

eman ta zabal zazu



Universidad del País Vasco Euskal Herriko Unibertsitatea

Caracterización de la formación de NO_x térmicos en quemadores de difusión de hidrógeno y análisis de nuevas alternativas de diseño para calderas

Autor:

Gontzal López Ruiz

Directores:

Jesus María Blanco Ilzarbe

Isabel Álava Pérez

Bilbao, octubre de 2021

Agradecimientos

Las clases con Mertxe en Mundakako Eskola, tardes de solfeo, atletismo, fútbol, txistu, acordeón, dantza... Y qué decir de Amaia, German, Fran...personas que me enseñaron más allá de lo académico y son la viva imagen de lo que es transmitir el conocimiento y la capacidad crítica. Con ellas aprendí a parar, cuestionar y reflexionar. Sin filosofía no hay futuro, dejemos de educar autómatas. Y luego Bilbao, años de guerra en el Renault Clio con mi amigo y compañero de batallas Joseba. Mil historias desde 1994, ¡Y todas las que están por llegar!

Es difícil agradecer toda influencia positiva, detalles, ayuda, consejos recibidos a lo largo del camino. Pero recuerdo de forma nítida aquellos momentos, en los que nos formamos y crecimos, que sin duda representan lo que ahora soy. A todas aquellas personas, que muchas veces se pierden en el recuerdo e incluso desconozco, les doy las gracias.

Me gustaría también agradecer a mis compañeros y compañeras de Ikerlan, con los que he pasado estos tres años y han compartido conmigo este camino. A mis directores de tesis Jesus Mari e Isabel, por confiar en mi y darme su apoyo y ayuda. Quiero dar las gracias también a Bertrand Naud, quien me ha enseñado y aconsejado a lo largo de la tesis.

Por último, me gustaría agradecer a los de casa, a mi ama y a mi aita, por el empuje constante, por su paciencia y su amor incondicional. Sois un ejemplo a seguir. A mi amuma Luisa, mi hermana mayor, con la que me he criado y he vivido durante 27 años. Sé que no entendías nada de lo que te contaba, pero me escuchabas y te emocionabas, siempre serás parte de mi.

Y como no, a Maialen, mi amor y compañera de vida. Eskerrik asko por aguantarme, apoyarme y quererme tal y como soy. Menos mal que siempre estás ahí. Tú si que te mereces un doctorado.

Resumen

En el marco de las energías renovables, el potencial del hidrógeno verde como vector energético se presenta como una de las alternativas para la reducción de emisiones de gases de efecto invernadero y dependencia de los combustibles fósiles en los distintos sectores. La presente tesis doctoral se centra en el uso del hidrógeno verde como sustituto del gas natural en los quemadores de calderas domésticas e industriales, lo cual eliminaría las emisiones de gases de efecto invernadero como el dióxido de carbono o el metano y gases tóxicos como el monóxido de carbono.

El proceso de combustión que tiene lugar en los quemadores depende altamente del tipo de combustible y de sus características. En este sentido, las propiedades físico-químicas del hidrógeno y del gas natural difieren de forma considerable, afectando al comportamiento del proceso de combustión. En concreto, debido a que el rango de inflamabilidad del hidrógeno es mucho mayor frente a otros combustibles gaseosos, la combustión del hidrógeno en condiciones premezcladas o parcialmente premezcladas puede llevar al fenómeno de retroceso de llama o *flashback*, poniendo en riesgo la integridad del quemador y de la caldera. Por otro lado, las altas temperaturas en llamas de hidrógeno favorecen la formación de los NO_x térmicos, considerándose éste un gas contaminante y perjudicial para la calidad del aire y la salud. Estas características dificultan la sustitución directa del gas natural por el hidrógeno en los quemadores actuales, teniendo que replantear nuevas alternativas de diseño que aseguren el óptimo funcionamiento con 100% hidrógeno, eliminando el riesgo de retroceso de llama y minimizando la formación de NO_x térmicos. En este contexto, la presente tesis doctoral tiene por objeto plantear diseños que eliminen o minimicen estos fenómenos.

Para ello, se optó por la tecnología de llamas de difusión en quemadores multillama, en las que no existe premezcla alguna y se elimina por completo el riesgo de retroceso de llama, centrando así la tesis en la problemática de los NO_x térmi-

cos. Inicialmente se caracterizó su formación en llamas de difusión considerando un caso de estudio simple, donde se analizó el impacto de distintos parámetros de funcionamiento (potencia térmica, nivel de exceso de aire y régimen de llama). Los resultados permitieron plantear diferentes alternativas de diseño de quemadores en función del régimen de la llama (laminar-turbulento).

En base a los resultados de la caracterización, se optó por un diseño de quemador multillama turbulento, tomando como referencia la tecnología *Micromix* empleada en quemadores de turbinas de gas de hidrógeno. Este concepto se basa en la formación de llamas turbulentas miniaturizadas, que se estabilizan entre dos vórtices generados a partir de la inyección perpendicular del hidrógeno al flujo de aire entrante y el impacto de este flujo con la estructura del quemador. Debido a las diferentes condiciones de operación en calderas, se analizó la viabilidad de esta tecnología para el diseño de quemadores domésticos e industriales. Los resultados mostraron que las características presentadas previamente en diseños para turbinas de gas se mantuvieron bajo las nuevas condiciones de operación y dimensiones geométricas, mostrando en ambos casos (quemador doméstico e industrial) bajos niveles de NO_x respecto a los límites establecidos en sus respectivas normativas.

En cuanto a la metodología, cabe destacar que la caracterización inicial y el estudio de la viabilidad del concepto *Micromix* para calderas se realizó empleando simulaciones numéricas de dinámica de fluidos computacional (CFD) mediante el software *ANSYS Fluent*, considerando el proceso de combustión en llamas laminares y turbulentas a través de los modelos de reacción de tasa finita y FGM respectivamente. Los cálculos en llamas turbulentas se realizaron siguiendo el enfoque RANS. La validación de los resultados numéricos se llevó a cabo a través de medidas experimentales macroscópicas de temperatura y de emisiones de NO_x . Para cada caso de estudio se construyeron prototipos escalados ad-hoc junto con el correspondiente montaje experimental.

Parte de los resultados de la presente tesis doctoral han sido publicados en revistas científicas con alto factor de impacto.

Abstract

In the framework of renewable energies, the potential of green hydrogen as an energy vector is becoming a promising alternative to reduce the greenhouse gas emissions as well as the dependency on fossil fuels. The present doctoral thesis focuses on the use of green hydrogen in domestic and industrial boiler burners as an alternative to natural gas, eliminating the greenhouse gases such as carbon dioxide and toxic gases such as carbon monoxide.

The combustion process taking place in the burners depends on the fuel and its characteristics. In that sense, the properties of gaseous hydrogen considerably differ from natural gas, resulting in a different behaviour in the combustion process. Due to its wide flammability limits, premixed and partially premixed hydrogen flames could lead to the so called flame flashback phenomena, compromising the integrity of the system. On the other hand, the high flame temperatures promote the thermal NO_x formation, leading to negative environmental effects as well as respiratory diseases. Hence, those characteristics makes it necessary to restate new design alternatives which ensure an optimum combustion process using 100 % hydrogen, eliminating the flashback risk and reducing the NO_x formation. In this context, the main objective of the doctoral thesis is to restate new burner designs avoiding or reducing the impact of such phenomena.

For that purpose, the diffusion flame technology together with multi-flame burners was selected, eliminating the flashback risk and focusing the core of the thesis on thermal NO_x formation. As an starting point, its formation was characterised in diffusion flames considering a simple case study and analyzing the impact of different operating parameters (thermal power, air excess level and flame regime). The obtained results served to raise new design approaches depending on the flame regime (laminar-turbulent).

Following the initial characterisation, a turbulent multi-flame diffusion burner

was selected, taking as reference the *Micromix* technology which has already been implemented in gas turbine burners. The concept is based on the formation of miniaturised turbulent diffusion flames, anchored between two vortices generated by the combination of aerodynamic effects induced by bluff bodies and jets in cross-flow configuration. Since domestic and industrial boiler operating conditions differ from gas turbine burners, the feasibility of *Micromix* technology for the design of domestic and industrial boiler burners was analysed. The results showed that the main characteristics observed in gas turbines were maintained under the desired operating conditions and scaled geometries, showing low NO_x levels with respect to the corresponding standards.

The general methodology used in the initial characterisation and the feasibility stages was based on CFD simulations carried out through the software *ANSYS Fluent*. Accordingly, the combustion process was simulated through finite-rate chemistry and FGM models for laminar and turbulent flames respectively. The turbulent flow field was solved following the RANS approach. Numerical results were validated through experimental measurements of temperature and NO_x emissions. Burner prototypes were constructed for each research stage along with the corresponding experimental setup.

The results from the present thesis have been published in scientific journals with high impact factor.

Laburpena

Energia berriztagarrien esparruan hidrogeno berdeak bektore energetiko gisara jarduteko eskaintzen dituen aukerek, teknologia hau berotegi efektudun gasen isurketa eta erregai fosilekiko menpekotasuna murrizteko alternatiba interesgarri bilakatu du. Hidrogenoaren erabilerari dagokionez, honako doktoretza tesia etxebizitza eta industria galdaretako erregailuetan zentratuko da, gas naturalaren ordeko erregai gisa kontsideratuz. Horrenbestez, hidrogenoaren errekuntzak karbono dioxidoa bezalako berotegi efektudun gasen eta karbono monoxidoa bezalako gas toxikoen isurketak ezabatuko lituzke.

Erregailuetan ematen den errekuntza prozesua erregai mota eta honen ezaugarriek baldintzatzen dute. Zentzu honetan, nabarmenak dira hidrogenoaren eta gas naturalaren propietate fisiko-kimikoen arteko ezberdintasunak, errekuntza prozesuan eragin zuzena izanik. Zehazki, hidrogenoaren sukoigarritasun tarte zabalagoaren ondorioz, aurre-nahasketa edo aurre-nahasketa partzialdun errekuntza baldintzetan sugar frontearen *flashback* arriskua areagotzen da, sistema osoa arriskuan jarritz. Bestalde, sugarrean ematen diren tenperatura altuek, NO_x termikoen sorkuntza areagotzen dute, gas honen isurketek ingurumenean eta gizakien arnas aparaturan kalte zuzenak izan ditzazketelarik. Ondorioz, aurkeztutako ezaugarriek gas naturalaren ordeko hidrogenoa erabiltzea zailtzen dute, *flashback* arriskua ekiditeko eta NO_x termikoen sorkuntza murrizteko hidrogeno erregailuen diseinu alternatiba berriak planteatzeko beharra agerian utziz.

Hortaz, *flashback* arriskua guztiz baztertze aldera, difusio sugarren teknologia aukeratu zen, sugar anitzdun erregailu konfigurazioak kontsideratuz. Honek doktoretza tesia NO_x termikoen sorkuntzara bideratzea ahalbidetu zuen. Abiapuntu gisa sugar konfigurazio simple bat definituz, lan baldintza ezberdinen arabera (potentzia termikoa, gehiegizko airea eta sugar erregimena) NO_x termikoen sorkuntza ezaugarritu zen. Ezaugarritze honetan jasotako emaitzek sugarren erregimenaren

araberako (laminar-turbulentu) diseinu alternatiba ezberdinak planteatzea ahalbidetu zuten.

Emaitza hauek aintzat hartuz, sugar anitzdun erregailu turbulentu baten aldeko hautua egin zen, gas turbinetan erabili izan den *Micromix* errekuntza teknologia kontsideratuz. Kontzeptu hau sugar turbulentu txikien sorkuntzan oinarritzen da, sugar bakoitza bi zurrunbiloren artean egonkortzen delarik. Zurrunbiloen sorkuntza airea eta erregailuaren arteko talkak eragiten dute, hidrogeno eta airearen fluxu perpendikularren eraginarekin batera. Galdara eta gas turbinen lan baldintzen desberdintasunak direla eta, etxebizitza eta industria galdaretako erregailuetarako *Micromix* teknologiaren bideragarritasuna aztertu zen. Emaitzen arabera, lan baldintza eta dimentsio geometriko berriak definituta gas turbinetan lortutako antzeko ezaugarriak mantentzea lortu zen, legedian ezarritako NO_x isurketa mugak kontuan izanik, proposatutako etxebizitza eta industria eskalako erregailuetan NO_x kontzentrazio maila baxuak erakutsiz.

Metodologiari dagokionez, hasierako ezaugarritzea eta *Micromix* erregailuen bideragarritasun analisia fluidoaren dinamika konputazionalaren (CFD) bidezko kalkuluen bitartez burutu zen, ANSYS Fluent softwarea erabili zelarik. Kalkuluetan errekuntza prozesua simulatzeko tasa finituko eta FGM errekuntza modeloak erabili ziren, sugar laminarrak eta turbulentuak simulatzeko hurrenez hurren. Sugar turbulentueta fluxua RANS ikuspegia kontsideratuz simulatu zen. Simulazioen balioztatzerako tenperatura eta NO_x termikoen neurketa esperimentalak burutu ziren, kontsideratutako kasu bakoitzerako prototipo bereziak fabrikatzeaz gain muntaketa esperimental espezifikoak erabiliz.

Tesi honetan aurkeztutako emaitzak inpaktu-indize altudun aldizkari zientifikoetan publikatu dira.

Índice

Resumen	III
Índice	IX
Lista de Figuras	XIII
Lista de Tablas	XVII
1. Introducción	1
1.1. Contexto y motivación	2
1.2. Combustión en quemadores de hidrógeno: retos y riesgos	9
1.3. Estado del arte	12
1.3.1. Escala doméstica	12
1.3.2. Escala industrial	16
1.3.3. Formación de NO_x en llamas de difusión	21
1.4. Objetivos	26
1.5. Estructura del documento	26
1.6. Bibliografía	29
2. Marco teórico: Resolución de flujos reactivos mediante CFD	35
2.1. Dinámica de fluidos computacional en flujos reactivos: Ecuaciones de conservación	36
2.1.1. Ecuaciones de Navier-Stokes	36
2.1.2. Ecuaciones de transporte de especies y energía	38
2.2. Propiedades de la mezcla de gases	40

2.2.1.	Flujos reactivos laminares	42
2.3.	Flujos reactivos turbulentos	44
2.3.1.	Fluctuaciones en flujos turbulentos	44
2.3.2.	Modelo RANS de viscosidad turbulenta: modelo $k - \omega$ SST	46
2.3.3.	Interacción químico-turbulenta: Modelo FGM	48
2.4.	Post-procesado de emisiones de NO_x	55
2.5.	Resolución numérica de las ecuaciones	56
2.6.	Bibliografía	59
3.	Caracterización de la formación de NO_x térmicos en llamas de difusión de hidrógeno	61
3.1.	Introducción	63
3.2.	Objetivos y metodología	64
3.2.1.	Configuración de llama unitaria	64
3.2.2.	Dominio numérico y condiciones de contorno	67
3.3.	Medidas experimentales	69
3.3.1.	Medidas de concentraciones de NO_X	69
3.3.2.	Medidas de temperatura axial	70
3.4.	Modelización CFD	72
3.5.	Resultados	74
3.5.1.	Observaciones generales	74
3.5.2.	Validación de la temperatura en la configuración no-confinada	76
3.5.3.	Validación de los NO_x térmicos	77
3.6.	Discusión	77
3.6.1.	Influencia de la potencia de entrada	78
3.6.2.	Influencia del exceso de aire	81
3.6.3.	Estrategias de diseño para quemadores de bajo NO_x de hidrógeno	82
3.7.	Conclusiones	84
3.8.	Bibliografía	86
4.	Viabilidad del concepto <i>Micromix</i> para el diseño de quemadores de hidrógeno	89

4.1. Introducción	91
4.2. Selección del concepto de quemador	91
4.3. Principio de combustión <i>Micromix</i>	94
4.4. Objetivos y metodología	100
4.4.1. Objetivos y requerimientos de diseño	100
4.4.2. Metodología	101
4.5. Geometría y dominio computacional	105
4.6. Modelización CFD	108
4.7. Sistema experimental	108
4.8. Validación	111
4.8.1. Validación con base en literatura	112
4.8.2. Validación experimental	114
4.9. Escalado de geometrías	116
4.9.1. Quemador industrial	116
4.9.2. Quemador doméstico	117
4.10. Resultados numéricos	118
4.10.1. Quemador industrial	118
4.10.2. Quemador doméstico	123
4.11. Conclusiones	127
4.12. Bibliografía	129
5. Conclusiones y trabajo futuro	133
5.1. Conclusiones	134
5.2. Trabajo Futuro	136
5.2.1. Calderas domésticas	137
5.2.2. Aplicaciones industriales	139
5.3. Bibliografía	140
Anexos: Contribuciones científicas	141
Contribución 1	141
Contribución 2	157

Lista de Figuras

1.1. Evolución del consumo de energía primaria a escala mundial por tipos de fuentes expresado en [TWh] [1].	3
1.2. Esquema de funcionamiento de una planta de generación eléctrica de hidrógeno. Proyecto piloto de <i>Siemens Energy</i> en Finspang (Suecia) [12].	4
1.3. Mapa del corredor vasco del hidrógeno indicando los proyectos esperados en cada zona [22].	5
1.4. Zonas de reacción en llamas de premezcla (Izqda.) y no-premezcla (dcha.)	11
1.5. Imagen del quemador de difusión experimental desarrollado por <i>DNV GL/GasTerra</i> [44]	14
1.6. Esquema general de la configuración del quemador en la caldera <i>fuel staging</i> y el sistema de distribución aire-gas [45]	15
1.7. Imagen tomada durante los ensayos experimentales mostrando la formación de las llamas de difusión y las llamas premezcladas [45]	16
1.8. Quemador industrial de tiro forzado con el sistema de encendido y termopares para la medición de temperaturas [49]	17
1.9. Efecto del porcentaje de hidrógeno en gas natural en la formación de NO_x [49]	17
1.10. Capacidad de fracciones máximas admisibles de hidrógeno en gas natural en las turbinas de gas actuales y previsión de futuros desarrollos para poder trabajar con 100% H_2 por parte de <i>Siemens Energy</i> [12]	18
1.11. Esquema del concepto de quemador <i>Micromix</i>	20

1.12. Quemador multillama <i>Micromix</i> mostrando imágenes de prototipos experimentales [53]	20
1.13. Quemador tipo JBD del fabricante EM Combustión [56]	21
1.14. Tendencias cualitativas de la formación de NO_x en función del exceso de aire y del tipo de llama [65]	25
2.1. Descomposición de la velocidad con su promedio y la componente de las fluctuaciones a lo largo del tiempo	44
2.2. Proceso de cascada de la turbulencia: Los remolinos de mayor energía (mayor longitud de onda κ) ceden su energía cinética a los remolinos de menor longitud de onda ($\kappa \sim 1/d$, donde d es el diámetro del remolino)	45
2.3. Representación esquemática del concepto de <i>flamelet</i> laminar [3]	49
2.4. Evolución de las variables a lo largo de la llama laminar de difusión 1-D [3]	50
2.5. Curva S de las soluciones estacionarias y las soluciones no estacionarias extinguidas consideradas en el modelo FGM	52
2.6. Relación entre la fracción de mezcla Z y la variable de progreso $\mathcal{Y} = Y_{\text{H}_2\text{O}}$ indicando el conjunto de soluciones estacionarias y soluciones no estacionarias extinguidas	53
2.7. Conservación de una variable genérica ϕ en un volumen de control [22]	57
3.1. Llama unitaria aislada de un concepto de quemador de difusión multillama	65
3.2. Geometría del quemador con las dimensiones más relevantes y los mecanismos de transferencia de calor considerados	66
3.3. Vista de la malla número 2 empleada en los cálculos CFD junto con una vista detallada de las entradas de fuel y aire	68
3.4. Geometría axisimétrica 2D para la configuración de llama no-confinada	68
3.5. Esquema del montaje experimental	69
3.6. Cámara de combustión experimental	71
3.7. Medidas de temperatura axial en la configuración no-confinada de la llama de hidrógeno	72

3.8. Secuencia de imágenes mostrando el régimen no-laminar de la llama no-confinada a 0,8 kW y $\lambda = 1,1$ (secuencia de imágenes capturada mediante una cámara Canon EOS M50 en modo ráfaga con 10 fps) .	75
3.9. Imágenes de las llamas no-confinadas a dos potencias diferentes (0,2 y 0,6kW) a $\lambda = 1,1$. (a) Llamas experimentales (b) Resultados numéricos, temperaturas (izqda.) y radicales OH (dcha.)	75
3.10. Resultados numéricos y experimentales de la temperatura axial a 0,2 kW y $\lambda = 1,2$	77
3.11. Resultados numéricos y experimentales de las concentraciones de NO_x para diferentes excesos de aire (λ). (a) En función de la potencia de entrada (b) En función del número de Reynolds del aire coaxial .	78
3.12. Resultados numéricos a diferentes potencias y excesos de aire (λ) de la fracción másicas de OH mostrando los volúmenes V_{reac}	79
3.13. Resultados numéricos a diferentes potencias y excesos de aire (λ). (a) Volúmenes de llama (b) Intensidad de la formación de NO_x	80
4.1. Principio de funcionamiento de un quemador poroso de premezcla doméstico [2]	92
4.2. Caudal másico de aire necesario para la combustión del H_2 y CH_4 a diferentes excesos de aire	94
4.3. Esquema del principio de combustión <i>Micromix</i>	96
4.4. Modelo de geometría del quemador indicando las principales dimensiones (a) Diseño conceptual de un quemador <i>Micromix</i> (b) Vista superior del quemador <i>Micromix</i>	99
4.5. Longitudes de llama en quemadores convencionales de gas natural y quemadores <i>Micromix</i>	101
4.6. Metodología para el escalado de las geometrías del quemador doméstico e industrial para las nuevas condiciones de operación definidas en cada caso.	104
4.7. Unidad mínima de simulación: (a) Dominio físico indicando las condiciones de contorno más relevantes (b) Vista general de la malla en uno de los planos de simetría y vista detallada de los elementos en la zona de mezclado hidrógeno-aire	106
4.8. Prototipo del quemador experimental empleado para la validación .	109

4.9. Esquema del montaje experimental indicando los componentes principales del sistema. (a) Vista del montaje real en el laboratorio de Ikerlan (b) Vista esquemática	110
4.10. Contornos de temperatura y líneas de corriente de la velocidad en el caso de referencia	112
4.11. Pruebas de encendido. (a) Sin cámara de combustión (quemador abierto al ambiente) (b) Con la cámara de combustión	114
4.12. Escalado de la geometría en el caso del QI mostrando las diferencias respecto al caso de referencia	116
4.13. Escalado de la geometría en el caso del QD mostrando las diferencias respecto al caso de referencia	118
4.14. Contornos de temperatura en el caso de QI	119
4.15. Contornos de temperatura en varias secciones de corte para $\lambda = 1,6$ en el QI	120
4.16. Líneas de corriente y magnitud de la velocidad en el caso del QI	120
4.17. Fracciones másicas de los OH en las diferentes secciones del caso QI	121
4.18. Zonas de formación de NO_x térmicos en el caso del QI. (a) $\lambda=1,8$ y (b) $\lambda=1,6$	122
4.19. Contornos de temperatura en el caso de QD	123
4.20. Contornos de temperatura en varias secciones de corte para $\lambda = 1,6$ en el QD	124
4.21. Líneas de corriente y magnitud de la velocidad en el caso del QD	125
4.22. Fracciones másicas de los OH en las diferentes secciones del caso QD	125
4.23. Zonas de formación de NO_x térmicos en el caso del QD. (a) $\lambda=1,8$ y (b) $\lambda=1,6$	126
5.1. Imágenes del espacio de integración de un quemador <i>Micromix</i> en una caldera comercial de 30 kW	138
5.2. Disposición de los quemadores en un horno de recalentamiento [9]	139

Lista de Tablas

1.1. Evolución del consumo de gas natural según mercados en España en GWh [5–7]	3
1.2. Resumen de proyectos internacionales relevantes relacionados con la generación y transporte del hidrógeno	6
1.3. Propiedades físicas y de combustión del hidrógeno, metano y propano [5–7]	9
1.4. Estudios que establecen el límite de H ₂ máximo en quemadores diseñados para el sector doméstico y comercial.	13
2.1. Reacciones elementales del mecanismo de O’Conaire et al. [11]	42
2.2. Constantes de las reacciones del mecanismo de Zeldovich [21]	55
2.3. Esquemas de discretización de los gradientes, términos convectivos, presión y acople presión-velocidad [13]	58
3.1. Número de celdas en las tres mallas consideradas: Dirección radial en el tubo de H ₂ (N_{H_2}), pared entre los tubos (N_{rim}), tubo de aire coaxial (N_{air}), y el número total de elementos. Valores de temperatura máxima y concentraciones de NO _x considerando 0,4 kW, $\lambda = 1, 2$. . .	67
4.1. Resumen de las publicaciones más relevantes en el campo del PCM . . .	95
4.2. Dimensiones principales y condiciones de operación en el caso de referencia	102
4.3. T_{max} , concentraciones de NO _x y porcentajes de variación para las mallas consideradas.	107
4.4. Precisión y rangos de la instrumentación empleada	111

4.5. Comparación de los resultados actuales con los resultados de [20] . . .	113
4.6. Comparación de las medidas experimentales de NO_x [ppm] corregidas al 0 % de O_2 a $DP=50 \text{ kW/dm}^2$ y los resultados numéricos en el caso de referencia.	115

Nomenclatura

Símbolos latinos

A_{ref} : Área de referencia [mm^2]

c : Variable de progreso normalizada [-]

$c_{p,i}$: Calor específico de la especie i [J/kg K]

$C_{j,r}$: Concentración molar de la especie j [$\text{mol}_j/\text{mol}_{tot}$]

$D_{i,m}$: Difusividad másica de la especie i [m^2/s]

E_t : Energía total [J/kg]

g : Gravedad [kg/m^2]

H_t : Entalpía total [J/kg]

h_i : Entalpía específica de la especie i [J/kg]

J_i : Vector de flujo difusivo [$\text{kg/m}^2\text{s}$]

k : Energía cinética turbulenta [m^2/s^2]

$k_{f,r}, k_{b,r}$: Constantes de las tasas de reacción directa e inversa [$\text{m}^3/\text{mol s}$]

L_f : Longitud de llama [mm]

Le : Número de Lewis [-]

M_w : Peso molecular [g/mol]

M_{NO} : Peso molecular del NO [g/mol]

Nu : Número de Nusselt [-]

P : Potencia térmica [kW]

$P(Z, c)$: Función de densidad de probabilidad [-]

Pr : Número de Prandtl [-]

\dot{Q}_{conv} : Transferencia de calor por convección [kW]

\dot{Q}_{rad} : Transferencia de calor por radiación [kW]

$R_{i,r}$: Tasa de reacción de la especie i en la reacción r [$\text{kmol/m}^3\text{s}$]

Ra_L : Número de Rayleigh [-]

r_m : Relación del momento de flujo [-]
 S : Término fuente de la energía [$\text{J}/\text{m}^3\text{s}$]
 Sc_t : Número turbulento de Schmidt [-]
 s : Distancia entre llamas [mm]
 t_{mix} : Escala temporal del flujo [s]
 u, v, w : Componentes de la velocidad [m/s]
 u'' : Fluctuación de la velocidad [m/s]
 \tilde{u} : Promedio de Favre de la velocidad [m/s]
 $\mathcal{V}_{\text{reac}}$: Volumen de reacción [cm^3]
 y_{H_2} : Longitud de penetración [mm]
 \mathcal{Y} : Variable de progreso no normalizada
 Z : Fracción de mezcla [-]

Símbolos griegos

δ : Espesor de llama [mm]
 ϵ : Emisividad [-]
 ϵ : Disipación de la energía cinética turbulenta [m^2/s^2]
 λ : Exceso de aire [-]
 μ : Viscosidad [kg/ms]
 ν : Coeficiente estequiométrico [-]
 ρ : Densidad [kg/m^3] σ : Constante de Stephan-Boltzman [-]
 ϕ : Variable escalar [-]
 τ_{red} : Esfuerzo cortante [N]
 τ_{red} : Tiempo de residencia en el volumen $\mathcal{V}_{\text{reac}}$ [s]
 χ : Disipación escalar [1/s]
 ω : Razón específica de disipación [-]
 $\dot{\omega}_i$: Tasa de reacción de la especie i [$\text{kg}/\text{m}^3\text{s}$]
 $\overline{\dot{\omega}_{NO}}$: Intensidad de formación de NO_X en $\mathcal{V}_{\text{reac}}$

Abreviaciones

ACS: Agua caliente sanitaria
 CFD: Computational fluid dynamics
 DNS: Direct Navier-Stokes
 DO: Discrete ordinates

DP: Densidad de potencia [kW/dm²]
EBU: Eddy break-up model
ED: Energy Density [kW/dm²]
EDC: Eddy dissipation concept
EDM: Eddy dissipation model
ED-FR: Eddy dissipation-Finite rate
FGM: Flamelet generated manifold
IB: Industrial burner
LES: Large eddy simulation
LPN: Longitud de penetración normalizada
PCM: Principio de combustión micromix
PGA: Placas de guiado de aire
ppm: Partes por millon
P2G: Power to gas
QD: Quemador doméstico
QI: Quemador industrial
RANS: Reynolds averaged Navier-Stokes
RB_{PGA}: Relación de bloqueo de las placas de guiado de aire [mm]
RB_{SH}: Relación de bloqueo de los segmentos de hidrógeno [mm]
WSGGM: Weighted sum of gray gases model

Capítulo 1

Introducción

Resumen: *En el marco de las energías renovables, el hidrógeno verde se presenta como un vector energético con un gran potencial de cara a la reducción de gases de efecto invernadero y del consumo de combustibles fósiles. Entre las aplicaciones finales se encuentra el uso del hidrógeno verde en calderas domésticas e industriales como sustituto del gas natural o de gases licuados. Si bien su combustión en condiciones óptimas emitiría solamente vapor de agua, este combustible presenta ciertas particularidades debido a sus propiedades fisicoquímicas. Analizando la literatura existente, en este capítulo se exponen los principales retos y se contextualizan las posibles soluciones tanto a escala doméstica como industrial que se plantearán a lo largo de este trabajo. Finalmente se presentan los objetivos y la estructura general del documento.*

1.1. Contexto y motivación

El rápido desarrollo tecnológico de las últimas décadas y la creciente explotación de fuentes primarias para el abastecimiento de las sociedades modernas, han supuesto un notable aumento en la demanda energética global, incrementando así las emisiones de gases de efecto invernadero, derivados principalmente del uso indiscriminado de combustibles fósiles. A pesar de la implantación de fuentes de energía renovables como la eólica y la solar, los datos de consumo de energía clasificados por el tipo fuente que se muestran en la Figura 1.1 (datos a escala mundial) indican que más del 50 % de la energía primaria se produce por medio de la combustión de combustibles fósiles (carbón, derivados del petróleo, gas) y de combustibles de origen renovable (biocombustibles).

Dichos procesos de combustión componen un amplio rango de aplicaciones para cubrir la demanda energética en diferentes sectores, que pueden clasificarse en cuatro grandes grupos entre los que se destacan las aplicaciones más significativas:

- Generación de electricidad: Calderas y turbinas de gas en centrales térmicas, motores de combustión interna en sistemas auxiliares o generación eléctrica a pequeña escala.
- Transporte: Motores de combustión interna para automóviles, trenes y buques, así como turbinas de gas para el transporte aéreo.
- Industria y construcción: Calderas de vapor y hornos para calentamiento en procesos, quemadores para calentamiento directo, turbinas de gas industriales y motores de combustión interna para cogeneración y fuentes de energía auxiliares.
- Sector residencial y servicios: Quemadores para calentamiento directo de espacios, quemadores en calderas para ACS, quemadores en cocinas domésticas y profesionales.

Por otro lado, el uso masivo de combustibles fósiles ha generado una gran dependencia económica con los países productores, ya que las reservas de hidrocarburos se concentran en puntos concretos del planeta. Este hecho ha producido fluctuaciones en los precios de compra junto con una alta dependencia económica [2, 3].

Cabe destacar que el gas natural ha jugado un papel muy importante en la reducción del consumo de combustibles fósiles tradicionales como el fuel-oil o el

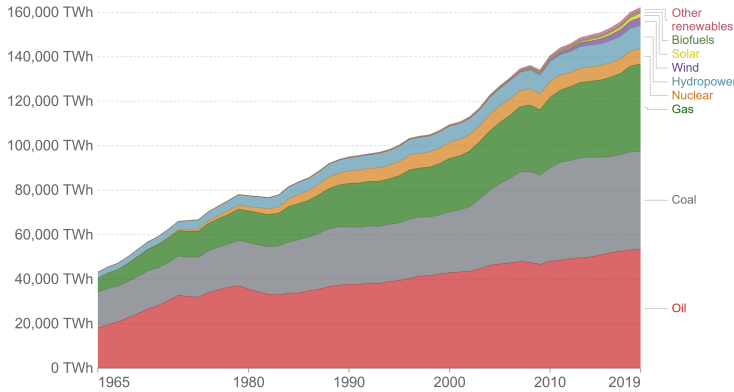


Figura 1.1: Evolución del consumo de energía primaria a escala mundial por tipos de fuentes expresado en [TWh] [1].

carbón, que se podían encontrar principalmente en los equipos de combustión utilizados tanto en el sector de la industria y la construcción como en el sector residencial y de servicios [4]. Este aumento del uso del gas natural se refleja en la Tabla 1.1, que muestra la evolución de su consumo por sectores en España entre 1.985 y 2.019. A pesar de ello, el gas natural sigue siendo un combustible fósil, cuyo componente principal es el metano (CH_4), representando aproximadamente el 90-95 % de su composición. Por lo tanto, la combustión de este hidrocarburo sigue generando emisiones de CO_2 y CO junto con emisiones de óxidos de nitrógeno (NO_x), los cuales contribuyen al efecto invernadero y la contaminación ambiental respectivamente.

Tabla 1.1: Evolución del consumo de gas natural según mercados en España en GWh [5–7]

Mercado	1.985	1.990	2.000	2.010	2.018	2.019
Doméstico-comercial	7.128	10.771	34.755	64.328	56.910	52.006
Industrial	15.480	44.166	144.994	194.098	226.611	231.103
Generación eléctrica	6.890	2.254	10.379	135.625	61.841	111.279

Para hacer frente a esta situación desde un punto de vista tecnológico, una de las alternativas se centra en la sustitución de los combustibles fósiles por combustibles de origen renovable que sean capaces de eliminar o reducir las emisiones contaminantes. Entre otros, debido a su capacidad de actuar como vector energé-

tico, el hidrógeno se ha convertido en una de las alternativas más novedosas para reducir las emisiones en los sectores y mercados previamente mencionados [8, 9]. Entre otros, el hidrógeno puede generarse por medio de la electrólisis del agua, utilizando el exceso de energía generado por las fuentes renovables en periodos de baja demanda, garantizando así su origen renovable. A diferencia de otros procesos de generación de hidrógeno, la denominación de hidrógeno verde proviene de la utilización de energías renovables en el proceso de su generación. Por lo tanto, a lo largo de este trabajo, cuando se haga referencia al uso del hidrógeno como combustible, se estará haciendo referencia al hidrógeno verde.

Este proceso de conversión de energía eléctrica renovable en hidrógeno verde es conocido como P2G (power to gas), el cual permite almacenar el hidrógeno generado mediante distintas fuentes de generación renovables para su posterior uso. En este sentido, actualmente se están llevando a cabo diversos proyectos piloto a nivel europeo para estudiar la viabilidad del P2G [10]. Entre otros, para 2.022 se espera contar con un sistema P2G de 100 MW conectado a la red en Alemania, mientras que en el Mar del Norte se quieren conectar unas 10.000 turbinas eólicas a una isla artificial para la producción de hidrógeno para el año 2.030 [11]. De la misma forma, el uso del hidrógeno esta siendo estudiado como alternativa del gas natural en los quemadores de las turbinas de gas y de las calderas de vapor de plantas de generación eléctrica. Como ejemplo, la Figura 1.2 muestra el esquema del proyecto piloto de *Siemens Energy* en Finspang (Suecia).

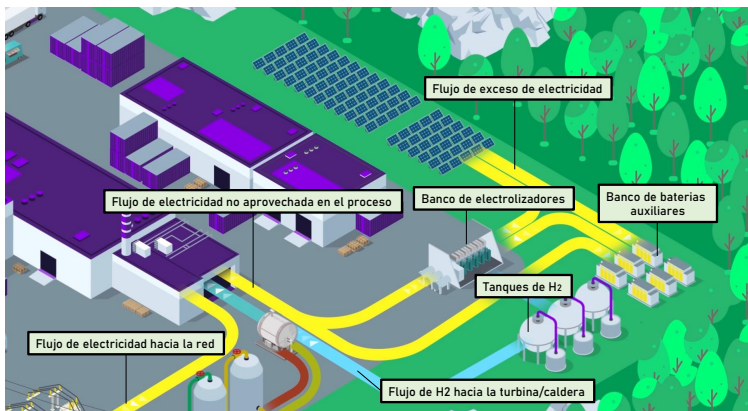


Figura 1.2: Esquema de funcionamiento de una planta de generación eléctrica de hidrógeno. Proyecto piloto de *Siemens Energy* en Finspang (Suecia) [12].

A nivel internacional existen numerosos proyectos relacionados con la generación y el transporte del hidrógeno. La Tabla 1.2 resume los más destacados, describiendo los objetivos más importantes en cada uno de ellos.

En un contexto más local, destaca el corredor vasco del hidrógeno [20], traccionado por Petronor y Repsol. El proyecto fue presentado en febrero de 2.021 con una inversión superior a los 1.300 millones de euros hasta 2.026 y que contará con un consorcio formado por 78 organizaciones. El objetivo principal del proyecto será el de avanzar en la descarbonización de sectores estratégicos, invirtiendo en proyectos relacionados con la producción de hidrógeno renovable y combustibles sintéticos, el uso urbano y residencial, la movilidad y logística así como la infraestructura necesaria y la descarbonización de la industria. Las inversiones se distribuirán en proyectos para la generación de hidrógeno verde mediante la construcción de tres instalaciones de 2, 10 y 100 MW. La primera estará en funcionamiento en el año 2.022 con el objetivo de alimentar el Parque Tecnológico de Abanto. La segunda está proyectada para el año 2024 en el Puerto de Bilbao y destinada al abastecimiento de una planta de combustibles sintéticos. La tercera que será para 2025 y servirá para abastecer parte del proceso productivo de Petronor así como para abastecer las necesidades del propio Corredor [21]. La Figura 1.3 muestra el mapa del corredor, describiendo los proyectos que se llevarán a cabo en cada zona.

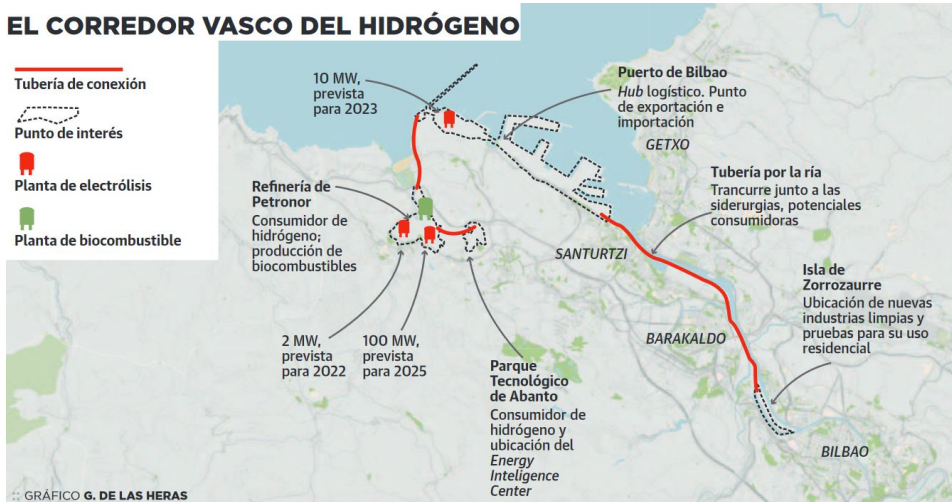


Figura 1.3: Mapa del corredor vasco del hidrógeno indicando los proyectos esperados en cada zona [22].

Tabla 1.2: Resumen de proyectos internacionales relevantes relacionados con la generación y transporte del hidrógeno

Tecnología	Consortio	Objetivos	Ref.
Gen. H ₂ verde	Refflyne, liderado por Shell's Energy y Chemicals Park Rheinland	Producción de hasta 1.300 toneladas de hidrógeno verde al año	[13]
Gen. H ₂ verde	Svevind Energy GmbH y Kazakh Invest National Company JSC	La electricidad generada por parques eólicos y solares (en el oeste y centro de Kazajistán) con una capacidad total de 45 gigavatios (GW), alimentará 30 GW de electrolizadores para producir alrededor de tres millones de toneladas de hidrógeno verde cada año	[14]
Gen. H ₂ verde	Energix Energy	Producción de más de 600.000 toneladas de hidrógeno verde al año a partir de 3,4 GW de energía renovable de carga base ya contratada a través de una asociación con Enerwind	[15]
Inyec. H ₂ red	Urban Community of Dunkerque, GDF, GNVert, Cofely Ineo, CEA, McPhy Energy, INERIS, CETIAT, AREVA SE, CETH2 and DK*Bus Marine	Inyección de hidrógeno en la red en un 6 % inicialmente con el objetivo de llegar a un 20 % para su uso en 100 hogares y la caldera del centro de salud del barrio "Petit Village" de Cappelle-la-Grande (Francia)	[16]
Inyec. H ₂ red	Gadent Gas, Northern Gas Networks, Progressive Energy Ltd, Keele University (Keele), Health and Safety Laboratory and ITM Powe	Demostrar la viabilidad de inyección de hidrógeno a la red en un %20.	[17]
Gen. H ₂ verde	Iberdrola y Fertiberia	Producción de hidrógeno mediante electrolisis (20 MW) para su uso en la fábrica de amoníaco de Fertiberia, reduciendo el consumo de gas natural de la planta en mas de un 10 %	[18]
Gen. H ₂ verde	BayWa r.e. y GroenLeven	Proyecto piloto para convertir la energía de un parque solar de 50 MWp en hidrógeno verde por medio de un electrolizador en momentos de sobreproducción. La energía generada se almacenará localmente, para diferentes aplicaciones.	[19]

1.1. Contexto y motivación

De forma similar, el proyecto BENORTH2 lanzado por el consorcio formado por White Summit Capital, Castleton Commodities International LLC (CCI), Bizkaia Energía S.L., Nortegas y SENER tiene como objetivo crear una planta de generación de hidrógeno junto a la actual central térmica de ciclo combinado de Boroa (Amorebieta, Vizcaya). Tras su generación, el hidrógeno se mezclará con el gas natural y será inyectado a la red de distribución de Nortegas para su posterior uso por parte de los usuarios finales. Por otro lado, el hidrógeno generado también se destinará a las turbinas de gas de la central térmica, reduciendo así el consumo de gas natural y las emisiones de CO₂ [23].

En el marco de la inyección de hidrógeno a la red de gas y su impacto en las aplicaciones finales, destaca el lanzamiento del proyecto H2Sarea [24], liderado por la distribuidora de gas vizcaína Nortegas y que cuenta con la participación de varias empresas del tejido industrial vasco, como ABC Compresores, C.A.E., S.L. – FIDEGAS, H2Site, Erreka Fastening Solutions y Orkli junto con la colaboración de los centros tecnológicos y de investigación vascos Ikerlan y Tecnalia. El proyecto pretende impulsar la investigación y el desarrollo de equipos y componentes que permitan aprovechar las infraestructuras existentes en diferentes escenarios: sistemas de inyección de hidrógeno, sistemas de compresión avanzados, desarrollo de fijaciones inteligentes específicas para hidrógeno, investigación de nuevos materiales y componentes aptos para su utilización en entornos 100 % hidrógeno y con mezclas de hidrógeno-gas natural variables.

Teniendo en cuenta la cantidad de proyectos relacionados con el hidrógeno y el alcance esperado, se puede afirmar que la apuesta por la generación y el uso del hidrógeno jugará un papel muy importante en las siguientes décadas, postulándose como un agente clave en la reducción o la eliminación total del consumo de combustibles fósiles y emisiones contaminantes en diferentes sectores. No obstante, los proyectos presentados y otros muchos, cuentan con un denominador común: los retos técnicos relacionados con la manipulación del hidrógeno para su generación, almacenamiento, transporte y usos finales. En términos generales, a día de hoy el almacenamiento y transporte de hidrógeno a gran escala son un campo de investigación donde quedan muchos retos por afrontar [25]. Para facilitar su logística, la producción y el almacenamiento distribuido de hidrógeno podría ser una buena alternativa frente al sistema centralizado. Por un lado, esto facilitaría la integración de la tecnología de hidrógeno en el mix energético, pudiendo generarlo mediante fuentes renovables locales sin la necesidad de transportarlo a lo largo de redes kilométricas. Y por otro lado, promovería la implementación de plantas de generación

renovable compartidas en diferentes puntos de consumo de hidrógeno, como pueden ser las zonas industriales, comarcas o municipios. Este sistema descentralizado va de la mano del concepto de redes inteligentes o smart grids, los cuales facilitarían el control para el aprovechamiento óptimo de los recursos [26–28]. Por su parte, los retos relacionados con las aplicaciones finales cubren diversos campos de investigación, ya que las particularidades físicas que presenta el hidrógeno difieren de las de otros gases convencionales como se detallará más adelante. En concreto, la presente tesis doctoral se centra en los retos relacionados con el proceso de combustión del hidrógeno.

En este contexto, el hidrógeno podría ser un buen sustituto del gas natural en la descarbonización de los sectores previamente mencionados, donde la tecnología de combustión es la más utilizada para el abastecimiento energético. Considerando las posibles aplicaciones del hidrógeno verde, este trabajo estará enfocado al uso del hidrógeno como combustible en los quemadores instalados en calderas para aplicaciones industriales y domésticas. El uso del hidrógeno en estos equipos implicaría una reducción directa en las emisiones de CO y CO₂, generando solamente vapor de agua en condiciones óptimas de combustión. En este sentido, los quemadores inician y mantienen el proceso de combustión entre el combustible y el aire, formando llamas que se confinan dentro de una cámara para el posterior aprovechamiento de la energía térmica mediante los sistemas de intercambio de calor situados aguas abajo.

Puesto que la combustión del hidrógeno presenta ciertas particularidades, la sustitución del hidrógeno por el gas natural o por mezclas con un contenido variable de hidrógeno en gas natural han abierto un nuevo campo de investigación como se podrá ver a lo largo del documento con las aportaciones bibliográficas más significativas.

Es necesario subrayar que a pesar de que el uso de combustibles alternativos o la sustitución de fuentes de energía convencionales por fuentes renovables podría reducir las emisiones de gases perjudiciales para el medio ambiente y la calidad del aire, estos desarrollos tecnológicos deben de ir acompañados de un cambio en la mentalidad de la sociedad, asumiendo los límites de los recursos finitos de los que disponemos y tomando una conciencia colectiva para la reducción del consumo de productos y bienes. Recordando las palabras de Murray Bookchin, pionero de la ecología social: *"Si no hacemos lo imposible, tendremos que enfrentarnos con lo impensable"* [29].

Como se ha mencionado previamente, la tesis doctoral se centra en la utilización del hidrógeno como combustible alternativo en quemadores de gas natural instalados en calderas domésticas e industriales. Para ello, inicialmente se identifican los principales retos técnicos relacionados con la sustitución directa del hidrógeno en arquitecturas de quemadores de gas natural. Tras revisar los trabajos de investigación realizados hasta la fecha y relacionados con dichos retos técnicos, se identifica el área de conocimiento que está por cubrirse y se plantean diversos casos de estudio con el objetivo de aportar ese conocimiento al estado del arte actual. En estos casos de estudio, se analizará el proceso de combustión del hidrógeno bajo diferentes condiciones de operación mediante cálculos numéricos basados en dinámica de fluidos computacional (CFD) y validaciones experimentales. De esta forma, se tiene como objetivo obtener resultados que puedan servir como base de cara a los re-diseños de quemadores actuales o el desarrollo de nuevos diseños que se plantean a lo largo del trabajo.

1.2. Combustión en quemadores de hidrógeno: retos y riesgos

Las propiedades físicas del hidrógeno hacen de él un combustible muy especial. La Tabla 1.3 muestra las principales diferencias entre las propiedades del hidrógeno, el metano (componente principal del gas natural) y el propano. Las propiedades que se presentan están obtenidas en condiciones estequiométricas y presión atmosférica.

Tabla 1.3: Propiedades físicas y de combustión del hidrógeno, metano y propano [5-7]

Propiedades	Hidrógeno	Metano	Propano
Densidad (kg/m ³)	0,080	0,64	1,71
PCI (kJ/kg)	119.950	50.020	46.360
Limites de inflamabilidad (Vol. %)	4-75	5-15	2-10
Temperatura adiab. de llama (K)	2.380	2.226	2.267
Energía min. ignición (MJ)	0,02	0,29	0,30
Velocidad max. llama (cm/s)	200	40	40

Siendo el elemento más ligero de entre los tres, el hidrógeno presenta una densidad relativamente baja respecto a otros combustibles gaseosos. Esto hace que

requiera mayores presiones para su almacenamiento en tanques o un mayor volumen del propio tanque. También presenta un mayor poder calorífico por unidad de masa (más del doble) por lo que para la misma cantidad de masa se obtiene el doble de energía. Por otro lado, las llamas de hidrógeno son difíciles de detectar ya que la luz que emite esta fuera del rango infrarrojo detectable para el ojo humano [30]. Por este motivo, será necesario desarrollar nuevas tecnologías de detección de llama para asegurar el control y la seguridad en los procesos de combustión con hidrógeno.

Por su parte, la temperatura adiabática de llama supera a la del metano y a la del propano, lo cual puede favorecer la formación de NO_x térmicos por medio del llamado mecanismo de Zeldovich [31] como se detallará en los siguientes capítulos.

En cuanto a los límites de inflamabilidad, se observa que el rango del hidrógeno es más amplio, resultando favorable desde un punto de vista de diseño, ya que el hidrógeno se inflamará rápidamente en un rango más amplio evitando inquemados. No obstante, también podría causar encendidos locales, sobre todo en quemadores premezclados y parcialmente premezclados, en los que existe una mezcla combustible-aire previa a su introducción en la cámara de combustión [32]. En presencia de puntos calientes en las tuberías de entrada o en la zona donde se realiza la premezcla, estas podrían encenderse debido a la mayor inflamabilidad del hidrógeno en el aire, así como por la baja energía de ignición necesaria para su combustión. Esto podría causar daños irreversibles en el conjunto del quemador, con un alto riesgo de explosión.

Por último, la velocidad del frente de llama definida como la velocidad de propagación de la llama hacia la mezcla combustible-aire [32] es considerablemente superior en llamas de hidrógeno. La Figura 1.4 (izqda.) muestra de forma esquemática las zonas de combustión en una llama de premezcla, donde se puede identificar la velocidad del frente de llama como (S_u) y la velocidad de la mezcla entrante a la zona de combustión como ($U_{unburnt}$).

El concepto de velocidad de frente de llama está relacionado con el fenómeno de retroceso de llama o *flashback*, que se define como la propagación descontrolada del frente de llama hacia la mezcla, producida por el desequilibrio local entre la velocidad de la mezcla y la velocidad del frente de llama [33, 34]. Cuando la segunda supera a la primera, el frente de llama comienza a propagarse hacia la zona de salida de la mezcla, pudiendo entrar a las tuberías de entrada y cámara de premezcla, pudiendo causar también daños irreversibles y explosiones.

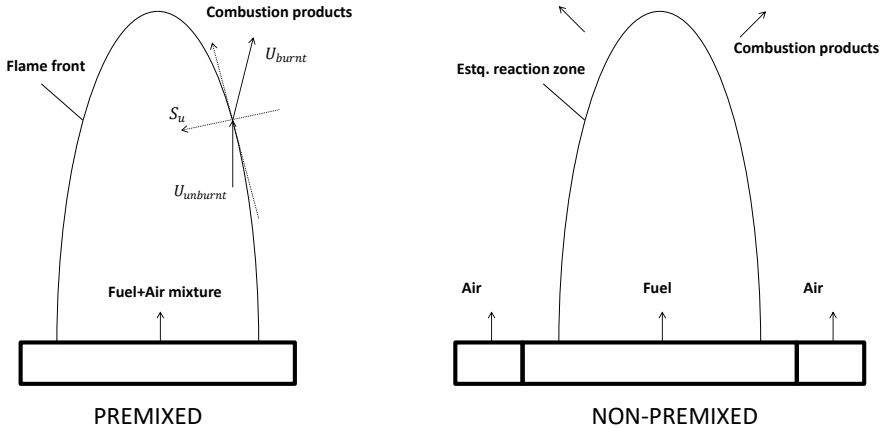


Figura 1.4: Zonas de reacción en llamas de premezcla (Izqda.) y no-premezcla (dcha.)

En base a estas propiedades y a las diferencias descritas, son dos los principales riesgos que pueden darse en el proceso de combustión del hidrógeno con el aire: la formación de NO_x térmicos debido a las altas temperaturas de llama y el fenómeno de retroceso de llama o *flashback* debido al mayor rango de inflamabilidad de las mezclas H_2/Aire y a las mayores velocidades del frente de llama.

En cuanto al fenómeno *flashback*, éste desaparece si la combustión tiene lugar en condiciones no-premezcladas. En la Figura 1.4 (dcha.) se puede observar que el concepto de velocidad del frente de llama desaparece en el caso de las llamas no-premezcladas o de difusión. En este tipo de llamas el combustible y el aire entran por separado a la cámara de combustión, donde se mezclan a escala molecular y después comienzan a reaccionar, formando un contorno donde teóricamente la reacción tiene lugar en cantidades estequiométricas [32, 35]. Así, el proceso de combustión está condicionado por la mezcla de los reactivos a nivel molecular frente a la cinética química debido a la mayor escala temporal inherente al proceso de transporte de especies frente a las menores escalas temporales de las reacciones definidas por la cinética química [32]. Puesto que el mecanismo que controla el proceso es el del transporte difusivo, las llamas no-premezcladas son también conocidas como llamas de difusión [32, 35].

De esta forma, debido a su naturaleza, este tipo de llamas eliminan por com-

pleto el riesgo de retroceso de llama o *flashback*, ya que no existe ninguna mezcla inflamable previa que pueda facilitar la propagación del frente de llama. Este tipo de llamas se puede encontrar en diferentes aplicaciones como pueden ser los quemadores de turbinas de gas, los motores de combustión interna tipo diésel o quemadores de calderas y hornos industriales [32, 36]. No obstante, las llamas de difusión presentan el inconveniente de contar con una zona de reacción estequiométrica, haciendo que las temperaturas en esos puntos alcancen valores aproximados a la temperatura adiabática de llama, favoreciendo así el mecanismo de formación de NO_x térmicos [32].

1.3. Estado del arte

En vista de lo expuesto, parece razonable seleccionar llamas de difusión a la hora de diseñar quemadores de hidrógeno, ya que la formación de NO_x térmico puede considerarse un riesgo menor frente al riesgo de *flashback*. Sin embargo, en la literatura se pueden encontrar trabajos de investigación que tratan de estudiar la fracción máxima admisible de hidrógeno en arquitecturas de quemadores premezclados y parcialmente premezclados, diseñados para gas natural y en los que existe el riesgo de *flashback*. Entre otros factores, la fracción máxima admisible de hidrógeno en gas natural sin riesgo de *flashback* en el quemador puede variar dependiendo de las condiciones de operación, el exceso de aire, la geometría de los inyectores y de la zona de combustión entre otros. A continuación se resumirán los estudios más relevantes y los avances más recientes por parte de los fabricantes de quemadores de hidrógeno, considerando por separado las aplicaciones a escala doméstica e industrial.

1.3.1. Escala doméstica

En la tabla 1.4 se resumen los estudios mas significativos que consideran quemadores premezclados y parcialmente premezclados utilizados en el sector doméstico, mostrando la concentración máxima admisible de H_2 en gas natural que asegure un correcto funcionamiento sin riesgo *flashback*. Cabe destacar que uno de los gases límite en aplicaciones de gas es el gas límite de retroceso de llama G222 con un 23% de H_2 en CH_4 siguiendo el estándar EN-437 [37], con lo que muchas de las aplicaciones deben estar homologadas para dicho gas para su posterior comercialización.

Tabla 1.4: Estudios que establecen el límite de H_2 máximo en quemadores diseñados para el sector doméstico y comercial.

Aplicación	Tipo de quemador	Año	Max. %H2	Ref.
Calentador de agua	Premezcla parcial	2019	%10	[38]
Cocina	Premezcla parcial	2020	%23	[39]
Caldera doméstica	Premezcla	2020	%20	[40]
Horno para cocina	Premezcla parcial	2019	%25	[41]
Cocina	Premezcla parcial	2019	%20	[42]
Calentador de aire	Premezcla	2020	%15	[43]

Los resultados de la Tabla 1.4 destacan la necesidad de desarrollar nuevos diseños de quemadores o adaptar las arquitecturas existentes para poder llegar a funcionar con 100% hidrógeno. Por lo tanto, los fabricantes de quemadores y calderas deberán de investigar el comportamiento de este combustible bajo las condiciones de operación deseadas, evitando el riesgo de *flashback* y minimizando la formación de los NO_x térmicos.

En este sentido cabe mencionar el estudio de S.Gersen et al. [44] llevado a cabo por investigadores de *DNV GL*, *GasTerra B.V.* y *Bekaert Heating*, fabricantes destacados en el sector gasista. En este trabajo experimental se describen dos conceptos de quemadores capaces de trabajar con 100% hidrógeno. Para la primera caldera de *DNV GL/GasTerra*, se presenta un quemador de difusión con un conjunto de 20 orificios de 0,7 mm dispuestos en una estructura cilíndrica como se puede observar en la Figura 1.5. Dicha estructura está cubierta por una malla metálica capaz de absorber parte de la potencia térmica de las llamas para emitirla después de forma radiante.

La segunda caldera de *Bekaert Combustion Technology* cuenta con un quemador de premezcla cuyas características se desconocen. A pesar de que el artículo carece de información técnica relativa al diseño y al dimensionamiento del quemador, en ambos casos se muestra que las emisiones de NO_x térmicos están por debajo de la normativa europea vigente. Hay que destacar que el artículo tampoco menciona el exceso de aire que emplean ambos quemadores, un dato relevante para evitar el riesgo de retroceso de llama en el caso del quemador de premezcla de *Bekaert*

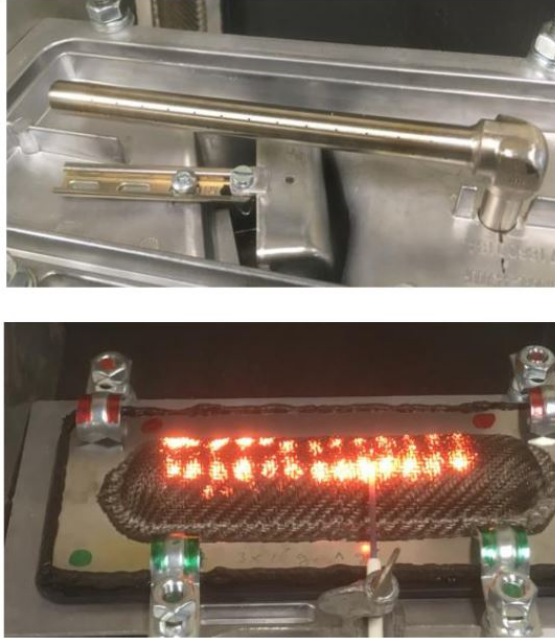


Figura 1.5: Imagen del quemador de difusión experimental desarrollado por DNV GL/GasTerra [44]

Combustion Technology y para la reducción de los NO_x en el caso del quemador de difusión de *DNV GL/GasTerra*. Si bien los fabricantes protegen el conocimiento adquirido en los procesos internos de investigación y desarrollo, se puede afirmar que existe un interés real por parte de los fabricantes de quemadores y calderas en el desarrollo de calderas de hidrógeno.

De forma similar, M.S. Boulahlib et al. [45] llevaron a cabo un estudio experimental sobre el efecto de mezclas hidrógeno-metano (con concentraciones máximas de hidrógeno del 45 %) en las emisiones de NO_x , CO_2 y CO considerando un quemador multillama de tipo mixto a una potencia nominal de 15 kW, compuesto por llamas de difusión y llamas de premezcla. En las llamas de premezcla, se empleó la combustión rica en aire con excesos de aire entre $\lambda = 2$ y 4, siguiendo la estrategia de *fuel-staging*, basada en emplear solamente parte del combustible para la combustión premezclada con altos excesos de aire. La otra fracción de combustible se separa para ser utilizada en la combustión por difusión, la cual toma el aire secundario que se introduce desde el exterior. De esta forma se combina un conjunto de

llamas premezcladas ricas en aire (lo cual reduce la temperatura de la llama y por ende la formación de NO_x térmicos) con un conjunto de llamas de difusión alimentadas por un flujo de aire secundario tomado del ambiente. Esta configuración se muestra en las Figuras 1.6 y 1.7.

Los resultados de las emisiones de NO_x para diferentes porcentajes de hidrógeno en metano (0-45%) considerando diferentes excesos de aire en las llamas de premezcla, mostraron que el incremento de la fracción de hidrógeno favorecía ligeramente la reducción de NO_x térmicos con disminuciones del orden de 10 ppm al incrementar la fracción de hidrógeno en metano desde 0 hasta 45%. Por otro lado, el incremento del exceso de aire en las llamas de premezcla (desde $\lambda = 2$ hasta 4) no mostró un impacto significativo en la reducción de los NO_x térmicos a una fracción de hidrógeno dada en el combustible. De esta forma, se puede concluir que la combinación de ambas tecnologías (difusión y premezcla) podría ser útil de cara a futuros diseños de quemadores de hidrógeno de bajo NO_x ya que los resultados mostraron concentraciones entre 5 y 30 ppm de NO_x en todos los casos considerados. No obstante, el estudio se limitó para una fracción máxima del 45% de hidrógeno, evidenciando que un mayor incremento en las concentraciones podría favorecer la aparición del *flashback* en las llamas de premezcla.

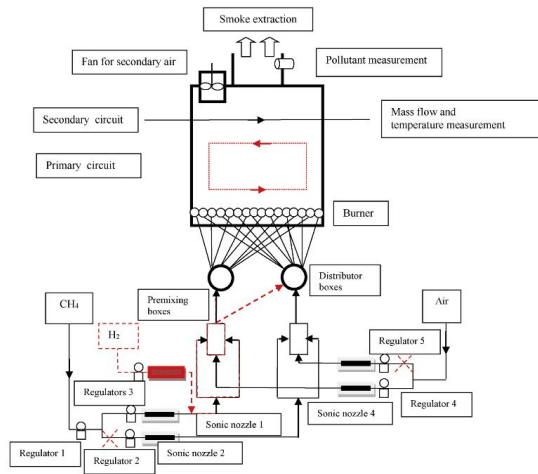


Figura 1.6: Esquema general de la configuración del quemador en la caldera fuel staging y el sistema de distribución aire-gas [45]

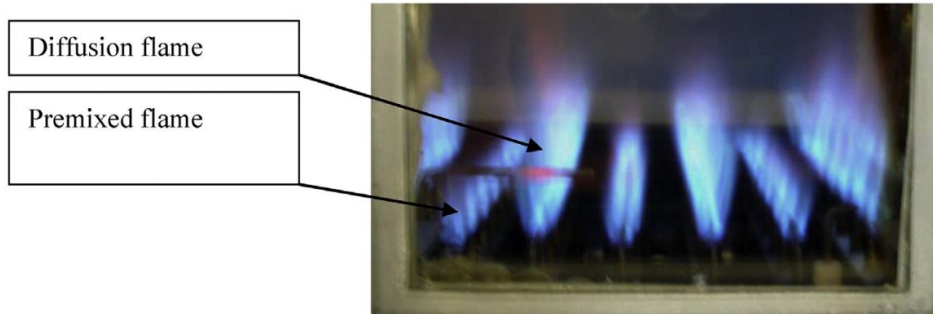


Figura 1.7: Imagen tomada durante los ensayos experimentales mostrando la formación de las llamas de difusión y las llamas premezcladas [45]

1.3.2. Escala industrial

Por otro lado, los estudios relacionados con quemadores para turbinas de gas se centran en definir diagramas de estabilidad diferenciando las zonas estables y de *flashback*, variando el porcentaje de hidrógeno, exceso de aire y número de Reynolds de los flujos de entrada [46, 47]. Como afirman M.Ditaranto et al. [48], a día de hoy no se ha conseguido superar el límite de 60 % de H_2 en quemadores de turbinas de gas de premezcla DLN (Dry Low NO_x) que no contenga algún tipo de dilución en la mezcla de entrada.

En cuanto a los estudios relacionados con el uso de hidrógeno en quemadores de calderas industriales, cabe mencionar el estudio de S. Gersen et al. [49] llevado a cabo nuevamente por investigadores de *DNV GL* y en este caso también de *Zantingh BV*. En este trabajo se presentaron los resultados experimentales tomados en un quemador industrial de tiro forzado (combustión no-premezclada o de difusión) instalado en una caldera industrial *Novum H2R* de 475 kW, empleando diferentes mezclas de gas natural/hidrógeno como combustible. La geometría del quemador se muestra en la Figura 1.8, donde se aprecian los orificios del aire en la placa circular y las entradas de hidrógeno en el cilindro central.

En el estudio se destaca la importancia del sistema de control de la relación fuel/aire dependiendo de la composición del fuel (% de hidrógeno en gas natural), por lo que presentaron un sistema de control propio para poder trabajar con el exceso de aire y la potencia térmica deseados. El porcentaje de hidrógeno en gas natural fue incrementado desde 30 % hasta el 100 %. A pesar de que se eliminó

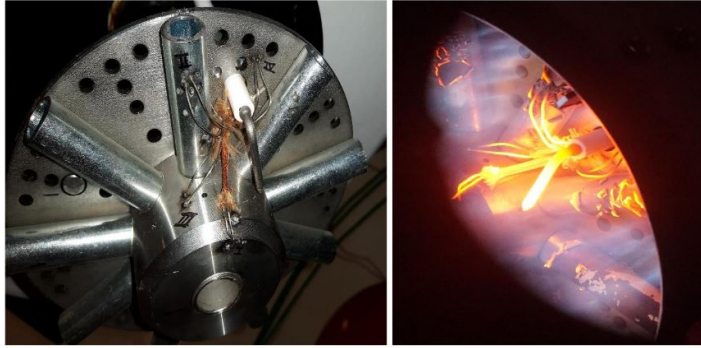


Figura 1.8: Quemador industrial de tiro forzado con el sistema de encendido y termopares para la medición de temperaturas [49]

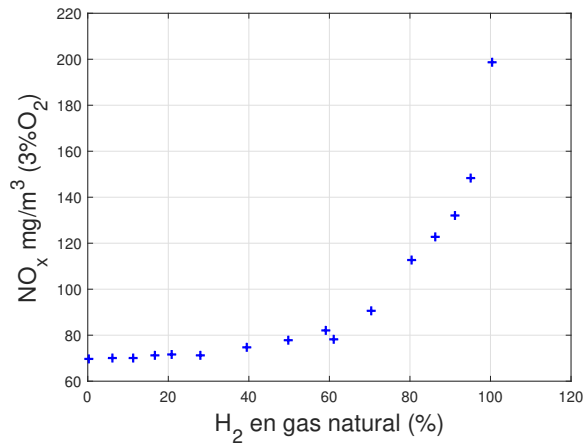


Figura 1.9: Efecto del porcentaje de hidrógeno en gas natural en la formación de NO_x [49]

el riesgo de *flashback*, los resultados mostraron un incremento en las emisiones de NO_x térmicos como se observa en la Figura 1.9.

Para reducir la formación de estos NO_x térmicos utilizando 100% hidrógeno como combustible, plantearon tres estrategias diferentes: incrementar el exceso de aire, diluir el hidrógeno con CO₂ puro y la recirculación de productos de combustión hacia el aire de entrada. Los resultados mostraron que el incremento del exceso de aire resultó tener un impacto negativo, aumentando las emisiones de NO_x térmicos. Como se verá a lo largo de este trabajo, el incremento del exceso de aire en

1.3. Estado del arte

llamas turbulentas debería de reducir el tiempo de residencia de las especies que toman parte en la formación de los NO_x térmicos, reduciendo así su formación. No obstante, en este caso concreto el comportamiento fue distinto, pudiendo deberse a la configuración y el dimensionamiento específico del quemador considerado. Por su contra, como era de esperar, la dilución del hidrógeno con CO_2 y la recirculación de productos tuvieron un impacto positivo, reduciendo las concentraciones en un factor de 3 y de 10 respectivamente.

Asimismo, como se verá a continuación, las inversiones y los planes de investigación por parte de los fabricantes de equipos de combustión a escala industrial pone de manifiesto su interés por incorporar el hidrógeno como combustible de cara a la reducción de gases de efecto invernadero en turbinas de gas y quemadores industriales. Entre los fabricantes de turbinas de gas, la Figura 1.10 muestra la capacidad en las turbinas actuales de *Siemens Energy*, indicando que con los desarrollos que se están llevando a cabo esperan poder alcanzar la capacidad de trabajar con 100 % H_2 [12].

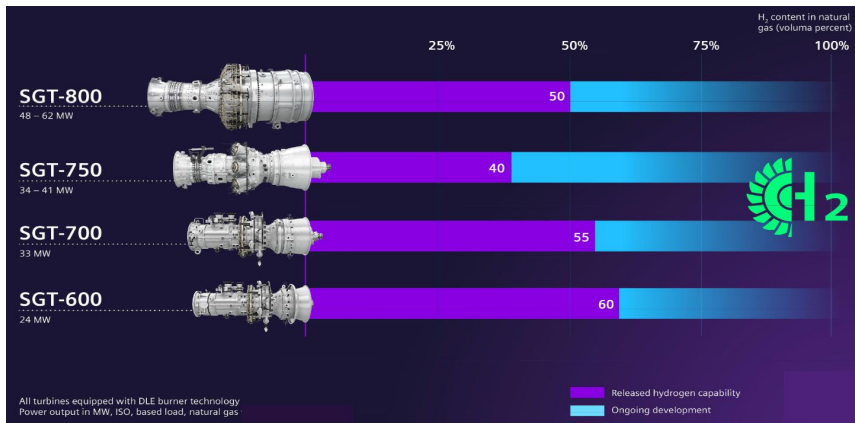


Figura 1.10: Capacidad de fracciones máximas admisibles de hidrógeno en gas natural en las turbinas de gas actuales y previsión de futuros desarrollos para poder trabajar con 100 % H_2 por parte de Siemens Energy [12]

En este sentido, el conocido fabricante *General Electric* cuenta con turbinas de gas capaces de trabajar con altos porcentajes de hidrógeno, hasta del 100 % H_2 en el caso de las turbinas de clase B/E [50]. De cara a futuros desarrollos, destacan el uso de la tecnología de micromezcla entre el combustible y el aire en configuraciones de flujos entrecruzados en llamas de premezcla, con el objetivo de mejorar el proceso

de combustión minimizando la formación de NO_x térmicos [51, 52].

De forma similar, los desarrollos de *Mitsubishi Hitachi power systems* (MHPS) cuentan con varios tipos de quemadores para turbinas de gas, entre los que destaca la tecnología de quemadores de difusión, trabajando con porcentajes de hasta 90 % de hidrógeno durante más de 3 millones de horas a lo largo de la red de 31 plantas de generación eléctrica con éste tipo de turbinas de gas. En este caso, debido a las mayores temperaturas de llama, los quemadores disponen de un sistema de inyección de vapor de agua para la reducción de NO_x térmicos. Hay que destacar que actualmente MHPS colabora en el proyecto *Vattenfall Magnum Carbon-Free Gas Power* con el objetivo de modificar las tres turbinas de gas de 440 MW para su funcionamiento con 100 % hidrógeno para el año 2025 [50].

Por último, en este campo destaca el desarrollo de la turbina de gas llevado a cabo por el consorcio formado por la Universidad de Aachen de Ciencias Aplicadas (UACA), B&B-AGEMA GmbH y Kawasaki Heavy Industries [53]. Este desarrollo se basa en el concepto de combustión de micromezcla o *Micromix* en una configuración de llamas de difusión con flujos entrecruzados de combustible y de aire en los quemadores de turbinas de gas. Estos dos conceptos se han mencionado previamente en los desarrollos actuales de las turbinas de gas de *General Electric*. No obstante, en este prevalece la combustión por difusión, eliminando cualquier tipo de premezcla aguas arriba y evitando así cualquier riesgo de *flashback*. Asimismo, este concepto de quemador *Micromix* tiene en cuenta efectos de aerodinámica de la combustión.

Las Figuras 1.11 y 1.12 muestran de forma esquemática los principales fenómenos físicos y los flujos de aire y de hidrógeno con el objetivo de aclarar el funcionamiento de los quemadores *Micromix* en las turbinas de gas. Se puede observar que el aire entra por la parte inferior impactando contra los segmentos de hidrógeno y parte de las placas de guiado de aire, pasando por los pequeños orificios de dichas placas para mezclarse con el hidrógeno. Este hidrógeno, entra de forma perpendicular hacia el flujo de aire, mezclándose a lo largo de una pequeña distancia y formando la llama en entre dos vórtices como se indica en la Figura 1.11. Con los efectos combinados del impacto del aire contra ambos cuerpos (segmentos de hidrógeno y placas de guiado de aire) y la entrada del chorro perpendicular de hidrógeno al aire, se busca la formación de los vórtices internos y externos, los cuales estabilizan las pequeñas llamas de difusión turbulentas entre ambos vórtices [54].

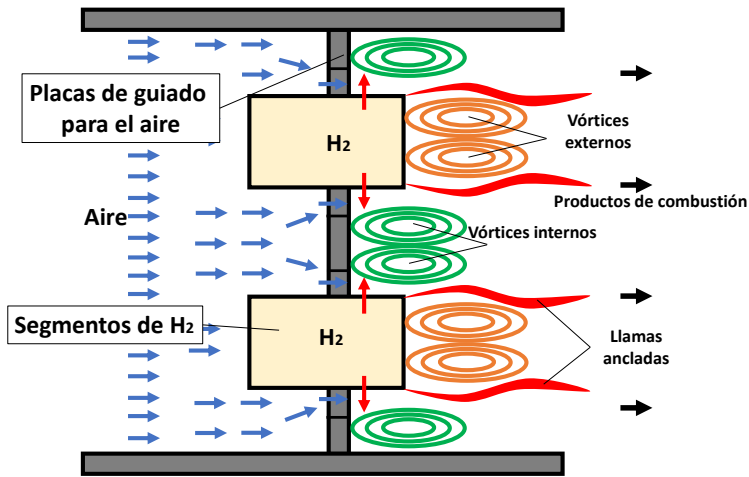


Figura 1.11: Esquema del concepto de quemador Micromix

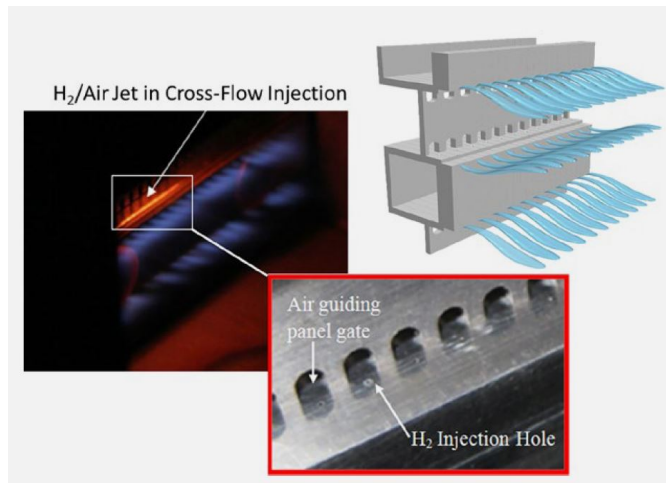


Figura 1.12: Quemador multillama Micromix mostrando imágenes de prototipos experimentales [53]

De esta forma, se consigue reducir la formación de NO_x térmicos, por un lado debido a la reducción de los tiempos de residencia de las especies que participan en las reacciones de formación de NO_x y por otro debido al menor volumen de las llamas confinadas entre ambos vórtices. Cabe destacar que este desarrollo cuenta con información técnica detallada y una sólida literatura debido a la publicación de los desarrollos por parte de los investigadores de la UACA [54]. Como se verá más

adelante, en esta tesis doctoral se considera- este concepto *Micromix* como posible alternativa para el diseño de quemadores de hidrógeno para calderas domésticas e industriales.

Por su parte, en cuanto a los quemadores de hidrógeno para calderas industriales, destaca el desarrollo anunciado por el fabricante de quemadores *EM combustión*, presentando un quemador capaz de trabajar con 100 % hidrógeno e instalado en una planta química de Portugal para un rango de potencias de entre 1 y 85 MW [55]. El modelo de quemador JBD que presentan, funciona con entradas de aire primario, secundario y terciario, contando con un tubo central para la inyección de fuel y un conjunto de álabes que forman el *swirler* como se puede observar en la Figura 1.13. El modo de funcionamiento de este tipo de quemadores de bajo índice de NO_x se basa en el concepto de *air-staging* [36], mediante el cual se obtiene una zona rica en fuel en el centro de la llama y otra zona rica en aire en la parte exterior.

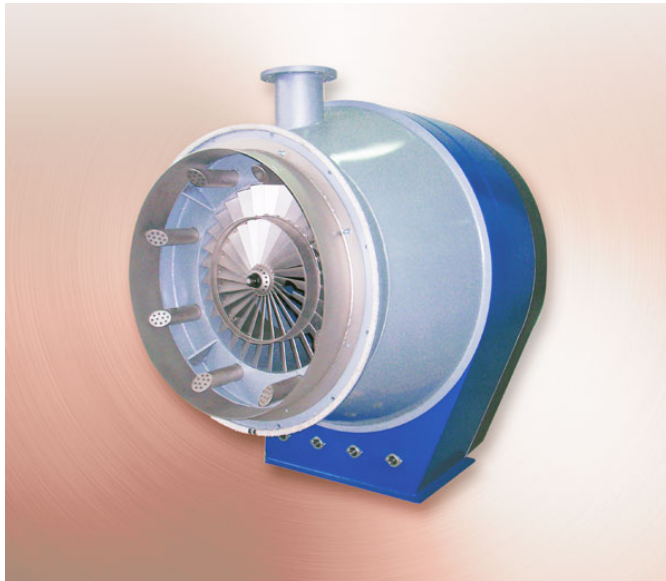


Figura 1.13: Quemador tipo JBD del fabricante EM Combustión [56]

1.3.3. Formación de NO_x en llamas de difusión

Los resultados mostrados a escala doméstica refuerzan la idea del uso de llamas de difusión para el diseño de quemadores con capacidad de utilizar 100 % hidrógeno sin riesgos potenciales de *flashback*. De forma similar, los desarrollos más prome-

tedores a escala industrial tratan de minimizar la premezcla entre el fuel y el aire, priorizando la tecnología de difusión. Es por ello por lo que la presente tesis doctoral se centrará en esta tipología de llamas, priorizando el diseño de quemadores sin ningún tipo de premezcla entre el hidrógeno y el aire. No obstante, como se ha comentado previamente, queda por resolver la problemática relacionada con la formación de los NO_x térmicos. Se descartarán otros mecanismos que favorecen a la formación de NO_x , conocidos como el mecanismo prompt- NO_x (basados en la presencia de radicales CH), fuel- NO_x (basado en átomos de nitrógeno que contiene el fuel) y el mecanismo del óxido nitroso (por altas presiones) [6], debido a que las llamas de hidrógeno no contienen radicales CH ni moléculas con átomos de nitrógeno en el fuel y por otro lado se trabajará a presiones cercanas a la atmosférica.

La denominación NO_x hace referencia al óxido nítrico (NO) y al óxido de nitrógeno (NO_2). El primero se forma por la disociación entre el nitrógeno y el oxígeno, que en el caso de los NO_x térmicos se debe a las altas temperaturas de llama. Como se ha mencionado anteriormente, este mecanismo es conocido como el mecanismo de Zeldovich, que se define mediante las siguientes reacciones:



La palabra *térmico* proviene de la alta energía de activación necesaria en la reacción (1.1) por causa del enlace triple en las moléculas de N_2 , siendo suficientemente rápida a altas temperaturas. Tras la formación del óxido nítrico en el proceso de combustión, éste puede reaccionar con otros radicales como el hidro-peróxido (HO_2) en zonas de menor temperatura ($T < 1000$ K) para formar NO_2 , pudiendo representar aproximadamente un 10 % de las emisiones totales de NO_x . No obstante, al ser expulsado al ambiente a través de los conductos de escape o chimeneas, el óxido nítrico se oxida rápidamente formando el NO_2 . Este último se define como un gas tóxico e irritante, considerándose un gas contaminante y perjudicial para la calidad del aire, pudiendo producir efectos adversos para el sistema respiratorio aumentando los síntomas de bronquitis y asma [57]. Asimismo, el NO_2 también contribuye a la formación de partículas PM_{2,5} (partículas presentes en la atmósfera respirable con un diámetro aerodinámico inferior o igual a los 2,5 micrómetros), favoreciendo a la lluvia ácida así como a la formación del ozono troposférico, que

a diferencia del estratosférico perjudica la calidad del aire con efectos nocivos para la salud, causando el conocido smog fotoquímico en ciudades y en zonas con altas concentraciones de emisiones [58, 59].

A priori, se ha mencionado que el uso del hidrógeno en quemadores eliminará las emisiones de CO y de CO₂, emitiendo solamente vapor de agua en caso de que la combustión sea óptima. No obstante, se ha visto que la formación de NO_x puede acompañar al vapor de agua, presentándose como el mayor inconveniente en quemadores de difusión de hidrógeno. En este sentido, la importancia de la formación de los NO_x en los procesos de combustión hace que sea necesario caracterizar y conocer los parámetros más relevantes en su formación al emplear hidrógeno puro como combustible en llamas de difusión, donde se espera que las altas temperaturas favorezcan la aparición de estas especies.

Uno de los trabajos más relevantes en este campo es el de Chen y Driscoll [60], quienes estudiaron los efectos del número de Reynolds del fuel y de la entrada de aire coaxial en la formación de NO_x en llamas de difusión tipo jet. El objetivo del trabajo era el de establecer leyes de escalado para el comportamiento de los NO_x (para llamas de hidrógeno y metano, en ambos casos con y sin aire coaxial y en régimen laminar y turbulento respectivamente). Los resultados experimentales mostraron que el aire coaxial tenía un efecto positivo en la reducción de los NO_x en el caso de llamas de hidrógeno y que no mostraba cambios significativos en el caso de llamas de metano. Por otro lado, los resultados de llamas de difusión simples (sin aire coaxial), mostraron que la reducción del diámetro del inyector de 0,37 a 0,16 cm favorecía la reducción de los NO_x. Así, el planteamiento de su trabajo de cara a obtener leyes de escalado de NO_x permite conocer los tres principales aspectos físicos, que destacan por su papel y compiten entre sí, en la producción de los NO_x:

1. Siguiendo el enfoque Euleriano de Peters y Donnerhack [61], Chen y Driscoll relacionaron la producción de NO_x en este tipo de llamas con un volumen de reacción $\mathcal{V}_{\text{reac}}$ (proporcional a $L_f^2 \cdot \delta$, donde L_f es la longitud de llama y δ su espesor).
2. Desde un punto de vista Lagrangiano, subrayaron la relevancia del tiempo de residencia τ_{res} en el volumen $\mathcal{V}_{\text{reac}}$.
3. De forma indirecta, también consideraron el tiempo químico para la producción de NO_x (el inverso de la tasa de reacción $\dot{\omega}_{\text{NO}_x}$)

Estas conclusiones serán relevantes para entender la influencia de las distintas variables que caracterizan el proceso de formación de NO_x térmicos en quemadores de difusión de hidrógeno y se desarrollaran en el capítulo 3. En concreto, en base a los resultados de dicho estudio, la formación de NO_x térmicos variará sobre todo dependiendo de la potencia térmica de la llama y del exceso de aire empleado. Por un lado se puede afirmar que la potencia térmica de la llama está directamente relacionada con el régimen de la llama o del conjunto de llamas que forman el quemador, ya que ambas definen la escala de la aplicación y la potencia térmica del quemador [62]. La combustión turbulenta a altas potencias térmicas se puede encontrar en los quemadores industriales para hornos y calderas o quemadores para turbinas de gas entre otros, los cuales trabajan a escalas de potencia térmica de megawatios [36]. Por su parte, la combustión laminar es más habitual en quemadores para calderas domésticas y comerciales, cocinas domésticas o profesionales y quemadores para calentamiento directo de espacios, con potencias térmicas en la escala de kilowatios [63]. Como se mostrará más adelante, la potencia del quemador y por consiguiente el régimen de la llama serán relevantes de cara a la formación de los NO_x térmicos, ya que influirá directamente sobre los parámetros que se han mencionado ($\mathcal{V}_{\text{reac}}$ y τ_{res}).

Por otro lado, el exceso de aire empleando jugará también un papel importante. Esta variable representada mediante λ , se define como la proporción entre la cantidad de aire real y la estequiométrica para la combustión completa del combustible considerado [63]. Cabe destacar que su valor depende de varios factores como pueden ser la aplicación final del quemador, el modo de combustión (premezcla, premezcla-parcial, difusión) y las condiciones de operación entre otros. Por ejemplo, los quemadores de gas natural instalados en hornos y calderas trabajan habitualmente con excesos de aire cercanos a $\lambda = 1,3$ [36] mientras que los quemadores empleados en turbinas de gas trabajan en niveles que pueden variar desde 1,6 hasta 2,5 en el marco de la tecnología de *lean-combustion* o combustión pobre [64]. Así, el exceso de aire implicará cambios sobre los NO_x térmicos influyendo en los parámetros previamente mencionados ($\mathcal{V}_{\text{reac}}$ y τ_{res}). Asimismo, por definición un mayor exceso de aire implicará menores temperaturas de llama en el caso de llamas de premezcla, lo cual también influirá de forma directa en la formación los NO_x térmicos. En relación con estos efectos, la Figura 1.14 resume de forma cualitativa la tendencia de formación de NO_x en función del exceso de aire y del tipo de combustión. Como se ha mencionado previamente, el presente trabajo se centrará en la tecnología de llamas de difusión, ya que eliminan por completo el riesgo de

flashback en llamas de hidrógeno. La tendencia cualitativa que se muestra en la Figura 1.14 indica un incremento de los NO_x cerca del punto estequiométrico de la parte pobre, llegando a un máximo a partir del cual el incremento del exceso de aire tendrá un efecto positivo. Por lo tanto, será necesario analizar la influencia del exceso de aire en los NO_x para determinar de forma cuantitativa el efecto que tiene sobre los NO_x térmicos.

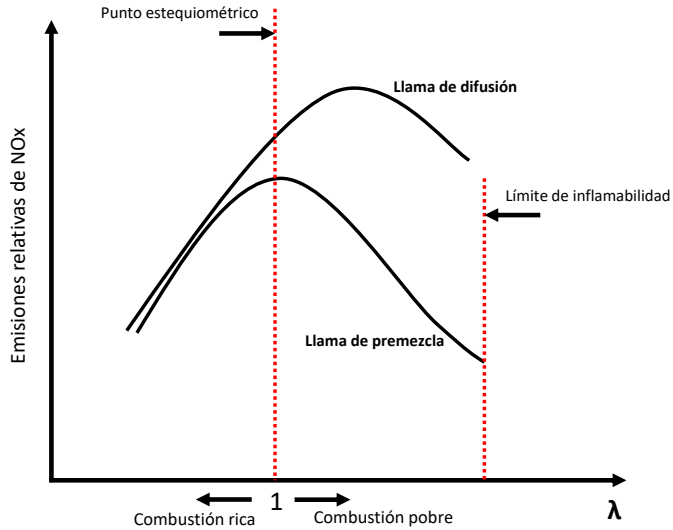


Figura 1.14: Tendencias cualitativas de la formación de NO_x en función del exceso de aire y del tipo de llama [65]

En este punto, es necesario subrayar que el concepto de exceso de aire puede referirse de forma local o global. A lo largo de este trabajo se hará referencia al exceso de aire global.

En este contexto y desde un punto de vista práctico, la presente tesis doctoral se centrará en el comportamiento de los NO_x térmicos frente a las diferentes condiciones de operación (potencia térmica y exceso de aire) y al régimen de llama (laminar-turbulento). Si bien la literatura existente se centra en las fracciones admisibles de hidrógeno en quemadores actuales de premezcla y premezcla-parcial, no existen estudios que muestren la influencia de la potencia térmica y del exceso de aire en la formación de NO_x térmicos en quemadores de difusión de hidrógeno.

1.4. Objetivos

El principal objetivo de la tesis doctoral es el de caracterizar el comportamiento de los NO_x térmicos en quemadores de difusión de hidrógeno y plantear nuevos diseños de quemadores para el sector doméstico e industrial que minimicen su formación. En concreto, se analizará la influencia de las condiciones de operación más relevantes. Cabe mencionar que dichas condiciones de operación se definirán teniendo en cuenta el funcionamiento real de calderas actuales. Así, los objetivos principales son:

- Caracterizar el comportamiento de los NO_x térmicos analizando parámetros microscópicos en una configuración de llama de difusión simple. Se estudiará la influencia de la potencia térmica, régimen de llama y exceso de aire. Para ello será necesario emplear cálculos CFD que consideren la química detallada junto con el transporte de especies y las pérdidas de calor que puedan darse. Asimismo, será necesario validar la fiabilidad de los cálculos CFD mediante validaciones experimentales.
- Plantear nuevos diseños de quemadores de difusión de hidrógeno de bajo NO_x partiendo de los resultados y conclusiones de la configuración simple. Si bien en el paso previo se considera una configuración de llama simple, en este caso se hablará de un modelo de quemador extendido, que estará más cerca de un posible diseño final para su integración en caldera. Siguiendo la misma metodología que en el estudio de la configuración simple, se quiere estudiar la influencia de las condiciones de operación tanto a escala de calderas domésticas como industriales. Para ello, se llevarán a cabo cálculos CFD capaces de resolver la química detallada en la llama o en el conjunto de llamas, así como las correspondientes validaciones experimentales en prototipos escalados de calderas.

1.5. Estructura del documento

El documento se divide en varios capítulos en los que se tratará de dar respuesta a los objetivos planteados:

- Capítulo 2: Descripción del marco teórico de los modelos de cálculo basados en dinámica de fluidos computacional. Los cálculos CFD validados mediante

ensayos experimentales serán el eje central de este capítulo y permitirán simular la interacción entre los diversos procesos físico-químicos (transferencia de calor, reacciones químicas, transporte de especies, turbulencia etc.) que tienen lugar en la combustión. En base a los modelos de combustión empleados, se aplicarán las ecuaciones de gobierno de los modelos empleados para resolver los flujos reactivos en llamas laminares y turbulentas.

- Capítulo 3: Estudio de la formación de NO_x térmicos en una configuración simple de llama de difusión de hidrógeno. Se definen el caso de estudio y las condiciones de operación en base a un concepto de quemador de difusión patentado [66]. Con el objetivo de caracterizar la influencia de las variables de operación más relevantes, se llevaron a cabo cálculos CFD a diferentes potencias térmicas y excesos de aire, en un rango de potencias que aseguraba el cambio de régimen de la llama. Los modelos de combustión empleados consideraron la química completa de la combustión del hidrógeno, contando con las reacciones intermedias así como el mecanismo de Zeldovich. De esta forma se pudieron establecer ciertos criterios de diseño para reducir la formación de NO_x térmicos en diseños de quemadores de hidrógeno. Los resultados se validaron mediante medidas experimentales en laboratorio. Así, a través de este estudio se obtuvo una caracterización del comportamiento de la formación de NO_x térmicos en función de variables macroscópicas que definen las condiciones de operación en quemadores (potencia de entrada, exceso de aire y régimen de la llama), explicados a través de variables microscópicas obtenidas de los resultados numéricos. Los contenidos de este capítulo están recogidos en el artículo científico [67] (Anexo 1).
- Capítulo 4: Tomando como base los resultados del capítulo 3 y analizando la literatura existente, se estudió la viabilidad de aplicar el concepto de quemador de difusión *Micromix* [54] empleado para turbinas de gas, en el diseño de un quemador de difusión de bajo NO_x de hidrógeno para calderas domésticas e industriales. Debido a las diferencias de escala y de condiciones de operación entre turbinas de gas y calderas, en este capítulo se muestran los cálculos numéricos realizados para el escalado de la geometría y de las condiciones de operación, con el objetivo de verificar si las características del diseño existente para turbinas de gas (bajas emisiones de NO_x sin riesgo de retroceso de llama) se mantienen a pesar de los cambios en la geometría y las condiciones de operación. Finalmente, tomando como base los resultados

numéricos, se llevó a cabo el diseño y la construcción de un prototipo de quemador de difusión de hidrógeno. Los resultados mostraron que los beneficios de los diseños aplicados en turbinas de gas (bajos niveles de NO_x) así como las características principales de la llama (estabilidad, zonas de recirculación, mezcla combustible/aire etc.) se mantuvieron en las nuevas geometrías de quemadores domésticos e industriales desarrolladas a pesar de las diferentes condiciones de operación impuestas. En este caso, parte de los resultados y avances presentados en este capítulo se recogen en el artículo científico [68] (Anexo 2).

- Capítulo 5: En este capítulo se resumen los resultados más significativos de la tesis doctoral y se plantean tareas complementarias teniendo en cuenta los resultados obtenidos en el capítulo 4. Finalmente se presentan las líneas de investigación futuras que derivan de la tesis y seguirán activas en Ikerlan, relacionadas con la integración del quemador *Micromix* en una caldera real y el desarrollo de quemadores *Micromix* para hornos del sector de la siderurgia.

1.6. Bibliografía

- [1] European hydrogen backbone, a gas for climate spin-off project, Tech. rep. (October 2020).
- [2] R. Aloui, M. S. B. Aïssa, S. Hammoudeh, D. K. Nguyen, Dependence and extreme dependence of crude oil and natural gas prices with applications to risk management, *Energy Economics* 42 (2014) 332–342. doi:<https://doi.org/10.1016/j.eneco.2013.12.005>.
- [3] European Commission Directorate, Member States' Energy Dependence: An Indicator-Based Assessment, no. April, 2013. doi:[10.2765/41957](https://doi.org/10.2765/41957).
- [4] Energy statistics - supply, transformation and consumption, Tech. rep., Statistical Office of the European Union (Eurostat) (2020).
- [5] B. E. Gelfand, M. V. Silnikov, S. P. Medvedev, S. V. Khomik, *Thermo-Gas Dynamics of Hydrogen Combustion and Explosion*, Springer, 2012.
- [6] J. Warnatz, U. Maas, R. W. Dibble, R. W. Dibble, *Combustion: Physical and Chemical Fundamentals, Modelling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation.*, Springer, 2001.
- [7] A. Lanz, *Hydrogen fuel cell engines, and related technologies*, Tech. rep., College of the Desert and SunLine Transit Agency (2001).
- [8] M. Z. Jacobson, Clean grids with current technology, *Nature Climate Change* 6 (2016) 441–442. doi:<https://doi.org/10.1038/nclimate2926>.
- [9] P. Miranda, *Science and Engineering of Hydrogen-Based Energy Technologies: Hydrogen Production and Practical Applications in Energy Generation*, Elsevier Science, 2018.
- [10] A review of technical advances, barriers, and solutions in the power to hydrogen (p2h) roadmap, *Engineering* 6 (12) (2020) 1364–1380. doi:<https://doi.org/10.1016/j.eng.2020.04.016>.
- [11] *Hydrogen Roadmap Europe*, Tech. rep., Fuel Cells and Hydrogen 2 Joint Undertaking (2019). doi:[doi:10.2843/341510](https://doi.org/10.2843/341510).
- [12] J. Larfeldt, Fuel flexibility of industrial gasturbines, Tech. rep. (December 2020).
- [13] Refhyne: clean refinery hydrogen for europe, accessed: 2021-07-21. URL <https://refhyne.eu/>
- [14] Svevind and kazakh invest national company jsc sign a memorandum of understanding relating to giant green hydrogen facilities amounting 30 gigawatt in kazakhstan, accessed: 2021-07-21.

- URL https://svevind.se/en/2021/06/23/svevind-and-kazakh-invest-national-company-jsc-sign-a-memorandum-of-understanding/#pll_switcher
- [15] Enegix energy to build \$5.4 billion green hydrogen facility in brazil, accessed: 2021-07-21.
URL <https://www.renewableenergymagazine.com/hydrogen/enegix-energy-to-build-5-4-billion-20210301>
- [16] The grhyd demonstration project, accessed: 2021-07-21.
URL <https://www.engeie.com/en/businesses/gas/hydrogen/power-to-gas/the-grhyd-demonstration-project>
- [17] T. Isaac, HyDeploy: The UK's First Hydrogen Blending Deployment Project, Clean Energy 3 (2) (2019) 114–125. doi:10.1093/ce/zkz006.
- [18] Planta de hidrógeno verde en puertollano, accessed: 2021-07-21.
URL <https://www.iberdrola.com/conocenos/lineas-negocio/proyectos-emblematicos/puertollano-planta-hidrogeno-verde>
- [19] Baywa r.e. ramps up green hydrogen activities, accessed: 2021-07-21.
URL <https://www.baywa-re.com/en/news/details/baywa-re-ramps-up-green-hydrogen-activities>
- [20] El corredor vasco del hidrógeno implica a 78 empresas e instituciones de la mano de petronor-repsol, accessed: 2021-07-21.
URL <https://petronor.eus/es/2021/02/el-corredor-vasco-del-hidrogeno-implica-a-78-empresas-e-instituciones-de-la-mano-de-petronor-repsol/>
- [21] El Corredor Vasco del Hidrógeno, url = <http://www.clusterenergia.com/noticias-asociados-2/corredor-vasco-hidrogeno-une-a-78-empresas-y-organizaciones-en-industria-futuro/>, note = Accessed: 2021-06-2.
- [22] Corredor vasco del hidrógeno, accessed: 2021-07-21.
URL <https://petronor.eus/wp-content/uploads/2021/03/publicacion-corredorvasco.pdf>
- [23] Proyecto benorth2, accessed: 2021-07-21.
URL <https://www.benorth2.com/>
- [24] Arranca h2sarea, un proyecto para impulsar la inyección segura de hidrógeno en la red de gas natural, accessed: 2021-07-21.
URL <https://www.spri.eus/es/ris3-euskadi-comunicacion/energia/arranca-h2sarea-un-proyecto-para-impulsar-la-inyeccion-segura->

- de-hidrogeno-en-la-red-de-gas-natural/
- [25] Large-scale compressed hydrogen storage as part of renewable electricity storage systems, *International Journal of Hydrogen Energy* (2021). doi:<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.02.080>.
- [26] J. Liu, Z. Xu, J. Wu, K. Liu, X. Guan, Optimal planning of distributed hydrogen-based multi-energy systems, *Applied Energy* 281 (2021) 116107. doi:<https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2020.116107>.
- [27] J. M. Andújar, F. Segura, M. Á. Martínez, A renewable sources-based smart grid using hydrogen as backup. Optimization criteria for the energy management, in: 2017 Saudi Arabia Smart Grid (SASG), 2017, pp. 1–8. doi: 10.1109/SASG.2017.8356473.
- [28] R.-H. Lin, Y.-Y. Zhao, B.-D. Wu, Toward a hydrogen society: Hydrogen and smart grid integration, *International Journal of Hydrogen Energy* 45 (39) (2020) 20164–20175. doi:<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.01.047>.
- [29] M. Bookchin, *The ecology of freedom : the emergence and dissolution of hierarchy*, Cheshire Books, Palo Alto (California), 1982.
- [30] W. L. Jolly, Hydrogen. *encyclopedia britannica*.
URL <https://www.britannica.com/science/hydrogen>
- [31] Y. Zeldovich, The oxidation of nitrogen in combustion and explosions, *Acta Physicochim. USSR* 21:577 (1946).
- [32] S. McAllister, J. Y. Chen, A. C. Fernandez-Pello, *Fundamentals of Combustion Processes*, Mechanical Engineering Series, Springer New York, 2011.
- [33] Chapter 6 - flashback due to combustion instabilities, in: A. C. Benim, K. J. Syed (Eds.), *Flashback Mechanisms in Lean Premixed Gas Turbine Combustion*, Academic Press, Boston, 2015, pp. 41 – 44. doi:<https://doi.org/10.1016/B978-0-12-800755-6.00006-4>.
- [34] Premixed flame propagation in hydrogen explosions, *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 81 (2018) 1988–2001. doi:<https://doi.org/10.1016/j.rser.2017.06.008>.
- [35] N. Peters, *Turbulent Combustion*, Cambridge Monographs on Mechanics, Cambridge University Press, 2000. doi:10.1017/CB09780511612701.
- [36] C. E. B. Jr., *Industrial Burners Handbook*, Industrial Combustion, CRC Press, 2003.
- [37] Test gases - test pressures - appliance categories, Standard, European Commission.

- [38] S. Choudhury, V. G. McDonell, S. Samuelsen, Combustion performance of low-nitrogen and conventional storage water heaters operated on hydrogen enriched natural gas, *International Journal of Hydrogen Energy* 45 (3) (2020) 2405–2417. doi:<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.11.043>.
- [39] A. González-Espinosa, A. Gil, L. Royo-Pascual, A. Nueno, C. Herce, Effects of hydrogen and primary air in a commercial partially-premixed atmospheric gas burner by means of optical and supervised machine learning techniques, *International Journal of Hydrogen Energy* 45 (55) (2020) 31130–31150. doi:<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.08.045>.
- [40] F. Schiro, A. Stoppato, A. Benato, Modelling and analyzing the impact of hydrogen enriched natural gas on domestic gas boilers in a decarbonization perspective, *Carbon Resources Conversion* 3 (08 2020). doi:[10.1016/j.crcon.2020.08.001](https://doi.org/10.1016/j.crcon.2020.08.001).
- [41] Y. Zhao, V. McDonell, S. Samuelsen, Experimental assessment of the combustion performance of an oven burner operated on pipeline natural gas mixed with hydrogen, *International Journal of Hydrogen Energy* 44 (47) (2019) 26049–26062. doi:<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.08.011>.
- [42] Y. Zhao, V. McDonell, S. Samuelsen, Influence of hydrogen addition to pipeline natural gas on the combustion performance of a cooktop burner, *International Journal of Hydrogen Energy* 44 (23) (2019) 12239–12253. doi:<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.03.100>.
- [43] Y. Zhao, V. McDonell, S. Samuelsen, Assessment of the combustion performance of a room furnace operating on pipeline natural gas mixed with simulated biogas or hydrogen, *International Journal of Hydrogen Energy* 45 (19) (2020) 11368–11379. doi:<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.02.071>.
- [44] S. Gersen, H. Darneveil, M. Van essen, G. Martinus, O. Teerlingc, *International Gas Research Conference* (2020).
- [45] M. Boulahlib, F. Medaerts, M. Boukhalifa, Experimental study of a domestic boiler using hydrogen methane blend and fuel-rich staged combustion, *International Journal of Hydrogen Energy* (2021). doi:<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.01.103>.
- [46] X. Liu, M. Bertsch, A. A. Subash, S. Yu, R.-Z. Szasz, Z. Li, P. Petersson, X.-S. Bai, M. Aldén, D. Lörstad, Investigation of turbulent premixed methane/air and hydrogen-enriched methane/air flames in a laboratory-scale gas turbine model combustor, *International Journal of Hydrogen Energy* 46 (24) (2021)

- 13377–13388. doi:<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.01.087>.
- [47] B. A. Imteyaz, M. A. Nemitallah, A. A. Abdelhafez, M. A. Habib, Combustion behavior and stability map of hydrogen-enriched oxy-methane premixed flames in a model gas turbine combustor, *International Journal of Hydrogen Energy* 43 (34) (2018) 16652–16666. doi:<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2018.07.087>.
- [48] M. Ditaranto, T. Heggset, D. Berstad, Concept of hydrogen fired gas turbine cycle with exhaust gas recirculation: Assessment of process performance, *Energy* 192 (2020) 116646. doi:<https://doi.org/10.1016/j.energy.2019.116646>.
- [49] S. Gersen, B. Slim, R. Zeijlmaker, M. Van essen, R. Tichelaar, The development of a natural gas/hydrogen boiler system, *International Gas Research Conference* (2020).
- [50] Hydrogen gas turbines, the path towards a zero-carbon gas turbine, Tech. rep. (January 2020).
- [51] J. Goldmeer, Power to gas: Hydrogen for power generation, Tech. rep. (February 2019).
- [52] W. York, W. Ziminsky, E. Yilmaz, Development and testing of a low nox hydrogen combustion system for heavy duty gas turbines, Vol. 135, 2012. doi: [10.1115/GT2012-69913](https://doi.org/10.1115/GT2012-69913).
- [53] N. Tekin, M. Ashikaga, A. Horikawa, D.-I. H. Funke, Enhancement of fuel flexibility of industrial gas turbines by development of innovative hydrogen combustion systems (2019).
- [54] H. H. Funke, N. Beckmann, S. Abanteriba, An overview on dry low NOx micromix combustor development for hydrogen-rich gas turbine applications, *International Journal of Hydrogen Energy* 44 (13) (2019) 6978–6990. doi: [10.1016/j.ijhydene.2019.01.161](https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.01.161).
- [55] EM Combustion develops a hydrogen burner for a chemical plant in portugal, accessed: 2021-07-21.
URL <https://emcombustion.es/quemador-de-hidrogeno/>
- [56] Quemadores EM duoblock JBD, accessed: 2021-07-21.
URL https://www.emcombustion.es/wp-content/pdfs/es/emc_quemadores_jbd_cast_web.pdf
- [57] WHO Air quality guidelines for particulate matter, ozone, nitrogen dioxide and sulfur dioxide. Summary of risk assessment, Tech. rep., World Health Organization (2005).

- [58] E. Sher, Chapter 2 - environmental aspects of air pollution, in: E. Sher (Ed.), Handbook of Air Pollution From Internal Combustion Engines, Academic Press, San Diego, 1998, pp. 27–41. doi:<https://doi.org/10.1016/B978-012639855-7/50041-7>.
- [59] L. Cecchi, G. D’Amato, I. Annesi Maesano, 1.09 - climate, urban air pollution, and respiratory allergy, in: R. A. Pielke (Ed.), Climate Vulnerability, Academic Press, Oxford, 2013, pp. 105–113. doi:<https://doi.org/10.1016/B978-0-12-384703-4.00116-7>.
- [60] R.-H. Chen, J. F. Driscoll, Nitric oxide levels of jet diffusion flames: Effects of coaxial air and other mixing parameters, Symposium (International) on Combustion 23 (1) (1991) 281–288, twenty-Third Symposium (International) on Combustion. doi:[https://doi.org/10.1016/S0082-0784\(06\)80271-7](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(06)80271-7).
- [61] N. Peters, S. Donnerhack, Structure and similarity of nitric oxide production in turbulent diffusion flames, Symposium (International) on Combustion 18 (1) (1981) 33–42, eighteenth Symposium (International) on Combustion. doi:[https://doi.org/10.1016/S0082-0784\(81\)80008-2](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(81)80008-2).
- [62] T. Poinsot, D. Veynante, Theoretical and Numerical Combustion, Edwards, 2005.
- [63] H. R. N. Jones, The Application of Combustion Principles to Domestic Gas Burner Design, British Gas technical monographs, Spon, 1989.
- [64] P. Jansohn, Wp, Modern gas turbine systems: High efficiency, low emission, fuel flexible power generation (woodhead publishing series in energy), 2014.
- [65] W. R. May, Reduction of thermal and prompt nox in exhausts of natural gas fueled boilers, SFA International.
- [66] R. Marin, L. Diaz, I. Urresti, Gas burner, Applicant: Ikerlan S.Coop. Application number: 16382614.2. (june 2018).
- [67] G. Lopez-Ruiz, I. Alava, I. Urresti, J. Blanco, B. Naud, Experimental and numerical study of NO_x formation in a domestic H₂/air coaxial burner at low reynolds number, Energy 221 (2021) 119768. doi:<https://doi.org/10.1016/j.energy.2021.119768>.
- [68] G. Lopez-Ruiz, I. Alava, J. Blanco, Study on the feasibility of the micro-mix combustion principle in low NO_x H₂ burners for domestic and industrial boilers: A numerical approach, Energy 236 (2021) 121456. doi:<https://doi.org/10.1016/j.energy.2021.121456>.

Capítulo 2

Marco teórico: Resolución de flujos reactivos mediante CFD

Resumen: *La resolución de flujos reactivos gaseosos implica resolver fenómenos físicos acoplados como la turbulencia, el transporte de especies, las reacciones químicas y la transferencia de calor y de masa. Para ello, la CFD permite resolver de forma numérica la interacción entre estos fenómenos, incluyendo posibles simplificaciones y modelos. En este capítulo se describen los modelos empleados a lo largo de este trabajo, partiendo de una definición general de las ecuaciones que gobiernan el flujo (las ecuaciones de Navier-Stokes) y describiendo de forma específica los modelos empleados para simular la combustión en régimen laminar y turbulento.*

2.1. Dinámica de fluidos computacional en flujos reactivos: Ecuaciones de conservación

Siguiendo la definición de John D. Anderson [1], la dinámica de fluidos computacional es el arte de reemplazar las integrales de las derivadas parciales en las ecuaciones de Navier-Stokes por su forma algebraica discretizada, las cuales se resuelven para obtener números de las variables del flujo en puntos temporales y/o espaciales discretos. De esta forma, la dinámica fluidos computacional (de ahora en adelante CFD por sus siglas en inglés) permite resolver problemas en diferentes tipos de flujos en los que se desconoce la solución analítica y no pueden ser resueltos de otra forma.

Las simulaciones CFD se utilizan principalmente para entender e interpretar fenómenos y variables relacionadas con diferentes tipos de flujos difíciles de observar y medir mediante ensayos experimentales. Por otro lado, también ayudan a optimizar y/o diseñar nuevos equipos en los que no es posible realizar experimentos, simplemente porque todavía no existen. Entre las ventajas de la CFD destacan su capacidad para realizar estudios paramétricos bajo diferentes condiciones (incluso bajo condiciones que no se quieren reproducir en la realidad: explosiones, fallos...) así como la amplia información que ofrece respecto a las variables más relevantes en todo el dominio considerado. Por otro lado, también presenta la desventaja de la fiabilidad de sus resultados ya que son muy sensibles a los parámetros y simplificaciones introducidas por parte del usuario. Por lo tanto, es imprescindible complementar las simulaciones con procesos de verificación y validación mediante ensayos experimentales.

2.1.1. Ecuaciones de Navier-Stokes

Como se ha indicado en la introducción, la CFD se basa en formular de forma algebraica las ecuaciones de Navier-Stokes, que para el caso de flujo incompresible que se considerará a lo largo de este trabajo, se expresan como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p - \nabla \cdot \tau + \rho \mathbf{g} \quad (2.2)$$

\mathbf{g} y p indican la gravedad y la presión hidrostática. El vector de velocidad \mathbf{u}

incluye las tres componentes $\mathbf{u} = (u, v, w)^T$. La primera ecuación se puede obtener aplicando el principio de conservación de masa sobre un volumen de control infinitesimal (partícula de fluido), mientras que la segunda se deduce aplicando la conservación de momento lineal, la cual obedeciendo a la segunda ley de Newton, relaciona la tasa de crecimiento del momento de una partícula de fluido (suma de los términos de la izquierda, conocidos como la aceleración local y aceleración convectiva de la partícula de fluido) y la suma de las fuerzas aplicadas sobre una partícula de fluido (suma de los términos de la derecha) [2]. Por su parte τ hace referencia al tensor de tensiones o tensor de esfuerzos viscosos, que considerando fluidos Newtonianos, es linealmente proporcional al tensor de razón de deformación. Así, los elementos de la diagonal representan los esfuerzos de elongación o compresión que actúan sobre una partícula de fluido, mientras que los elementos fuera de la diagonal describen los esfuerzos que causan la deformación de la partícula de fluido en respuesta al corte que cambia el ángulo entre los planos mutuamente perpendiculares correspondientes a los tres ejes coordenados [2].

$$\tau_{i,j} = \begin{pmatrix} 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} & \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) & \mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \\ \mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) & 2\mu \frac{\partial v}{\partial x} & \mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \\ \mu \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) & \mu \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) & 2\mu \frac{\partial w}{\partial x} \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

Así, este conjunto de ecuaciones de conservación constituyen las llamadas ecuaciones de Navier-Stokes, las cuales se resolverán de forma numérica durante los cálculos.

Cabe destacar que en el caso de flujos reactivos laminares considerados en el capítulo 3, estas ecuaciones describen por completo la física general, por lo que se resolverán de forma numérica tal y como se han expresado. No obstante, en el caso de los flujos reactivos turbulentos que se tratarán en el capítulo 4, existen un amplio rango de escalas temporales y espaciales (remolinos con fluctuaciones locales de la velocidad debidas al movimiento caótico y desordenado del flujo), dificultando la resolución numérica de las ecuaciones de Navier-Stokes. Por lo tanto, en estos casos, es habitual resolver las ecuaciones promediadas que se presentan en el apartado 2.3 para poder incluir los efectos de la turbulencia con un coste computacional asumible. También existen otras aproximaciones que consisten en

resolver las grandes escalas del flujo turbulento (enfoque *Large Eddy Simulation* o LES).

2.1.2. Ecuaciones de transporte de especies y energía

Si bien las ecuaciones de Navier-Stokes forman la base del cálculo en diferentes tipos de flujos, la resolución de flujos reactivos de mezclas gaseosas de varias especies (mezclas multicomponente) también implica conocer las concentraciones másicas de las especies que participarán en el conjunto de reacciones químicas que pueden darse a lo largo del dominio. Asimismo, será necesario conocer los cambios del campo de temperaturas inducidos por dichas reacciones químicas y por los diferentes mecanismos de transferencia de calor en el dominio. Por lo tanto, junto con las ecuaciones de Navier-Stokes, también será necesario resolver las ecuaciones de conservación de especies y de la energía [3]:

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_i) = -\nabla \cdot J_i + R_i \quad (2.4)$$

$$\frac{\partial(\rho E_t)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho H_t \mathbf{u}) = \nabla \cdot (k_{mix} \nabla T) + \nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^N J_i h_i \right) + S \quad (2.5)$$

De la misma forma que las ecuaciones de Navier-Stokes, ambas ecuaciones se pueden deducir aplicando la conservación de la fracción másica y de la energía a un volumen infinitesimal (partícula de fluido) [3]. Las dos ecuaciones cuentan con el vector de velocidad \mathbf{u} que se obtiene de las ecuaciones de Navier-Stokes. Analizando los términos, se puede ver que en ambas ecuaciones el primer término no-estacionario de la izquierda representa la variación temporal de la fracción másica de la especie i (Y_i) y de la energía total (E_t) en el volumen infinitesimal de fluido. El segundo término hace referencia al transporte convectivo (entrada/salida del flujo del volumen de control) de la fracción másica Y_i y de la energía en términos de la entalpía total H_t , la cual se define como $H_t = \sum_{i=1}^N h_i Y_i$, donde h_i es la entalpía sensible de la especie i , que se calcula como:

$$h_i = \int_{T_{ref}}^T c_{p,i} dT \quad (2.6)$$

Donde el calor específico de cada especie $c_{p,i}$ se calcula en función de la temperatura con expresiones polinómicas. Los coeficientes de dichas expresiones se toman de tablas termodinámicas disponibles en la literatura [4]. Analizando cada uno de los

términos situados a la derecha en la ecuación (2.4), el primero de ellos representa el transporte difusivo de la especie i en la mezcla, donde J_i se define como el vector de flujo difusivo. Para el cálculo de este vector se pueden considerar dos enfoques: el del cálculo con la aproximación diluida y el enfoque multicomponente [5, 6]:

$$J_i = -\rho D_{i,m} \nabla Y_i - D_{T,i} \frac{\nabla T}{T} \quad (2.7)$$

$$J_i = -\sum_{j=1}^{N-1} \rho D_{i,j} \nabla Y_j - D_{T,i} \frac{\nabla T}{T} \quad (2.8)$$

Donde las ecuaciones (2.7) y (2.8) definen el vector de flujo difusivo mediante la aproximación diluida y el enfoque multicomponente respectivamente. Como se puede observar, el enfoque multicomponente calcula los coeficientes de difusión generalizados de la ley de Fick $D_{i,j}$ de la especie transportada i en cada especie j presente en la mezcla de gases, lo cual requiere un mayor coste computacional. Por su parte, la aproximación de mezcla diluida, simplifica este cálculo considerando el coeficiente de difusión $D_{i,m}$ de la especie i en la mezcla m .

Para los cálculos en llamas laminares de difusión, el transporte difusivo juega un papel muy importante, por un lado, debido a la importancia de las fuerzas viscosas respecto a las convectivas (bajo número de Reynolds en el flujo) y por otro, debido a la importancia del proceso de difusión en la mezcla aire-fuel en este tipo de flujos reactivos [7, 8]. Por lo tanto, en el caso de las llamas laminares del capítulo 3 se optó por el enfoque multicomponente. Por su parte, los segundos términos de la derecha de las ecuaciones 2.7 y 2.8 expresan la difusión de las especies producida por los gradientes de temperatura. En este caso, los coeficientes $D_{T,i}$ se calcularon en base a una expresión empírica dependiente de la composición de la mezcla [9].

Retomando el último término R_i de la ecuación (2.4), este expresa la tasa de formación/destrucción de la especie i . Para su cálculo se emplean modelos específicos, ya que las reacciones entre las diferentes especies cuentan con diferentes escalas temporales, incrementando la rigidez del sistema de ecuaciones diferenciales que definen R_i debido a esta variabilidad de escala [8]. En el apartado 2.2.1 se describirán los modelos empleados para su cálculo.

Por último, los tres términos de la derecha de la ecuación (2.5) hacen referencia al transporte de energía por conducción (ley de Fourier), al transporte debido a la difusión de las especies en la mezcla y al término fuente por radiación y reacciones químicas ($S = S_{rad} + S_q$). En el apartado 3.4 del capítulo 3 se describirán en

detalle las características del modelo empleado para el cálculo del término fuente por radiación S_{rad} . En cuanto a S_q , se expresa en función de la entalpía de formación de las especies y su tasa de reacción R_i :

$$S_q = - \sum_{i=1}^N \Delta h_{f,i}^0 R_i \quad (2.9)$$

Se puede observar que en estas ecuaciones de transporte existe una estructura común, pudiendo definir una ecuación de conservación general para una variable genérica ϕ :

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}\phi) = \nabla(\Gamma^\phi\nabla\phi) + Q^\phi \quad (2.10)$$

Donde a la izquierda se identifican el término no-estacionario y el término convectivo y a la derecha, el término difusivo y el término fuente. Esta observación facilita la programación de las técnicas numéricas y ayuda a entender que los fenómenos de transporte siguen un mismo patrón a pesar de las diferentes variables transportadas (masa, momento, energía o especies).

2.2. Propiedades de la mezcla de gases

La mezcla reactiva que se considera en cada problema se caracteriza principalmente por cuatro propiedades: densidad, conductividad, viscosidad y calor específico. Todas ellas están presentes en las ecuaciones que se han ido describiendo, por lo que es necesario evaluarlas a lo largo de las simulaciones.

En los cálculos realizados, la mezcla de gases se aproximará como una mezcla de gas ideal incompresible, ya que los cálculos se llevarán a cabo a presiones atmosféricas considerando flujos de bajo número de Mach (condiciones de trabajo habituales en calderas domésticas e industriales). De esta forma, la densidad se expresa como:

$$\rho = \frac{p_{op}}{\frac{R}{M_w} T} \quad (2.11)$$

Donde R es la constante universal de gases, M_w el peso molecular del gas (calculado a partir del peso molecular de cada especie presente en la mezcla) y p_{op} la presión de operación (101.325 Pa).

La conductividad (k_{mix}), viscosidad (μ_{mix}) y calor específico ($c_{p,mix}$) de la mezcla, se calcularon a partir de las propiedades individuales de cada especie y su correspondiente fracción molar X [8]:

$$k_{mix} = \sum_i \frac{k_i}{1 + \sum_{j \neq i} X_j 1,065 \phi_{i,j}} \quad (2.12)$$

$$\mu_{mix} = \sum_i \frac{\mu_i}{1 + \sum_{j \neq i} \frac{X_j}{X_i} \phi_{i,j}} \quad (2.13)$$

$$c_{p,mix} = \sum_i Y_i c_{p,i} \quad (2.14)$$

Donde:

$$\phi_{i,j} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{M_{w,i}}{M_{w,j}} \right)^{-1/2} \left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j} \right)^{1/2} \left(\frac{M_{w,j}}{M_{w,i}} \right)^{1/4} \right]^2 \quad (2.15)$$

Los índices i y j representan las especies individuales de la mezcla y $M_{w,i}$ el peso molecular de cada especie. μ_i , k_i y $c_{p,i}$ hacen referencia a la viscosidad, conductividad y calor específico de cada especie. Para el cálculo de las primeras dos propiedades, se consideran expresiones que derivan de la teoría cinética de gases [7, 8, 10]:

$$\mu_i = 2.6693 \cdot 10^{-6} \frac{(M_{w,i} T)^{1/2}}{\sigma_i^2 \Omega_{i,i}^{(2,2)*}(T^*, \delta^*)} \quad (2.16)$$

$$k_i = \frac{15}{4} \frac{R}{M_w} \mu \left[\frac{4}{15} \frac{c_p M_w}{R} + \frac{1}{3} \right] \quad (2.17)$$

Donde $M_{w,i}$ es el peso molecular de la especie i y T es la temperatura. El término σ_i^2 es el diámetro molecular, que esta tabulado para cada especie [7]. El término $\Omega_{i,i}^{(2,2)*}(T^*, \delta^*)$ es la integral de colisión de Lennard-Jones, que depende de la temperatura reducida T^* y la naturaleza de cada especie ($\delta^*=0$ para especies no polares y $\delta^*=1$ para especies polares). La temperatura reducida se calcula como:

$$T^* = \frac{kT}{\epsilon} \quad (2.18)$$

Se puede ver que está directamente relacionado a la temperatura local T y también a la profundidad del pozo de potencial de Lennard-Jones (ϵ/k), cuyos valores también están tabulados para cada especie [7].

Por último, como se ha mencionado previamente, el calor específico de cada especie $c_{p,i}$ se calcula en función de la temperatura con expresiones polinómicas. Los coeficientes de dichas expresiones se toman de tablas termodinámicas disponibles en la literatura [4].

2.2.1. Flujos reactivos laminares

En este apartado se describirá el modelo de cálculo empleado para el término de reacción R_i de la ecuación (2.4) en el caso de las llamas laminares. Antes de definir este término, hay que tener en cuenta que en esta tesis doctoral se trabajará con mecanismos de reacción, los cuales están formados por reacciones elementales y ofrecen una descripción más detallada de los fenómenos que se dan en la llama.

Tabla 2.1: Reacciones elementales del mecanismo de O'Conaire et al. [11]

$H + O_2 \rightleftharpoons O + OH$	$HO_2 + H \rightleftharpoons H_2 + O_2$
$O + H_2 \rightleftharpoons H + OH$	$HO_2 + H \rightleftharpoons 2OH$
$O + H_2O \rightleftharpoons 2OH$	$HO_2 + O \rightleftharpoons OH + O_2$
$H_2 + M \rightleftharpoons 2H + M$	$H_2O_2 + O_2 \rightleftharpoons 2HO_2$
$HO_2 + OH \rightleftharpoons H_2O + O_2$	$H_2O_2 + M \rightleftharpoons 2OH + M$
$O_2 + M \rightleftharpoons 2O + M$	$H_2O_2 + H \rightleftharpoons H_2O + OH$
$OH + M \rightleftharpoons O + H + M$	$H_2O_2 + H \rightleftharpoons H_2 + HO_2$
$H_2O + M \rightleftharpoons H + OH + M$	$H_2O_2 + O \rightleftharpoons OH + HO_2$
$H + O_2 + M \rightleftharpoons HO_2 + M$	$H_2O_2 + OH \rightleftharpoons H_2O + HO_2$
$OH + H_2 \rightleftharpoons H + H_2O$	

Asimismo, también será importante contar con estas reacciones elementales y las especies intermedias como los radicales O o OH ya que influyen directamente en la formación de los NO_x térmicos. Las reacciones de combustión consideradas a lo largo de este trabajo son las de hidrógeno/aire, por lo que se seleccionó un mecanismo de reacción previamente validado y ampliamente utilizado en la literatura. Se trata del mecanismo de O'Conaire et al. que incluye 19 reacciones y 8 especies reactivas [11]. La tasa de reacción de la especie i en la reacción elemental r se calcula como:

$$R_{i,r} = \left(\nu''_{i,r} - \nu'_{i,r} \right) \left(k_{f,r} \prod_{j=1}^N [C_{j,r}]^{\eta'_{j,r}} - k_{b,r} \prod_{j=1}^N [C_{j,r}]^{\nu''_{j,r}} \right) \quad (2.19)$$

Donde $\nu''_{i,r}$ and $\nu'_{i,r}$ representan los coeficientes estequiométricos para los productos y los reactantes i en la reacción elemental r . El término $C_{j,r}$ representa las concentraciones molares de las especies j en la reacción elemental r . Los términos $k_{f,r}$ y $k_{b,r}$ son las constantes de las tasas de reacción directa e inversa respectivamente y $\eta'_{j,r}$ es el exponente de la tasa. La información para el cálculo de estas constantes esta expresada en un formato concreto para poder leerla durante el cálculo. Los valores cinéticos pueden consultarse en el mecanismo de O'Conaire et al. [11].

La tasa de reacción total (2.20) se calcula como la suma de las tasas de reacción elementales, donde $M_{w,i}$ representa el peso molecular de cada especie:

$$\dot{\omega}_i = M_{w,i} \sum_{r=1}^{N_R} R_{i,r} \quad (2.20)$$

El cálculo directo o explícito de la ecuación (2.20) puede llevar a dificultades numéricas, ya que puede existir una gran variabilidad de escalas temporales entre las reacciones elementales (algunas reacciones son mucho más rápidas que otras). Esta medida de la variabilidad de escalas se define mediante la rigidez del sistema de ecuaciones diferenciales a resolver. Así, cuanto mayor sea la variabilidad de escalas, mayor será la rigidez del sistema, implicando mayores dificultades para su resolución numérica [8]. En este caso, para evitar problemas de convergencia relacionados con la rigidez del sistema, el software empleado para los cálculos numéricos (que se describirá más adelante) aproxima la solución de la ecuación (2.20) considerando el efecto de los términos de reacción a lo largo de un pequeño tiempo característico de reacción τ , tal que:

$$R_i = \frac{\rho}{\tau} \int_0^{\tau} \dot{\omega}_i dt \quad (2.21)$$

De esta forma, cuanto menor sea este tiempo τ , la expresión se aproximará más al cálculo explícito, pudiendo causar a problemas de convergencia y estabilidad numérica durante el cálculo. En cambio si τ tiene al infinito, la aproximación en la ecuación (2.21) tiende a cero, anulando las reacciones. En la práctica, se ha visto que definiendo este factor como la décima parte de la escala temporal del flujo ($\tau = t_{mix}/10$) puede ser una aproximación válida [12, 13]. Para verificar la independencia de los resultados respecto a este parámetro en los cálculos realizados mediante esta expresión, durante los cálculos se realizaron diferentes pruebas considerando $\tau = t_{mix}/100$ y $\tau = t_{mix}/1.000$, verificando que las principales variables apenas cambiaban respecto a la aproximación inicial de $\tau = t_{mix}/10$.

2.3. Flujos reactivos turbulentos

2.3.1. Fluctuaciones en flujos turbulentos

En los flujos turbulentos las fuerzas inerciales predominan respecto a las fuerzas viscosas (mayor número de Reynolds), pudiendo definir una serie de características inherentes a los flujos turbulentos. Por un lado, los flujos turbulentos son irregulares y caóticos, dando lugar a fluctuaciones locales de la velocidad a lo largo del tiempo. La Figura 2.1 muestra la evolución de la medida de la velocidad en un punto del espacio a lo largo del tiempo, pudiendo descomponerse en una velocidad promedio estacionaria U y un valor fluctuante $u'(t)$.

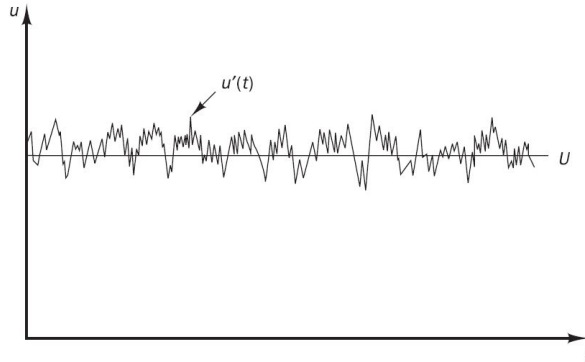


Figura 2.1: Descomposición de la velocidad con su promedio y la componente de las fluctuaciones a lo largo del tiempo

Debido a estas fluctuaciones de la velocidad, aparecen remolinos de diferentes tamaños, que se pueden definir por velocidades y longitudes características (v_k y l_k). Los remolinos de mayor tamaño se definen con longitudes características del orden de la escala de la geometría. En el otro extremo se encuentran los remolinos más pequeños (remolinos de Kolmogorov), que finalmente desaparecen o se disipan debido a las fuerzas viscosas. Así, los remolinos más pequeños reciben la energía cinética desde remolinos de mayor tamaño. Este proceso de transferencia de energía se denomina proceso de cascada, representado en la Figura 2.2. Por otro lado, los flujos turbulentos se caracterizan por ser tridimensionales y no-estacionarios.

Así, los flujos turbulentos pueden resolverse de forma numérica mediante las expresiones de Navier-Stokes previamente descritas. A este enfoque se le denomina como DNS (*Direct Navier Stokes* de sus siglas en Inglés), y se basa en resolver

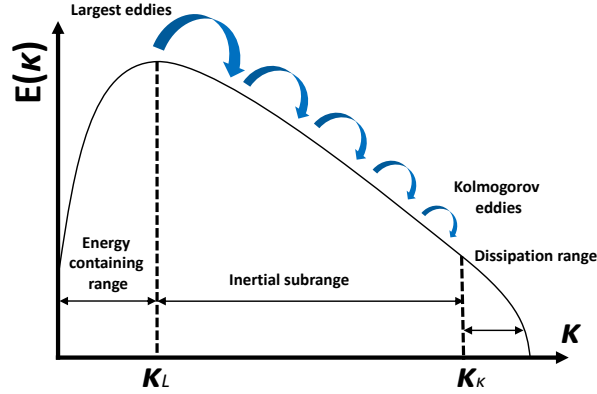


Figura 2.2: Proceso de cascada de la turbulencia: Los remolinos de mayor energía (mayor longitud de onda κ) ceden su energía cinética a los remolinos de menor longitud de onda ($\kappa \sim 1/d$, donde d es el diámetro del remolino)

todas las escalas espacio-temporales del flujo, resolviendo así todo el proceso de la cascada de la turbulencia. No obstante, resolver todas las escalas de forma numérica a través de las ecuaciones 2.1 y 2.2 requiere pasos espacio-temporales muy pequeños (resolución de malla muy fina y saltos de tiempo del orden del periodo de las fluctuaciones más pequeñas), dando lugar a costes computacionales muy altos incluso en problemas de flujos simples [3].

En el otro extremo se encuentra el enfoque RANS (Reynolds averaged Navier-Stokes), que simplifica el proceso de cascada asumiendo que toda la energía cinética k tomada del flujo medio se disipa en las escalas más pequeñas, pudiendo cuantificar esta disipación mediante una tasa de disipación ϵ , que representa el trabajo realizado por los remolinos más pequeños contra los esfuerzos viscosos y actúa como sumidero de la energía cinética turbulenta [12].

Se puede decir que para este enfoque el proceso de cascada es una caja negra donde su entrada es la energía cinética y la salida su disipación, centrándose así en las propiedades turbulentas del flujo medio en lugar de resolver todas las escalas a lo largo del proceso de cascada. Para plasmar esta descripción cualitativa en las ecuaciones, se realiza la descomposición de Reynolds, que se basa en descomponer la velocidad instantánea como la suma entre una velocidad promediada y una velocidad fluctuante:

$$u = \bar{u} + u'_i \quad (2.22)$$

En flujos de densidad variable como es el caso de los flujos reactivos, se introduce el promedio de Favre:

$$u = \frac{\overline{\rho u}}{\bar{\rho}} + u_i'' = \tilde{u} + u_i'' \quad (2.23)$$

Introduciendo esta definición de u en las ecuaciones exactas de Navier-Stokes 2.1 y 2.2, se obtienen las ecuaciones de Navier-Stokes promediadas, comúnmente denominadas como ecuaciones RANS, que para el caso estacionario se expresan como:

$$\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.24)$$

$$\frac{\partial \overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{v}_j}}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \overline{\rho u_i'' u_j''} \right) \quad (2.25)$$

Donde aparecen los nuevos esfuerzos debidos a la turbulencia (correlaciones de velocidades fluctuantes) $\overline{\rho u_i'' u_j''}$ también conocidos como esfuerzos de Reynolds.

2.3.2. Modelo RANS de viscosidad turbulenta: modelo $k - \omega$ SST

Las nuevas variables desconocidas requieren un modelo de cierre para su cálculo [3, 12]. Para ello, se emplea la aproximación de *Boussinesq*, que asume que los esfuerzos de Reynolds son directamente proporcionales a las tasas medias de deformación:

$$\overline{\rho u_i'' u_j''} = -\mu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{i,j} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) - \frac{2}{3} \bar{\rho} k \delta_{i,j} \quad (2.26)$$

Donde se define la viscosidad turbulenta μ_t . Por su parte $k = 1/2 \sum_{k=1}^3 \overline{u_k'' u_k''}$ representa la energía cinética turbulenta y $\delta_{i,j}$ es la delta de Kronecker. Finalmente, queda por definir la viscosidad turbulenta y también es necesario conocer el valor de la energía cinética turbulenta k . En el marco RANS existen diversos modelos para este cierre. Los cálculos turbulentos del capítulo 4 se llevaron a cabo considerando los modelos de cierre de dos ecuaciones. En concreto, se empleó el modelo $k - \omega$ SST de Menter, que se basa en la resolución de dos ecuaciones de transporte adicionales:

la ecuación de transporte de la energía cinética turbulenta k y la ecuación de la razón específica de disipación ω , definida como $\omega = \epsilon/k$, siendo ϵ la disipación de la energía cinética turbulenta. Este modelo incluye las ventajas del modelo estándar $k - \omega$ en la parte interna de la capa límite y las del modelo $k - \epsilon$ en la parte externa de la capa límite. Asimismo, en las regiones de baja turbulencia donde k y ϵ tienden a cero, la ecuación de ϵ puede presentar inestabilidades numéricas cuando k tiende a cero [14, 15]. Así, la ecuación de ω resuelve este tipo de inestabilidades, y que tiende a cero con k , permitiendo emplear este modelo en las cercanías de la pared, incluyendo la sub-capa viscosa. Las ecuaciones de k y ω se expresan como:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_j k)}{\partial x_j} = P^k - \beta^* \bar{\rho} \omega k + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] \quad (2.27)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_j \omega)}{\partial x_j} = & \alpha \frac{\omega}{k} P^k - \beta \bar{\rho} \omega^2 + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] \\ & + 2(1 - F_1) \frac{\bar{\rho} \sigma_{\omega 2}}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \end{aligned} \quad (2.28)$$

Donde [13, 15]:

$$\mu_t = \frac{\bar{\rho} k}{\omega} \frac{1}{\max \left[\frac{1}{\alpha^*}, \frac{S F_2}{a_1 \omega} \right]} \quad (2.29)$$

$$F_2 = \tanh(\phi_2^2) \quad (2.30)$$

$$\phi_2 = \max \left[2 \frac{\sqrt{k}}{0,09 \omega y}, \frac{500 \mu}{\bar{\rho} y^2 \omega} \right] \quad (2.31)$$

$$F_1 = \tanh(\xi^4) \quad (2.32)$$

$$\xi = \min \left[\max \left(2 \frac{\sqrt{k}}{0,09 \omega y}, \frac{500 \mu}{\bar{\rho} y^2 \omega} \right), \frac{4 \sigma_{\omega k - \epsilon} k}{C D_\omega y^2} \right] \quad (2.33)$$

$$C D_\omega = \max \left[2 \sigma_{\omega k - \epsilon} \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_i} \frac{\partial \omega}{\partial x_i}, 10^{-10} \right] \quad (2.34)$$

$$\alpha = F_1 \alpha_{k-\omega} + (1 - F_1) \alpha_{k-\epsilon} \quad (2.35)$$

Donde S hace referencia al promedio del modulo del tensor de deformación mientras que y es la distancia desde la celda hasta la pared más cercana. En las ecuaciones (2.27) y (2.28) se pueden identificar los términos de convección, producción, difusión y disipación. Por su parte, la función F_1 hace que las ecuaciones actúen como el modelo estándar $k - \omega$ cerca de la pared ($F_1=1$) y como el modelo $k - \epsilon$ lejos de estas ($F_1=0$). A diferencia del modelo estándar $k - \omega$, que no incluye ningún termino de difusión cruzada, el último término de la ecuación (2.28) se multiplica por $(1-F_1)$ para activar este término en la región $k - \epsilon$.

Así, estos modelos representan el proceso de la cascada de la energía cinética turbulenta, considerando que toda la energía cinética turbulenta k se disipa en las escalas de Kolmogorov a través de ϵ . Para una descripción más detallada de estos modelos se recomienda consultar el trabajo de S.B.Pope [16].

2.3.3. Interacción químico-turbulenta: Modelo FGM

Tras describir el enfoque que se utilizará para resolver los flujos en llamas turbulentas, queda por definir la interacción entre el flujo turbulento y el proceso de combustión. Junto con las fluctuaciones de velocidad u' , las fluctuaciones en otras variables como la temperatura y la composición de la mezcla inducen fluctuaciones en la densidad. Así, siguiendo el enfoque RANS, se hablará del promedio de dichas variables. De la misma forma, las tasas de reacción también se verán afectadas por dichas fluctuaciones, por lo que se necesitan modelos que sean capaces de representar las fluctuaciones turbulentas en las reacciones químicas que se dan en la llama. A pesar de que existen numerosos modelos para este fin [3, 8, 17], en esta tesis doctoral se trabajará con el modelo FGM (*Flamelet Generated Manifold* de sus siglas en inglés) que se describe en el siguiente apartado y cuya selección se justificará en el capítulo 4.

Dentro de la familia de los modelos *flamelet* con química pre-tabulada se encuentra el modelo *Flamelet Generated Manifold* o FGM. Para entender este modelo, es necesario definir las hipótesis en las que se basa:

- La escala temporal química es mucho menor que la escala temporal característica turbulenta.

- El combustible y el aire reaccionan en pequeñas estructuras unidimensionales integradas en el flujo turbulento, que se propagan en dirección perpendicular a la línea estequiométrica.
- Estas estructuras se aproximan como llamas laminares unidimensionales como se indica en la Figura 2.3.
- Debido a la mayor importancia de las fuerzas inerciales frente a las viscosas en las llamas turbulentas, se asume que el número de Lewis es uno, simplificando así las expresiones y el cálculo de las ecuaciones que se presentan a continuación.

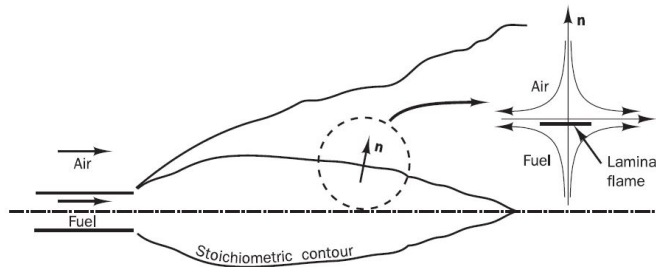


Figura 2.3: Representación esquemática del concepto de flamelet laminar [3]

Por lo tanto, la llama turbulenta se aproxima como un conjunto de llamas unidimensionales laminares, también denominadas *flamelets* laminares. Estas, se estrecharán y estirarán debido al efecto de la turbulencia. Por lo tanto, es necesario incluir los parámetros adecuados para modelar estos efectos [3, 17].

El funcionamiento general de estos modelos sigue este orden: (1) Como punto de partida se resuelve el conjunto de *flamelets* en una etapa previa al cálculo CFD, teniendo que elegir una configuración de llama unidimensional. (2) Tras resolver este conjunto de *flamelets*, las variables termoquímicas se tabulan en función de algunos parámetros denominados parámetros de control. (3) A lo largo del cálculo CFD se resuelven las ecuaciones de transporte de estas variables de control pudiendo acceder a la información tabulada.

Para el primer paso, habitualmente se eligen dos configuraciones: llamas de difusión 1-D (configuración de llama *counterflow*) o llamas de premezcla 1-D. Esta selección depende de la naturaleza final de la llama considerada. Como se ha descrito en la introducción, la tesis doctoral se centrará en el estudio de llamas de

2.3. Flujos reactivos turbulentos

difusión, por lo que en esta etapa previa se seleccionarán estas configuraciones. Como se observa en la vista detallada de la Figura 2.3, el combustible y el aire entran por separado, dando lugar a una evolución de las variables termoquímicas a lo largo de la coordenada y como se muestra en la Figura 2.4. Se puede observar también que la evolución de las variables se puede representar en función de un parámetro de control Z , también conocido como fracción de mezcla.

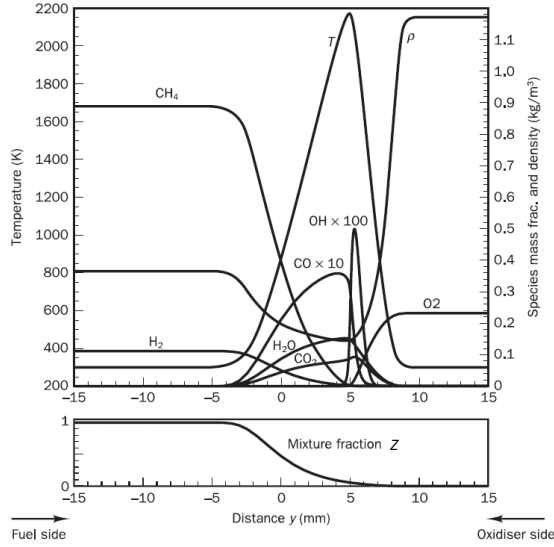


Figura 2.4: Evolución de las variables a lo largo de la llama laminar de difusión 1-D [3]

La fracción de mezcla es una variable escalar conservativa, que puede interpretarse como la relación combustible-aire ($\phi = \nu Y_{F,u}/Y_{O_2,u}$) normalizada [18]:

$$Z = \frac{\nu Y_F - Y_{O_2} + Y_{O_{2,2}}}{\nu Y_{F,1} + Y_{O_{2,2}}} \quad (2.36)$$

Donde ν es la relación másica oxígeno-combustible, $Y_{F,1}$ la fracción másica de combustible en la corriente de combustible y $Y_{O_{2,1}}$ la fracción másica de oxígeno en la corriente de aire. Así, en la entrada del fuel la fracción de mezcla tomará el valor de 1 y evolucionará hasta la entrada de aire, donde será 0.

De esta forma el cálculo se realiza directamente tomando la variable Z en lugar de la coordenada física y , dando lugar a las ecuaciones *flamelet* de las fracciones

másicas Y_i y la ecuación de conservación de la energía en el espacio Z :

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} - \rho \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} - \dot{\omega}_i = 0 \quad (2.37)$$

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} - \rho \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} + \frac{1}{c_p} \sum_i H_i \dot{\omega}_i - \frac{1}{2c_p} \rho \chi \left[\frac{\partial c_p}{\partial Z} + \sum_i c_{p,i} \frac{\partial Y_i}{\partial Z} \right] \frac{\partial T}{\partial Z} = 0 \quad (2.38)$$

Se puede observar que al igual que en el cálculo de llamas laminares, es necesario resolver la ecuación (2.37) para cada especie considerada en el mecanismo. En este caso, también se consideró el mecanismo de reacción de O'Conaire et al. [11] con 19 reacciones y 8 especies reactivas. Por lo tanto, en este caso también se obtendrá la información de las especies intermedias a lo largo de la llama 1-D. De forma similar, es necesario evaluar el término fuente $\dot{\omega}_i$ siguiendo una metodología similar a la expuesta en el apartado 2.2.1. Por su parte χ representa la disipación escalar. Esta variable tiene en cuenta los gradientes de la fracción de mezcla, que están directamente relacionados con la deformación de la llama. Por lo tanto, χ incorpora implícitamente efectos de convección-difusión en la dirección normal a la superficie estequiométrica, siendo el parámetro que marca lo lejos o lo cerca que estará la llama 1-D del equilibrio químico. Así el perfil teórico de Peters [18] se define como:

$$\chi(Z) = \frac{a}{\pi} \exp\left(-2 \left[\operatorname{erfc}^{-1}(2Z) \right]^2\right) \quad (2.39)$$

Que deriva del perfil de Z en el espacio físico y la relación de χ con los gradientes de Z :

$$Z(x) = \frac{1}{2} \left[1 - \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{\sqrt{2D/a}} \right) \right] \quad (2.40)$$

$$\chi = 2D \frac{\partial Z}{\partial x_j} \frac{\partial Z}{\partial x_j} \quad (2.41)$$

Sustituyendo Z por su valor en el punto estequiométrico Z_{st} , se obtiene el valor de la disipación escalar estequiométrica χ_{st} . Así, para considerar un conjunto de llamas 1-D bajo diferentes tasas de deformación, las ecuaciones (2.37) y (2.38)

se resuelven fijando pequeños valores de χ_{st} e incrementándolos hasta llegar a la extinción (para valores altos de χ o de a , los gradientes de Z son muy altos y los términos convectivo-difusivos predominan sobre la tasa de reacción $\dot{\omega}_i$, causando así la extinción).

El modelo FGM incluye el conjunto de soluciones estacionarias hasta la extinción junto con una solución no estacionaria en la extinción. En la Figura 2.5 se puede observar la evolución de la temperatura máxima en cada solución a una tasa de deformación a dada. Como se indica, el modelo FGM tiene en cuenta la solución en la extinción. De esta forma, se consideran las soluciones desde la *flamelet* de extinción hasta la mezcla pura de gases, lo cual resulta en una continuación natural de los perfiles en el espacio de composición [17, 19]. De esta forma se tiene un conjunto de soluciones (fracciones másicas Y_i , temperaturas T , propiedades de la mezcla etc.) parametrizados en función de la fracción de mezcla Z .

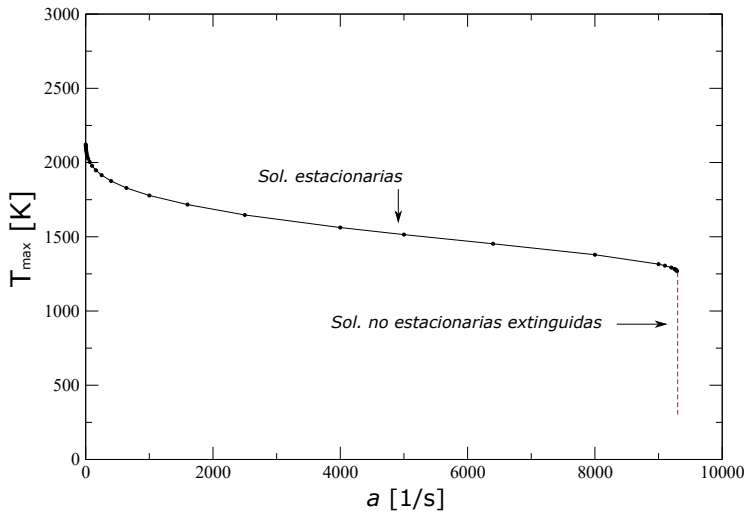


Figura 2.5: Curva S de las soluciones estacionarias y las soluciones no estacionarias extinguidas consideradas en el modelo FGM

No obstante, es necesario definir una nueva variable de control para poder realizar de forma unívoca la búsqueda de los valores en las tablas. Además, si bien la fracción de mezcla es una variable que se conserva sin términos de reacción (ofrece información relativa al estado de la mezcla), es necesario que la nueva variable de control ofrezca información acerca de la reacción en el cálculo CFD. Así, se define la variable de progreso \mathcal{Y} , que se expresa como una combinación lineal de fracciones

másicas de especies. Esta combinación lineal varía dependiendo del caso considerado y es dependiente del problema. Su definición tiene que asegurar una evolución monótona a una fracción de mezcla dada. En esta tesis doctoral, donde se considera el hidrógeno como combustible, se utilizó la definición de $\mathcal{Y} = Y_{H_2O}$, asegurando el cumplimiento de este último criterio. De esta forma las soluciones estacionarias y las soluciones no-estacionarias en la extinción pueden expresarse de forma unívoca. Dicha relación se muestra en la Figura 2.6.

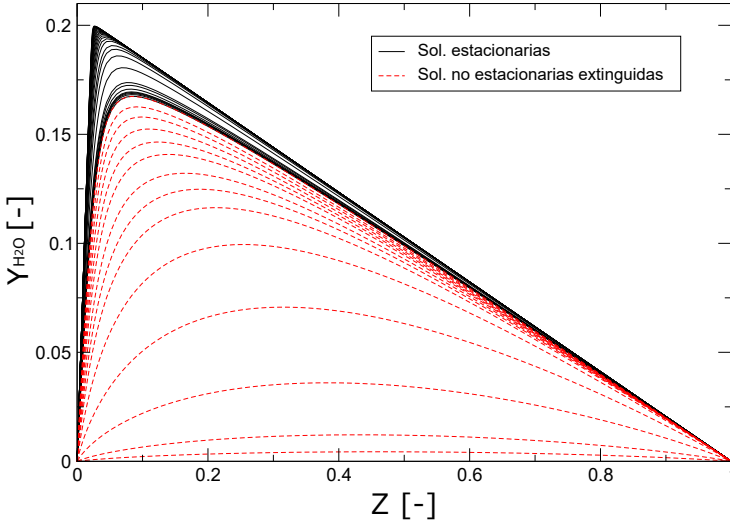


Figura 2.6: Relación entre la fracción de mezcla Z y la variable de progreso $\mathcal{Y} = Y_{H_2O}$ indicando el conjunto de soluciones estacionarias y soluciones no estacionarias extinguidas

Por razones prácticas, la variable de progreso normalizada se define a través de la ecuación (2.42), donde máx. y mín. representan los valores máximo y mínimo de la variable de progreso seleccionada a una Z dada.

$$c = \frac{\mathcal{Y} - \mathcal{Y}_{\min}(Z)}{\mathcal{Y}_{\max}(Z) - \mathcal{Y}_{\min}(Z)} \quad (2.42)$$

$$\tilde{\phi} = \int_0^1 \int_0^1 \phi(Z, c) \tilde{P}(Z) \tilde{P}(c) dZ dc \quad (2.43)$$

Donde se asume que las funciones de densidad de probabilidad $\tilde{P}(Z)$ y $\tilde{P}(c)$ siguen una distribución tipo β , ampliamente utilizada en este tipo de modelos [3, 17,

18]. El cálculo de $\tilde{P}(Z)$ y $\tilde{P}(c)$ requiere además conocer las varianzas de la fracción de mezcla \tilde{Z}''^2 y de la variable de progreso no-normalizada \tilde{Y}''^2 respectivamente, por lo que será necesario resolverlas a lo largo del cálculo. En resumen, al emplear el modelo FGM, será necesario resolver en total cuatro ecuaciones adicionales:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{Z}) + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{v}\tilde{Z}) = \nabla \cdot \left(\left(\bar{\rho}D_Z + \frac{\mu_t}{\sigma_t} \right) \nabla \tilde{Z} \right) \quad (2.44)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{Z}''^2) + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{v}\tilde{Z}''^2) = \nabla \cdot \left(\left(\bar{\rho}D_Z + \frac{\mu_t}{\sigma_t} \nabla \tilde{Z}''^2 \right) \right) \\ + C_\varphi \frac{\mu_t}{Sc_t} \cdot (\nabla \tilde{Z})^2 - C_\varphi \bar{\rho} \frac{\epsilon}{k} \tilde{Z}''^2 \end{aligned} \quad (2.45)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{Y}) + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{v}\tilde{Y}) = \nabla \cdot \left(\left(\bar{\rho}D_Y + \frac{\mu_t}{Sc_t} \nabla \tilde{Y} \right) \right) + \tilde{S}_Y \quad (2.46)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{Y}''^2) + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{v}\tilde{Y}''^2) = \nabla \cdot \left(\left(\bar{\rho}D_Y + \frac{\mu_t}{Sc_t} \nabla \tilde{Y}''^2 \right) \right) \\ + C_\varphi \frac{\mu_t}{Sc_t} |\nabla \tilde{Y}|^2 - C_\varphi \bar{\rho} \frac{\epsilon}{k} \tilde{Y}''^2 \end{aligned} \quad (2.47)$$

Donde $C_\varphi=2$ es una constante de modelización. $\sigma_t=0,85$ representa el número de Prandtl turbulento y $Sc_t=0.7$ el número turbulento de Schmidt [13]. En flujos turbulentos reactivos es habitual asumir que el número de Lewis es $Le = 1$. Por lo tanto los términos difusivos de las ecuaciones dan lugar a:

$$\bar{\rho}D_Z = \bar{\rho}D_Y = \frac{k_{mix}}{c_{p,mix}} \quad (2.48)$$

Donde k_{mix} y $c_{p,mix}$ representan la conductividad y el calor específico de la mezcla respectivamente.

El término fuente de la variable de progreso \tilde{S}_Y , se calcula a partir de la fuente tabulada (en este caso el término fuente del vapor de agua) y la función de densidad de probabilidad:

$$\tilde{S}_Y = \bar{\rho} \int_0^1 \int_0^1 S_Y \tilde{P}(Z) \tilde{P}(c) dZ dc \quad (2.49)$$

En definitiva, la química de la llama queda reducida a un problema de transporte de escalares, reduciendo así el tiempo computacional respecto a los cálculos en

llamas laminares, donde es necesario resolver la ecuación de transporte (2.4) para cada especie.

Como se ha podido ver, el efecto de la turbulencia se incluye en la formulación del modelo por medio de la densidad de probabilidad de las variables de control Z y \mathcal{Y} .

2.4. Post-procesado de emisiones de NO_x

Como se ha descrito en el apartado 1.3.3, la formación de NO_x térmicos se describe mediante el mecanismo de Zeldovich:



La Tabla 2.2 muestra las constantes de Arrhenius de las reacciones directas e inversas, donde se puede ver que la reacción (2.50) cuenta con la mayor energía de activación. Esto se debe al triple enlace de las moléculas de N_2 , requiriendo altas temperaturas para activar esta reacción. Así, debido a su menor tasa de reacción, la reacción (2.50) es el paso que limita la velocidad de formación de los NO_x térmicos, siendo suficientemente rápida por encima de los 1.800 K [3, 20].

Tabla 2.2: Constantes de las reacciones del mecanismo de Zeldovich [21]

Reacción	k_d [$\text{m}^3/\text{mol s}$]	k_i [$\text{m}^3/\text{mol s}$]
1	$1.8 \times 10^8 e^{-38370/T}$	$3.8 \times 10^7 e^{-425/T}$
2	$1.8 \times 10^4 T e^{-4680/T}$	$3.8 \times 10^3 T e^{-20820/T}$
3	$7.1 \times 10^7 e^{-450/T}$	$1.7 \times 10^8 e^{-24560/T}$

En consecuencia, la escala temporal de reacción de los llamados NO_x térmicos es mucho mayor en comparación con las escalas temporales de las reacciones de combustión del mecanismo principal [20]. Por lo tanto, es habitual desacoplar el cálculo de (2.53) del mecanismo principal, incluyéndolo en una etapa de post-procesado. Para ello, se emplean las concentraciones molares resueltas a lo largo del cálculo principal.

Por lo tanto, considerando las tres reacciones, se tiene que la tasa de reacción del NO esta dada por:

$$\dot{\omega}_{NO} = \frac{d[NO]}{dt} = k_{d,1}[O][N_2] + k_{d,2}[N][O_2] + k_{d,3}[N][OH] - k_{i,1}[NO][N] - k_{i,2}[NO][N] - k_{i,3}[NO][H] \quad (2.53)$$

Como el objetivo final es conocer las concentraciones del óxido de nitrógeno, es necesario conocer su distribución a lo largo del dominio. Para ello se resuelve la ecuación de transporte de su fracción másica Y_{NO} :

$$\nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v} \widetilde{Y_{NO}}) = \nabla \cdot (\bar{\rho} D \nabla \widetilde{Y_{NO}}) + \bar{\rho} \tilde{\omega}_{NO} \quad (2.54)$$

Donde el término fuente $\dot{\omega}_{NO}$ se calcula a través de la ecuación (2.53). Si bien las ecuaciones (2.53) y (2.54) son válidas para el caso de flujos reactivos laminares, en el caso turbulento se resuelve la ecuación (2.54) promediada, calculando el término de reacción mediante:

$$\tilde{\omega}_{NO} = \int \dot{\omega}_{NO} \tilde{P}(T) dT \quad (2.55)$$

Donde $\tilde{P}(T)$ es la función de densidad de probabilidad de la temperatura, que se calcula a partir de su varianza. Esta varianza se calcula de forma algebraica [13].

2.5. Resolución numérica de las ecuaciones

En el trabajo desarrollado, las ecuaciones diferenciales que se han presentado se resolvieron mediante el software ANSYS Fluent [2], el cual se basa en el método numérico de volúmenes finitos. Este método se discretiza el dominio físico en una serie de volúmenes de control finitos como el que se muestra en la Figura 2.7. Así, las ecuaciones diferenciales presentadas se aproximan de forma algebraica asumiendo ciertas simplificaciones matemáticas, dando lugar a errores numéricos. Cabe mencionar que todos los cálculos se realizaron en estado estacionario, por lo que los términos no estacionarios de las ecuaciones presentadas no se tuvieron en cuenta.

En cuanto a los términos de las ecuaciones de conservación presentadas, existen diversos esquemas de discretización para los términos convectivos y difusivos.

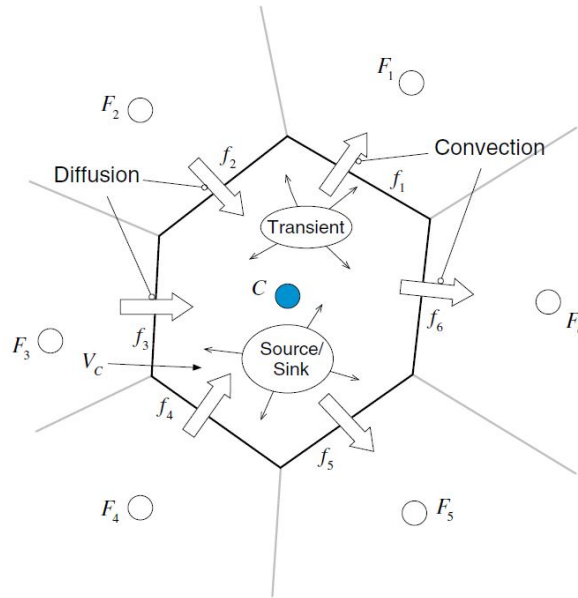


Figura 2.7: Conservación de una variable genérica ϕ en un volumen de control [22]

Esto requiere seleccionar los esquemas numéricos adecuados; por un lado, para el cálculo de los gradientes en ambos términos y por otro, para los esquemas de discretización de los términos convectivos. Estos últimos presentan la dificultad de estar condicionados por la direccionalidad del flujo, por lo que existen esquemas capaces de predecir esta direccionalidad a la hora de definir los perfiles de la evolución de las variables de interés entre las celdas. Por otro lado, se deben de utilizar esquemas que minimicen la aparición de la difusión numérica debida a los errores de truncamiento de esquemas de bajo orden. En la Tabla 2.3 se resumen los esquemas numéricos empleados que tratan de minimizar este tipo de errores y asegurar soluciones estables con una buena convergencia.

Por otro lado, la calidad y la resolución del dominio discretizado o de la "malla", influirá directamente en los errores numéricos y en la calidad de los resultados. Por este motivo, cada capítulo presenta los estudios de independencia de malla correspondientes.

Finalmente, las ecuaciones de Navier-Stokes muestran que la velocidad está presente en las ecuaciones de momento y continuidad, mientras que la presión aparece solamente en las ecuaciones de momento, produciendo un acople en las ecuaciones

Tabla 2.3: Esquemas de discretización de los gradientes, términos convectivos, presión y acople presión-velocidad [13]

Término	Esquema
Gradientes	Mínimos cuadrados basados en celdas
Convectivo momento	Segundo orden <i>upwind</i>
Convectivo especies	Segundo orden <i>upwind</i>
Convectivo energía	Segundo orden <i>upwind</i>
Convectivo k	Segundo orden <i>upwind</i>
Convectivo ω	Segundo orden <i>upwind</i>
Presión	Segundo orden
Acople presión-velocidad	SIMPLE - Coupled

que dificulta su resolución numérica. Asimismo, también aparecen términos no lineales (ρu^2). Estos dos problemas asociados a las ecuaciones de Navier-Stokes, se pueden resolver mediante algoritmos específicos que se basan en procedimientos de estimación y corrección para el cálculo de las presiones. En esta tesis doctoral se consideran los métodos *SIMPLE* (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations) y *Coupled* [3, 13]. Cabe mencionar que el esquema de interpolación de la presión indicada en la Tabla 2.3 se emplea durante este procedimiento de cálculo para aproximar los gradientes de presión de la ecuación (2.2).

2.6. Bibliografía

- [1] J. Anderson, Computational Fluid Dynamics, Computational Fluid Dynamics: The Basics with Applications, McGraw-Hill Education, 1995.
- [2] Y. Çengel, J. Cimbala, Fluid Mechanics: Fundamentals and Applications, McGraw-Hill Education, 2018.
- [3] H. Versteeg, W. Malalasekera, An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method, Pearson Education Limited, 2007.
- [4] GRI-Mech thermodynamic data, accessed: 2021-07-21.
URL http://combustion.berkeley.edu/gri-mech/data/nasa_plnm.html
- [5] R. Taylor, R. Krishna, Multicomponent Mass Transfer, Wiley Series in Chemical Engineering, Wiley, 1993.
- [6] A. Majda, K. G. Lamb, Simplified equations for low mach number combustion with strong heat release, in: P. C. Fife, A. Liñán, F. Williams (Eds.), Dynamical Issues in Combustion Theory, Springer New York, New York, NY, 1991, pp. 167–211.
- [7] C. Law, Combustion Physics.
- [8] J. Warnatz, U. Maas, R. W. Dibble, R. W. Dibble, Combustion: Physical and Chemical Fundamentals, Modelling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation., Springer, 2001.
- [9] K. Kuo, Principles of Combustion, Wiley, 2005.
- [10] J. Hirschfelder, R. B. Bird, C. F. Curtiss, Molecular theory of gases and liquids; rev. version, Structure of matter series, Wiley, New York, NY, 1964.
- [11] M. Ó Conaire, H. J. Curran, J. M. Simmie, W. J. Pitz, C. K. Westbrook, A comprehensive modeling study of hydrogen oxidation, International Journal of Chemical Kinetics 36 (11) (2004) 603–622. doi:10.1002/kin.20036.
- [12] S. Pope, Computationally efficient implementation of combustion chemistry using in situ adaptive tabulation, Combustion Theory and Modelling 1 (1) (1997) 41–63. doi:10.1080/713665229.
- [13] ANSYS Fluent Inc. 2020 R1, documentation user’s guide. (2020).
- [14] L. Davidson, Publication 97/2 An Introduction to Turbulence Models, Tech. rep., Chalmers University of Technology (2018).
- [15] L. Davidson, Fluid mechanics, turbulent flow and turbulence modeling, CFD course (2012) 1–270.
URL <papers3://publication/uuid/AFAD50F2-DB75-4B82-A5EE-3FBFB17C0285>

- [16] S. Pope, P. Eccles, S. Pope, C. U. Press, Turbulent Flows, Cambridge University Press, 2000.
- [17] T. Poinsot, D. Veynante, Theoretical and Numerical Combustion, Edwards, 2005.
- [18] N. Peters, Turbulent Combustion, Cambridge Monographs on Mechanics, Cambridge University Press, 2000. doi:10.1017/CB09780511612701.
- [19] L. Verhoeven, W. Ramaekers, J. van Oijen, L. de Goey, Modeling non-premixed laminar co-flow flames using flamelet-generated manifolds, Combustion and Flame 159 (1) (2012) 230–241. doi:https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2011.07.011.
- [20] S. McAllister, J. Y. Chen, A. C. Fernandez-Pello, Fundamentals of Combustion Processes, Mechanical Engineering Series, Springer New York, 2011.
- [21] R. K. Hanson, S. Salimian, Survey of Rate Constants in the N/H/O System, Springer New York, New York, NY, 1984, pp. 361–421. doi:10.1007/978-1-4684-0186-8_6.
- [22] F. Moukalled, L. Mangani, M. Darwish, The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics: An Advanced Introduction with OpenFOAM and Matlab, 1st Edition, Springer, 2015.

Capítulo 3

Caracterización de la formación de NO_x térmicos en llamas de difusión de hidrógeno

Resumen: *Mediante el siguiente estudio numérico y experimental se quiere caracterizar la formación de NO_x térmicos en llamas de difusión tipo jet con aire coaxial con el objetivo de establecer estrategias de reducción de NO_x en el diseño de quemadores de hidrógeno de difusión. Tomando un concepto de quemador multi-llama previamente patentado, se define un caso de estudio en una configuración de llama unitaria en la que se realizan cálculos numéricos y medidas experimentales a diferentes potencias térmicas (desde 0,2 hasta 1 kW) y a tres excesos de aire ($\lambda = 1,1, 1,2$ y $1,3$). Los resultados obtenidos indican que las concentraciones de NO_x incrementaron junto con la potencia térmica entre 0,2 y 0,6 kW, mostrando una buena correspondencia entre los cálculos numéricos y las medidas experimentales. La tendencia fue contraria para valores superiores a 0,6 kW, donde no se pudieron obtener resultados numéricos debido a la transición de llamas laminares a turbulentas. Por otro lado, frente a las tendencias observadas en llamas turbulentas de difusión, el incremento del exceso de aire aumentó las concentraciones de NO_x en las llamas con menor número de Reynolds. Se destacan tres factores*

relacionados con la formación de NO_x : el volumen de la región donde se producen los NO_x , y dentro de esta región, la competición entre el tiempo de residencia y la tasa de reacción de los NO_x .

3.1. Introducción

En este capítulo se quiere caracterizar la formación de NO_x térmicos en llamas de difusión de hidrógeno con objeto de establecer posibles criterios de diseño para el desarrollo de quemadores de hidrógeno de bajo NO_x . Para ello, se definió un caso de estudio que permitió analizar las tendencias de los NO_x térmicos frente a la variación de dos parámetros directamente relacionados con las condiciones de operación de quemadores reales: la potencia térmica de la llama y el exceso de aire empleado. Como se verá, la variación de estos dos parámetros influyó en el cambio del régimen de la llama, afectando de forma considerable en la formación de NO_x térmicos. Como se ha comentado previamente en el apartado 1.3, el trabajo de Chen y Driscoll [1], permitió conocer los tres principales parámetros físicos que describen la producción de NO_x térmicos en llamas de difusión:

1. Siguiendo el enfoque Euleriano de Peters y Donnerhack [2], Chen y Driscoll relacionaron la producción de NO_x en este tipo de llamas a un volumen de reacción $\mathcal{V}_{\text{reac}}$ (proporcional a $L_f^2 \cdot \delta$, donde L_f es la longitud de llama y δ su espesor).
2. Desde un punto de vista Lagrangiano, subrayaron la relevancia del tiempo de residencia τ_{res} en el volumen $\mathcal{V}_{\text{reac}}$.
3. De forma indirecta, también consideraron el tiempo químico para la producción de NO_x (la inversa de la tasa de reacción $\dot{\omega}_{\text{NO}_x}$).

Los puntos de vista Euleriano y Lagrangiano se diferencian en la forma de obtener la masa total de NO por unidad de tiempo producidas en una llama. El punto de vista Lagrangiano se basa en identificar un volumen de fluido e integrar $M_{\text{NO}} d(\text{NO})/dt$ (producción local de masa de NO por unidad de tiempo y volumen) sobre el tiempo de residencia durante el cual el elemento esta expuesto a altas temperaturas, dando lugar a la masa de NO por unidad de volumen del elemento. Este valor se multiplica por el volumen local de gas que reacciona por unidad de tiempo y se integra sobre todos los elementos del dominio para obtener la masa total de NO producida por unidad de tiempo [1].

En cambio, el enfoque Euleriano empleado por Peters y Donnerhack [2], integra $M_{\text{NO}} d(Y_{\text{NO}})/dt$ directamente sobre un volumen de reacción total para obtener la masa total de NO producida por unidad de tiempo [1]. Así, en el enfoque Euleriano no es necesario conocer el tiempo de residencia o las velocidades locales, pudiendo

estimar las tendencias de formación de NO_x conociendo el volumen total de reacción mediante técnicas de visualización de llama [1].

Estas observaciones se emplearon para explicar la relación entre las condiciones de operación (potencia térmica de la llama, exceso de aire y régimen de la llama) y las tendencias de las concentraciones de NO_x térmicos.

3.2. Objetivos y metodología

Como se ha mencionado, el objetivo de este capítulo es el de caracterizar la formación de NO_x térmicos para poder establecer criterios de diseño de futuros quemadores de difusión de hidrógeno de bajo NO_x .

La metodología se basó en definir un caso de estudio partiendo de un concepto de quemador de hidrógeno. Así, el análisis se acotó como se describe en el siguiente apartado, permitiendo llevar a cabo simulaciones numéricas para las distintas condiciones de operación. Asimismo, los resultados numéricos se validaron de forma experimental mediante medidas de temperatura en llama y emisiones de NO_x .

3.2.1. Configuración de llama unitaria

Como se muestra en la Figura 3.1, el caso de estudio se definió como una llama unitaria aislada de un hipotético quemador multillama. El diseño conceptual de dicho quemador se basa en la patente desarrollada por Ikerlan [3].

En la Figura 3.1 se puede ver que el hidrógeno entra por un tubo central mientras que el aire se introduce de forma coaxial. Si bien la introducción de aire coaxial y el incremento del exceso de aire han sido ampliamente estudiados y caracterizados como métodos de reducción de NO_x térmicos en llamas de difusión turbulentas, la aplicación de estos métodos en llamas laminares de difusión apenas cuenta con estudios en la literatura. Así, en este estudio se consideró el efecto del exceso de aire para $\lambda = 1,1, 1,2$ y $1,3$, donde λ representa el factor de exceso de aire global respecto al aire estequiométrico necesario para la combustión. Se decidió trabajar en este rango de λ ya que representa valores habituales en calderas convencionales de gas natural [4, 5].

Asimismo, se consideró la configuración de quemadores multillama, ya que reducen las inestabilidades facilitando el control del quemador [6]. En este sentido, el potencial de este tipo de quemadores ha sido demostrado en estudios previos

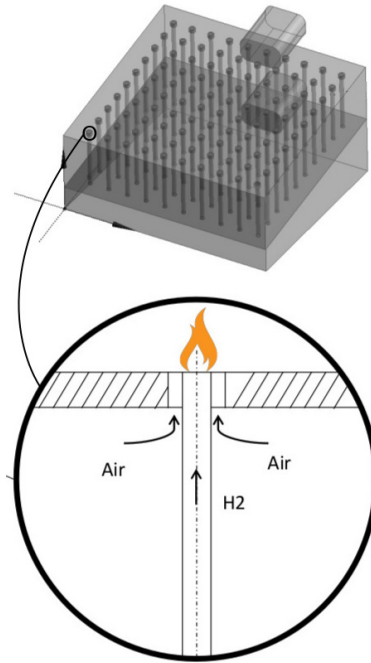


Figura 3.1: Llama unitaria aislada de un concepto de quemador de difusión multi-llama

para aplicaciones de alta potencia así como sistemas de combustión de menor escala [7–10]. Este tipo de diseños se basa en dividir la potencia térmica total del quemador en varias llamas unitarias de menor potencia, que en este caso serán llamas de difusión de hidrógeno. Por lo tanto, en este capítulo se analiza el efecto de la potencia térmica de la llama unitaria variando la potencia térmica entre 0,2 y 1 kW con el objetivo de estudiar el impacto en la formación de NO_x térmicos al emplear hidrógeno como combustible.

En cuanto a la selección del rango de potencias térmicas, cabe destacar que considerando una potencia nominal de 20 kW en el conjunto del quemador, si el punto de trabajo óptimo (menor formación de NO_x) en la llama unitaria fuese el de 1 kW, el quemador estaría formado por 20 llamas. Sin embargo, si el punto de trabajo óptimo fuese el de 0,2 kW, el quemador estaría formado por 100 llamas unitarias para entregar los 20 kW en su punto nominal. Es por ello por lo que se decidió estudiar el efecto de la potencia térmica entre 0,2 y 1 kW. También cabe mencionar que la potencia nominal de 20 kW representa una potencia habitual en

3.2. Objetivos y metodología

calderas domésticas para calefacción y agua caliente sanitaria (ACS) [4]. Asimismo, teniendo en cuenta los diámetros de entrada del quemador que se presentan a continuación, el rango de potencias (y por ende caudales y velocidades del hidrógeno y del aire) seleccionado fijó el rango del número de Reynolds entre 550-3500, lo cual permitió estudiar la influencia del régimen de la llama (laminar y transición laminar-turbulenta).

El estudio de la llama unitaria se realizó en el quemador cilíndrico que se muestra en la Figura 3.2, donde también se indican las dimensiones más significativas. La superficie amarilla hace referencia al material aislante que se introdujo en la cámara, la cual tiene una longitud total de 300 mm. También se consideró una configuración de llama no-confinada (sin cámara) con el objetivo de obtener las temperaturas axiales de cara a una validación inicial de los modelos numéricos.

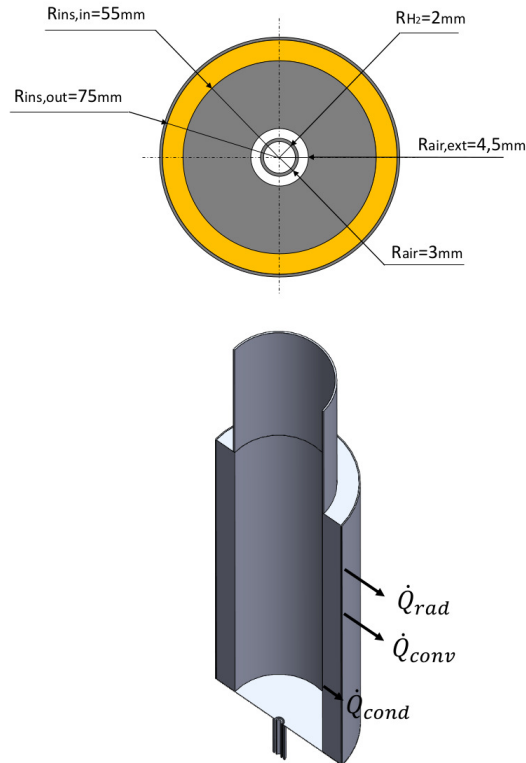


Figura 3.2: Geometría del quemador con las dimensiones más relevantes y los mecanismos de transferencia de calor considerados

3.2.2. Dominio numérico y condiciones de contorno

Con el objetivo de reducir el coste computacional, los cálculos numéricos se llevaron a cabo considerando geometrías 2D axisimétricas. Como se ha mencionado previamente en los apartados 1.3 y 1.4, los cálculos numéricos se utilizaron para entender las tendencias de los NO_x térmicos bajo diferentes condiciones de trabajo. Para ello, como se describirá más adelante, se extrajo el volumen de reacción de los NO_x térmicos $\mathcal{V}_{\text{reac}}$ para estudiar la competición entre el tiempo de residencia τ_{res} y el tiempo de reacción química $1/\dot{\omega}_{\text{NO}_x}$ dentro de $\mathcal{V}_{\text{reac}}$.

Para la discretización del dominio numérico, inicialmente se realizó un estudio de independencia de malla considerando tres estructuras diferentes. La Tabla 3.1 resume las características de cada una de ellas, donde se muestra el número de elementos en las entradas del fuel y el aire y en la pared que los separa. El número de elementos se multiplicó por un factor de 1,5 para incrementar el número de elementos de forma uniforme en cada malla. Asimismo, también se aplicó un factor para alargar la longitud de los elementos en la dirección radial (desde la pared externa del tubo de aire coaxial hasta la pared del aislante) y axial. Los resultados obtenidos indicaron que la malla número 2 que se muestra en la Figura 3.3 ofrecía una reducción en el coste computacional respecto a la malla número 3 sin cambios significativos en las variables de interés, por lo que fue seleccionada para los cálculos.

Tabla 3.1: Número de celdas en las tres mallas consideradas: Dirección radial en el tubo de H_2 (N_{H_2}), pared entre los tubos (N_{rim}), tubo de aire coaxial (N_{air}), y el número total de elementos. Valores de temperatura máxima y concentraciones de NO_x considerando $0,4 \text{ kW}$, $\lambda = 1, 2$

	N_{H_2}	N_{rim}	N_{air}	Elementos	T_{max} [K]	NO_x [ppm]
Malla 1	8	4	6	50.752	2.365	84
Malla 2	12	6	9	114.192	2.368	88
Malla 3	20	10	15	317.200	2.368	88

En cuanto a las condiciones de contorno, se impuso la condición de no deslizamiento en todas las paredes del dominio y las derivadas parciales de las fracciones másicas de las especies fueron definidas como nulas en la dirección normal a la pared. Como se muestra en la Figura 3.3, el dominio numérico cuenta con la zona

3.2. Objetivos y metodología

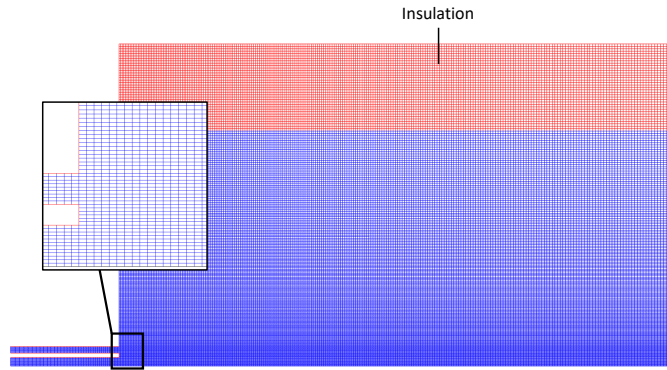


Figura 3.3: Vista de la malla número 2 empleada en los cálculos CFD junto con una vista detallada de las entradas de fuel y aire

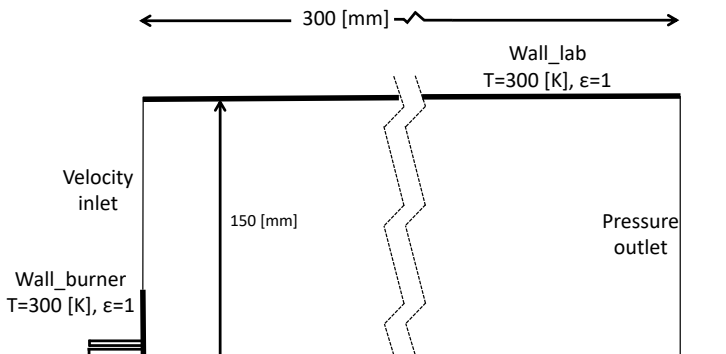


Figura 3.4: Geometría axisimétrica 2D para la configuración de llama no-confinada

de la cámara (en azul) y la zona del aislante sólido (rojo). De esta forma se pudieron simular las pérdidas de calor desde la llama hacia el aislante sólido y hacia el ambiente.

Las simulaciones numéricas se realizaron mediante el software ANSYS Fluent 2019 R3 [11], considerando las ecuaciones de conservación de masa, momento, energía y especies, previamente descritos en el capítulo 2. La discretización de los términos convectivos, los gradientes y el acople presión-velocidad de las ecuaciones de Navier-Stokes se realizó siguiendo los métodos descritos en el apartado 2.5.

Para poder validar la evolución de temperaturas axiales, se consideró de forma adicional una configuración de llama no confinada. Las condiciones de contorno

de esta configuración se muestran en la Figura 3.4, donde las paredes inferiores del quemador y las paredes del laboratorio se definieron como cuerpos negros con $T_{inf} = 300 \text{ [K]}$ y $\epsilon = 1$.

3.3. Medidas experimentales

La validación de los cálculos CFD se realizó mediante medidas experimentales macroscópicas en un prototipo del caso de estudio que se ha presentado. Las medidas macroscópicas hacen referencia a mediciones de temperatura mediante termopares y cámara termográfica junto con las medidas de las emisiones de NO_x térmicos. En este apartado se resumen los detalles del montaje experimental y de la instrumentación empleada.

3.3.1. Medidas de concentraciones de NO_x

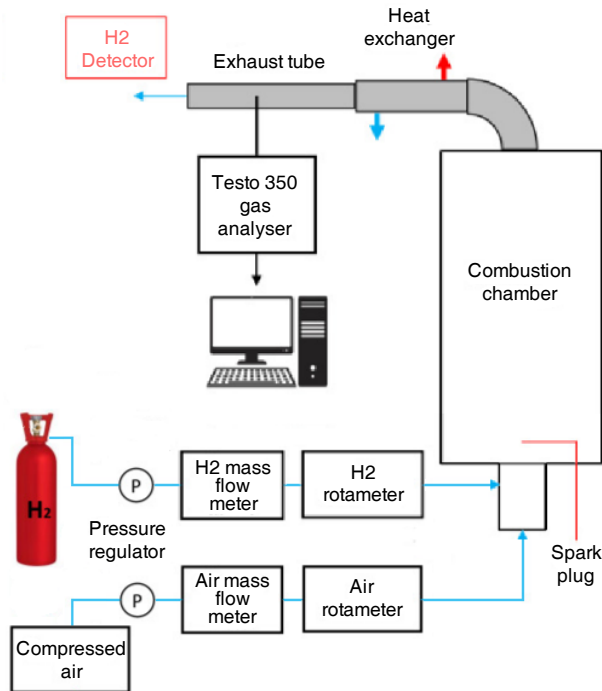


Figura 3.5: Esquema del montaje experimental

La Figura 3.5 muestra el esquema general del montaje experimental con los principales componentes. Siguiendo este esquema, el flujo de hidrógeno proviene de una botella de alta presión, mientras que la alimentación del aire se realiza mediante una línea de aire comprimido. En ambos casos, el caudal másico fue controlado por medio de caudalímetros másicos Brooks con rangos de 0-10 Nl/min y 0-20 Nl/min para el hidrógeno y el aire respectivamente. Estos caudalímetros se controlaron mediante una unidad de control digital Brooks 0152 pudiendo fijar el caudal másico de hidrógeno deseado, el cual a su vez fija la potencia térmica de la llama y el caudal másico del aire, permitiendo así fijar el exceso de aire deseado.

La cámara cilíndrica de acero inoxidable AISI 316 fue recubierta con una pintura térmica de alta temperatura asegurando una emisividad cercana a 1. Las dimensiones de la cámara se muestran en la Figura 3.2. Los gases de combustión fueron refrigerados mediante un intercambiador de calor tubular situado en la parte superior de la cámara, con la toma de muestras en su salida donde se tomaron las medidas de NO_x térmicos mediante el analizador de gases Testo 350. Estas medidas se tomaron en base seca y se aplicó una corrección de O_2 al 0%. Cabe mencionar que los ensayos en cada punto de diseño se realizaron durante periodos de tiempo controlados, asegurando un estado estacionario del sistema a la hora de la toma de datos.

3.3.2. Medidas de temperatura axial

Como se ha descrito previamente, la relación entre los NO_x térmicos y el campo de temperaturas en la llama, requieren un cálculo óptimo de estas últimas. Así, la evolución de la temperatura en el eje axial obtenido a través de los cálculos CFD, se validó con medidas experimentales a lo largo de dicho eje mediante un termopar tipo-B como se muestra en la Figura 3.10. El termopar se desplazó empleando una mesa de precisión XYZ permitiendo desplazamientos verticales de 1 mm. Las señales medidas se procesaron por medio del sistema de adquisición de datos AGILENT 34972 A. Hay que destacar que las medidas a cada altura presentaron fluctuaciones de $\pm 15^\circ\text{C}$ por lo que fueron promediados en intervalos de 180 s. Como se puede observar en la Figura 3.7, estas medidas de temperatura axial así como las simulaciones numéricas, se llevaron a cabo en la configuración de llama no-confinada.

Siendo la medida por termopar un método de medición que interacciona con el flujo, hay que tener en cuenta la influencia del flujo laminar de gases en la tem-



Figura 3.6: Cámara de combustión experimental

peratura medida así como las pérdidas por radiación desde el termopar, haciendo necesario que las temperaturas procesadas sean corregidas. Para ello, tomando como referencia el procedimiento presentado por Bradley y Matthews [12], se aplicó el balance de energía de la ecuación (3.1) en la punta del termopar. De esta forma, la temperatura real del gas fue estimada de forma iterativa.

$$h(T_{llama} - T_{tc}) = \epsilon_{tc}\sigma(T_{tc}^4 - T_{inf}^4) \quad (3.1)$$

Donde h es el coeficiente de transferencia de calor por convección, T_{llama} indica la temperatura de los gases de combustión, T_{tc} la temperatura del propio termopar y T_{inf} la temperatura de los cuerpos lejanos del laboratorio (paredes, techo etc.).

La emisividad media del termopar ϵ_{tc} se caracterizó modificando la emisividad de la cámara termográfica FLIR ThermoCam P25 hasta alcanzar el valor de medida instantáneo del termopar, obteniendo un valor final de $\epsilon_{tc}=0,3$. El coeficiente de transferencia de calor h se obtuvo de la definición del número de Nusselt, el cual fue a su vez calculado en función de los números de Reynolds y de Prandtl. Siguiendo la metodología de Xu .H et al. [13], las propiedades de la mezcla de gases depen-

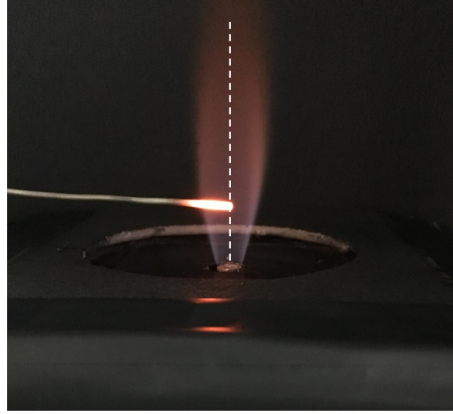


Figura 3.7: Medidas de temperatura axial en la configuración no-confinada de la llama de hidrógeno

dientes de la temperatura (viscosidad, conductividad, calor específico y densidad) se aproximaron como las del aire. Asimismo, la velocidad media axial empleada para el cálculo del número de Reynolds, se tomó de los resultados numéricos. Para este último número, se empleó el diámetro del cuerpo del termopar ($D=1,8$ mm).

3.4. Modelización CFD

Como se ha mencionado anteriormente, el campo de flujo reactivo de los casos considerados fue resuelto mediante cálculos numéricos en el dominio presentado en la Figura 3.3. Para ello, se resolvieron las ecuaciones de Navier-Stokes estacionarias presentadas en el apartado 2.1.1.

Asimismo, también fue necesario resolver la ecuación de transporte de las especies descrita en el apartado 2.1.2 mediante la ecuación (2.4), considerando los términos de reacción. Estos términos de reacción fueron evaluados en cada iteración por medio de la ecuación (2.21). Así, las tasas de reacción de cada especie i fueron evaluadas a partir del mecanismo de reacción detallado de O'Conaire et al. [14] presentado en la Tabla 2.1, que incluye 8 especies reactivas y 19 reacciones. Debido a la importancia del transporte difusivo en llamas laminares no-premezcladas, y en especial en llamas de hidrógeno, el término de transporte difusivo se calculó teniendo en cuenta el enfoque de difusión multicomponente descrita en el apartado 2.1.2 junto con la difusión térmica o efecto Soret.

En cuanto a la formación de los NO_x térmicos, se siguió la metodología descrita en el apartado 2.4. De esta forma, la ecuación de transporte de la fracción másica del óxido de nitrógeno Y_{NO} se resolvió en una etapa de post-procesado, tomando los valores de las concentraciones de las especies presentes en el mecanismo de Zeldovich obtenidos durante el cálculo detallado.

Los procesos de transferencia de calor fueron también resueltos considerando la ecuación (2.5) de conservación de la energía. En este estudio, los términos de radiación fueron calculados mediante el modelo de radiación *Discrete Ordinates* (DO), el cual resuelve la ecuación de transferencia por radiación para un número finito de ángulos sólidos discretos. Así, la discretización angular se realizó teniendo en cuenta cuatro divisiones en los ángulos θ y φ , por lo que se obtuvieron 8 ángulos sólidos. Por su parte, la absorptividad del vapor de agua se calculó mediante el modelo *weighted-sum-of-gray-gases model* (WSGGM).

En este caso, cabe mencionar que la ecuación de la entalpía también fue resuelta en el dominio sólido (aislante de la cámara) para el cálculo de la transferencia de calor desde la cámara hacia el exterior. Así, la ecuación de transporte de la entalpía se redujo a la ecuación de transferencia de calor por conducción:

$$\nabla \cdot (k_w \nabla T) = 0 \quad (3.2)$$

Donde la conductividad térmica del material aislante k_w se expresó en función de la temperatura local de acuerdo a las especificaciones del fabricante. El calor transportado a través del material aislante por conducción, llega a la pared exterior de la cámara, donde se disipa por medio del intercambio de calor por convección natural y radiación con el aire del ambiente. Para la modelización de este fenómeno en la pared externa del dominio, se impuso una condición de contorno de transferencia de calor combinada (radiación+convección) como se indica en la Figura 3.2 mediante \dot{Q}_{conv} y \dot{Q}_{rad} , expresando el flujo de calor por convección como:

$$\dot{Q}_{conv} = h_0 \sum A_i (T_{w,i} - T_0) \quad (3.3)$$

Donde A_j y $T_{w,i}$ hacen referencia a la superficie de la celda i y a su temperatura en la cara externa del dominio (pared externa de la cámara) respectivamente. La temperatura T_0 es la temperatura ambiente del aire. Para el coeficiente de transferencia de calor se empleó la aproximación de $h_0=6.5$ W/m²K, calculado mediante

la expresión del número de Nusselt [15]:

$$Nu = \left[0,825 + \frac{0,387Ra_L^{1/6}}{[1 + (0,492/Pr)^{9/16}]^{8/27}} \right]^2 \quad (3.4)$$

Donde Ra_L es el número de Rayleigh el cual se expresa como el producto de los números de Grashof y Prandtl [15]. Así, tomando la definición de Nu , el coeficiente de transferencia de calor h_0 fue calculado para cada temperatura de superficie considerada. Así, variando la temperatura de la pared externa desde 320 K hasta 500 K, se obtuvo un valor medio de $h_0=6.5$.

Por su parte, el flujo de calor por radiación desde la pared externa de la cámara hacia el ambiente \dot{Q}_{rad} de la ecuación (3.5), fue modelizado aproximando la pared externa de la cámara de combustión como una superficie gris difusa con una emisividad igual a $\epsilon=0,98$.

$$\dot{Q}_{rad} = \epsilon\sigma \sum A_i(T_{w,i}^4 - T_0^4) \quad (3.5)$$

Donde $\sigma = 5,67 \times 10^{-8} \text{ W}/(\text{m}^2 \text{ K}^4)$ es la constante de Stephan-Boltzman. Como se ha mencionado previamente, la emisividad indicada se obtuvo pintando la pared externa de la cámara con un spray negro mate de alta temperatura. De esta forma, el valor de la emisividad se evaluó colocando un termopar en la superficie de la pared exterior de la cámara y al mismo tiempo midiendo la temperatura de dicha pared mediante una cámara termográfica FLIR ThermaCam P25. Así, la emisividad de la cámara se ajustó hasta igualar la temperatura leída por el termopar de superficie llegando finalmente al valor de $\epsilon=0,98$.

3.5. Resultados

3.5.1. Observaciones generales

En base a los parámetros presentados previamente, el rango de potencias considerado (0,2-1 kW) hace que los caudales máxicos de hidrógeno y de aire aumenten en función de la potencia, aumentando así el número de Reynolds de los flujos. Teniendo en cuenta esta relación, hay que destacar que no se pudieron obtener resultados numéricos estacionarios a partir de 0,6 kW, lo cual apunta a un régimen de transición laminar-turbulento como se esperaba. Este régimen no-laminar se observó de forma experimental en las llamas no-confinadas a 0,8 kW y $\lambda = 1,1$

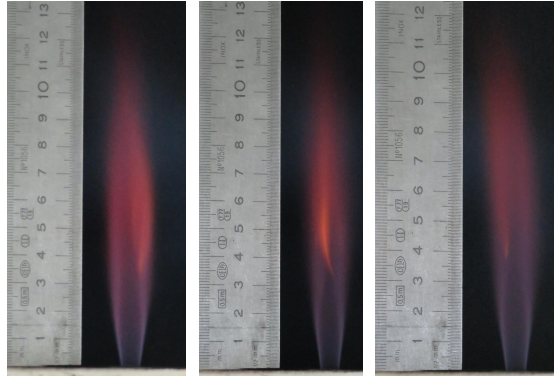


Figura 3.8: Secuencia de imágenes mostrando el régimen no-laminar de la llama no-confinada a 0,8 kW y $\lambda = 1,1$ (secuencia de imágenes capturada mediante una cámara Canon EOS M50 en modo ráfaga con 10 fps)

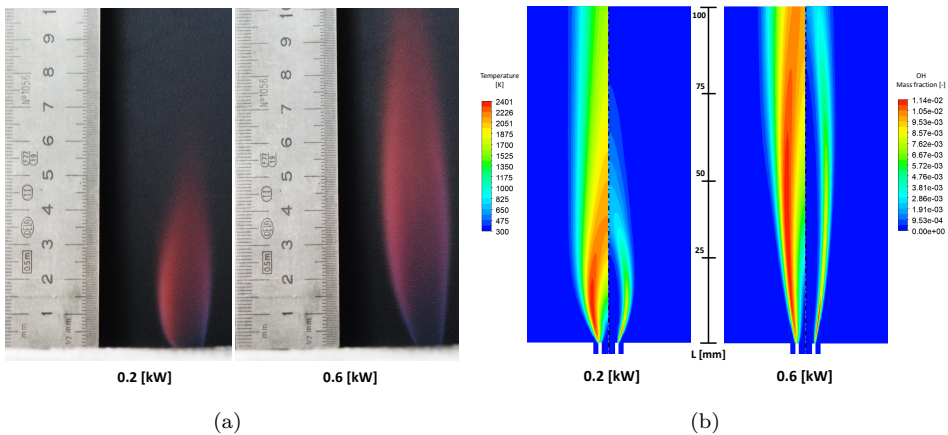


Figura 3.9: Imágenes de las llamas no-confinadas a dos potencias diferentes (0,2 y 0,6kW) a $\lambda = 1,1$. (a) Llamas experimentales (b) Resultados numéricos, temperaturas (izqda.) y radicales OH (dcha.)

como se muestra en la Figura 3.8, confirmando el inicio de este régimen transitorio para $P > 0,6$ kW. Por lo tanto, el estudio numérico se limitó al rango 0,2-0,6 kW mientras que las medidas experimentales se mantuvieron para el rango 0,2-1 kW.

Como se verá más adelante, este régimen no-laminar tuvo un impacto considerable en la formación de NO_x , cambiando la tendencia de las curvas de concen-

traciones de los NO_x térmicos. Como se ha mencionado al inicio de este capítulo, tomando los resultados de Chen y Driscoll [1], la diferencia en las tendencias de los NO_x entre el régimen laminar y el turbulento de la llama se puede explicar mediante la relación entre el volumen de reacción $\mathcal{V}_{\text{reac}}$, el tiempo de residencia τ_{res} y la escala temporal de la formación de los NO_x $1/\dot{\omega}_{\text{NO}_x}$, por lo que se emplearon para la interpretación de los resultados.

Antes de entrar a analizar en detalle los resultados cuantitativos de las concentraciones de NO_x , en la Figura 3.9 (caso de $P = 0,2$ kW y $\lambda = 1,1$ en la configuración no-confinada) se puede observar que en general los resultados numéricos y experimentales mostraron resultados similares desde un punto de vista cualitativo.

3.5.2. Validación de la temperatura en la configuración no-confinada

La Figura 3.10 muestra las curvas axiales de temperatura obtenidas de forma numérica y experimental a una potencia de 0,2 kW y $\lambda = 1,2$. Como se puede observar, los resultados numéricos fueron capaces de predecir las medidas experimentales mostrando un error relativamente pequeño entre ambas curvas. Se puede ver que los resultados numéricos sobre estimaron la temperatura máxima (~ 54 K).

Por un lado, las diferencias entre ambas curvas pueden deberse a las pérdidas por conducción de calor en el termopar, las cuales no se tuvieron en cuenta a la hora de realizar las correcciones de temperatura. Por otro lado, hay que tener en cuenta que las correcciones de temperatura se realizaron aproximando la mezcla de gases con las propiedades del aire, mientras que el perfil axial de velocidades se tomó de los resultados numéricos.

Asimismo, los modelos numéricos cuentan con aproximaciones y simplificaciones que podrían mejorarse, tanto para la expresión del término fuente de reacción de la ecuación (2.21) como para el modelo de radiación empleado, para el que se asumió que las paredes del dominio estaban a una temperatura constante con emisividad $\epsilon = 1$. No obstante, los resultados mostrados en la Figura 3.10 para la configuración de llama no-confinada demostraron que los modelos numéricos empleados fueron capaces de capturar la física general de las llamas laminares consideradas en este estudio.

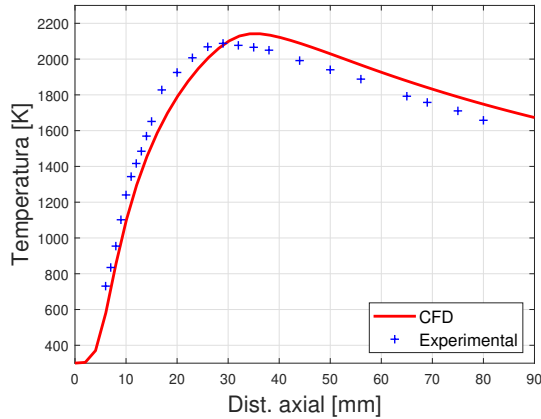


Figura 3.10: Resultados numéricos y experimentales de la temperatura axial a 0,2 kW y $\lambda = 1,2$

3.5.3. Validación de los NO_x térmicos

La Figura 3.11 muestra los resultados numéricos y experimentales de las concentraciones de NO_x para cada exceso de aire considerado (λ) en función de la potencia térmica de entrada (Figura 3.11 (a)) y del número de Reynolds del aire coaxial (Figura 3.11 (b)). Como se puede observar los resultados numéricos fueron capaces de predecir las concentraciones de NO_x de forma cuantitativa, prediciendo la tendencia creciente de los NO_x con la potencia de entrada (y con el número de Re del aire) hasta alcanzar su máximo en 0,6 kW.

Por su parte, los resultados experimentales mostraron una tendencia opuesta a 0,8 y 1 kW para todos los excesos de aire considerados, correspondiendo a números de Reynolds superiores a 2.000 en el aire coaxial y confirmando la transición laminar-turbulenta de la llama por encima de 0,6 kW.

3.6. Discusión

Las tendencias de las concentraciones de NO_x indicaron un incremento en el régimen laminar de la llama y una tendencia opuesta en el régimen no-laminar. Por otro lado, las concentraciones de NO_x fueron mayores para excesos de aire más altos en ambas zonas (laminar y no-laminar). Teniendo en cuenta que los resultados numéricos fueron capaces de predecir de forma cuantitativa las concentraciones de

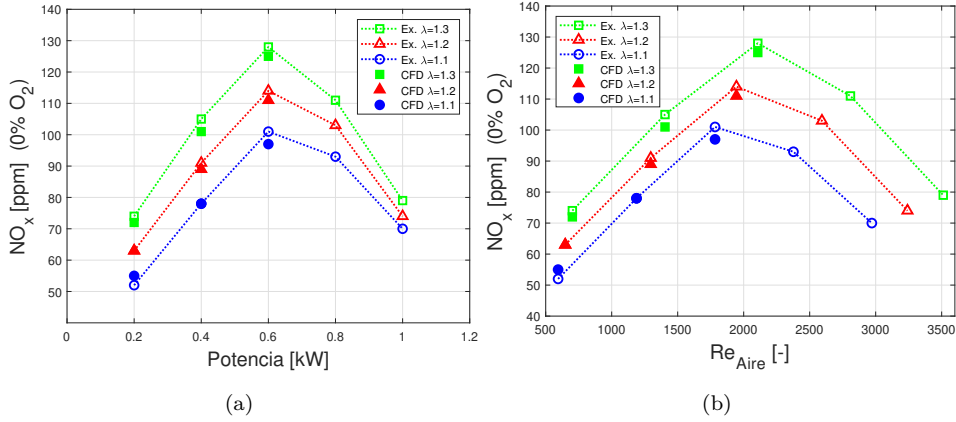


Figura 3.11: Resultados numéricos y experimentales de las concentraciones de NO_x para diferentes excesos de aire (λ). (a) En función de la potencia de entrada (b) En función del número de Reynolds del aire coaxial

NO_x, estos se emplearan para interpretar las tendencias en el caso de llama laminar.

A continuación se utilizará la información mostrada en las Figuras 3.12-3.13 para considerar la relación entre los parámetros más importantes en la formación de los NO_x (volúmenes de reacción $\mathcal{V}_{\text{reac}}$, tiempos de residencia del flujo τ_{res} y los tiempos de reacción $1/\dot{\omega}_{\text{NO}_x}$).

3.6.1. Influencia de la potencia de entrada

Para cuantificar los volúmenes de reacción $\mathcal{V}_{\text{reac}}$ en los resultados numéricos, estos fueron definidos como las regiones con tasas de reacción mayores que un número pequeño (por ejemplo $\dot{\omega}_{\text{NO}_x} > 0,1 \text{ s}^{-1}$):

$$\mathcal{V}_{\text{reac}} = \iiint_{[\dot{\omega}_{\text{NO}_x} > 0,1 \text{ s}^{-1}]} dV \quad (3.6)$$

Con esta definición se tiene que este volumen extraído es el que encierra la iso-superficie $\dot{\omega}_{\text{NO}_x} = 0,1 \text{ s}^{-1}$ de la Figura 3.12. Debido a su influencia en la formación de los NO_x térmicos, cabe mencionar que dicha iso-superficie podría haberse definido como el volumen de altas temperaturas, ya que las altas temperaturas permiten activar la reacción limitante (2.50) como se describió en el apartado 2.4.

No obstante, se consideró que la definición presentada en la Ecuación (3.6.1) era más apropiada, incluyendo todos los factores que describen la zona de alta producción de NO . Esto se debe a que las concentraciones molares de los radicales O también participan en la activación de la reacción (2.50), no solamente las altas temperaturas.

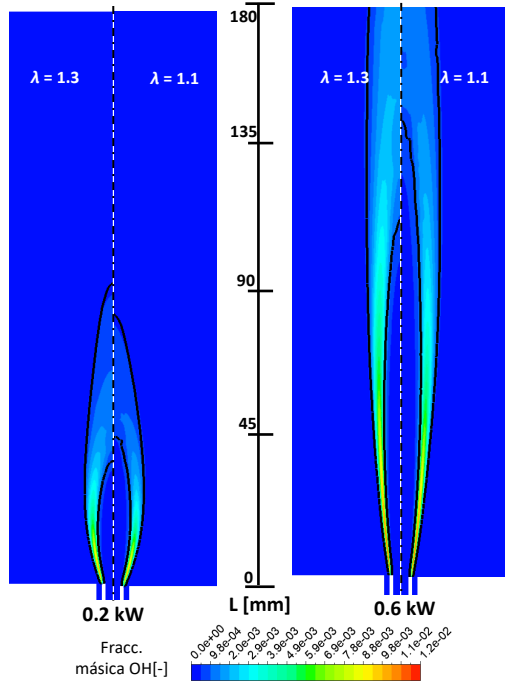


Figura 3.12: Resultados numéricos a diferentes potencias y excesos de aire (λ) de la fracción másicas de OH mostrando los volúmenes $\mathcal{V}_{\text{reac}}$

Como se ha mencionado anteriormente, un mayor volumen de reacción $\mathcal{V}_{\text{reac}}$ implica un mayor volumen de la zona en la que se forma el NO_x . Sin embargo, es necesario considerar la intensidad de la producción de estos NO_x dentro del volumen $\mathcal{V}_{\text{reac}}$. Esta intensidad puede relacionarse con la competición entre un tiempo de residencia τ_{res} del flujo (que puede aproximarse como la magnitud inversamente proporcional a la velocidad $|\vec{v}|$) y un tiempo químico definido como la inversa de la tasa de reacción $\dot{\omega}_{\text{NO}_x}$. De esta forma, se puede definir la media ponderada de

$\dot{\omega}_{\text{NO}_x}$ por la inversa de la velocidad dentro de $\mathcal{V}_{\text{reac}}$:

$$\overline{\dot{\omega}_{\text{NO}}} = \frac{\iiint_{\mathcal{V}_{\text{reac}}} \dot{\omega}_{\text{NO}} / |\vec{v}| d\mathcal{V}}{\iiint_{\mathcal{V}_{\text{reac}}} 1 / |\vec{v}| d\mathcal{V}} \quad (3.7)$$

Con esta definición se quiere evaluar la intensidad de producción de NO_x dentro de $\mathcal{V}_{\text{reac}}$. Así, cuanto mayor sea esta media ponderada $\overline{\dot{\omega}_{\text{NO}}}$, mayor será la intensidad de la producción de NO_x dentro de $\mathcal{V}_{\text{reac}}$.

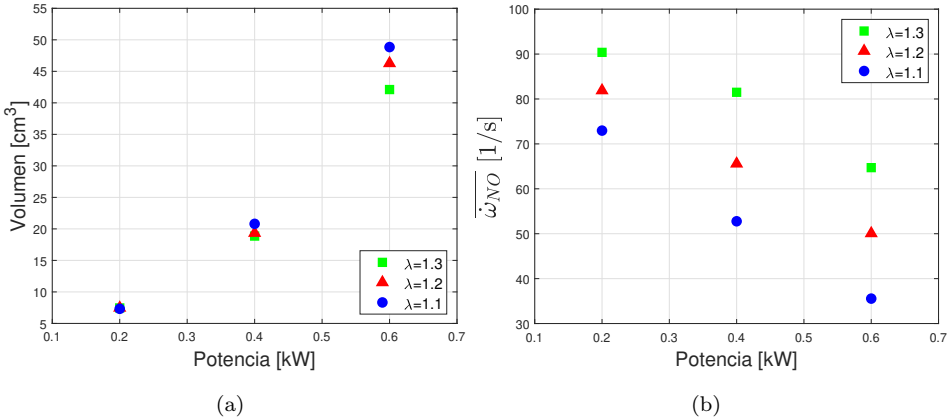


Figura 3.13: Resultados numéricos a diferentes potencias y excesos de aire (λ). (a) Volúmenes de llama (b) Intensidad de la formación de NO_x

La Figura 3.13 muestra las tendencias opuestas de estos dos factores. Por un lado, los volúmenes de reacción de NO_x incrementan con la potencia de entrada (llamas laminares más alargadas) con una tasa de aproximadamente $41 \text{ cm}^3/\text{kW}$. Por otro lado, la intensidad de la formación $\overline{\dot{\omega}_{\text{NO}}}$ baja con la potencia de entrada. Por lo tanto, se puede afirmar que el incremento de las concentraciones de NO_x de la Figura 3.11 en la región laminar se deben a las mayores longitudes de llama y por ende a mayores volúmenes de reacción $\mathcal{V}_{\text{reac}}$.

Asimismo, la tendencia opuesta de las concentraciones experimentales de NO_x de la Figura 3.11 en el régimen no-laminar, con una tasa de disminución aproximada de $120 \text{ ppm}/\text{kW}$, podría explicarse debido a la misma tendencia descendente de la intensidad de producción de NO_x dentro del volumen $\mathcal{V}_{\text{reac}}$, manteniéndose este último aproximadamente constante cuando se inicia la transición hacia el régimen turbulento [16, 17]. Esta afirmación se apoya en los resultados de Chen y Driscoll [1] para llamas tipo jet en configuraciones simples (sin aire coaxial), don-

de las longitudes de llama permanecen aproximadamente constantes en el régimen turbulento (lo cual implica volúmenes de reacción constantes ya que $\mathcal{V}_{\text{reac}} \sim L_f^2 \cdot \delta$ [2]), mientras que dichas longitudes se incrementan en el régimen de llama laminar. Adicionalmente, aumentando la potencia por encima del rango considerado hasta obtener llamas totalmente turbulentas, se podría esperar una reducción del tiempo de residencia del flujo ($1/|\vec{v}|$) junto con unas menores tasas de reacción $\dot{\omega}_{\text{NO}_x}$ locales, inducidas principalmente por el incremento en las tasas de deformación de la llama y la intensidad de la mezcla molecular.

3.6.2. Influencia del exceso de aire

La tendencia de mayores concentraciones de NO_x para mayores excesos de aire (λ), que se observa en la Figura 3.11, también se puede explicar mediante la Figura 3.13. A bajas potencias de entrada, los volúmenes de reacción son similares para todos los excesos de aire y la diferencia en la concentración de NO_x se puede explicar directamente por la mayor intensidad de reacción en los excesos de aire más altos de la Figura 3.13 (b) (incremento del 18% en la intensidad al pasar de $\lambda = 1,1$ a $1,3$), aumentando así las concentraciones de NO_x aproximadamente en un 23%. Esto se debe a que en estos puntos se esperan valores locales más elevados de $\dot{\omega}_{\text{NO}_x}$ debido a las mayores concentraciones locales de radicales de O , que a su vez se deben a la inyección de más aire coaxial (mayor exceso de aire).

Sin embargo, al aumentar la potencia de entrada, esta diferencia se reduce (las curvas experimentales se acercan por encima de 0,6 kW en la Figura 3.11 (a)), mostrando un incremento en las concentraciones del 22% al pasar de $\lambda = 1,1$ a $1,3$ con $P=0,6$ kW y del 12,5% $P=1$ kW, debido a que los volúmenes de reacción son menores a excesos de aire más altos. Esta afirmación coincide con la observación de Chen y Driscoll en llamas turbulentas [1], donde el aire coaxial redujo las emisiones de NO_x . Por lo tanto, siguiendo esta tasa de disminución, se puede esperar que las tres líneas del gráfico de la Figura 3.11 (a) se crucen para aquellos valores de potencia de entrada superiores a 1 kW, lo cual implicaría una reducción de NO_x con valores de λ más altos en llamas totalmente turbulentas, como observaron Chen y Driscoll.

Por lo tanto, se concluye que en llamas totalmente turbulentas con altos números de Reynolds, el efecto de un mayor exceso de aire podría ser una buena estrategia de reducción de NO_x . Sin embargo, en las llamas de bajo número de Reynolds consideradas en este estudio se observa el efecto contrario: las corrientes de aire

coaxial más fuertes (excesos de aire más altos), implican mayores concentraciones locales de O , aumentando así las emisiones de NO_x . De esta forma se ve que a pesar de que los volúmenes de reacción y tiempos de residencia puedan empezar a ser más cortos por encima de 0,6 kW en el régimen de llama no-laminar, el nivel de turbulencia de la llama no es suficiente para que el aumento del exceso de aire tenga un impacto positivo en la reducción de emisiones de NO_x . Por lo tanto, frente a los resultados de estudios anteriores en llamas turbulentas no premezcladas con altos números de Reynolds en el aire coaxial [1, 18, 19], se puede concluir que el aumento del exceso de aire promueve la formación de NO_x en llamas de hidrógeno de difusión en régimen laminar y en el régimen de transición laminar-turbulento con aire coaxial.

3.6.3. Estrategias de diseño para quemadores de bajo NO_x de hidrógeno

Considerando estos resultados, se plantean dos estrategias de diseño de quemadores de difusión de bajo NO_x de hidrógeno en la configuración multillama dependiendo del régimen de la llama. En este punto se introduce el concepto de densidad de potencia nominal, que se define como la potencia térmica en el punto nominal de trabajo del quemador dividida por la superficie total, la cual será constante:

$$DP = \frac{P_{nom}}{A_{ref}} \quad (3.8)$$

Quemadores turbulentos

Considerando una superficie A_{ref} constante del quemador, la primera estrategia consistiría en reducir el número N de llamas del quemador, aumentando así la potencia térmica por cada llama (P_{nom}/N) para poder mantener la densidad de potencia nominal. En consecuencia, se podría conseguir el régimen de llama turbulenta para poder reducir la formación de NO_x . Como se ha comentado previamente, en estas llamas totalmente turbulentas se podría esperar una reducción de las concentraciones de NO_x debido a las menores intensidades de formación $\overline{\omega_{NO}}$ junto con volúmenes de reacción \mathcal{V}_{reac} constantes (esperando longitudes de llama

L_f constantes con $\sim L_f^2 \cdot \delta$ [2]). En este caso, llegando al régimen de llama totalmente turbulento, existen evidencias de que el incremento del exceso de aire y la introducción de aire coaxial favorecen a la reducción de la formación de NO_x en llamas de hidrógeno [1, 18, 19].

No obstante, en el marco de las aplicaciones de baja potencia como pueden ser las calderas domésticas, donde la gran mayoría de quemadores trabaja en régimen de llama laminar [4, 20], este régimen de llama turbulenta podría tener un impacto negativo debido a la necesidad de incrementar el volumen de la cámara de combustión por el incremento en la longitud de las llamas. En este sentido, los diseños de quemadores compactos de bajo NO_x de hidrógeno, se podrían desarrollar y optimizar siguiendo estrategias basadas en principios de aerodinámica de la combustión, donde se ha demostrado que las técnicas de chorros entrecruzados, generación de vórtices, quemadores tipo *swirl* o chorros estabilizados por giro pueden servir para optimizar los diseños [21–24]. Otro de los problemas a considerar en el diseño de quemadores domésticos turbulentos sería el del exceso de aire y la capacidad máxima de caudal de aire, los cuales inducirían la turbulencia en la llama debido a los mayores números de Reynolds en el chorro. Este problema estaría relacionado con la capacidad de succión de aire de los soplantes actuales y las limitaciones que podrían existir para conseguir un régimen turbulento.

En el marco de las aplicaciones de mayor potencia, como pueden ser los quemadores de hornos y calderas industriales, se puede decir que el incremento del exceso de aire sería una buena estrategia para la reducción de los niveles de NO_x en el diseño de quemadores, ya que estos quemadores trabajan en régimen turbulento [5]. Asimismo, debido a su naturaleza turbulenta, las mencionadas técnicas de aerodinámica de llama se podrían aplicar con mayor facilidad en los procesos de diseño de quemadores industriales de difusión de hidrógeno de bajo NO_x .

Quemadores laminares

La estrategia opuesta consistiría en aumentar el número de llamas N del quemador, reduciendo la potencia térmica de cada llama (P_{nom}/N) para mantener la densidad de potencia nominal. De esta forma se debería de asegurar que la potencia de cada llama (P_{nom}/N) asegura un régimen de llama laminar, buscando menores niveles de formación de NO_x con las reducción del volumen de reacción $\mathcal{V}_{\text{reac}}$ de cada llama a pesar del incremento de la intensidad de formación $\overline{\omega_{\text{NO}}}$ de como se ha concluido en la sección anterior.

Este método coincide con los resultados obtenidos por Igawa et al. [10], siendo más apto para el diseño de quemadores de calderas domésticas o aplicaciones similares con restricciones de espacio para la integración del quemador en el sistema. En este caso, se tendría un quemador multillama con un gran número de llamas de difusión de menor potencia para reducir las concentraciones de NO_x . Como se observa en la Figura 3.11, el punto a 0,2 kW con $\lambda = 1,1$ ofrece las menores concentraciones de NO_x . A modo de ejemplo, considerando una potencia nominal de 20 kW, se necesitaría un quemador con 100 llamas de 0,2 kW, generando aproximadamente unos 55 ppm de NO_x . De la misma forma, esta potencia nominal podría ser cubierta con 34 llamas de 0,6 kW lo cual implicaría unos 100 ppm de NO_x . Así, se puede ver que la formación de NO_x podría reducirse aproximadamente en un 45 %.

No obstante, el método de división de llamas requiere una gran cantidad de orificios miniaturizados en el quemador, lo cual puede llevar a dificultades constructivas y restricciones prohibitivas en los procesos de fabricación. Asimismo, es necesario estudiar la interacción entre las diferentes llamas en una configuración de quemador multillama para verificar que los resultados y conclusiones de este estudio se mantienen en dichas configuraciones.

3.7. Conclusiones

En este capítulo se presenta el análisis numérico y experimental de la formación de NO_x térmicos en llamas de difusión coaxiales de H_2 /Aire con bajo número de Reynolds. El estudio se centró en la influencia de la potencia de entrada, exceso de aire y régimen de la llama en la formación de NO_x , considerando los rangos 0,2-1,0 kW y $\lambda = 1,1-1,3$ respectivamente. Los resultados numéricos se validaron con medidas experimentales de temperaturas en el eje axial en la configuración de llama no confinada y las medidas experimentales de NO_x en la configuración de llama confinada, mostrando que los resultados numéricos fueron capaces de reproducir las medidas experimentales con buenos resultados cuantitativos. Tras esta validación de los resultados numéricos, las tendencias en la formación de NO_x térmicos para diferentes potencias térmicas y excesos de aire dependiendo del régimen de la llama, pudieron ser interpretadas considerando tres factores: el volumen de reacción $\mathcal{V}_{\text{reac}}$ y la competición del tiempo de residencia τ_{res} y los tiempos de reacción de NO_x $1/\dot{\omega}_{\text{NO}_x}$ dentro de $\mathcal{V}_{\text{reac}}$.

Considerando el efecto de la potencia de entrada en la formación de NO_x , se

detectó una transición laminar-turbulenta por encima de 0,6 kW, mostrando un cambio en la tendencia de NO_x con una tasa de disminución de 120 ppm/kW. Así, considerando el método de división de llama (quemadores multillama), se plantean dos estrategias opuestas para el diseño de quemadores de difusión de hidrógeno: un quemador con un número reducido de llamas turbulentas (con la problemática añadida de la necesidad de un mayor espacio en la cámara de combustión y limitaciones en cuanto a caudales de aire en calderas domésticas) o un quemador con un mayor número de llamas laminares (teniendo que considerar la problemática relacionada con las restricciones de fabricación debidas a los pequeños orificios de entrada de los chorros y la cantidad de llamas considerada).

En cuanto al exceso de aire, existen evidencias de que su incremento en llamas de difusión de hidrógeno totalmente turbulentas favorece a la reducción de NO_x [1, 18, 19]. Sin embargo, en las llamas laminares y llamas no-laminares con bajos números de Reynolds considerados en este estudio, se observó una tendencia opuesta, donde se obtuvieron mayores niveles de NO_x para mayores excesos de aire. En el régimen laminar, las concentraciones de NO_x aumentaron en un 23 % al aumentar el exceso de aire de $\lambda = 1,1$ a 1,3, confirmando que los excesos de aire cercanos al punto estequiométrico favorecen la reducción de NO_x . En cambio, en el régimen no-laminar el incremento de la potencia mostró una menor influencia del exceso de aire, pasando de un incremento de NO_x del 22 % a $P = 0,6$ kW al aumentar λ desde 1,1 hasta 1,3, a un incremento del 12,5 % a $P = 1$ kW. Estas observaciones implicarían una reducción de NO_x con valores de λ más altos en llamas totalmente turbulentas, como observaron Chen y Driscoll [1].

Por lo tanto, los resultados de la caracterización sirvieron para establecer criterios de diseño para la reducción de la formación de NO_x en quemadores de difusión de hidrógeno. Siguiendo los objetivos previamente presentados, estas conclusiones sirvieron para plantear nuevas alternativas de diseño que se desarrollarán en el siguiente capítulo.

3.8. Bibliografia

- [1] R.-H. Chen, J. F. Driscoll, Nitric oxide levels of jet diffusion flames: Effects of coaxial air and other mixing parameters, Symposium (International) on Combustion 23 (1) (1991) 281–288, twenty-Third Symposium (International) on Combustion. doi:[https://doi.org/10.1016/S0082-0784\(06\)80271-7](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(06)80271-7).
- [2] N. Peters, S. Donnerhack, Structure and similarity of nitric oxide production in turbulent diffusion flames, Symposium (International) on Combustion 18 (1) (1981) 33–42, eighteenth Symposium (International) on Combustion. doi:[https://doi.org/10.1016/S0082-0784\(81\)80008-2](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(81)80008-2).
- [3] R. Marin, L. Diaz, I. Urresti, Gas burner, Applicant: Ikerlan S.Coop. Application number: 16382614.2. (june 2018).
- [4] H. R. N. Jones, The Application of Combustion Principles to Domestic Gas Burner Design, British Gas technical monographs, Spon, 1989.
- [5] C. E. B. Jr., Industrial Burners Handbook, Industrial Combustion, CRC Press, 2003.
- [6] Dry Low NOx Combustion Systems for GE Heavy-Duty Gas Turbines, Vol. Volume 3: Coal, Biomass and Alternative Fuels; Combustion and Fuels; Oil and Gas Applications; Cycle Innovations of Turbo Expo: Power for Land, Sea, and Air, v003T06A003. arXiv:<https://asmedigitalcollection.asme.org/GT/proceedings-pdf/GT1996/78743/V003T06A003/2407421/v003t06a003-96-gt-027.pdf>, doi:10.1115/96-GT-027.
- [7] J. Choi, R. Rajasegar, T. Lee, J. Yoo, Development and characterization of swirl-stabilized diffusion mesoscale burner array, Applied Thermal Engineering 175 (2020) 115373. doi:<https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2020.115373>.
- [8] K. Maruta, Micro and mesoscale combustion, Proceedings of the Combustion Institute 33 (1) (2011) 125–150. doi:<https://doi.org/10.1016/j.proci.2010.09.005>.
- [9] Y. Lei, W. Chen, J. Lei, Combustion and direct energy conversion inside a micro-combustor, Applied Thermal Engineering 100 (2016) 348–355.
- [10] S. Igawa, T. Matsui, A. Seo, Nox emission reduction in hydrogen combustion, International Gas Research Conference Proceedings 2 (2011) 1111–1125.
- [11] ANSYS Fluent Inc. 2020 R1, documentation user’s guide. (2020).
- [12] D. Bradley, K. J. Matthews, Measurement of high gas temperatures with fine

- wire thermocouples, *Journal of Mechanical Engineering Science* 10 (4) (1968) 299–305. doi:10.1243/JMES_JOUR_1968_010_048_02.
- [13] H. Xu, F. Liu, S. Sun, Y. Zhao, S. Meng, W. Tang, Effects of h₂o and co₂ diluted oxidizer on the structure and shape of laminar coflow syngas diffusion flames, *Combustion and Flame* 177 (2017) 67–78. doi:https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2016.12.001.
- [14] M. Ó Conaire, H. J. Curran, J. M. Simmie, W. J. Pitz, C. K. Westbrook, A comprehensive modeling study of hydrogen oxidation, *International Journal of Chemical Kinetics* 36 (11) (2004) 603–622. doi:10.1002/kin.20036.
- [15] Y. Çengel, *Heat Transfer: A Practical Approach*, McGraw-Hill series in mechanical engineering, McGraw-Hill, 2003.
- [16] J. Warnatz, U. Maas, R. W. Dibble, R. W. Dibble, *Combustion: Physical and Chemical Fundamentals, Modelling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation.*, Springer, 2001.
- [17] S. McAllister, J. Y. Chen, A. C. Fernandez-Pello, *Fundamentals of Combustion Processes*, Mechanical Engineering Series, Springer New York, 2011.
- [18] S. Noda, J. Inohae, Z. S. Saldi, Nox emission characteristics of confined jet nonpremixed flames, *Proceedings of the Combustion Institute* 31 (1) (2007) 1625–1632. doi:https://doi.org/10.1016/j.proci.2006.07.088.
- [19] J. Hwang, K. Sohn, N. Bouvet, Y. Yoon, Nox scaling of syngas h₂/co turbulent non-premixed jet flames, *Combustion Science and Technology* 185 (2013) 1715–1734. doi:10.1080/00102202.2013.831847.
- [20] V. Raghavan, *Combustion Technology : Essentials of Flames and Burner*, 2016. doi:10.1002/9781119241775.
- [21] Z. Ling, H. Zhou, T. Ren, Effect of the flue gas recirculation supply location on the heavy oil combustion and nox emission characteristics within a pilot furnace fired by a swirl burner, *Energy* 91 (2015) 110–116. doi:https://doi.org/10.1016/j.energy.2015.08.025.
- [22] H. H. Funke, N. Beckmann, S. Abanteriba, An overview on dry low NO_x micromix combustor development for hydrogen-rich gas turbine applications, *International Journal of Hydrogen Energy* 44 (13) (2019) 6978–6990. doi:10.1016/j.ijhydene.2019.01.161.
- [23] J. Choi, R. Rajasegar, W. Lee, T. Lee, J. Yoo, Hydrogen enhancement on a mesoscale swirl stabilized burner array, *International Journal of Hydrogen Energy* 46 (46) (2021) 23906–23915. doi:https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.04.157.

3.8. Bibliografía

- [24] J. M. Beér, N. A. Chigier, Combustion Aerodynamics, Fuel and energy science series, Krieger, 1983.

Capítulo 4

Viabilidad del concepto *Micromix* para el diseño de quemadores de hidrógeno

Resumen: *En este capítulo se analiza la viabilidad del uso del concepto de quemador Micromix para el diseño de quemadores de calderas domésticas e industriales de hidrógeno. Este concepto de quemador ha sido ampliamente estudiado para aplicaciones de turbinas de gas industriales y aeronáuticas, mostrando bajas emisiones de NO_x y eliminando por completo el riesgo de retroceso de llama. Debido a que las condiciones de operación en turbinas de gas difieren de forma considerable a las de los quemadores de calderas domésticas e industriales, fue necesario adaptar las densidades de potencia, excesos de aire y las temperaturas del aire de entrada. Así, para analizar la viabilidad de este concepto de quemador, se llevó a cabo el escalado de las geometrías considerando las nuevas condiciones de trabajo, que fueron analizadas mediante cálculos CFD. Con el objetivo de validar los modelos empleados, se partió de una geometría de referencia tomada de la literatura. Tras este primer paso y siguiendo la metodología de escalado implementada en estudios previos, la geometría de referencia fue redimensionada para los casos de quemador doméstico e industrial respectivamente (proceso de escalado). Los resultados se validaron de forma experimental en un prototipo de quemador Micromix, diseñado y fabricado tomando como base la geometría escalada del caso doméstico. Los resultados numéricos y experimentales mostraron que los beneficios observados en turbinas de*

gas se mantuvieron en los nuevos casos de estudio, ofreciendo bajos niveles de NO_x térmicos por debajo del límite Europeo de NO_x clase 6 de 56 mg/kWh en base a la directiva ErP y el estándar EN 15502 en el caso del quemador doméstico, y por debajo del límite de 250 mg/Nm³ establecido en el Real Decreto 1042/2017 para el caso industrial.

4.1. Introducción

Tomando como base los resultados del estudio presentado anteriormente, en este capítulo se plantea una posible solución para el diseño de quemadores domésticos e industriales de hidrógeno de bajo NO_x . Para ello, inicialmente se describirá el proceso de selección del concepto del quemador, presentando las ventajas y desventajas de los diferentes enfoques de diseño introducidos en la parte final del capítulo anterior.

Tras un análisis exhaustivo de la literatura, se identificó un concepto de quemador que reunía todas las características deseadas: uso de la tecnología de llamas de difusión turbulentas, bajas emisiones de NO_x y capacidad de trabajar con 100 % hidrógeno como combustible. Se trata del concepto de quemador *Micromix*, previamente presentado en el capítulo 1 y que ha sido ampliamente estudiado a lo largo de las últimas décadas como se verá más adelante. Sin embargo, este concepto de quemador ha sido aplicado para el diseño de turbinas de gas industriales y aeronáuticas.

Así, en este capítulo se presenta el estudio de la viabilidad de aplicar el *principio de combustión Micromix* (PCM) para el diseño de quemadores de hidrógeno a escala doméstica e industrial. Para ello, será necesario realizar el escalado de las geometrías en base a las nuevas condiciones de operación, que difieren de las condiciones previamente estudiadas en turbinas de gas. El proceso de diseño y validación contará con simulaciones CFD y medidas experimentales en laboratorio.

4.2. Selección del concepto de quemador

En el capítulo 3 se plantearon posibles alternativas de diseño de quemadores de difusión de hidrógeno capaces de reducir la formación de NO_x térmicos, dependiendo de la potencia térmica de la llama (o densidad de potencia del quemador, concepto introducido en el apartado 3.6.3), exceso de aire y régimen de la llama. En este sentido, los quemadores laminares podrían ser una buena opción para aplicaciones domésticas, donde predominan los quemadores de baja potencia (aproximadamente 20-30 kW), pudiendo diseñar quemadores multillama de difusión con una cantidad de llamas que asegure el régimen laminar con bajas emisiones de NO_x en todo el rango de funcionamiento. No obstante, esta selección presenta varios inconvenientes. Por un lado, como se ha comentado previamente, se necesitaría una

4.2. Selección del concepto de quemador

gran cantidad de llamas, dificultando la fabricación y dando lugar a restricciones geométricas difíciles de afrontar, aumentando además el coste del quemador.

Asimismo, de cara a minimizar la formación de NO_x , al contrario que los flujos turbulentos el régimen laminar no permite introducir efectos de aerodinámica de la llama, teniendo que acudir al uso de otras alternativas. En este sentido, suele ser habitual incluir materiales radiantes porosos capaces de absorber el calor de la llama para emitirlo de forma radiante, reduciendo así las temperaturas en llama y por consiguiente la formación de NO_x térmicos [1].

Como se observa en la Figura 4.1, estos quemadores son principalmente de premezcla, por lo que este tipo de métodos de diseño no elimina por completo el riesgo de *flashback* al emplear hidrógeno como combustible, por lo que se descartó el uso de este tipo de tecnología.

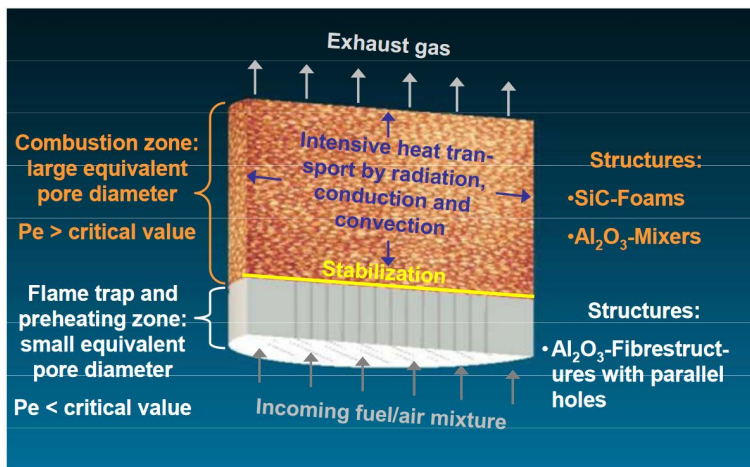


Figura 4.1: Principio de funcionamiento de un quemador poroso de premezcla doméstico [2]

Por el contrario, los quemadores turbulentos presentan varias ventajas. La primera de ellas estriba en que podrían utilizarse tanto a nivel doméstico como industrial. A pesar de que los quemadores domésticos emplean soplantes para introducir aire ambiente en la cámara de combustión, estos podrían ser válidos para inducir la turbulencia en quemadores de hidrógeno. Para ello, sería necesario medir las pérdidas de carga en el circuito de aire. En el caso de los quemadores industriales, que trabajan a escala de MW, los soplantes de aire inducen el flujo turbulento de aire, dando lugar a llamas turbulentas. Por lo tanto, el concepto de un diseño de

quemador operando en régimen turbulento podría ser utilizado en ambos sectores.

En segundo lugar, el carácter turbulento de las llamas permitiría aplicar principios de aerodinámica de la combustión, aumentando los grados de libertad para el diseño. Como se ha mencionado previamente, existen diversos métodos como el uso de chorros entrecruzados, generación de vórtices, quemadores tipo *swirl* o el uso de chorros estabilizados por giro [3–6].

En tercer lugar, como se ha indicado en el capítulo anterior, en las llamas totalmente turbulentas el incremento del exceso de aire es una buena alternativa para la reducción de NO_x térmicos, ya que se consiguen mantener los volúmenes de reacción $\mathcal{V}_{\text{reac}}$ prácticamente constantes con las variaciones de potencia, mientras que se reducen tanto las tasas de reacción $\dot{\omega}_{\text{NO}_x}$ como los tiempos de residencia [7–9]. En este sentido, el hidrógeno cuenta con la ventaja de poder trabajar con mayores excesos de aire frente a los quemadores de gas natural, empleando el mismo caudal másico (y por ende consumiendo la misma energía eléctrica del soplante para la succión del aire). Esto se debe a que en comparación con el metano (componente principal del gas natural), el hidrógeno necesita menos cantidad de aire en masa para completar su combustión. Este hecho permite incrementar el exceso de aire en un quemador de hidrógeno respecto a un quemador de gas natural, empleando el mismo caudal másico en ambos casos y ofreciendo la misma potencia térmica, como se muestra en la Figura 4.2. De esta forma, aunque los quemadores de hidrógeno turbulentos podrían trabajar con mayores excesos de aire para minimizar la formación de NO_x , consumirían la misma energía eléctrica para la succión por parte del soplador.

Por último, es importante destacar que el uso de la tecnología de difusión es más habitual en aplicaciones industriales, donde predomina la combustión turbulenta, ya sea en quemadores de calderas o en turbinas de gas [10, 11]. En cambio, actualmente la gran mayoría de los quemadores de calderas domésticas hacen uso de la combustión de premezcla laminar [12, 13]. Por este motivo, las configuraciones y los principios de combustión aplicados a quemadores de difusión turbulentos de gas natural a escala industrial podrían replicarse de forma parcial o modificarse para el desarrollo de nuevos quemadores de hidrógeno, mientras que se descartan los diseños existentes a escala doméstica ya que predomina la tecnología de premezcla.

En base a lo expuesto y debido a las ventajas que presenta, se decidió optar por el régimen turbulento para el diseño de un nuevo concepto de quemador de difusión de hidrógeno. El concepto de quemador que se describe en el siguiente

4.3. Principio de combustión *Micromix*

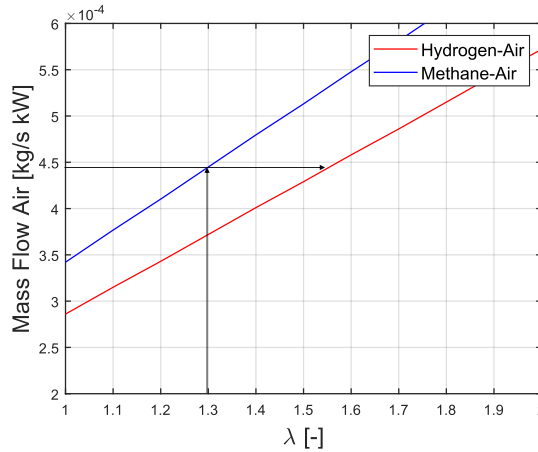


Figura 4.2: Caudal másico de aire necesario para la combustión del H_2 y CH_4 a diferentes excesos de aire

apartado se planteó con la idea de poder adaptar el diseño para quemadores de calderas domésticas e industriales.

4.3. Principio de combustión *Micromix*

El *principio de combustión Micromix* (PCM) fue desarrollado en los proyectos de investigación Europeos EQHHPP [14] y CRYOPLANE [15], teniendo como objetivo diseñar sistemas de combustión capaces de utilizar 100 % hidrógeno. En los últimos años, el consorcio formado por la Universidad de Ciencias Aplicadas de Aachen, B&B-AGEMA GmbH y Kawasaki Heavy Industries [16] ha publicado numerosos estudios relacionados con el diseño de quemadores *Micromix* para turbinas de gas industriales. Dichos estudios describen las principales características del PCM empleando simulaciones numéricas y validaciones experimentales. En la misma línea, el proyecto Europeo ENABLE H2 [17] ha puesto el foco en el uso del PCM para las turbinas de gas aeronáuticas, llevando a cabo simulaciones numéricas de la mano de grupos de investigación de la Universidad de Cranfield. Los estudios más relevantes en este campo se resumen en la Tabla 4.1.

A pesar de que los estudios muestran el comportamiento del PCM frente a distintos parámetros de diseño (dimensiones, densidad de potencia, exceso de aire etc.), las condiciones de operación y las dimensiones de los quemadores estudiados

Tabla 4.1: Resumen de las publicaciones más relevantes en el campo del PCM

Año	Descripción	Ref.
2015	Caracterización de la estructura de llama <i>Micromix</i> mediante diferentes modelos de combustión en CFD (EDM, ED-FR y EDC). Se muestran medidas experimentales de NO _x en un prototipo de quemador considerando diámetros de la entrada de hidrógeno de $D_{H_2}=0,3$ mm con densidades de potencia de $ED=6,7$ MW / (m ² bar)	[18]
2015	Diseño y escalado de llamas <i>Micromix</i> para mayores diámetros de hidrógeno ($D_{H_2}=0,45$ mm y 1 mm). Estudio CFD del campo de flujo, estructura de llama y formación de NO _x térmicos. Se muestran medidas experimentales de NO _x y distribución de temperaturas en los segmentos de hidrógeno	[19]
2016	Estudio comparativo de los modelos de combustión EBU, FGM y EDC considerando hidrógeno y mezclas de gas de síntesis ricas en hidrógeno en un quemador <i>Micromix</i> con $D_{H_2}=1$ mm y $ED=7,85$ MW / (m ² bar).	[20]
2017	Estudio de la influencia de diferentes parámetros geométricos en la estructura de llama y formación de NO _x térmicos con mayores densidades de potencia. Cálculos CFD y validaciones experimentales de NO _x térmicos.	[21]
2017	Estudio de inyectores <i>Micromix</i> novedosos en configuraciones simples y en configuraciones array a través de modelos RANS ($k - \omega$ SST) y LES	[22]
2019	Evaluación del modelo de combustión FGM para la combustión <i>Micromix</i> empleando el modelo de turbulencia $k - \omega$ SST. Influencia del mecanismo de combustión empleado y estudio comparativo para la predicción de NO _x térmicos con el método de post-procesados clásico y el enfoque de la red de reactores.	[23]

4.3. Principio de combustión *Micromix*

están dirigidos para su uso en turbinas de gas estacionarias o aeronáuticas.

Para analizar la viabilidad de este concepto, es necesario conocer el PCM y sus características principales. El proceso de combustión se caracteriza por la combinación de varios fenómenos. Por un lado, se hace uso de flujos entrecruzados de hidrógeno y aire, inyectando el hidrógeno de forma perpendicular en el chorro de aire, como se muestra en la Figura 4.3. A su vez, también se hace uso del choque de flujos contra cuerpos para la generación de vórtices. Así, las placas de guiado de aire y los segmentos de hidrógeno actúan como obstáculos para el flujo de aire entrante, generando los vórtices internos y externos indicados [6].

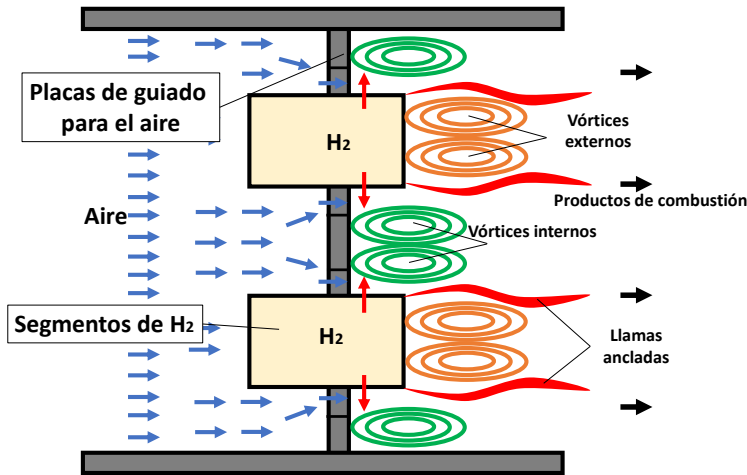


Figura 4.3: Esquema del principio de combustión *Micromix*

Siguiendo el diseño de quemadores multillama presentados en el capítulo anterior, la zona de reacción en los quemadores *Micromix* se separa en un conjunto de llamas de difusión turbulenta miniaturizadas, que se estabilizan entre los vórtices internos y externos como se indica en la Figura 4.3. Se puede observar que no existe una premezcla previa entre el hidrógeno y el aire, dando lugar a llamas de difusión. No obstante, hay que destacar que en la zona en la que el hidrógeno entra al chorro de aire existe una pequeña premezcla a lo largo de una distancia muy corta, de ahí su nombre *Micromix*. El conjunto de fenómenos físicos anteriormente citados consiguen mejorar la mezcla entre el hidrógeno y el aire, reduciendo los tiempos de residencia de las especies que participan en la formación de NO_x térmicos. Asimismo, la forma y el tamaño de los vórtices internos y externos condicionan la forma y el volumen de las llamas, ofreciendo llamas compactas y minimizando los

volúmenes de formación de NO_x ($\mathcal{V}_{\text{reac}}$). Los estudios bibliográficos presentados en la Tabla 4.1 han demostrado que todos estos fenómenos dependen de ciertos parámetros de diseño que condicionan la física de los chorros entrecruzados y la aerodinámica de la interacción del flujo de aire con los obstáculos, los cuales son necesarios para el dimensionamiento y escalado de los quemadores *Micromix*:

- Relación de bloqueo [-]: Representa la relación entre la longitud del obstáculo y la longitud de la sección de paso de aire [4, 6]. Se consideran dos relaciones de bloqueo (RB), uno para las placas de guiado de aire (PGA) y otro para los segmentos de hidrógeno (SH) respectivamente, como se muestra en la Figura 4.4 (b).

$$RB_{PGA} = \frac{d_{PGA}}{D_{PGA}} \quad (4.1)$$

$$RB_{SH} = \frac{d_{SH}}{D_{SH}} \quad (4.2)$$

- Relación del momento de flujo [-]: Define la relación entre los momentos del chorro de hidrógeno y aire, definiendo la longitud de penetración del primero en el chorro de aire [4].

$$r_m = \frac{\rho_{H_2} V_{H_2}^2}{\rho_{\text{Aire}} V_{\text{Aire}}^2} \quad (4.3)$$

- Longitud de penetración [mm]: Define la longitud en la que penetra el chorro de hidrógeno en el aire. Su valor depende del diámetro de entrada del chorro de hidrógeno d_{H_2} y la relación del momento de flujo [24].

$$y_{H_2} \sim d_{H_2} \sqrt{r_m} \quad (4.4)$$

- Longitud de penetración normalizada (LPN): Es la relación entre la longitud de penetración y_{H_2} y el diámetro de entrada de hidrógeno d_{H_2} . Se conocen valores de este parámetro para los que se ha demostrado el correcto funcionamiento del PCM. Como se describirá más adelante, este parámetro se utilizó para optimizar la sección de entrada de aire y el diámetro de hidrógeno para evitar la penetración del chorro de hidrógeno en el vórtice interno. Este será un parámetro de diseño a optimizar, ya que es necesario asegurar que la longitud de penetración normalizada evita la entrada del chorro de hidrógeno en el vórtice interno. Un mal diseño podría producir esta situación, lo que daría lugar a la combustión del hidrógeno en el vórtice interno y un incremento no

deseado de las temperaturas en las placas de guiado de aire así como un aumento en la formación de NO_x como se ha demostrado de forma numérica y experimental en el trabajo de N. Beckmann [25]. Así, se tratará de optimizar su valor, que se expresa como:

$$LPN = y_{H_2}/d_{H_2} \quad (4.5)$$

- Distancia entre llamas $s[mm]$: Es la distancia entre dos llamas consecutivas. Este valor está directamente relacionado con el tamaño del quemador y la densidad de potencia. Asimismo, la distancia s tendrá que asegurar la separación entre dos llamas consecutivas, evitando la formación de una sola llama cuando las distancias son demasiado pequeñas.
- Área de referencia $A_{ref}[mm^2]$: Es la superficie de la unidad mínima de llama como se indica en la Figura 4.4 (b). Sus dimensiones están directamente relacionadas con la distancia entre llamas s y las dimensiones de las placas de guiado de aire y segmentos de hidrógeno, y por lo tanto también con las relaciones de bloqueo:

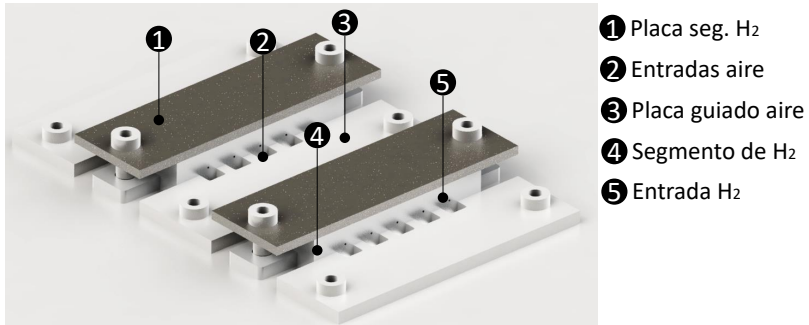
$$A_{ref} = \frac{s(d_{HS} + D_{PGA})}{2} \quad (4.6)$$

- Densidad de potencia $[kW/dm^2]$: Representa la potencia térmica por inyector respecto a un área de referencia (A_{ref} , como se indica en la Figura 4.4 (b)). Se utiliza para definir las dimensiones del quemador y el número de inyectores que se necesitan dependiendo de la potencia total que se desea en el quemador.

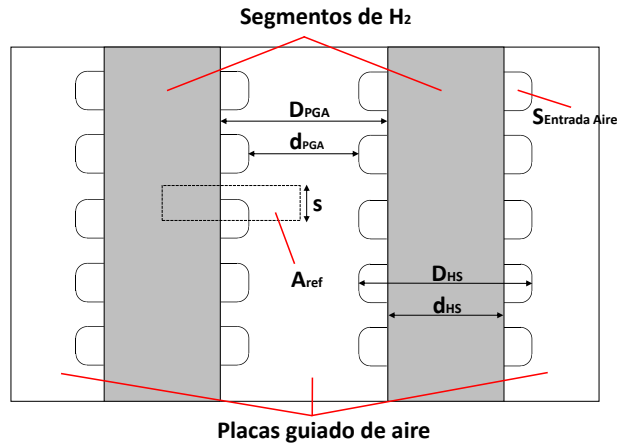
$$DP = \frac{P_{injec}}{A_{ref}} \quad (4.7)$$

En cuanto a las unidades de la densidad de potencia, cabe destacar que los estudios realizados para turbinas de gas industriales y aeronáuticas se llevaron a cabo en condiciones escaladas de presión, considerando la combustión a presiones atmosféricas. Esta aproximación se utilizó para realizar los estudios numéricos y experimentales iniciales del PCM [4, 25]. Tomando el rango de densidades de potencia entre 60-100 kW/dm² bar estudiados previamente, las turbinas de gas industriales reales con una presión de operación de $P_{ref} \sim 6,5$ bar [25] darían lugar a quemadores con densidades de potencia no-escaladas de 390-650 kW/dm². Por lo tanto, el hecho de que los estudios de

literatura relacionados con el PCM fuesen realizados considerando presiones atmosféricas favorece al presente estudio, ya que los quemadores de calderas domésticas e industriales trabajan a presiones atmosféricas [11, 12]. Por ello, de ahora en adelante la densidad de potencia, que en estudios anteriores se expresa en unidades de $[\text{kW}/\text{dm}^2 \text{ bar}]$ se expresará en $[\text{kW}/\text{dm}^2]$.



(a)



(b)

Figura 4.4: Modelo de geometría del quemador indicando las principales dimensiones (a) Diseño conceptual de un quemador *Micromix* (b) Vista superior del quemador *Micromix*

4.4. Objetivos y metodología

4.4.1. Objetivos y requerimientos de diseño

Como se ha mencionado previamente, en este capítulo se quiere demostrar la viabilidad del PCM para el diseño de un quemador doméstico (QD) y un quemador industrial (QI) para calderas.

Los estudios de la Tabla 4.1 consideran puntos de diseño con altos excesos de aire ($2 < \lambda < 4$) con altas densidades de potencia ($60\text{-}100 \text{ kW/dm}^2$), empleando aire precalentado en la entrada con temperaturas de $T_{aire}=560 \text{ K}$. Frente a estas condiciones aplicadas en turbinas de gas, las calderas domésticas trabajan con menores excesos de aire ($\lambda \simeq 1,3$) y menores densidades de potencia ($20\text{-}50 \text{ kW/dm}^2$). Además, no es habitual utilizar aire precalentado en este tipo de calderas.

De forma similar, los quemadores de calderas industriales trabajan con menores excesos de aire ($\lambda \simeq 1,3$) pero con mayores densidades de potencia en comparación con las calderas domésticas. En estos casos, dependiendo la aplicación final, puede emplearse aire precalentado para incrementar la eficiencia total de la caldera [11].

En consecuencia, en este capítulo se quiere adaptar el diseño de quemadores *Micromix* existentes ajustando las condiciones de operación. Por un lado, para el quemador doméstico se consideraron excesos de aire entre $1,6 < \lambda < 2$ y la densidad de potencia se fijó en 50 kW/dm^2 . En este caso no se consideró aire precalentado, fijando las temperaturas de entrada en 300 K . Por otro lado, para el quemador industrial también se consideraron excesos de aire entre $1,6 < \lambda < 2$. No obstante, en este caso la densidad de potencia fue incrementada hasta 140 kW/dm^2 , considerando aire precalentado a $T_{aire}=560 \text{ K}$.

En este sentido, hay que destacar que los valores de las densidades de potencia fueron definidos teniendo en cuenta las dimensiones y las potencias térmicas en quemadores convencionales de gas natural. Así, considerando una geometría cilíndrica en la cabeza del quemador (diámetro indicado en la Figura 4.5), la densidad de potencia seleccionada en el caso del quemador doméstico daría lugar a un quemador con una superficie de diámetro $D=90 \text{ mm}$ para un quemador doméstico de 30 kW , representando las dimensiones reales y potencias térmicas empleadas en quemadores de calderas domésticas [26, 27]. De forma similar, en el caso del quemador industrial la densidad de potencia seleccionada daría lugar a un quemador de 1MW con un diámetro de superficie de quemador de $D=300 \text{ mm}$, representando dimensiones habituales en quemadores industriales de gas natural [28].

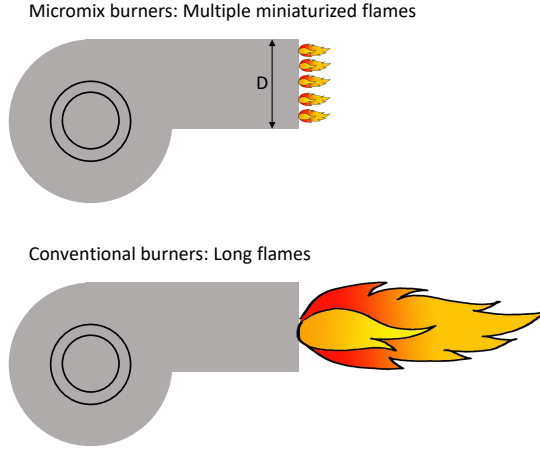


Figura 4.5: Longitudes de llama en quemadores convencionales de gas natural y quemadores *Micromix*

4.4.2. Metodología

Como punto de partida y con el objetivo de validar de forma cualitativa los resultados numéricos obtenidos mediante los modelos CFD seleccionados, se diseñó una geometría de quemador *Micromix* de referencia tomando como base el dimensionamiento y las condiciones de trabajo de un quemador presentado en estudios previos [19, 20, 22], cuyos resultados numéricos se conocen y han sido validados de forma experimental mediante medidas de NO_x . Las dimensiones principales y las condiciones de trabajo del caso de referencia se resumen en la Tabla 4.2. Cabe mencionar que conociendo las relaciones de bloqueo, las distancias d_{PGA} , D_{PGA} , d_{HS} y D_{HS} (que se desconocen) se fijaron en base a los resultados numéricos tras un breve proceso iterativo como se indica en la Figura 4.6 (a).

Así, se llevaron a cabo cálculos numéricos en el caso de referencia considerando las condiciones de contorno presentadas y empleando los modelos de turbulencia y combustión que se detallan más adelante. En esta primera etapa de validación, los resultados obtenidos se compararon con resultados numéricos y medidas experimentales de trabajos previos, para verificar la correcta definición de las distancias d_{PGA} , D_{PGA} , d_{HS} y D_{HS} en base a las relaciones de bloqueo que se conocen y poder valorar de forma cualitativa las características principales del PCM (distribución de temperaturas en los vórtices, velocidades, forma y tamaño de los vórtices) y de for-

Tabla 4.2: Dimensiones principales y condiciones de operación en el caso de referencia

Dimensiones geométricas	
D_{H_2} [mm]	1
RB_{PGA} [-]	0,60
RB_{SH} [-]	0,70
LPN [-]	1,4
Condiciones de operación	
DP [kW/dm^2]	78
λ [-]	2,5
T_{air} [K]	560

ma cuantitativa las emisiones de NO_x [19, 20]. Así, se pudo verificar si los modelos numéricos seleccionados fueron capaces de reproducir las principales características del flujo junto con el proceso de combustión. Hay que destacar que la selección de los modelos numéricos se realizó tomando como base los modelos empleados en los estudios presentados en la Tabla 4.1. La etapa inicial de la metodología de diseño se resume en la Figura 4.6 (a).

Tras esta primera etapa de validación en el caso de referencia y teniendo en cuenta las condiciones de operación previamente descritas para el quemador QD y el QI, se llevó a cabo el redimensionamiento o escalado de las geometrías de los quemadores en cada caso. Para ello, se utilizó la metodología de escalado de geometrías *Micromix* previamente utilizada y validada por H.H. Funke et al. y A.H. Ayed et al. [19, 24], junto con el proceso de modelización en CFD, que incluye la generación de la geometría, el mallado, el cálculo y el post-procesado. Como se ha podido observar, los principales parámetros físicos y geométricos que definen el comportamiento del PCM están interrelacionados. En este sentido, esta metodología de escalado permitió ajustar los parámetros geométricos del quemador (diámetros, relaciones de bloqueo, superficie de referencia, distancia entre llamas etc.) en función de las condiciones de operación (densidad de potencia, velocidades de entrada etc.). Por lo tanto, la metodología que se presenta a continuación, que cuenta con la metodología de escalado combinada con un proceso iterativo de cálculo en CFD y que se resume en la Figura 4.6, tiene como objetivo modificar los parámetros previamente descritos para asegurar que se mantienen las siguientes características del PCM:

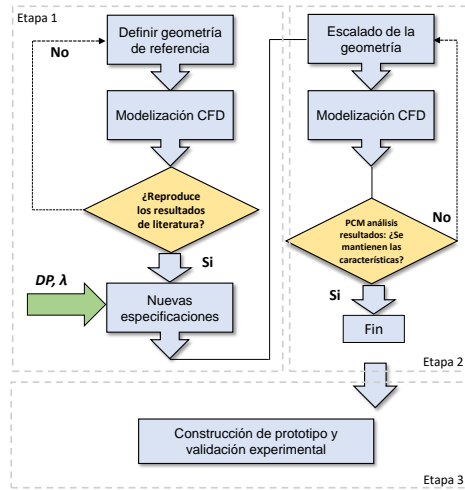
1. La relación del momento de flujo tiene que garantizar una longitud de penetración normalizada (LPN) que evite la entrada del hidrógeno en el vórtice interno. Se tomará como referencia la LPN del caso de referencia.
2. La distancia entre llamas s , las relaciones de bloqueo RB (y por ende el tamaño de los vórtices) tienen que asegurar que las llamas estén separadas y se evite la unión de estas en cualquier dirección.
3. La entrada de aire al vórtice externo tiene que permitir que las temperaturas de recirculación no sean demasiado altas y estén en el rango de temperaturas observado en resultados previos (1300-1800 K).

Como se ha indicado previamente, se definió un nuevo rango de exceso de aire con el objetivo de estudiar la influencia de la reducción de este parámetro en el diseño de quemadores para calderas. Así, considerando $\lambda=2, 1,8$ y $1,6$ en los casos de QD y QI, requiere una reducción del caudal másico de aire, lo cual implicaría un incremento de la relación del momento de flujo y por ende de la longitud de penetración. En consecuencia, durante el escalado de la geometría, los diámetros de entrada de hidrógeno y el área de las entradas de aire fueron modificados con el objetivo de optimizar la relación del momento de flujo y la longitud de penetración. Así, la longitud de penetración óptima se obtiene cuando no se observa ninguna reacción entre el hidrógeno y el aire (y por lo tanto no se observa un aumento significativo de la temperatura) en el interior del vórtice interno.

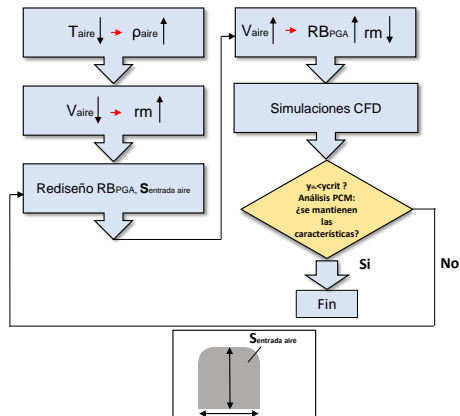
Para el escalado de cada uno de los casos (QI y QD), se tomaron los valores de referencia de la longitud de penetración normalizada y se modificó el diámetro de entrada del hidrógeno así como las dimensiones de la sección de entrada del aire hasta dar con la relación que asegure la no penetración del chorro de hidrógeno en el vórtice interno. Asimismo, para conseguir la densidad de potencia deseada, siguiendo la definición de la densidad de potencia de la ecuación (4.7), se modificó la potencia unitaria de cada llama en función del área de referencia (A_{ref}). Así, la interrelación de estos parámetros se resolvió de forma iterativa hasta dar con la solución deseada. En el apartado 4.9 se describen los cambios realizados en cada uno de los quemadores respecto a la geometría de referencia. El proceso iterativo llevado a cabo en esta segunda etapa se indica también en la Figura 4.6 (a).

Por su parte en el caso del QD, la temperatura del aire es menor que en el caso de referencia, incrementando así la relación de momento de flujo como se indica en la Figura 4.6 (b). Así pues, en el caso del QD la dificultad para el escalado

4.4. Objetivos y metodología



(a)



(b)

Figura 4.6: Metodología para el escalado de las geometrías del quemador doméstico e industrial para las nuevas condiciones de operación definidas en cada caso.

de la geometría fue mayor que en el QI siendo necesario reducir la sección de entrada de aire para acelerar el flujo. No obstante, esta reducción puede suponer un incremento de la relación de bloqueo de las placas de guiado de aire (BR_{PGA}), cambiando así las características de los vórtices. Por lo tanto, este proceso será también iterativo en el caso del QD. Tras finalizar este proceso de validación inicial

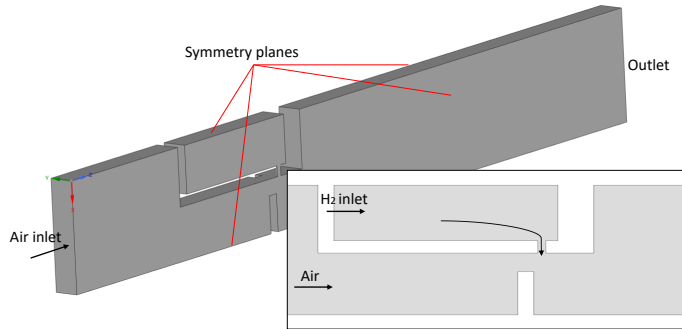
y escalado de geometrías, se llevó a cabo una última etapa de validación sobre un prototipo doméstico. Para ello, se construyó un prototipo experimental basándose en la geometría obtenida para el caso de QD, donde se midieron las emisiones de NO_x en las condiciones definidas para el QD y se compararon con los resultados numéricos. Las características constructivas de este prototipo se presentan en el apartado 4.7.

4.5. Geometría y dominio computacional

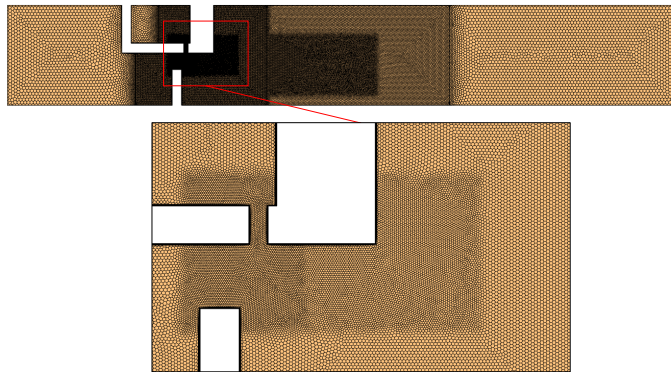
A continuación se presentan las principales características del dominio computacional y de la malla en la geometría de referencia. Cabe mencionar que las mallas de los casos QD y QI se definieron en base a la malla del caso de referencia. Así, el escalado de las respectivos mallas fue llevado a cabo de forma automatizada, ajustando las características del mallado a las variaciones de geometría en cada caso.

La Figura 4.7 (a) muestra el dominio 3D correspondiente a la unidad mínima de simulación, que está definida como el área de referencia indicada en la Figura 4.4 (b). Como se observa, el dominio fue dividido por planos de simetría en las direcciones longitudinal y transversal, asumiendo un comportamiento simétrico del flujo y de los vórtices. Así, la geometría está limitada entre el plano de simetría que corta el orificio de entrada de hidrógeno y la sección de entrada de aire y el plano de simetría del espacio libre entre dos llamas consecutivas. Si bien en la realidad el flujo turbulento podría no ser del todo simétrico, los trabajos presentados en la Tabla 4.1 han demostrado que el uso de estas condiciones de simetría fueron suficientes para representar las características principales del PCM y predecir de forma cuantitativa las emisiones de NO_x térmicos. Asimismo, los estudios de la Tabla 4.1 también demostraron que las condiciones de pared adiabática fueron suficientes para estudiar el comportamiento del PCM y predecir las emisiones de NO_x térmicos de forma cuantitativa [20, 21, 24], por lo que se siguió el mismo enfoque.

En cuanto a la malla, cabe mencionar que el análisis de independencia de malla llevado a cabo por RB Abdallah [22] con tetraedros, indica que la independencia de malla se obtuvo con 1.800.000 celdas considerando una geometría similar a la de referencia, con un tamaño de elemento mínimo de 0,2 mm en la zona de mezcla mostrada en la vista detallada de la Figura 4.7 (b) y un tamaño máximo de 1 mm a



(a)



(b)

Figura 4.7: Unidad mínima de simulación: (a) Dominio físico indicando las condiciones de contorno más relevantes (b) Vista general de la malla en uno de los planos de simetría y vista detallada de los elementos en la zona de mezclado hidrógeno-aire

la salida del dominio. Por su parte, los estudios de independencia de malla llevados a cabo en los estudios de la Universidad de Ciencias Aplicadas de Aachen emplearon elementos poliédricos, reduciendo el número de elementos y ofreciendo una buena resolución de malla, reduciendo de esta forma el coste computacional total [29]. En los estudios presentados en geometrías similares a las de la geometría de referencia, se consideró la independencia de malla desde 500.000 hasta 1.300.000 elementos dependiendo del caso de estudio [18, 19, 30]. Teniendo en cuenta estos resultados y los beneficios que ofrece el uso de elementos poliédricos, la discretización del dominio se realizó considerando este tipo de elementos como se muestra en la

Figura 4.7 (b).

Asimismo, fue necesario refinar la malla en las regiones cercanas a la pared para resolver las características del flujo en estas zonas donde las fuerzas viscosas predominan frente a las inerciales. Esta zona denominada sub-capa viscosa, se caracteriza por la distancia adimensional $y^+ = u_\tau y / \nu$, donde u_τ es la velocidad de fricción definida en función del esfuerzo cortante de la pared [31]. Para poder resolver la subcapa viscosa mediante las ecuaciones consideradas, es necesario obtener valores $y^+ \simeq 1$ por lo que se ajustó la altura del centro de la primera celda y hasta cumplir este criterio en las paredes. En la vista detallada de la Figura 4.7 (b) se puede apreciar una línea negra gruesa en las paredes de la geometría debido al conjunto de diferentes capas de menor tamaño en estas zonas. En la vista general también se observa el cambio de tamaño de elementos por cada zona, para lo que se utilizaron cuerpos de influencia.

Para asegurar la independencia de la solución respecto a la malla empleada, se llevó a cabo un estudio de independencia de malla considerando varios tamaños de malla. La Tabla 4.3 muestra que la malla número 2 con 1.200.000 elementos resultó ser válida al presentar pequeñas variaciones en los parámetros principales así como en los resultados cualitativos (distribución de temperaturas y velocidades) y cuantitativos (concentraciones de NO_x) respecto a una malla más fina de 2.400.000 elementos (malla 1), ofreciendo un menor coste computacional. Las variaciones en la malla número 3 fueron mayores debido al mayor tamaño de los elementos en las zonas más críticas (entrada de hidrógeno y aire y zona de mezcla). De forma adicional, para asegurar la independencia de malla se llevó a cabo un refinamiento gradual a lo largo del proceso de cálculo en base a diferentes criterios (gradientes de temperatura, gradientes de velocidad etc.).

Tabla 4.3: T_{max} , concentraciones de NO_x y porcentajes de variación para las mallas consideradas.

Malla	Elementos	T_{max} [K]	T_{max} var. [%]	NO_x [ppm]	NO_x var. [%]
Malla 1	2.400.000	2.311	-	4,56	-
Malla 2	1.200.000	2.310	0,043	4,50	0,013
Malla 3	600.000	2.298	0,52	3,43	23,77

4.6. Modelización CFD

Debido a su carácter turbulento, las simulaciones del PCM se llevaron a cabo resolviendo las ecuaciones de Navier-Stokes promediadas, siguiendo el enfoque RANS presentado en el apartado 2.3.2 junto con las ecuaciones de transporte de escalares necesarias en el modelo de combustión FGM descrito en el apartado 2.3.3. Asimismo, se emplearon los esquemas presentados en el apartado 2.5. Cabe mencionar que debido al tratamiento adiabático de las paredes, se utilizó el modelo FGM adiabático, por lo que no se tuvieron en cuenta las pérdidas de calor en el proceso de cálculo de las *flamelets*, evitando también el transporte de la entalpía en el cálculo CFD.

El PCM presenta diversas zonas con diferentes niveles de turbulencia, siendo estos mayores en la zona de mezcla del hidrógeno y el aire y menores en las zonas de recirculación de los vórtices así como a la salida del dominio. En este sentido, siguiendo el enfoque empleado en simulaciones realizadas en la Universidad de Cranfield [22, 23, 32], se utilizó el modelo de cierre de dos ecuaciones $k - \omega$ SST de Menter, previamente descrito en el apartado 2.3.2. Como se mencionó, este modelo es capaz de capturar esta variabilidad de escalas, pudiendo también resolver las ecuaciones en la sub-capa viscosa, donde los modelos $k - \epsilon$ pueden resultar inestables cuando k tiende a cero cerca de las paredes.

Finalmente, como se describe en el apartado 2.4, el cálculo de la formación de NO_x térmicos se llevo a cabo en una etapa de post-procesado una vez finalizado el cálculo principal.

4.7. Sistema experimental

Como se ha mencionado en el apartado 4.4.2, una vez finalizado el proceso de escalado de las geometrías para el QD y QI, se llevo a cabo una última etapa de validación con medidas experimentales. Para ello, se construyó un prototipo experimental basado en las dimensiones obtenidas en el QD, que se muestra en la Figura 4.8. Si bien la primera etapa de la metodología contó con una validación basada en resultados previos de la literatura, esta etapa de validación se basó en medidas tomadas en un quemador real, permitiendo validar el proceso de escalado de geometrías presentado en la Figura 4.6. Para esta validación se tomaron medidas de las concentraciones de NO_x mediante un analizador de gases.

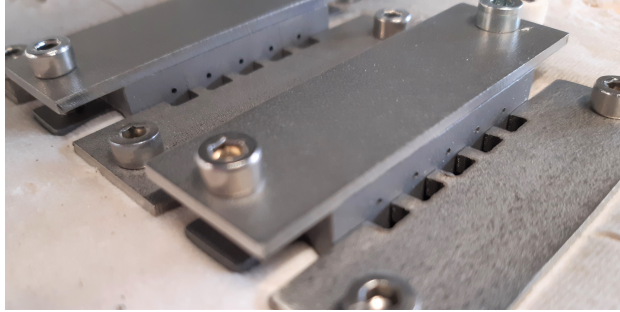


Figura 4.8: Prototipo del quemador experimental empleado para la validación

Como se puede observar en la Figura 4.8, el prototipo está formado por 20 orificios de entrada de hidrógeno organizados en dos segmentos y construidos mediante fabricación aditiva, empleando Inconel 718. Tomando el diseño presentado en trabajos previos [4, 33], los segmentos se cubrieron con dos placas (placas del segmento de hidrógeno (1) indicadas en la Figura 4.4 (a)) de una aleación especial níquel-cromo-acero-molibdeno capaces de resistir alta temperatura. Por su parte, las tres placas de guiado de aire (3) son de acero inoxidable AISI 316 debido a las menores temperaturas esperadas en los vórtices internos. Se puede ver también que tanto las placas de guiado de aire como los segmentos de hidrógeno y sus respectivas placas fueron atornilladas a una placa de acero cubierta por una manta de fibra cerámica refractaria de aluminia-silica.

En la Figura 4.9 (a) y (b) se muestran los componentes principales del montaje experimental. En la Figura 4.8 se puede ver que el quemador se alojó en una cámara de combustión de dimensiones 140x160 mm con dos ventanas de cuarzo para controlar y visualizar el encendido y el proceso de combustión. Asimismo, las paredes de la cámara fueron cubiertas por placas aislantes de 20 mm fabricadas a partir de lana de silicato alcalino terroso Insulfrax para evitar las pérdidas de calor por las paredes hacia el exterior.

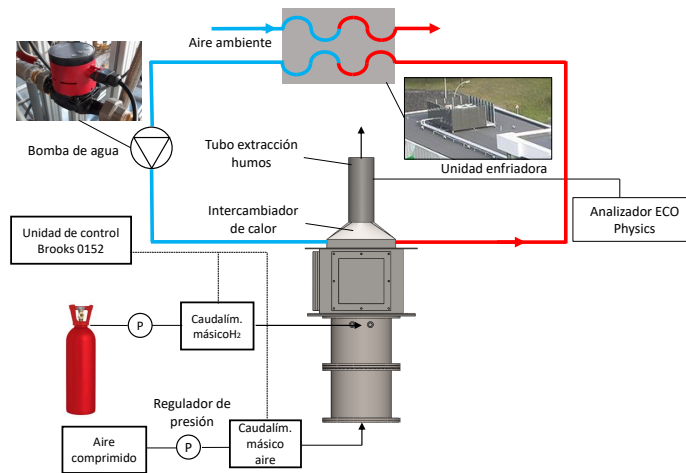
Siguiendo el esquema y los componentes de la Figura 4.9, el hidrógeno proviene de una botella presurizada, mientras que el aire se toma de una línea de aire comprimido. El primero entra a cada uno de los segmentos de hidrógeno (3) por medio de dos tubos independientes, mientras que el segundo se introduce por la parte inferior del sistema (1). El aire pasa por un cuerpo cilíndrico (2) contando también con una chapa homogeneizadora para asegurar un flujo uniforme en la dirección deseada. Los caudales máxicos se controlan mediante una unidad de control digital

4.7. Sistema experimental



- 1-Entrada de aire
- 2-Cuerpo cilíndrico aire
- 3-Entradas de hidrógeno
- 4-Cámara de combustión
- 5-Entrada/salida agua del intercambiador
- 6-Intercambiador de calor plano
- 7-Tubo de extracción de humos

(a)



(b)

Figura 4.9: Esquema del montaje experimental indicando los componentes principales del sistema. (a) Vista del montaje real en el laboratorio de Ikerlan (b) Vista esquemática

Brooks 0152, conectada a dos caudalímetros másicos con rangos de caudal de 0-200 Nl/min y 0-900 Nl/min para el hidrógeno y el aire respectivamente.

Se puede observar que la parte superior de la cámara de combustión (4) cuenta con un intercambiador de calor plano (6), el cual enfría los productos de combustión antes de pasar a la chimenea (7). El circuito de refrigeración que se muestra en la 4.9 (b), está compuesto por una bomba de agua y una unidad enfriadora 30RBP0220 automatizada, permitiendo fijar el caudal de agua del circuito y controlar las temperaturas de entrada y salida del intercambiador.

Las medidas de las concentraciones de NO_x se tomaron en la chimenea mediante el analizador de gases ECO Physics CLD NO_x con una precisión de medida de $\pm 0,1$ ppm. La sonda de humos se colocó a una distancia de 1 m respecto a la salida del intercambiador.

Tabla 4.4: Precisión y rangos de la instrumentación empleada

Instrumento	Precisión	Rango
Caudalímetro másico de H_2	$\pm 1,5 \%$	0-200 Nl/min
Caudalímetro másico de Aire	$\pm 1,5 \%$	0-900 Nl/min
ECO Physics CLD	$\pm 0,1$ ppm	0-200 ppm

4.8. Validación

Como se ha mencionado previamente, el proceso de validación se dividió en dos etapas. En la primera etapa se simuló la geometría de referencia con sus condiciones de contorno ($\lambda=2,5$, $T_{air}=560$ K y $DP=78$ kW/dm²) con el objetivo de verificar la correcta selección de las distancias que definen las relaciones de bloqueo y evaluar de forma cualitativa los resultados numéricos utilizando resultados disponibles en la literatura. En la segunda etapa de validación y tras finalizar el proceso de escalado de las geometrías, se fabricó un prototipo de quemador tomando como base las dimensiones del quemador doméstico. En este prototipo se tomaron medidas de las concentraciones de NO_x para los distintos excesos de aire ($\lambda = 1,6, 1,8$ y 2) y las condiciones de trabajo previamente descritas (50 kW/dm², $T_{air}=300$ K).

4.8.1. Validación con base en literatura

La Figura 4.10 muestra el contorno de temperaturas así como las líneas de corriente de la velocidad. Se puede observar que la forma y el tamaño de los vórtices corresponde a la mostrada en el trabajo previo de Funke et al.[20]. Por su parte, la forma de la llama y la distribución de la temperatura en los vórtices alcanza valores muy similares a los mostrados en el trabajo original de Funke et al..

Estos resultados cualitativos indican un buen diseño de las distancias d_{PGA} , D_{PGA} , d_{HS} y D_{HS} que definen las relaciones de bloqueo así como las dimensiones de la sección de las entradas de aire, evitando la penetración del chorro de hidrógeno en el del aire (lo cual incrementaría las temperaturas en el vórtice interno). Como se ha indicado en la Tabla 4.2, la LPN de referencia fue de 1,4. Asimismo, las temperaturas en el vórtice externo y la longitud aproximada de la llama basada en los contornos de temperatura fueron similares a los resultados mostrados en el trabajo previo de Funke et al. como se indica en la Tabla 4.5. Las diferencias en la temperatura máxima podrían haber sido causadas por pequeñas diferencias en la geometría y en los modelos empleados.

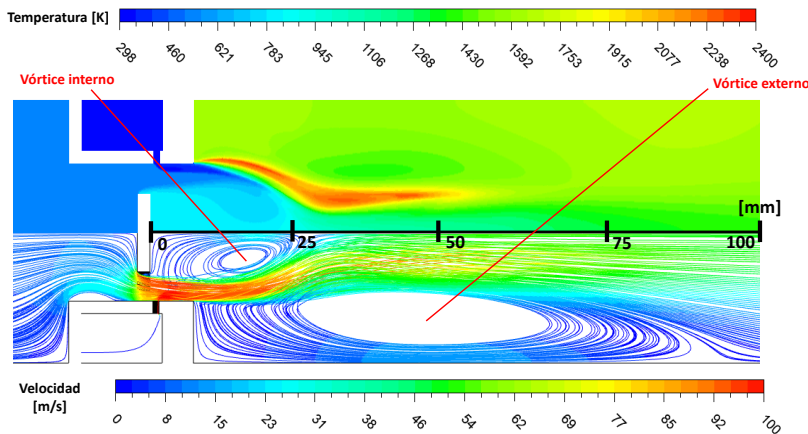


Figura 4.10: Contornos de temperatura y líneas de corriente de la velocidad en el caso de referencia

Las diferencias en la geometría hacen referencia a dimensiones similares pero no idénticas de la sección de la puerta de entrada, pudiendo causar diferencias en la forma y el comportamiento de los vórtices. Por su parte, las diferencias en los modelos empleados pueden atribuirse al uso de un mecanismo de reacción diferente

Tabla 4.5: Comparación de los resultados actuales con los resultados de [20]

Caso	Turbulencia	T_{\max} [K]	Longitud [mm]	NO_x [ppm]
Experimental [20]	-	-	-	3
Presentes res.	$k - \omega$ SST	2.310	50	3,2
Presentes res.	$k - \epsilon$ Realiz	2.177	60	1,8
FGM model [20]	$k - \epsilon$ Realiz	2.153	60	1,6
EDC model [20]	$k - \epsilon$ Realiz	2.204	50	2,5

y a la definición de la variable de progreso y su término fuente.

Además, en estas simulaciones se consideró el modelo $k - \omega$ SST siguiendo el mismo enfoque que en otros estudios recientes llevados a cabo en la Universidad de Cranfield. No obstante, Funke et al. consideraron el modelo $k - \epsilon$ Realizable, lo cual pudo causar diferencias entre ambos casos. Para comparar los resultados obtenidos mediante estos dos modelos de turbulencia, se llevo a cabo una simulación más con el modelo $k - \epsilon$ Realizable, obteniendo valores más cercanos a los que se observan en los resultados numéricos del trabajo de Funke et al.. Cabe mencionar que en el trabajo de Abdallah [22], donde se emplearon condiciones de contorno similares (menor DP pero con $D_{H_2}=1$ mm y $\lambda = 2,5$) con los modelos FGM y $k - \omega$ SST se obtuvo una temperatura máxima de 2.352 K, mostrando un valor más cercano al que se obtuvo en el caso de referencia (2.310 K).

En la Tabla 4.5 se puede ver que los resultados del caso de referencia fueron capaces de predecir los valores experimentales de los NO_x que se muestran en el trabajo de Funke et al.. Tras esta validación del proceso de modelización principalmente cualitativa pero con una comparativa cuantitativa en cuanto a los valores de temperatura máxima, longitud de llama y formación de NO_x , se puede decir que el modelo $k - \omega$ SST fue capaz de predecir un mayor valor de la temperatura máxima, implicando una mayor formación de NO_x y con valores muy similares a las medidas experimentales mostradas en el trabajo de Funke et al.

Si bien esta validación frente a resultados numéricos previos y medidas de NO_x experimentales fue válida para verificar la fiabilidad del proceso de modelización (geometría, malla, modelos empleados y post-procesado) empleado para la simulación del PCM, se decidió realizar una segunda etapa de validación en un prototipo de quemador real.

4.8.2. Validación experimental

Como se ha indicado previamente, la validación experimental se llevó a cabo tras la etapa de escalado de geometrías. Así, se tomó el diseño para el quemador doméstico y se construyó el prototipo de quemador presentado en el apartado 4.7. Para ello, se tomaron medidas de las concentraciones de NO_x trabajando a 50 kW/dm^2 y $\lambda = 2, 1,8$ y $1,6$ respectivamente. Las medidas fueron tomadas partiendo del exceso de aire más bajo e incrementándolo hasta $\lambda = 2$, manteniendo las medidas durante un tiempo razonable en cada punto hasta asegurar un estado estacionario del sistema. Siguiendo el mismo enfoque que en el capítulo 3, las medidas de NO_x se corrigieron al 0% de O_2 .



(a)



(b)

Figura 4.11: Pruebas de encendido. (a) Sin cámara de combustión (quemador abierto al ambiente) (b) Con la cámara de combustión

Para verificar el funcionamiento del sistema de encendido y la correcta distribución del hidrógeno y del aire en sus respectivos circuitos de entrada, las pruebas de encendido se realizaron en dos pasos. Como se muestra en la Figura 4.11 (a), la primera prueba de encendido fue llevada a cabo sin la cámara de combustión. En la imagen se pueden ver los electrodos de encendido, que fueron colocados en uno de los laterales para evitar el contacto con las llamas centrales. Asimismo, debido a que las llamas de hidrógeno no se pueden identificar a simple vista por el rango infrarrojo en el que emiten, se colocaron dos filamentos de carburo de silicio (diámetro 0,1 mm) a dos alturas diferentes. De esta forma, cuando la llama entra en contacto con los filamentos, estos se calientan emitiendo radiación detectable para confirmar la presencia de llamas y verificar el encendido. En la Figura 4.11 (a) se puede observar que las llamas se encendieron correctamente mostrando cuatro zonas con mayor luminosidad debido a las mayores temperaturas de llama. Si bien en esta imagen los filamentos están colocados en la fila central de llamas, se realizó un barrido a lo largo de todas las filas para asegurar el encendido.

Siguiendo el mismo procedimiento, este paso se repitió con el quemador confinado dentro de la cámara. Debido al mayor impacto térmico del caso confinado, los filamentos tienden a romperse a partir de un punto. Para asegurar la presencia de los filamentos a lo largo del ensayo de encendido, fue necesario añadir un filamento más como se observa en la Figura 4.11 (b).

Tabla 4.6: Comparación de las medidas experimentales de NO_x [ppm] corregidas al 0% de O_2 a $DP=50 \text{ kW/dm}^2$ y los resultados numéricos en el caso de referencia.

	$\lambda = 2$	$\lambda = 1,8$	$\lambda = 1,6$
Experimental	15,2	23,7	38,9
CFD	15,7	23,1	35,4
err. rel (%)	3,3	2,5	8,9

Tras las pruebas de encendido, se retiraron los filamentos y se llevaron a cabo las medidas de NO_x en el tubo de extracción de humos. La Tabla 4.6 muestra que los cálculos CFD fueron capaces de predecir los valores experimentales de NO_x bajo las diferentes condiciones de exceso de aire indicadas. Por lo cual, se pudo concluir que las condiciones de contorno que se definieron así como los modelos de combustión y turbulencia empleados fueron suficientes para predecir la formación de NO_x en estos casos.

Cabe destacar que los resultados de la Tabla 4.6 reforzaron las conclusiones

del capítulo 3 ya que demostraron el impacto positivo del incremento de λ en la reducción de NO_x .

4.9. Escalado de geometrías

En este apartado se presentan los resultados del proceso de escalado de las geometrías y los cambios realizados en cada uno de los quemadores (QD y QI) respecto a la geometría de referencia. Para mostrar los cambios, se han incluido las vistas superiores de una sección del quemador con dos llamas enfrentadas de la Figura 4.4.

4.9.1. Quemador industrial

En el caso del quemador industrial, el escalado de la geometría dio como resultado un incremento en el diámetro de hidrógeno hasta $D_{H_2}=1,4$ mm, incrementando la potencia de entrada (y el caudal másico de H_2) por cada inyector en un 214% respecto al caso de referencia debido a la necesidad de mantener la velocidad. Estos cambios llevaron también a incrementar el área de referencia (A_{ref}) en un 20% manteniendo las relaciones de bloqueo constantes. Así, se pudo obtener la densidad de potencia deseada de 140 kW/dm^2 .

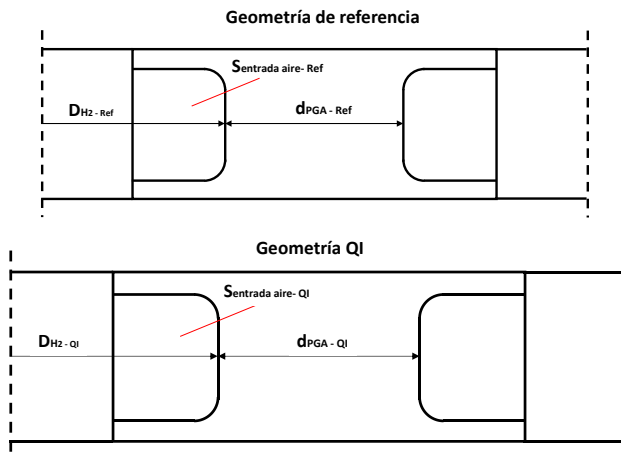


Figura 4.12: Escalado de la geometría en el caso del QI mostrando las diferencias respecto al caso de referencia

Asimismo, el área de la sección de entrada del aire se incrementó en un 187 % respecto al caso de referencia, estando directamente relacionado con el incremento del área de referencia (A_{ref}) previamente mencionada. De esta forma se consiguió el objetivo de mantener una longitud de penetración normalizada alrededor de 1,4 (LPN del caso de referencia) con valores de 1,2, 1,3 y 1,5 para los excesos de aire de $\lambda=2$, 1,8 y 1,6 respectivamente.

4.9.2. Quemador doméstico

En este caso el objetivo era reducir la densidad de potencia hasta 50 kW/dm^2 trabajando a $\lambda=2$, 1,8 y 1,6. Para obtener esta DP, se decidió mantener A_{ref} constante y reducir la potencia térmica de cada llama en un 35 % respecto al caso de referencia, pudiendo llegar así a 50 kW/dm^2 . Con la reducción del caudal másico de hidrógeno, fue necesario reducir el diámetro de la entrada de hidrógeno a 0,9 mm para mantener las velocidades en valores similares a los obtenidos en el caso de referencia. Si bien las altas velocidades en la entrada de hidrógeno podrían llevar a la penetración del chorro en el aire y en el vórtice interno, se observó que las bajas velocidades de entrada de hidrógeno empeoraban el proceso de combustión, debido a la peor mezcla con el aire (el aire arrastra todo el hidrógeno) y produciendo configuraciones de llama no deseadas.

Como se ha mencionado en la descripción de la metodología, en el caso del QD no se consideró aire precalentado, reduciendo así de la velocidad en las entradas de aire y por ende, mayores relaciones de momento de flujo como se muestra en la Figura 4.6 (b). Como resultado, fue necesario reducir la sección de la entrada de aire en un 47 % para asegurar una LPN suficiente para evitar la penetración del chorro de hidrógeno. Así, se obtuvieron valores de LPN de 1,7, 1,9 y 2,2 para $\lambda=2$, 1,8 y 1,6 respectivamente, siendo mayores debido a las menores velocidades del aire no-precalentado. No obstante, los resultados numéricos que se muestran a continuación demostraron que a pesar del incremento del LPN respecto a la geometría de referencia, las dimensiones seleccionadas evitaban la penetración del chorro de hidrógeno.

En la Figura 4.13 se puede observar que se mantuvo la anchura de la geometría de referencia mientras que se redujo el ancho de la sección de entrada del aire, dando lugar a una mayor distancia entre llamas s . Asimismo, también se observa una reducción en la altura de la sección del aire, necesaria para asegurar una mayor velocidad de aire y valores de LPN relativamente bajos. Esto implicó la variación de

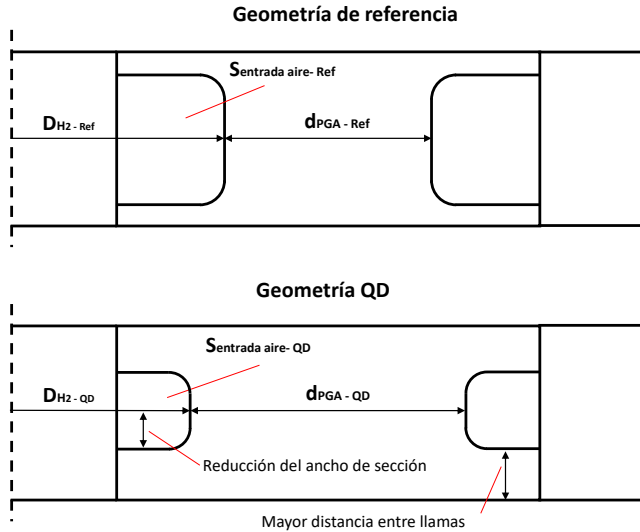


Figura 4.13: Escalado de la geometría en el caso del QD mostrando las diferencias respecto al caso de referencia

las relaciones de bloqueo respecto a la geometría de referencia, incrementándolos en un 8%. A pesar de este cambio, no se detectó ningún impacto negativo en las características del PCM como se describirá en los resultados numéricos que se muestran a continuación.

4.10. Resultados numéricos

4.10.1. Quemador industrial

Las Figuras 4.14 y 4.16 muestran los contornos de temperatura y las líneas de corriente de la velocidad respectivamente. De las figuras se puede deducir que de forma cualitativa, los resultados son similares a los obtenidos en el caso de referencia así como en trabajos previos en cuanto a la distribución de temperaturas en los vórtices y la forma de estos, indicando que se mantienen las características del PCM.

La distribución de temperaturas para todos los excesos de aire muestran el paso de aire entre llamas enfrentadas como se puede ver en la Figura 4.14, confirmando que a priori no existiría contacto entre las llamas enfrentadas y se evitaría la

formación de una única llama en esta dirección. De forma similar, para analizar la interacción entre llamas consecutivas, la Figura 4.15 muestra la vista superior en las secciones de corte indicadas en la Figura 4.14. Se puede observar que la distancia entre llamas consecutivas s fue suficiente para asegurar el flujo de aire entre ellas, evitando el contacto entre llamas en esta dirección. Cabe mencionar que la Figura 4.15 hace referencia al caso de $\lambda = 1,6$, siendo este el más crítico debido al menor caudal másico de aire.

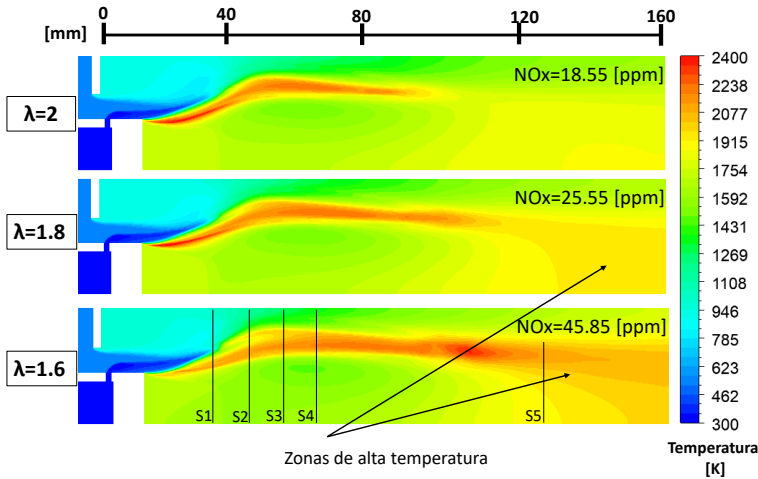


Figura 4.14: Contornos de temperatura en el caso de *QI*

En el caso de $\lambda = 1,6$ los contornos de temperatura muestran una pequeña separación hacia el vórtice interno a la altura de la sección S2. En los contornos de la fracciones másicas de los radicales *OH* de la Figura 4.17, se aprecia este fenómeno, que para $\lambda = 1,6$ presentan una forma de herradura a lo largo de las diferentes secciones. Este fenómeno que aparece al reducir el exceso de aire se debe al incremento de la longitud de penetración normalizada (LPN), dando lugar a reacciones en las primeras capas del vórtice interno. Esto indica que para valores más altos de LPN la zona de reacción podría descontrolarse, produciendo reacciones en el interior del vórtice y calentando los paneles de aire. Como se verá en el caso del *QD*, la LPN se pudo incrementar hasta 2.2 evitando la combustión en el interior del vórtice interno.

Por su parte, las líneas de corriente de la velocidad de la Figura 4.16 muestran la variación de la longitud y anchura de los vórtices con formas elípticas para los diferentes excesos de aire. La mayor diferencia se manifiesta en las longitudes de los

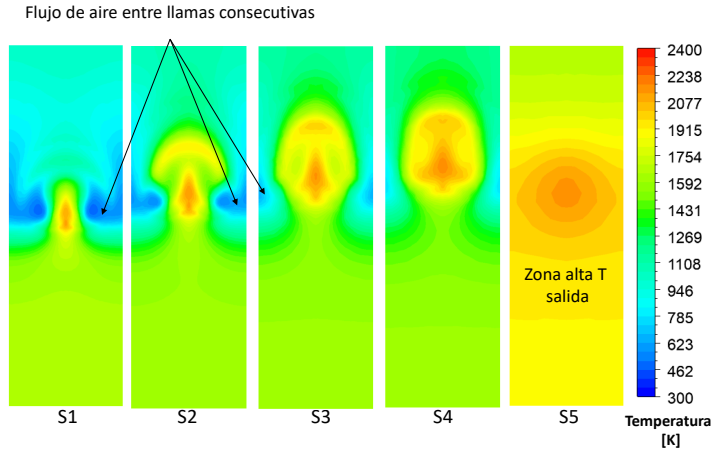


Figura 4.15: Contornos de temperatura en varias secciones de corte para $\lambda = 1,6$ en el QI

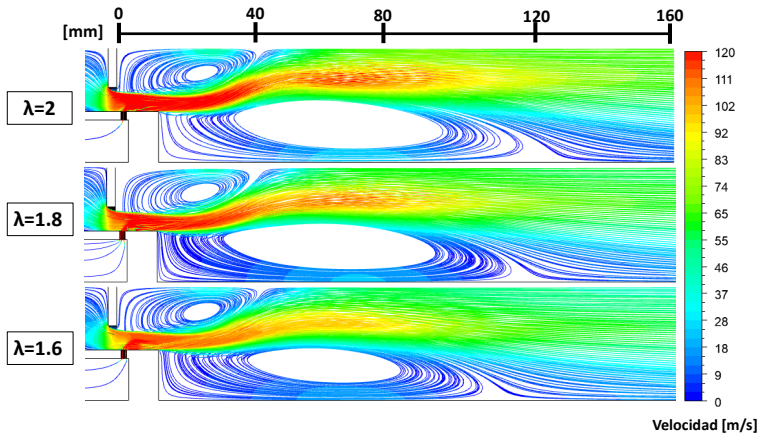


Figura 4.16: Líneas de corriente y magnitud de la velocidad en el caso del QI

vórtices externos, que disminuyen con la reducción de λ debido al menor momento del flujo de aire que choca contra los segmentos y las placas.

En cuanto a la formación de NO_x , la Figura 4.14 muestra las concentraciones medidas a la salida del dominio y corregidas al 0% de O_2 en base seca. Asimismo, en esta misma figura se observa que la longitud de la llama aumenta con la reducción de λ , dando lugar a una zona de altas temperaturas cercana a la zona de salida. La aparición de estas zonas se debe a la peor mezcla entre el hidrógeno y el aire en

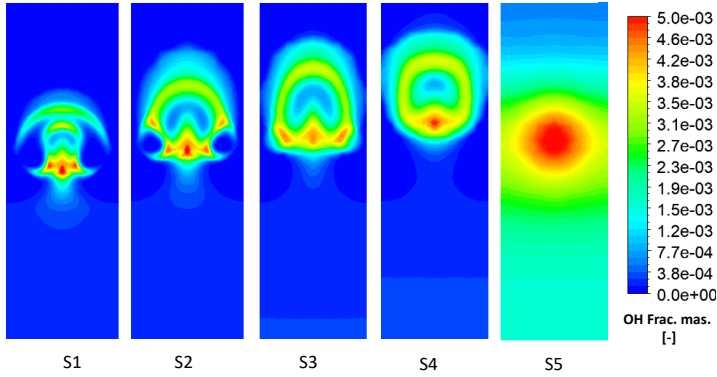


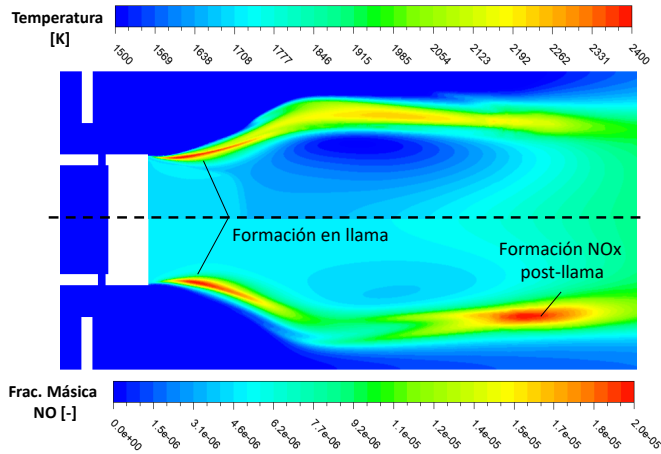
Figura 4.17: Fracciones másicas de los OH en las diferentes secciones del caso QI

la zona de mezcla y a una menor dilución de los productos a la salida, alargando así la zona de reacción entre el hidrógeno y el aire.

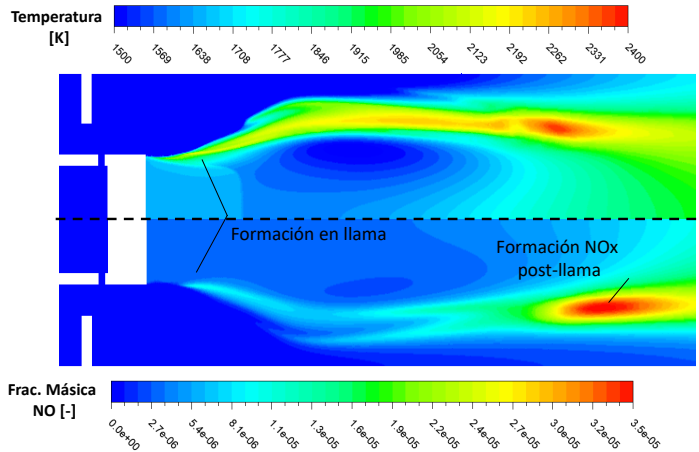
En consecuencia, como se muestra en las Figuras 4.18 (a) y (b), la formación de NO_x térmicos se divide en dos zonas diferentes. Por una parte, a la salida de los chorros, la llama se forma y se ancla encima de la placa superior de hidrógeno, quedando confinada entre los dos vórtices. Por otro lado, también se crea una zona de reacción en la parte superior, llamada zona de post-llama. Se puede ver que para el caso de $\lambda = 1,8$, la formación de NO_x tiene lugar en ambas zonas, por lo que las concentraciones totales a la salida aumentan respecto al caso de $\lambda = 2$. En el caso de $\lambda = 1,6$, la formación de NO_x se da solamente en la zona de post llama, aumentando aún más las concentraciones de NO_x a la salida.

A pesar de la aparición de estas zonas de formación de NO_x , se constató que los valores numéricos obtenidos se mantuvieron en un rango aceptable de emisiones (18-50 ppm). Para poder comparar estos valores con la normativa vigente establecida en el Real Decreto 1042/2017 sobre la limitación de las emisiones a la atmósfera de determinados agentes contaminantes procedentes de las instalaciones de combustión medianas, fue necesario expresar los resultados en unidades de mg/Nm^3 . Se tomó el límite de $250 [\text{mg}/\text{Nm}^3]$ establecido para combustibles gaseosos distintos del gas natural.

Los resultados para $\lambda = 2, 1,8$ y $1,6$ fueron de 38, 52 y $94 \text{ mg}/\text{Nm}^3$ respectivamente. Por lo tanto, a pesar de que los valores obtenidos están por debajo de la normativa, sería preferible trabajar a $\lambda = 2$ y $1,8$ para evitar el incremento que se observa.



(a)



(b)

Figura 4.18: Zonas de formación de NO_x térmicos en el caso del QI. (a) $\lambda=1,8$ y (b) $\lambda=1,6$

En general, los resultados obtenidos en el QI mostraron que el PCM puede ser una buena alternativa para el diseño de quemadores industriales, ya que se mantuvieron las principales características del PCI con valores de NO_x aceptables y llamas compactas con longitudes entre 90-140 mm.

4.10.2. Quemador doméstico

Siguiendo la misma tendencia observada en el caso de referencia y en el caso del quemador industrial, la Figura 4.19 muestra una distribución de temperaturas acorde con las distribuciones esperadas, dando lugar a bajas temperaturas en el vórtice interno, altas temperaturas en la zona de la llama y temperaturas en el rango aproximado de 1.400-1.700 K en el vórtice externo. Las temperaturas en el vórtice externo son ligeramente mayores que en el caso del QI, principalmente en las zonas cercanas a la placa superior del segmento de hidrógeno. Esto puede deberse a la reducción del ancho de la sección de entrada de aire, dando lugar a un menor caudal de aire entre llamas consecutivas y por lo tanto una menor capacidad de refrigeración de los vórtices.

Asimismo, los contornos de temperatura de la Figura 4.20 muestran que la separación entre llamas mostrada fue suficiente para evitar el contacto entre llamas consecutivas debido al flujo de aire. La reducción del exceso de aire también produjo la aparición de una zona de altas temperaturas a la salida del dominio, dando lugar a un incremento del volumen de reacción. Si bien este volumen de reacción se concentra en una zona cercana a la zona de mezcla y entre ambos vórtices como en el caso de $\lambda = 2$, al reducir λ este volumen se alarga hacia la salida.

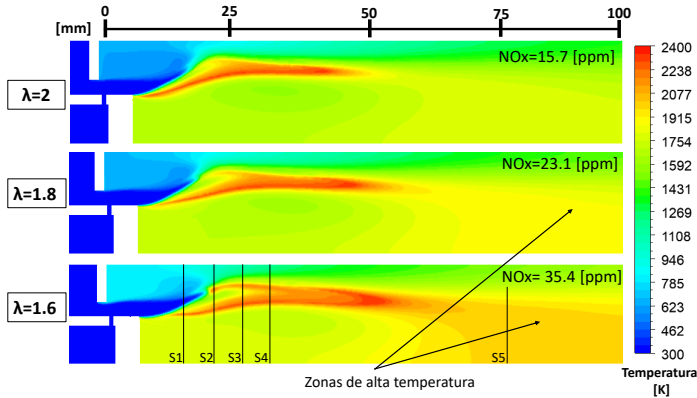


Figura 4.19: Contornos de temperatura en el caso de QD

Como se ha mencionado previamente, en la Figura 4.19 se aprecia una separación local de la llama a la altura de las secciones S2 y S3, con una forma similar a la que se muestra en el caso del QI para $\lambda = 1,6$. La Figura 4.22 muestra los contornos

de las fracciones másicas de OH , donde se indica la iniciación de dicha separación a partir de S2. Hay que destacar que en este caso la separación local se da también en el caso de $\lambda = 2$. Como se ha indicado previamente, este fenómeno indica una tendencia hacia la penetración del chorro de hidrógeno en el aire, ya que tras el proceso de escalado, en el caso del QD la longitud de penetración normalizada fue mayor que en el caso de referencia y que en el caso del QI a $\lambda = 1,6$, con valores de 1,7, 1,8 y 2,1 para los casos de $\lambda = 2, 1,8$ y 1,6 respectivamente. Asimismo, en el caso del QD también se modificaron ligeramente las relaciones de bloqueo, pudiendo influir en la forma y el tamaño de los vórtices y su efecto sobre la zona de mezcla y reacción, afectando también la aparición de esta separación local de la llama.

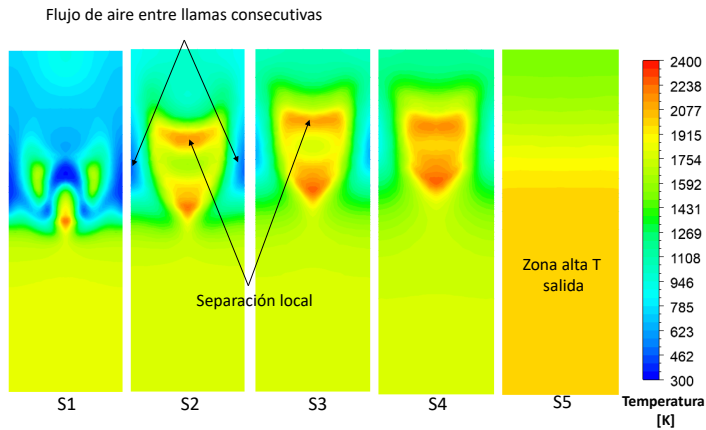


Figura 4.20: Contornos de temperatura en varias secciones de corte para $\lambda = 1,6$ en el QD

Las líneas de corriente de la Figura 4.21 siguen la tendencia general observada en el caso de referencia así como en el caso del QI. La reducción del exceso de aire también redujo el tamaño de los vórtices externos como se ha descrito en el caso del QI. En relación al incremento de la longitud de penetración normalizada y a la separación local de llama observada, también se puede observar una deceleración local en la garganta entre ambos vórtices. Si bien en el caso de $\lambda = 2$ la velocidad en el paso de la garganta toma valores cercanos a los 60 m/s, en los casos de $\lambda = 1,8$ y 1,6 la pérdida de momento axial debido a la mayor penetración del chorro de hidrógeno en el aire hace que las velocidades sean menores en esta zona. A pesar de que se modificaron las relaciones de bloqueo durante el proceso de escalado, se

puede concluir que la forma de las líneas de corriente y distribución de velocidades se mantuvieron de acuerdo a las características del PCM.

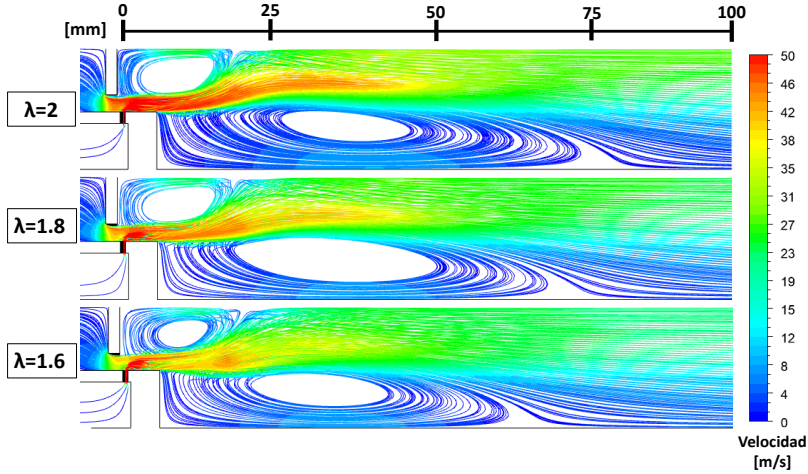


Figura 4.21: Líneas de corriente y magnitud de la velocidad en el caso del QD

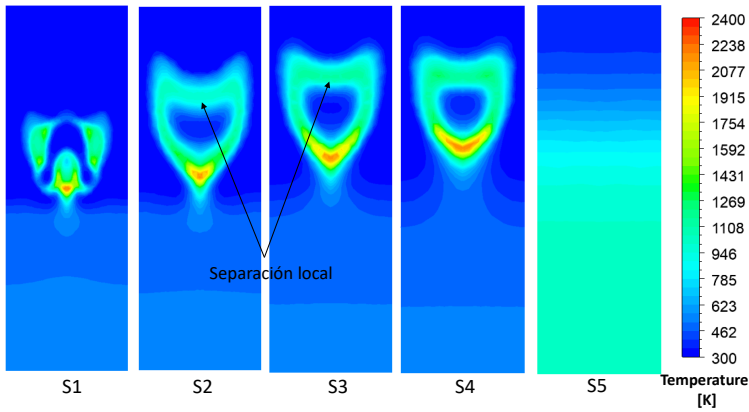


Figura 4.22: Fracciones másicas de los OH en las diferentes secciones del caso QD

En la misma línea que en el QI, la formación de NO_x se mantuvo dentro de un rango razonable, manteniendo así las características del PCM de bajo NO_x . En este caso las concentraciones a la salida fueron menores que en el caso QI, principalmente debido a la menor temperatura del aire a la entrada (en este caso 300 K, en el caso del QI 560 K). Como se ha mostrado previamente en el caso

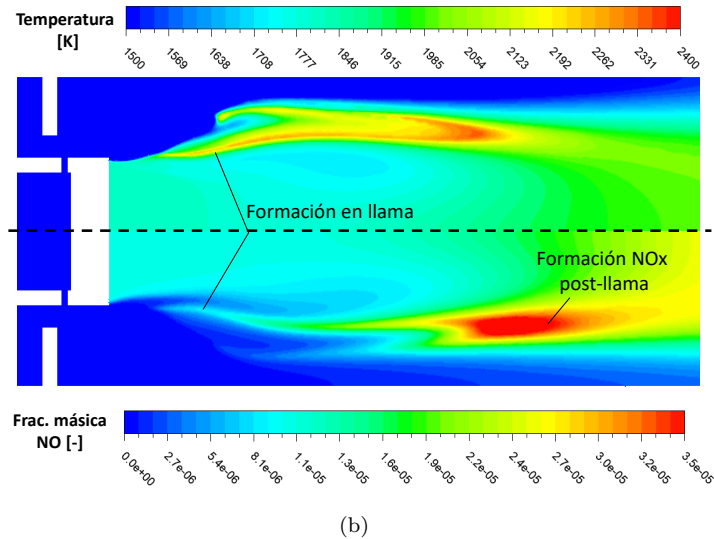
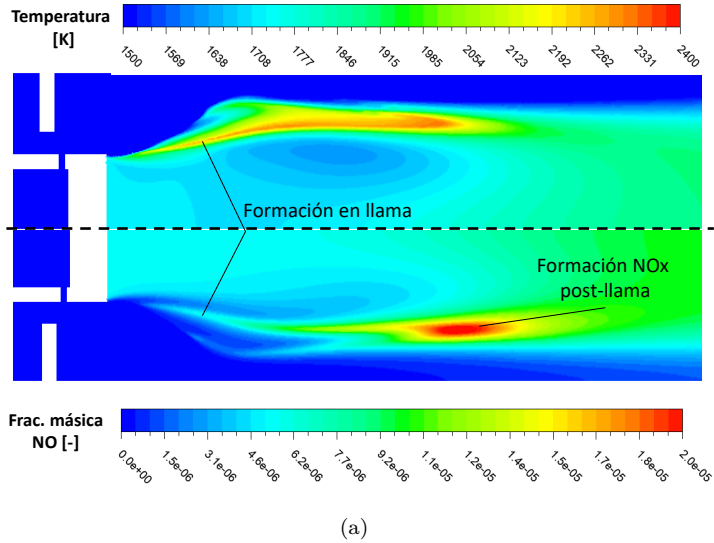


Figura 4.23: Zonas de formación de NO_x térmicos en el caso del QD. (a) $\lambda=1,8$ y (b) $\lambda=1,6$

del QI, la Figura 4.23 muestra una zona de formación de NO_x de post llama. En comparación con los resultados del QI, en este caso la formación de NO_x en la zona de llama desaparece debido al incremento de la longitud de penetración normalizada y por ende una peor mezcla entre el hidrógeno y el aire. De forma

general se puede decir que los resultados numéricos demostraron que el uso del PCM podría ser una buena alternativa para el diseño de quemadores domésticos.

Y siendo más restrictivos, los valores obtenidos se compararon con los valores límite de la normativa Europea vigente, establecidos en la directiva ErP (*Energy related Products*) [34], siendo necesario expresar los resultados en unidades de mg/kWh . Esta normativa tiene como objetivo establecer una eficiencia mínima y estándares respecto a las emisiones de NO_x en este tipo de aplicaciones. En base a la última actualización de la directiva y junto con el estándar EN 15502 [35], los valores actuales se compararon con el límite Europeo de NO_x clase 6 de 56 mg/kWh .

Así, se obtuvieron los valores de 17, 25 y 39 mg/kWh para $\lambda = 2, 1,8$ y 1,6 respectivamente. Hay que destacar que las llamas resultaron ser compactas (50 mm - 75 mm) a pesar de la reducción del exceso de aire, lo cual facilitaría la integración del quemador en la caldera.

4.11. Conclusiones

El objetivo del estudio presentado en este capítulo fue el de analizar la viabilidad del principio de combustión *Micromix* para el diseño de quemadores de difusión de hidrógeno de bajo NO_x en calderas domésticas e industriales. Tras definir las condiciones de operación deseadas, se llevo a cabo el escalado de las geometrías para el QD y QI respectivamente. Las características del PCM fueron estudiadas en las nuevas configuraciones mediante cálculos CFD, mostrando el potencial del principio *Micromix* para su uso en el diseño de QD y QI.

Por un lado se emplearon resultados numéricos y experimentales de estudios previos para una primera validación de los modelos empleados y su capacidad para representar el PCM en un caso de referencia. Tras el proceso de escalado de las geometrías, se fabricó un prototipo de quemador *Micromix* tomando las dimensiones obtenidas en el QD. Así, posteriormente se diseñó un sistema experimental donde se llevaron a cabo las medidas de NO_x térmicos en las condiciones definidas para el QD (50 kW/dm^2 y $\lambda = 2, 1,8$ y 1,6). Los resultados confirmaron que las simulaciones CFD fueron capaces de predecir los valores de NO_x medidos, corroborando la fiabilidad del proceso de escalado de geometrías.

Siguiendo el PCM, se pudieron observar llamas compactas con longitudes de aproximadamente 120 y 50 mm para los casos QI y QD respectivamente. Las emi-

siones de NO_x se mantuvieron por debajo de los límites legales establecidos en todos los casos. Se puede decir que los resultados mostraron un funcionamiento óptimo a $\lambda = 2$ y $1,8$ en ambos quemadores, ofreciendo menores niveles de NO_x , llamas más compactas y menores temperaturas en los vórtices respecto a los resultados a $\lambda = 1,6$.

4.12. Bibliografía

- [1] A. Gharehghani, K. Ghasemi, M. Siavashi, S. Mehranfar, Applications of porous materials in combustion systems: A comprehensive and state-of-the-art review, *Fuel* 304 (2021) 121411. doi:<https://doi.org/10.1016/j.fuel.2021.121411>.
- [2] J. Schloss, L. Paesler, K. Lucka, H. Köhne, L. Kulisiewicz, A. Delgado, Pyrinno: Practical results of a small scale burner development, *International Journal of Energy for a Clean Environment* 11 (01 2010). doi:[10.1615/InterJEnerCleanEnv.2011001540](https://doi.org/10.1615/InterJEnerCleanEnv.2011001540).
- [3] Z. Ling, H. Zhou, T. Ren, Effect of the flue gas recirculation supply location on the heavy oil combustion and nox emission characteristics within a pilot furnace fired by a swirl burner, *Energy* 91 (2015) 110–116. doi:<https://doi.org/10.1016/j.energy.2015.08.025>.
- [4] H. H. Funke, N. Beckmann, S. Abanteriba, An overview on dry low NOx micromix combustor development for hydrogen-rich gas turbine applications, *International Journal of Hydrogen Energy* 44 (13) (2019) 6978–6990. doi:[10.1016/j.ijhydene.2019.01.161](https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.01.161).
- [5] J. Choi, R. Rajasegar, W. Lee, T. Lee, J. Yoo, Hydrogen enhancement on a mesoscale swirl stabilized burner array, *International Journal of Hydrogen Energy* 46 (46) (2021) 23906–23915. doi:<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.04.157>.
- [6] J. M. Beér, N. A. Chigier, *Combustion Aerodynamics*, Fuel and energy science series, Krieger, 1983.
- [7] R.-H. Chen, J. F. Driscoll, Nitric oxide levels of jet diffusion flames: Effects of coaxial air and other mixing parameters, *Symposium (International) on Combustion* 23 (1) (1991) 281–288, twenty-Third Symposium (International) on Combustion. doi:[https://doi.org/10.1016/S0082-0784\(06\)80271-7](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(06)80271-7).
- [8] S. Noda, J. Inohae, Z. S. Saldi, Nox emission characteristics of confined jet nonpremixed flames, *Proceedings of the Combustion Institute* 31 (1) (2007) 1625–1632. doi:<https://doi.org/10.1016/j.proci.2006.07.088>.
- [9] J. Hwang, K. Sohn, N. Bouvet, Y. Yoon, Nox scaling of syngas h₂/co turbulent non-premixed jet flames, *Combustion Science and Technology* 185 (2013) 1715–1734. doi:[10.1080/00102202.2013.831847](https://doi.org/10.1080/00102202.2013.831847).
- [10] S. McAllister, J. Y. Chen, A. C. Fernandez-Pello, *Fundamentals of Combustion Processes*, Mechanical Engineering Series, Springer New York, 2011.

- [11] C. E. B. Jr., *Industrial Burners Handbook*, Industrial Combustion, CRC Press, 2003.
- [12] H. R. N. Jones, *The Application of Combustion Principles to Domestic Gas Burner Design*, British Gas technical monographs, Spon, 1989.
- [13] P. Gvero, S. Lekic, Vojinović, B. Prochaska, *Design and modelling aspects in premixed gas burners development*, 2016.
- [14] J. Shum, F. and Ziemann, *Potential use of hydrogen in air propulsion*, Euro-Québec Hydro-Hydrogen Pilot Project (EQHHPP), European Union, Contract No. 4541-91-11 EL ISP PC, Final Report, 1996.
- [15] A. Westenberger, *Liquid Hydrogen Fuelled Aircraft – System Analysis*, CRYO-PLANE, Final Technical Report No. GRD1-1999-10014, to the European Commission, 2003.
- [16] N. Tekin, M. Ashikaga, A. Horikawa, D.-I. H. Funke, *Enhancement of fuel flexibility of industrial gas turbines by development of innovative hydrogen combustion systems* (2019).
- [17] CORDIS | European commission. (2018). *Enabling cryogenic Hydrogen based CO2 free air transport (ENABLE H2) | Projects | H2020 | CORDIS | European commission*.
- [18] A. Haj Ayed, K. Kusterer, H. H. Funke, J. Keinz, C. Striegan, D. Bohn, *Experimental and numerical investigations of the dry-low-NOx hydrogen micromix combustion chamber of an industrial gas turbine*, *Propulsion and Power Research* 4 (3) (2015) 123–131. doi:10.1016/j.jpvr.2015.07.005.
- [19] H. H. Funke, K. Kusterer, A. H. Ayed, M. Kazari, J. Kitajima, A. Horikawa, K. Okada, *Experimental and numerical study on optimizing the DLN micromix hydrogen combustor principle for industrial gas turbine applications*, *Proceedings of the ASME Turbo Expo* (2015).
- [20] H. H. Funke, N. Beckmann, J. Keinz, S. Abanteriba, *Comparison of Numerical Combustion Models for Hydrogen and Hydrogen-Rich Syngas Applied for Dry-Low-NOx-Micromix-Combustion*, *Proceedings of ASME Turbo Expo* (2016).
- [21] A. H. Ayed, K. Kusterer, H. H. Funke, J. Keinz, D. Bohn, *CFD based exploration of the dry-low-NOx hydrogen micromix combustion technology at increased energy densities*, *Propulsion and Power Research* 6 (1) (2017) 15–24. doi:10.1016/j.jpvr.2017.01.005.
- [22] R. B. Abdallah, *NOx Micromix Hydrogen Combustion System: -Preliminary Design and Performance Assesment of Novel Injectors Using RANS and LES CFD*, Tech. rep., Cranfield University (2017).

- [23] G. Babazzi, P. Q. Gauthier, P. Agarwal, J. McClure, V. Sethi, NOx emissions predictions for a hydrogen micromix combustion system, Proceedings of the ASME Turbo Expo 3 (2019). doi:10.1115/GT2019-90532.
- [24] A. H. Ayed, K. Kusterer, H. H. Funke, J. Keinz, M. Kazari, J. Kitajima, A. Horikawa, K. Okada, D. Bohn, Numerical Study on Increased Energy Density for the Dln Micromix Hydrogen Combustion Principle, Proceedings of the ASME Turbo Expo (2014).
- [25] N. Beckmann, Characterization of the Hydrogen-Dry-Low-NOx-Micromix-Combustion Principle for Hydrogen-Methane Fuel Mixtures, Tech. rep., School of Engineering, College of Science, Engineering and Health. RMIT University (2019).
- [26] C. E. Arrieta, A. M. García, A. A. Amell, Experimental study of the combustion of natural gas and high-hydrogen content syngases in a radiant porous media burner, International Journal of Hydrogen Energy 42 (17) (2017) 12669–12680. doi:https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.03.078.
- [27] H. Soltanian, M. Z. Targhi, H. Pasharshahi, Chemiluminescence usage in finding optimum operating range of multi-hole burners, Energy 180 (2019) 398–404. doi:https://doi.org/10.1016/j.energy.2019.05.104.
- [28] J. Chacón, J. M. Sala, J. M. Blanco, Investigation on the design and optimization of a low NOx - CO emission burner both experimentally and through computational fluid dynamics (CFD) simulations, Energy and Fuels 21 (1) (2007) 42–58. doi:10.1021/ef0602473.
- [29] M. Sosnowski, J. Krzywanski, R. Gnatowska, Polyhedral meshing as an innovative approach to computational domain discretization of a cyclone in a fluidized bed CLC unit, E3S Web of Conferences 14 (2017). doi:10.1051/e3sconf/20171401027.
- [30] A. Haj Ayed, K. Kusterer, H. H. Funke, J. Keinz, C. Striegan, D. Bohn, Improvement study for the dry-low-NOx hydrogen micromix combustion technology, Propulsion and Power Research 4 (3) (2015) 132–140. doi:10.1016/j.jprr.2015.07.003.
- [31] L. Davidson, Fluid mechanics, turbulent flow and turbulence modeling, CFD course (2012) 1–270.
 URL papers3://publication/uuid/AFAD50F2-DB75-4B82-A5EE-3FBFB17C0285
- [32] P. Agarwal, X. Sun, P. Q. Gauthier, V. Sethi, Injector design space exploration for an ultra-low NOx hydrogen micromix combustion system, Proceedings of

- the ASME Turbo Expo 3 (2019). doi:10.1115/GT2019-90833.
- [33] C. Striegan, A. H. Ayed, K. Kusterer, H. H. Funke, S. Loechle, M. Kazari, A. Horikawa, K. Okada, K. Koga, Numerical Combustion and Heat Transfer Simulations and Validation for a Hydrogen Fueled “Micromix” Test Combustor in Industrial Gas Turbine Applications, Proceedings of ASME Turbo Expo (2017) 1–10.
- [34] Commission guidelines: Ecodesign requirements for space and water heaters, Tech. rep., European comission (2018).
- [35] Domestic central heating boilers using gaseous fuels, Standard, European Commission.

Capítulo 5

Conclusiones y trabajo futuro

**SUJETO A
CONFIDENCIALIDAD POR EL
AUTOR**

Anexos: Contribuciones científicas

**SUJETO A CONFIDENCIALIDAD
POR EL AUTOR**

