

GAS LICUADO RENOVABLE (E-GL):  
UNA ALTERNATIVA CARBONO NEUTRAL AL GLP  
PARA LA TRANSICIÓN ENERGÉTICA SOSTENIBLE

Por

IGNACIO ANDRÉS VERDUGO MONTECINOS

Tesis realizada como parte de los requerimientos  
para obtener el grado de PhD. en Ingeniería Aplicada  
en la Universidad Técnica Federico Santa María  
Valparaíso, Chile

Supervisores: Dr. Andrés Fuentes (UTFSM)

Mg. Pedro Martin (GASCO S.A.)

Comisión: Dra. María Thomsen (UAI)

Ing. Sergio Huepe (GASCO S.A.)

Dr. Hernán Olgún (UTFSM)

Mg. Andrés Amell (U. de Antioquía, Colombia)

14 Agosto 2025



## CONSTANCIA DE VALIDACIÓN Y CONFIDENCIALIDAD DE MONOGRAFÍA A REPOSITORIO ACADÉMICO

### 1.- IDENTIFICACIÓN DEL TRABAJO ACADÉMICO

**Tipo de monografía (marcar una opción):**  Memoria o trabajo de título;  Tesis de Postgrado;

**Título del trabajo:** Gas licuado renovable (e-GL): una alternativa carbono neutral al GLP para la transición energética sostenible

**Nombre del candidato(a):** Ignacio Andrés Verdugo Montecinos

**Carrera / Grado:** Doctorado en Ingeniería Aplicada

**Campus:** Casa Central Valparaiso ; **Departamento:** Industrias

### 2.- VALIDACIÓN DEL PROFESOR GUÍA/DIRECTOR DE TESIS

Yo, Andrés Hernán Fuentes Castillo, en mi calidad de profesor(a) guía/director(a) del trabajo académico mencionado anteriormente **DEJO CONSTANCIA** que:

- He revisado esta versión del documento y corresponde a la versión final aprobada del trabajo.
- El trabajo cumple con los requisitos académicos y de formato establecidos por la institución

### 3.- EVALUACIÓN DE CONFIDENCIALIDAD POR PROPIEDAD INDUSTRIAL

El trabajo **NO contiene información que amerite confidencialidad** y puede ser publicado de inmediato en repositorio con acceso abierto.

El trabajo **CONTIENE** información con potenciales implicancias de propiedad industrial o intelectual y requiere un periodo de confidencialidad (embargo) por:

6 meses;  12 meses;  2 años;  3 años;  5 años;  10 años

Fundamentación de la necesidad de confidencialidad (obligatorio si se solicita embargo):

### 4.- FIRMAS

**Profesor(a) guía o director(a) de memoria o tesis:**

**Fecha:** 19/08/2025

**Firma:** \_\_\_\_\_



Firmado digitalmente por Andrés FUENTES C.

**Estudiante o Candidato(a):**

**Fecha:** 19/08/2025

**Firma:** \_\_\_\_\_

*Este formulario debe ser insertado como página 2 de la memoria o tesis, completado y firmado por estudiante y profesor(a) antes de la entrega en portal PRISMA de Biblioteca USM.*

## ABSTRACT

La creciente urgencia por enfrentar el cambio climático y avanzar hacia una transición energética sostenible ha impulsado el interés en combustibles renovables capaces de sustituir a los fósiles sin requerir cambios estructurales en la infraestructura existente. Esta tesis investiga la viabilidad técnica, la seguridad, la flamabilidad, las emisiones y la formación de hollín de un gas licuado renovable (e-GL), producido mediante procesos tipo *Power-to-Gasoline* a partir de hidrógeno verde y CO<sub>2</sub> capturado del aire. A través de un enfoque integral que combina análisis normativo, modelación computacional y validación experimental, se evalúa su potencial como combustible alternativo al GLP convencional.

El análisis regulatorio comparado evidencia que la composición del e-GL no está considerada en la mayoría de las normativas internacionales vigentes, cumpliendo sin modificaciones solo en 1 de 50 países evaluados. Gracias al modelado teórico-numérico, se obtuvo que el e-GL es igual de estable, seguro y es intercambiable por el GLP de forma directa, incluso con emisiones netas de carbono iguales a cero. En términos de comportamiento en la combustión, el e-GL presenta una mayor propensión a generar hollín—hasta un 57,6 % más por kilogramo de combustible—y libera un 15 % de su energía como radiación térmica, lo que podría ser ventajoso en procesos industriales que requieran alta transferencia de calor. Además, se demuestra que puede integrarse en la infraestructura actual de distribución de GLP, reduciendo las barreras de adopción.

Este estudio sienta las bases técnicas y normativas necesarias para avanzar en la comercialización del e-GL como un combustible seguro, sostenible y competitivo, contribuyendo significativamente a la descarbonización de sectores energéticos residenciales e industriales.

**Palabras clave:** e-GL, PtX, combustibles renovable, GLP, emisiones, transición energética.

## DEDICATORIA

*A Dios, mi amada Constanza, familiares y amigos. Gracias por estar siempre en mi vida.*

*Ad astra per aspera. Non est ad astra mollis e terris via.*

## AGRADECIMIENTOS

En primer lugar quisiera agradecer y dar toda la gloria y honra a Dios, porque sin Él no hubiera llegado a este momento y lugar. Agradecer a Constanza, el amor de mi vida, el que Dios puso como mi compañera, por estar en todo mi camino formativo, apoyándome en todo momento, compartiendo los momentos de gozo y de dolor, empujándome cuando ya no tenía fuerzas de continuar. Gracias por siempre creer en mi, mi amor. Este éxito es gracias a los tres.

Quisiera agradecer mi familia, sabiendo el orgullo que significa para ustedes que sea el primer profesional de la familia, y ahora Doctor en Ingeniería. Agradezco honrosamente a mi Madre Paola, a mi mamita Francisca, a mi tata Germán, y a mi hermano. También agradezco a los amigos que son como hermanos, Samuel, Vale y Esteban, que estuvieron presentes desde siempre, siempre acompañando en todo. Agradezco a la familia Pacheco Espinoza, por estar presentes cuando lo necesité, dándome su amor de forma incondicional, considerándome como un hijo y hermano más.

A los amigos que hice en mi camino en el Energy Conversion and Combustion Group (EC<sup>2</sup>G), que estuvieron acompañándome durante mi formación, trabajando en conjunto o prestando una mano de ayuda cuando lo necesité. A Juan José, PPM, Goli, José Ignaciooooo, Carlos, Mijail, Felipe dolfin, Nico y Jano. A quienes fueron mis ayudantes en intro y GE3 también, que me prestaron apoyo y fueron unos buenos compañeros de equipo. A quienes marcaron mi vida con aprendizajes valiosos, durante mi estancia en la UTFSM y en el EC<sup>2</sup>G. Finalmente quisiera agradecer a mis mentores en el equipo, quienes también fueron parte fundamental durante mi proceso formativo. A Juan José, por su dedicación, ayuda, amistad y paciencia en el trabajo de laboratorio, parte de este trabajo y de mi desarrollo es gracias a ti. A Goli, por ser un gran apoyo en todo mi proceso formativo, por ser siempre una gran

---

persona y profesional, por siempre estar dispuesto a ayudar cuando alguien te requirió, y por siempre escuchar. A Pedro, un buen amigo y colega durante todo mi proceso formativo. Por ser un buen guía en la hermosa ciudad de Punta Arenas, y por mostrarme como debe ser un gran líder, siempre preocupándose por la gente y de los detalles. Al profesor Rodrigo por su guía y apoyo, por escuchar, por ser el mejor partner de oficina, por sus consejos de vida y científicos, y por darme la confianza y oportunidad de crecer profesionalmente con mi primer curso. Al profesor Andrés, mi coach, por su gran dedicación y apoyo incondicional en todo este proceso, por sus consejos, palabras de ánimo y malas bromas, las que han sido parte importante para mi en este proceso. Al profesor Felipe, gracias por el apoyo, orientación, dedicación y consejos cuando lo necesité, contagiando su motivación por la ciencia y siempre a hacer algo más. Finalmente agradecer a GASCO, por financiar mi programa y por darme oportunidad de crecimiento, invitándome a presentar nuestro trabajo a diferentes congresos.

A todos ustedes, ¡gracias totales!

# Índice general

	Page
<b>1 Presentación de la investigación</b>	<b>1</b>
1.1 Introducción . . . . .	2
1.2 Pregunta de investigación . . . . .	11
1.3 Alcance . . . . .	13
1.4 Objetivos . . . . .	15
1.4.1 General . . . . .	15
1.4.2 Específicos . . . . .	15
<b>2 Vigilancia tecnológica</b>	<b>17</b>
2.1 PtX: Síntesis de combustibles desde energía eléctrica . . . . .	18
2.1.1 Producción de combustibles sintéticos y vectores energéticos . . . . .	18
2.1.2 Materia prima . . . . .	31
2.1.3 Proyectos de combustibles sintéticos y vectores energéticos en Chile . . . . .	48
2.2 Análisis normativo . . . . .	65
2.2.1 Normas sobre hidrocarburos gaseosos . . . . .	65
2.2.2 Captura de CO <sub>2</sub> . . . . .	79
2.2.3 Producción, almacenamiento y transporte de H <sub>2</sub> . . . . .	82
2.3 Modelamiento teórico y numérico . . . . .	86
2.3.1 Intercambiabilidad . . . . .	86
2.3.2 Seguridad y condiciones de flamabilidad . . . . .	90

2.3.3	Diagrama ternario . . . . .	98
2.3.4	Huella de carbono . . . . .	99
2.3.5	Mecanismos cinéticos . . . . .	101
2.4	Materiales y métodos experimentales . . . . .	107
2.4.1	Introducción . . . . .	107
2.4.2	Marco experimental . . . . .	108
2.4.3	Metodología experimental . . . . .	109
<b>3</b>	<b>Resultados</b>	<b>125</b>
3.1	Resultados análisis normativo . . . . .	127
3.1.1	Cumplimiento del e-GL en la normativa internacional . . . . .	127
3.1.2	e-GL en los mercados de interés . . . . .	130
3.1.3	Propuesta de mejora para cumplimiento normativo . . . . .	132
3.2	Resultados teóricos y numéricos . . . . .	132
3.2.1	Propiedades del e-GL simulados . . . . .	133
3.2.2	Intercambiabilidad . . . . .	134
3.2.3	Seguridad y condiciones de flamabilidad . . . . .	143
3.2.4	Mezclas e-GL con propano . . . . .	147
3.2.5	Análisis de contaminantes . . . . .	150
3.2.6	Comportamiento numérico del e-GL . . . . .	153
3.2.7	Potencial del e-GL como complemento al gas licuado de petróleo . . . . .	154
3.3	Resultados experimentales I: Caracterización e-GL vs propano HD5 . . . . .	155
3.3.1	Extinción y emisión de llama . . . . .	155
3.3.2	Temperatura de llama . . . . .	158
3.3.3	Madurez y fracción en volumen de hollín . . . . .	159
3.3.4	Radiación de la llama . . . . .	159

3.3.5	Propiedades generales de la llama: altura, carga de hollín generado y estabilidad . . . . .	162
3.3.6	Análisis global de propiedades . . . . .	164
3.3.7	Comparación entre e-GL y propano HD5 . . . . .	166
3.4	Resultados experimentales II: Efecto del cambio del índice de oxígeno (OI) en la combustión del e-GL para diferentes mezclas con propano HD5 . . . . .	167
3.4.1	Análisis de alternativas: mezclas de e-GL con propano a distintos OI .	167
3.4.2	Resumen global de alternativas . . . . .	181
3.4.3	Análisis sobre tendencias de las mezclas . . . . .	186
<b>4</b>	<b>Conclusiones</b>	<b>188</b>
	<b>Bibliografía</b>	<b>192</b>
	<b>Index</b>	<b>214</b>

# Índice de figuras

1.1	Estimación de la producción mundial de combustibles fósiles. Adaptado de Veziroglu y Sahin [2]. . . . .	3
1.2	Proceso de obtención de GLP renovable (e-GL) a partir de la síntesis power to gasoline (PtG). . . . .	6
2.1	Color del H <sub>2</sub> según su fuente de obtención. . . . .	19
2.2	Rutas <i>Power-to-X</i> para transformar electricidad en productos químicos mediante electrólisis y síntesis. Adaptado desde [33]. . . . .	19
2.3	Caminos principales para la producción de combustibles sintéticos. . . . .	21
2.4	Bucle de síntesis convencional en metanol, DME y procesos FT. Adaptado desde [33]. . . . .	24
2.5	TRLs para la producción de distintos combustibles sintéticos. . . . .	31
2.6	Diagrama de la cadena de valor del H <sub>2</sub> V (Hidrógeno verde). . . . .	49
2.7	Proyectos actualmente en desarrollo por región en Chile al año 2024. . . . .	52
2.8	Diagrama de Flujo Hidrolinera. . . . .	53
2.9	Diagrama de Flujo Planta AES Andes. . . . .	53
2.10	Diagrama de Flujo Planta HyEx. . . . .	54
2.11	Diagrama de Flujo Planta Faraday. . . . .	55
2.12	Diagrama de Flujo Planta HYDRA. . . . .	56
2.13	Diagrama de Flujo Planta San Pedro de Atacama. . . . .	57
2.14	Diagrama de Flujo Planta H <sub>2</sub> Solar. . . . .	58

2.15 Diagrama de Flujo Planta Atacama Hydrogen Hub. . . . .	58
2.16 Diagrama de Flujo Planta HOASIS. . . . .	59
2.17 Diagrama de Flujo Planta Quintero Bay H <sub>2</sub> Hub. . . . .	60
2.18 Diagrama de Flujo Hydrogen Forklifts. . . . .	61
2.19 Diagrama de Flujo Planta Green Steel. . . . .	62
2.20 Diagrama de Flujo Planta HIF. . . . .	62
2.21 Diagrama de Flujo Planta H1 Magallanes. . . . .	63
2.22 Diagrama de Flujo Planta HNH Energy. . . . .	64
2.23 Diagrama de Flujo Planta Llaquedona. . . . .	65
2.24 Extracto de la NFPA 58. . . . .	69
2.25 Extracto del DS108, artículos 1, 4 y 6. . . . .	77
2.26 temperatura adiabática de llama de propano (izq) [130] e iso-butano (der, D = 0%) [131], en función del ratio de equivalencia ( $\phi$ ). . . . .	90
2.27 Diagrama simplificado de un tubo de choque, obtenido desde [132]. . . . .	91
2.28 velocidad de llama laminar de propano (izq) [133, 134, 135] e iso-butano (der, D = 0%) [131, 136, 137], en función del ratio de equivalencia ( $\phi$ ). . . . .	96
2.29 Tiempo de retardo de ignición del propano (izq) [138] e iso-butano (der, D = 0%) [139], en función del inverso de la temperatura. . . . .	97
2.30 Diagrama ternario del propano y del iso-butano obtenidos por Cantera usando JetSurf, respectivamente. . . . .	100
2.31 Esquema de reacción del metano, obtenido por JetSurF en Cantera. . . . .	104
2.32 Arreglo experimental utilizado para las mediciones de extinción-emisión de luz, altura de la llama, radiación y estabilidad en llamas de difusión laminar de e-GL y propano con aire. La descripción de los elementos se encuentra incorporada en el texto. . . . .	109

2.33	Diagrama esquemático de las principales etapas de la formación del hollín y las especies representativas producidas a medida que avanza el proceso. La escala relativa de estas imágenes cambia entre los paneles, las estructuras varían entre $<1$ nm (a) y $\sim 100$ nm (e) [158]. . . . .	116
2.34	Road-map para la obtención de propiedades del hollín con variación espectral espacial. . . . .	120
2.35	(a) Simplificación geométrica de la llama y el radiómetro. (b) Representación gráfica de los contornos de la llama y el sensor. . . . .	122
3.1	Número de regulaciones que cumple el e-GL con su composición actual (Tabla 2.20). . . . .	128
3.2	Número de regulaciones que cumple el e-GL mezclado con propano en volumen. . . . .	131
3.3	Propiedades de intercambiabilidad de los combustibles estudiados: Poder calorífico (izq) e Índice de Wobbe (der), ambos a diferentes ratios de equivalencia ( $\phi$ ). . . . .	135
3.4	La temperatura adiabática para los tres gases a diferentes $\phi$ . A la derecha se encuentra un zoom de la curva de la izquierda. . . . .	139
3.5	Tiempo de retardo de ignición simulado con Cantera. . . . .	141
3.6	Tiempo de autoignición simulado con Cantera para el e-GL. . . . .	142
3.7	Tiempo de autoignición simulado con Cantera para el $C_3H_8$ . . . . .	142
3.8	Tiempo de autoignición simulado con Cantera para el $iC_4H_{10}$ . . . . .	143
3.9	velocidad de llama laminar de los gases estudiados a distintos $\phi$ (izq), y Diagrama ternario del e-GL (der). . . . .	145
3.10	Poder calorífico e Índice de Wobbe del e-GL mezclado con propano en volumen (izq), y límites de inflamabilidad del e-GL mezclado con propano. . . . .	149
3.11	Diagrama ternario de e-GL mezclado volumétricamente con $C_3H_8$ . . . . .	151

3.12	Imágenes de llama de (a) transmisividad ( $\tau$ ) y (b) emisividad ( $P_y$ ) para e-GL (izquierda) y HD5 (derecha) a 810 nm. . . . .	156
3.13	(a) Coeficiente de extinción del hollín ( $\kappa_{ext}$ ), (b) emisión local ( $J$ ) y (c) temperatura ( $T$ ) para e-GL (izquierda) y HD5 (derecha). . . . .	157
3.14	Perfiles radiales del coeficiente de extinción del hollín ( $\kappa_{ext}$ ), la emisión local ( $J$ ) y la temperatura ( $T$ ) obtenidos para ambos combustibles. La altura seleccionada se representa con una línea blanca en Figura 3.13. . . . .	158
3.15	(a) Campos del índice de madurez del hollín ( $\beta$ ), (b) campos de la fracción de volumen del hollín ( $f_s$ ) y (c) perfiles para e-GL y HD5. La línea blanca representa la altura analizada en (c), que se indica en la parte superior de la figura (a) y (b). . . . .	160
3.16	Divergencia del flujo radiativo ( $\nabla \cdot \dot{q}_r$ ) (a) campos y (b) perfiles, y (c) radiación térmica emitida ( $q_{emi}$ y $\chi_r$ ) para e-GL y HD5. La línea blanca en (a) representa la altura analizada en (b) (indicada en la parte superior de la figura). . . . .	161
3.17	(a) Campos visibles de la llama ( $h_f$ ), (b) fracción volumétrica de hollín integrada radialmente ( $B_s$ ) y eficiencia de conversión de carbono en hollín (CtS), y (c) emisión de llama de las llamas e-GL y HD5 medida en la punta de la llama mediante un fotodiodo de silicio. La línea blanca representa la altura de la llama en (a), y la línea verde en (b) representa la altura estudiada en Figura 3.13, Figura 3.15 y Figura 3.16. La frecuencia predominante obtenida por FFT se indica debajo de cada gráfico en (c). . . . .	164
3.18	Distribución global (a) de la temperatura ( $T$ ), (b) de la fracción volumétrica de hollín ( $f_s$ ) y (c) de la divergencia del flujo radiativo ( $\nabla \cdot \dot{q}_r$ ) para e-GL y HD5. . . . .	166
3.19	Imágenes de transmisividad de la llama a 810 nm ( $\tau$ ) para los casos estudiados.	169
3.20	Imágenes de emisividad de la llama a 810 nm ( $P_y$ ) para los casos estudiados.	171

3.21	Imágenes del coeficiente de extinción de la llama a 810 nm ( $\kappa_{ext}$ ) para los casos estudiados. . . . .	172
3.22	Imágenes de la emisión local del hollín en la llama a 810 nm ( $J$ ) para los casos estudiados. . . . .	174
3.23	Imágenes de la temperatura de la llama ( $T$ ) para los casos estudiados. En cada caso se indica el valor medio de la temperatura. . . . .	176
3.24	Imágenes del coeficiente de madurez del hollín ( $\beta$ ) para los casos estudiados. En cada caso se indica el valor medio del $\beta$ . . . . .	177
3.25	Imágenes de la fracción en volumen del hollín ( $f_s$ ) para los casos estudiados. En cada caso se indica el valor máximo del $f_s$ . . . . .	179
3.26	Imágenes de la altura de la llama ( $h_f$ ) para los casos estudiados. Los valores numéricos corresponden a la altura máxima de la llama. . . . .	180
3.27	Mapa de calor de la potencia térmica emitida ( $\dot{q}_{emi}$ ) para los casos estudiados, en función del índice de oxígeno (OI) y el tipo de combustible. . . . .	182
3.28	Mapa de calor de la altura de la llama ( $h_f$ ) para los casos estudiados en función del índice de oxígeno (OI). . . . .	183
3.29	Mapa de calor de las temperaturas medias de la llama ( $T$ ) en función del índice de oxígeno (OI). . . . .	185
3.30	Mapa de calor de la fracción volumétrica máxima de hollín ( $f_s$ ) en función del índice de oxígeno (OI). . . . .	187

# Índice de cuadros

2.1	Resumen de los diseños de reactores aplicados para la síntesis de metanol, DME y combustibles Fischer–Tropsch [54, 55, 56, 57]. . . . .	25
2.2	Ventajas y desventajas del electrolizador AEL obtenidas de [49]. . . . .	33
2.3	Ventajas y desventajas del electrolizador PEM obtenidas de [49]. . . . .	34
2.4	Resumen de los principales parámetros para las tecnologías actuales de electrólisis del agua, resumidos de Buttler y Spliethoff (2018) [41]. . . . .	36
2.5	Rango de costos por tonelada capturada de CO <sub>2</sub> en dolares americanos (USD). . . . .	39
2.6	Propiedades del gas de reciclaje o flue gas (entrada de la unidad de procesamiento central - CPU) [104]. . . . .	40
2.7	Propiedades y costos por tecnología de la CPU, obtenidos de [103, 104]. . . . .	41
2.8	Propiedades y costos por tecnología de solvente, obtenidos de [103]. . . . .	43
2.9	Propiedades y costos por tecnología, obtenidos de [103]. . . . .	45
2.10	Especificaciones del SynGas crudo. . . . .	48
2.11	Requerimientos detallados de contenidos de hidrocarburos contaminantes para las distintas normas analizadas. . . . .	67
2.12	Especificaciones de gases licuados de petróleo GPA 2140-2017 Midstream. . . . .	70
2.13	Requisitos detallados para gases licuados de petróleo según norma ASTM D1835-18. . . . .	72
2.14	Requisitos de los gases licuados de petróleo según NCh72. . . . .	78
2.15	Composición GLP extracto de la NCh 72, artículos 4 y Tabla 1. . . . .	78
2.16	Poderes caloríficos de gases de referencia. . . . .	89

2.17	Índice de <i>Wobbe</i> de gases de referencia. . . . .	90
2.18	Límites de inflamabilidad de gases de referencia . . . . .	97
2.19	Composición teórica en masa del e-GL. . . . .	107
2.20	Composición de Propano (HD5) y e-GL (% Vol) con Fórmulas Químicas. . .	110
2.21	Flujo de aire con variación en el índice de oxígeno (OI) en L/min. . . . .	110
2.22	Proporciones de mezcla de e-GL y HD5 en los experimentos realizados. . . .	111
3.1	Países donde el e-GL con su actual composición (Tabla 2.20) si cumple regu- laciones y donde no. . . . .	128
3.2	Propiedades simuladas del e-GL por cada 1 kg y 1 kmol. . . . .	133
3.3	Poder calorífico, densidad específica e índice de <i>Wobbe</i> de los diferentes gases estudiados. . . . .	135
3.4	Diferencias porcentuales de los índice de <i>Wobbe</i> , contrastados con el e-GL. .	136
3.5	Límites de inflamabilidad de los tres gases simulados. . . . .	146
3.6	Limiting Oxygen Concentration (LOC) de los tres gases estudiados. . . . .	146
3.7	Concentración estequiométrica (Cst) de los tres gases estudiados. . . . .	147
3.8	Fracción másica ( $y_i$ ) de los productos de combustión para e-GL, C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> e i-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> .152	
3.9	Factores de emisión brutos de los diferentes gases estudiados. . . . .	152



# Capítulo 1

## Presentación de la investigación

### Contenidos

---

1.1	Introducción . . . . .	<b>2</b>
1.2	Pregunta de investigación . . . . .	<b>11</b>
1.3	Alcance . . . . .	<b>13</b>
1.4	Objetivos . . . . .	<b>15</b>
1.4.1	General . . . . .	15
1.4.2	Específicos . . . . .	15

---

## 1.1. Introducción

El efecto invernadero está directamente vinculado a la producción de energía, que es el sector de la economía con mayores emisiones de dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ), y representa el 80 % de las emisiones en todo el mundo [1]. Los combustibles fósiles contribuyen al mayor porcentaje de la matriz energética mundial. Estos combustibles son agotables e implican riesgos relacionados con la extracción y el consumo, así como la liberación de gases que contribuyen al efecto invernadero. Sin embargo, la mayoría de las fuentes de energía en el mundo son combustibles fósiles. Tal como se presenta en la Figura 1.1, se espera que la demanda de producción anual se estabilice a largo y mediano plazo, con una reducción de la producción de combustibles líquidos (a medio-largo plazo) y de carbón (a corto-medio plazo) [2]. En efecto, los mercados mundiales han mostrado esta tendencia, principalmente impulsado por los tratados internacionales para la reducción de emisiones gaseosas y de partículas sólidas (principalmente hollín) [1, 3, 4].

Por un lado, la creciente demanda de electricidad en el mundo y en Chile, ha sido cubierta a través de centrales termoeléctricas operando con combustibles fósiles [2]. Además, estas centrales generan emisiones y con precios crecientes de producción de electricidad, dado al aumento que han experimentado sufren los combustibles convencionales. Esta tendencia permite buscar combustibles de segunda generación, renovables, amigables con el medio ambiente y económicamente viables [5, 6, 7].

El hidrógeno en este contexto podría desempeñar un papel crucial en la transición energética mundial. Esta fuente de energía, eventualmente verde, producida a partir de fuentes renovables, y con emisiones de carbono casi nulas ofrece una oportunidad para enfrentar el cambio que se requiere. De hecho, existe una sinergia relevante entre la implantación acelerada de las energías renovables, la producción y uso del hidrógeno. Se han desarrollado planes para el uso del hidrógeno en Australia [8, 9], Brasil [10], Francia [11], Alemania [12,

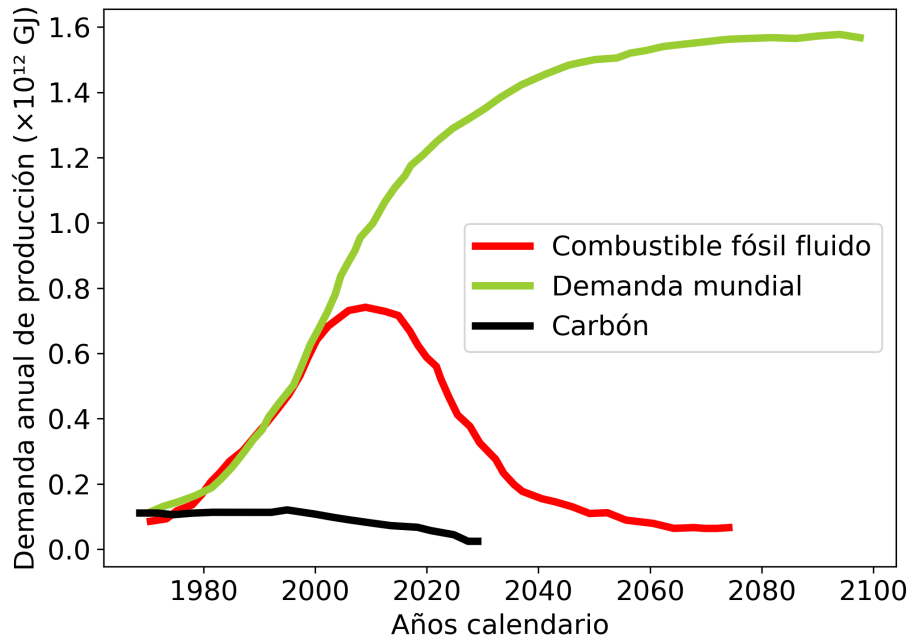


Figura 1.1: Estimación de la producción mundial de combustibles fósiles. Adaptado de Veziroglu y Sahin [2].

13], Japón [14, 15], Países Bajos [16, 17], Gran Bretaña [18] y Estados Unidos [19]. Las diferentes estrategias dependen de los métodos de producción de hidrógeno y de los principales usos de la hidrogenación de acuerdo con las particularidades de cada país [20, 21].

En 2014, se invirtieron aproximadamente 286.000 millones de dólares en energías renovables en todo el mundo, superando las inversiones en gas natural y carbón [22]. Brasil fue uno de los países en desarrollo que más aplicó capital en procesos que utilizan fuentes de energía renovables, correspondiendo a una inversión de aproximadamente el 73 %. Esto generó un cambio en la matriz energética brasileña, ya que los combustibles fósiles que dominaban los medios de producción pasaron a corresponder sólo al 22 % de la producción de energía eléctrica [23]. Al aumentar el uso de fuentes de energía renovables, el hidrógeno verde comenzó a ser visto como un combustible que podría sustituir a los productos derivados del petróleo en la industria del automóvil. Además, el hidrógeno verde puede sustituir al carbón como

combustible para alimentar las turbinas de las centrales termoeléctricas y podría servir en la producción de energía secundaria como la solar, la eólica y la hidroeléctrica [24].

El hidrógeno verde ha sido estudiado en investigaciones innovadoras que analizan su uso con fines de conversión de energía, demostrando ser una opción prometedora como combustible en pilas de combustible o como mezcla con los combustibles fósiles [24, 25]. Así, surge como una alternativa prometedora, dado que es el más abundante entre los elementos del universo, y conteniendo una densidad energética importante (mayor a la de los combustibles convencionales [26]), emitiendo únicamente vapor de agua.

La constante evolución del mercado, acompañado de la crisis climática, está exigiendo soluciones energéticas que sean carbono neutral, es decir, reutilizar el ya existente en la atmósfera y no emitir más. Este concepto, sumado al Hidrógeno verde, da origen a los electrocombustibles o (e-combustibles o e-fuels, por su denominación en inglés). En la Figura 2 se esquematiza el proceso de obtención de este tipo de combustible, el cual se obtiene a través de un proceso de síntesis de CO<sub>2</sub> capturado de la atmósfera e Hidrógeno verde obtenido a través de un proceso de electrólisis, cuya electricidad es provista por generación renovable como la energía eólica. Este proceso de síntesis principalmente genera tres productos: e-gasolina el cual podría ser usado para el transporte terrestre, e-combustible de aviación y e-GL, el cual puede ser usado como sustituto del gas licuado de petróleo (GLP).

Debido a que el origen de los hidrocarburos que componen el GLP es el petróleo crudo o el gas natural, a nivel mundial las mezclas de propano – butano presentan variabilidad en su composición. Actualmente, la norma NCh 72 [27] impone límites para el contenido de butano en las mezclas de propano – butano, a diferencia de lo que ocurre con las normas equivalentes en Norteamérica y Europa. Los gases licuados de petróleo (GLPs) son uno de los combustibles más usados en Chile, principalmente a nivel domiciliario e industrial. El GLP más usado en Chile es una mezcla de hidrocarburos compuesta mayoritariamente por

propano ( $C_3H_8$ ) y butano ( $C_4H_{10}$ ). La calidad y composición de estos combustibles está regulada por la norma NCh 72:1999, “Gases licuados de petróleo – Especificaciones”. Esta norma define distintos tipos de productos, incluyendo Propano comercial, Butano comercial y Mezclas propano – butano comercial.

La llegada de combustibles de nueva generación ofrece una solución potencial a los retos que plantean el cambio climático, la evolución de los marcos normativos y la necesidad de una transición en las fuentes de energía [28]. Los combustibles derivados de procesos de síntesis verdes basados en el hidrógeno se han identificado como un prometedor sustituto de los combustibles convencionales. Su potencial depende de varios factores, como su perfil de emisiones neutras, su poder calorífico y sus características de combustión similares [29, 30, 31]. Además, estos combustibles pueden incorporarse a la infraestructura energética existente con mínimas modificaciones [32]. Existen varios procesos de síntesis de combustibles descritos en la literatura, que emplean diferentes rutas para la obtención de combustibles, cada uno con un nivel de desarrollo tecnológico o TRL diferente [33].

En concreto, el novedoso GLP renovable que se propone en este estudio es un subproducto de la síntesis power-to-gasoline (PtG) [34, 35], que emplea  $H_2$  obtenido mediante electrólisis y  $CO_2$  capturado de la atmósfera. La energía para los procesos procede de fuentes renovables. Una simplificación del proceso de síntesis se detalla en la Figura 1.2, donde el proceso comienza con la producción de metanol ( $MeOH$ ), como paso intermedio, a partir de hidrógeno verde producido por electrólisis y  $CO_2$  capturado de la atmósfera mediante un Sistema de Captura de Carbono (CCS). Posteriormente, el metanol se transforma en gasolina sintética mediante el proceso de metanol a gasolina (MtG). A diferencia del refinado convencional del petróleo, el proceso MtG no produce compuestos de azufre ni otras emisiones tóxicas durante la etapa de destilación, por lo que ofrece una alternativa más benigna para el medio ambiente [33]. Además, el proceso genera unos subproductos mínimos (como compuestos  $C_3-C_4$ ), lo que garantiza que la mayor parte del metanol se convierta en gasolina

sintética utilizable, mejorando así la sostenibilidad y la eficiencia. A continuación, el metanol se convierte en gasolina sintética mediante el proceso de conversión de metanol en gasolina, que forma parte del proceso de síntesis de PtG [33, 34]. Durante esta conversión, se produce GLP renovable (en lo sucesivo, e-GL) como subproducto del proceso de MtG, lo que hace que todo el proceso sea renovable al 100 %, utilizando únicamente electricidad verde y  $\text{CO}_2$  atmosférico.

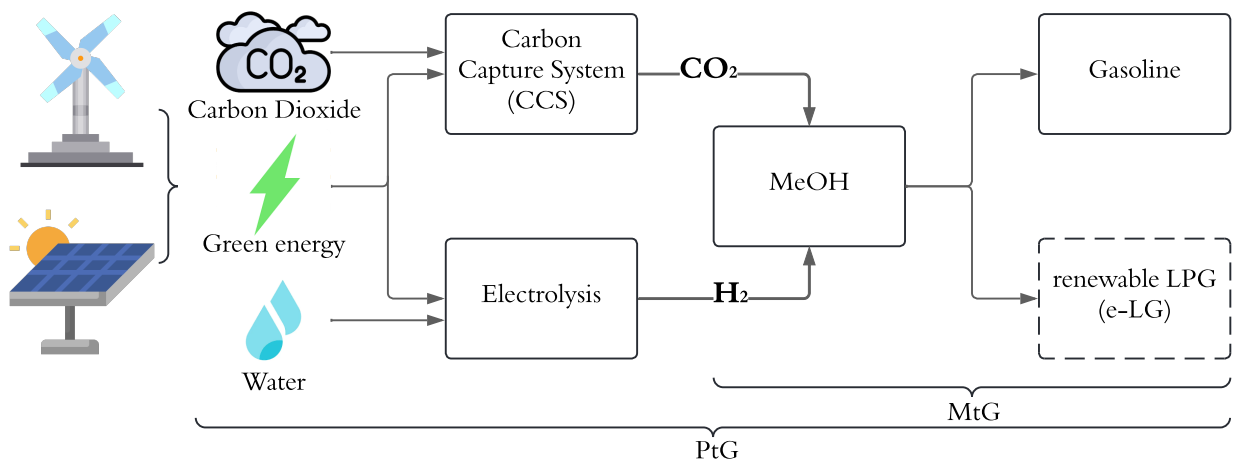


Figura 1.2: Proceso de obtención de GLP renovable (e-GL) a partir de la síntesis power to gasoline (PtG).

En los últimos años, se han llevado a cabo algunas investigaciones sobre las características de combustión, los mecanismos y las emisiones contaminantes de diferentes combustibles sintéticos sin carbono. Nobili et al. [36] muestran que los combustibles sostenibles (SAF) como HEFA, FT-SPK y ATJ producen significativamente menos hollín que los combustibles convencionales como Jet-A, JP5 y JP8. Las mezclas de SAF con Jet-A también reducen la formación de hollín. Estos resultados subrayan el potencial para reducir las emisiones de hollín en la aviación, convirtiéndola en una opción más limpia y sostenible. Por otra parte, He et al. [37] investigaron las características de formación de hollín en la pirólisis híbrida de mezclas de amoníaco con cero carbono y etileno, evaluando cómo afectan las condiciones de temperatura a la grafitización y reactividad de los productos formados, con implicaciones

para el desarrollo de combustibles con cero carbono. Härtl et al. [38] exploraron el uso del combustible diésel sintético OME<sub>1</sub>, un combustible oxigenado con C<sub>1</sub>, en motores diésel y demostraron que puede reducir significativamente las emisiones de hollín en comparación con el diésel convencional. Sus resultados demostraron que el OME<sub>1</sub> arde casi sin hollín en llamas de difusión, incluso a cargas elevadas y en condiciones estequiométricas, gracias a su alto contenido en oxígeno y a la ausencia de enlaces C-C, lo que lo convierte en una prometedora alternativa sostenible a los combustibles fósiles. Por último, Bui et al. [39] revisan las emisiones de hollín y partículas de los combustibles derivados de la biomasa, como el 2,5-dimetilfurano (DMF), destacando su potencial para reducir las emisiones de hollín en comparación con los combustibles tradicionales como la gasolina y el gasóleo. Sus conclusiones sugieren que el DMF, especialmente cuando se mezcla con gasolina o gasóleo, genera menores concentraciones de hollín debido a su estructura oxigenada.

En este estudio, se lleva a cabo un análisis normativo, teórico, numérico y experimental exhaustivo para evaluar la factibilidad de incorporar el gas licuado renovable (e-GL) en la matriz energética tanto en Chile, como en el mundo. Este estudio fue llevado en conjunto a GASCO, quien se adjudicó un proyecto de investigación, desarrollo e innovación (I+D+i) de CORFO, para analizar este combustible 100 % hecho en Chile. La compañía proveyó los datos necesarios y el combustible para llevar a cabo el estudio, además de financiar la presentación de los trabajos en diferentes congresos. Este combustible innovador es comparado con el propano HD5 (en adelante, HD5) para analizar su rendimiento, características de combustión y emisiones contaminantes, con especial énfasis en la producción de hollín y su impacto ambiental. El análisis normativo se enfoca en la revisión de estándares nacionales e internacionales, incluyendo normativas como NFPA 58, GPA 2140 y NCh 72, entre otras. Este análisis busca identificar brechas en los marcos regulatorios actuales y evaluar el grado de aceptación normativa del e-GL, considerando su composición química y características operativas. Asimismo, se exploran posibles actualizaciones en las regulaciones para facilitar

su implementación en mercados industriales, residenciales y comerciales.

Desde una perspectiva numérica, se simulan las propiedades del e-GL, abarcando parámetros críticos como la temperatura adiabática de llama, los límites de inflamabilidad, el índice de Wobbe y la seguridad en condiciones operativas. Estas simulaciones, realizadas mediante modelos cinéticos detallados, permiten evaluar la intercambiabilidad del e-GL con combustibles convencionales en diferentes configuraciones, proporcionando información clave sobre su adaptabilidad en equipos existentes.

Finalmente, el enfoque experimental aplica técnicas avanzadas y no intrusivas para caracterizar las propiedades ópticas y físicas del hollín generado en una llama laminar no premezclada de e-GL y HD5. Se miden variables como la fracción de volumen de hollín, la radiación térmica emitida, la estabilidad de la llama y la eficiencia de conversión de carbono. Este enfoque experimental no solo permite validar los resultados numéricos, sino que también proporciona una base sólida para entender las diferencias en el comportamiento de combustión entre el e-GL y los combustibles fósiles tradicionales. En conjunto, este estudio multidimensional integra aspectos normativos, numéricos y experimentales para establecer el potencial del e-GL como un combustible renovable viable y sostenible. Los resultados obtenidos buscan contribuir al desarrollo de estrategias para su implementación segura y eficiente, apoyando la transición hacia un futuro energético más limpio y alineado con los objetivos globales de sostenibilidad.

El estudio tendrá una componente teórica (principalmente en aspectos relativos a la seguridad y a la intercambiabilidad de gases) y de simulación numérica con validación experimental realizada en los laboratorios del Energy Conversion and Combustion Group (EC<sup>2</sup>G) de la Universidad Técnica Federico Santa María (USM). También, se llevará a cabo una vigilancia tecnológica que permita tener una revisión detallada de la literatura técnica y científica actualizada respecto a la combustión (premezcla y difusión) de los combustibles

e-GL existentes en diferentes configuraciones. Tomando en cuenta los aspectos señalados anteriormente se ha establecido la siguiente metodología para el estudio:

- Revisión de normas internacionales y nacionales: se revisará la normativa internacional y nacional, además de códigos pertinentes, informes y buenas prácticas relativas al uso de los e-GL respecto a los combustibles convencionales, a nivel mundial. Además de una revisión bibliográfica exhaustiva en la relación a estudios principalmente experimentales del uso del e-GL en diferentes configuraciones.
- Consideraciones de seguridad: se realizará un análisis basado en información técnica sobre la seguridad en el envasado, almacenamiento, transporte y operación de mezclas tipo e-GL. También, se realizará un estudio teórico (con análisis de sensibilidad) que permita evaluar los límites de inflamabilidad, temperatura adiabática de llama, liberación de energía (potencial) e índice de Wobbe para un combustible e-GL que deberá definir GASCO S.A.
- Emisiones y estabilidad de llama: se desarrollará un análisis numérico, validado experimentalmente, usando un código (perteneciente al EC<sup>2</sup>G) que resuelve en forma detallada las ecuaciones de conservación y la cinética química de diferentes combustibles gaseosos hasta el C<sub>4</sub>, que permita evaluar cuantitativamente las emisiones de especies químicas contaminantes gaseosas menores y de partículas de hollín, usando una configuración de una llama laminar de difusión, que ha sido validada internacionalmente. Además, se incorporarán mediciones experimentales y análisis de datos obtenidos para estudiar la estabilidad de la llama y liberación de energía por radiación en diferentes configuraciones:
  - e-GL con aire a 21 % en volumen de O<sub>2</sub> (OI = 21).
  - e-GL con aire a índice de OI <21 % .

- Mezcla GLP (corriente de GASCO S.A.) con e-GL.
- Huella de carbono: se analizarán las emisiones de CO<sub>2</sub> con el código numérico y se proporcionarán modelos que permitan estimar la huella de carbono usando la diferentes mezclas e-GL y GLP para configuración premezcla (laminar simulada) y difusión (laminar).

## 1.2. Pregunta de investigación

El cambio climático y la crisis energética global han puesto en evidencia la urgente necesidad de transitar hacia fuentes de energía sostenibles, seguras y de bajas emisiones. Los combustibles fósiles, principales responsables del 80% de las emisiones globales de CO<sub>2</sub>[1], presentan problemas significativos debido a su agotabilidad, su impacto ambiental y los riesgos asociados a su extracción y uso. En este contexto, el desarrollo e implementación de combustibles renovables, como el gas licuado renovable (e-GL), representan una alternativa prometedora para mitigar estos efectos adversos y avanzar hacia una matriz energética carbono-neutral.

El e-GL, producido a partir de CO<sub>2</sub> capturado de la atmósfera e hidrógeno verde obtenido mediante electrólisis alimentada por energías renovables, destaca por ser un combustible carbono-neutral y compatible con la infraestructura actual de distribución y uso de GLP [33]. Sin embargo, su incorporación en los mercados doméstico, comercial e industrial enfrenta desafíos técnicos, normativos y operativos significativos. La falta de estándares claros para el e-GL, junto con la necesidad de garantizar su seguridad, eficiencia y compatibilidad con los equipos actuales, limita su adopción y comercialización.

En este contexto, surge la siguiente pregunta central de la investigación:

**¿Se puede intercambiar una mezcla representativa de Gas Licuado sintético renovable (BioGL o e-GL) por GLP corriente de manera segura, eficiente y limpia en Chile, en los mercados doméstico, comercial e industrial?**

Para responder esta interrogante, es esencial evaluar la alineación del e-GL con las regulaciones nacionales e internacionales, identificar brechas normativas que podrían impedir

su implementación y caracterizar sus propiedades de combustión, incluyendo estabilidad de llama, índices de inflamabilidad y producción de emisiones contaminantes como el hollín. Además, es necesario determinar su nivel de intercambiabilidad con el propano HD5, un combustible convencional ampliamente utilizado en el país.

Este estudio aborda estos desafíos mediante un enfoque integral que combina:

- **Análisis normativo:** Revisión de regulaciones y estándares vigentes para identificar los requerimientos técnicos y las brechas regulatorias asociadas al uso del e-GL.
- **Simulaciones numéricas:** Modelado de las propiedades de combustión del e-GL, incluyendo su estabilidad de llama, límites de inflamabilidad y generación de emisiones. Estas simulaciones se realizarán mediante códigos avanzados que incorporan cinética química detallada.
- **Validación experimental:** Aplicación de técnicas no intrusivas para caracterizar la fracción de volumen y temperatura de hollín, la radiación térmica y la estabilidad de la llama en configuraciones laminares no premezcladas de e-GL y propano HD5.

La investigación propuesta no solo busca establecer la viabilidad técnica y normativa del e-GL, sino también generar conocimiento que contribuya al desarrollo de estrategias para su implementación segura y sostenible en los mercados nacionales e internacionales. Los resultados de este trabajo tendrán un impacto directo en la transición energética, posicionando al e-GL como un actor clave en la lucha contra el cambio climático y el avance hacia un sistema energético más limpio y resiliente.

## 1.3. Alcance

Este trabajo se enmarca en el desarrollo de una evaluación integral que permita determinar la viabilidad técnica, normativa y operativa del gas licuado renovable (e-GL) como sustituto parcial o total del gas licuado de petróleo (GLP) en los mercados doméstico, comercial e industrial en Chile. El alcance del estudio incluye las siguientes áreas clave:

### 1. Análisis normativo:

- Revisión exhaustiva de las normativas nacionales e internacionales aplicables al uso de combustibles gaseosos, con énfasis en aspectos de seguridad, intercambiabilidad y límites de composición química.
- Identificación de brechas regulatorias y elaboración de recomendaciones para la adaptación de estándares que permitan la inclusión del e-GL.

### 2. Análisis teórico y numérico:

- Modelado de las propiedades de combustión del e-GL utilizando herramientas de cinética química detallada.
- Realización de simulación de parámetros críticos como estabilidad de llama, límites de inflamabilidad, índices de Wobbe y emisión de contaminantes (gaseosos y partículas de hollín).
- Evaluación del impacto de la incorporación del e-GL en equipos representativos en condiciones de operación típicas.

### 3. Validación experimental:

- Aplicación de técnicas no intrusivas para la caracterización de llamas laminares no premezcladas de e-GL y propano HD5.

- Medición de variables como la fracción de volumen de hollín, radiación térmica, estabilidad de llama y eficiencia de conversión de carbono.
- Generación de datos experimentales que permitan validar los modelos numéricos y establecer comparaciones robustas entre el e-GL y el GLP convencional.

#### 4. **Evaluación de impacto:**

- Estimación de la huella de carbono asociada al uso de e-GL en diferentes configuraciones y mezclas con GLP.

#### 5. **Desarrollo tecnológico:**

- Diseño conceptual de un banco de pruebas experimental que permita la evaluación continua de mezclas de e-GL en condiciones operativas reales.

El alcance de esta investigación cubre desde la fundamentación teórica y normativa hasta la validación experimental y el diseño conceptual, proporcionando una visión integral que permita apoyar la adopción del e-GL como un combustible sostenible y competitivo en la transición energética global. Este estudio no cubre las pruebas del combustible en dispositivos aplicados como calderas y calefón, quemadores y simulaciones turbulentas, y simulaciones de flujos laminares 2D, por lo que quedan propuestas estas pruebas para trabajos futuros.

## 1.4. Objetivos

### 1.4.1. General

Evaluar la viabilidad técnica, normativa y operativa del gas licuado renovable (e-GL) como un sustituto sostenible del gas licuado de petróleo (GLP) en los mercados doméstico, comercial e industrial, mediante el análisis normativo, simulaciones numéricas y validación experimental, para contribuir al desarrollo de soluciones energéticas limpias y carbono-neutrales.

### 1.4.2. Específicos

1. Realizar un análisis exhaustivo de las normativas nacionales e internacionales aplicables al uso del e-GL, identificando brechas regulatorias y elaborando recomendaciones para su inclusión en la matriz energética.
2. Caracterizar numéricamente en llamas 0D y 1D las propiedades de combustión del e-GL, incluyendo parámetros como estabilidad de llama, límites de inflamabilidad, índice de Wobbe y emisiones contaminantes, utilizando herramientas de dinámica de fluidos computacional (CFD) y modelos de cinética química detallada.
3. Aplicar técnicas experimentales no intrusivas para medir variables críticas en una llama laminar no premezclada de e-GL y propano HD5, como la fracción de volumen de hollín, radiación térmica y estabilidad de llama, generando datos que validen los modelos numéricos.
4. Evaluar el impacto ambiental del e-GL mediante el cálculo de su huella de carbono en diferentes configuraciones y mezclas con GLP, determinando su potencial para reducir emisiones de gases de efecto invernadero y partículas contaminantes.

5. Proponer lineamientos técnicos y estratégicos para la implementación segura y eficiente del e-GL, contribuyendo a su adopción como una solución energética sostenible y competitiva.

# Capítulo 2

## Vigilancia tecnológica

### Contenidos

---

2.1	PtX: Síntesis de combustibles desde energía eléctrica . . . . .	<b>18</b>
2.1.1	Producción de combustibles sintéticos y vectores energéticos . . . . .	18
2.1.2	Materia prima . . . . .	31
2.1.3	Proyectos de combustibles sintéticos y vectores energéticos en Chile . . . . .	48
2.2	Análisis normativo . . . . .	<b>65</b>
2.2.1	Normas sobre hidrocarburos gaseosos . . . . .	65
2.2.2	Captura de CO <sub>2</sub> . . . . .	79
2.2.3	Producción, almacenamiento y transporte de H <sub>2</sub> . . . . .	82
2.3	Modelamiento teórico y numérico . . . . .	<b>86</b>
2.3.1	Intercambiabilidad . . . . .	86
2.3.2	Seguridad y condiciones de flamabilidad . . . . .	90
2.3.3	Diagrama ternario . . . . .	98
2.3.4	Huella de carbono . . . . .	99
2.3.5	Mecanismos cinéticos . . . . .	101
2.4	Materiales y métodos experimentales . . . . .	<b>107</b>
2.4.1	Introducción . . . . .	107
2.4.2	Marco experimental . . . . .	108
2.4.3	Metodología experimental . . . . .	109

---

---

## 2.1. PtX: Síntesis de combustibles desde energía eléctrica

### 2.1.1. Producción de combustibles sintéticos y vectores energéticos

Para la creación de combustibles sintéticos que emulan las características de los combustibles convencionales, se necesitan tres componentes clave: energía, hidrógeno y carbono [33].

Primero, la electricidad juega un rol fundamental en los procesos de síntesis *Power-to-X* (PtX) [33, 40], ya que es la fuente primaria de energía que permite transformar recursos como el agua y el CO<sub>2</sub> en combustibles líquidos sintéticos. Dependiendo de la fuente de donde provenga la electricidad, tanto el hidrógeno, como el proceso de síntesis puede adquirir características o *colores* distintivos. En la Figura 2.1 se puede observar esta definición, donde en particular el color rosa, amarillo y verde son los asociados a la fuente donde se obtiene la electricidad. En particular, este último ha ganado bastante atención mundial debido a el poco impacto o huella de carbono que posee en su generación [40].

En los sistemas *Power-to-X*, la electricidad renovable se convierte en el eje central de un proceso integral que permite la producción de combustibles líquidos a partir de recursos abundantes como el agua y el dióxido de carbono. El proceso se inicia con la electrólisis del agua, mediante la cual se obtiene hidrógeno de alta pureza. La electrólisis del agua es un proceso que emplea energía eléctrica para descomponer el agua en oxígeno e hidrógeno [41], el cual es indispensable para la síntesis de metanol, dimetil éter (DME) y combustibles Fischer–Tropsch (FT) [33]. Paralelamente, el carbono puede capturarse desde fuentes industriales concentradas [42] o directamente del aire utilizando tecnologías de captura química [43],



Figura 2.1: Color del H<sub>2</sub> según su fuente de obtención.

gasificación de biomasa [44] o biológica [45], como la fotosíntesis artificial. Se puede capturar en forma de monóxido o dióxido de carbono [43], CO) y CO<sub>2</sub>, respectivamente. Dependiendo de la fuente de carbono utilizada, podemos clasificar los combustibles sintetizados en dos grandes grupos: los derivados de fuentes biológicas, conocidos como *biocombustibles sintéticos*, y aquellos producidos a partir de CO<sub>2</sub> capturado mediante el uso de energías renovables, llamados *electrocombustibles* o *e-Fuels*.

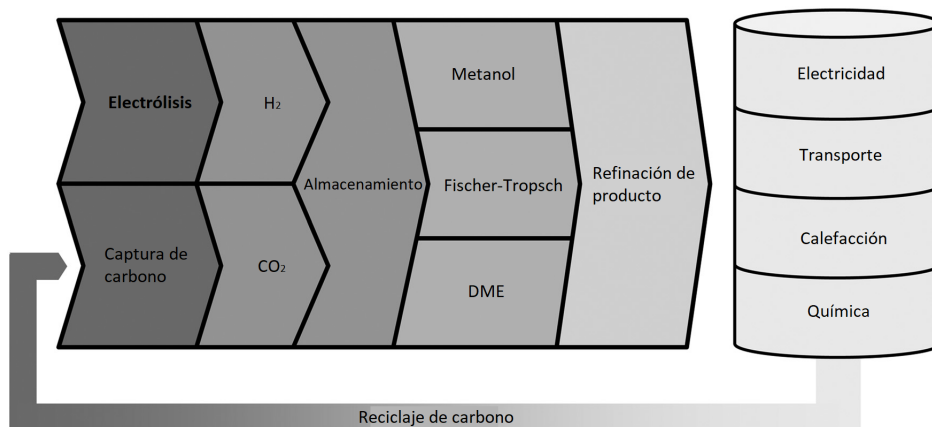


Figura 2.2: Rutas *Power-to-X* para transformar electricidad en productos químicos mediante electrólisis y síntesis. Adaptado desde [33].

Una vez capturado, el  $\text{CO}_2$  necesita ser convertido en  $\text{CO}$  a través de la reacción reversible de cambio de agua a gas (RWGSR, por sus siglas en inglés) [46]. Esta transformación es fundamental para la posterior combinación del  $\text{CO}$  con  $\text{H}_2$  y la formación de *SynGas*, un precursor clave en la mayoría de los métodos de producción de combustibles sintéticos [47]. Una vez disponibles ambos insumos, el hidrógeno y el  $\text{CO}_2$  se introducen en un sistema de síntesis catalítica que permite su conversión en productos como metanol, dimetil éter o combustibles sintéticos tipo diésel, a través de reacciones altamente controladas (véase Figura 2.3) [33]. Este conjunto de etapas no solo permite la producción de combustibles con alta densidad energética, aptos para el transporte pesado, la aviación y la industria química, sino que además posibilita el cierre del ciclo del carbono [29]. Al utilizar el  $\text{CO}_2$  capturado como materia prima y devolverlo a la atmósfera únicamente tras su uso como combustible, se evita la incorporación neta de carbono al sistema, contribuyendo a la mitigación del cambio climático [48].

Los procedimientos de síntesis siguen principalmente dos rutas: (1) el proceso de Fischer-Tropsch, que produce combustibles líquidos similares a la gasolina, el diésel y el keroseno; y (2) la síntesis de metanol, que puede servir como combustible en sí mismo o como intermediario para la generación de otros combustibles, como la gasolina y gas licuado sintético. Además, existe una tercera vía menos explorada (3): la producción de Dimetil Éter (DME) a partir del *SynGas*. El DME no solo puede emplearse directamente como combustible, sino que también puede actuar como un precursor en la síntesis de otros combustibles. Un mapa de los principales caminos para la producción de combustibles a través de FT, metanol y DME se muestra en la Figura 2.3, y que se detalla a continuación.

1. **Electrólisis:** La electrólisis del agua es el primer paso esencial en los procesos PtX, ya que permite la producción de hidrógeno utilizando electricidad renovable. Existen tres tecnologías principales:

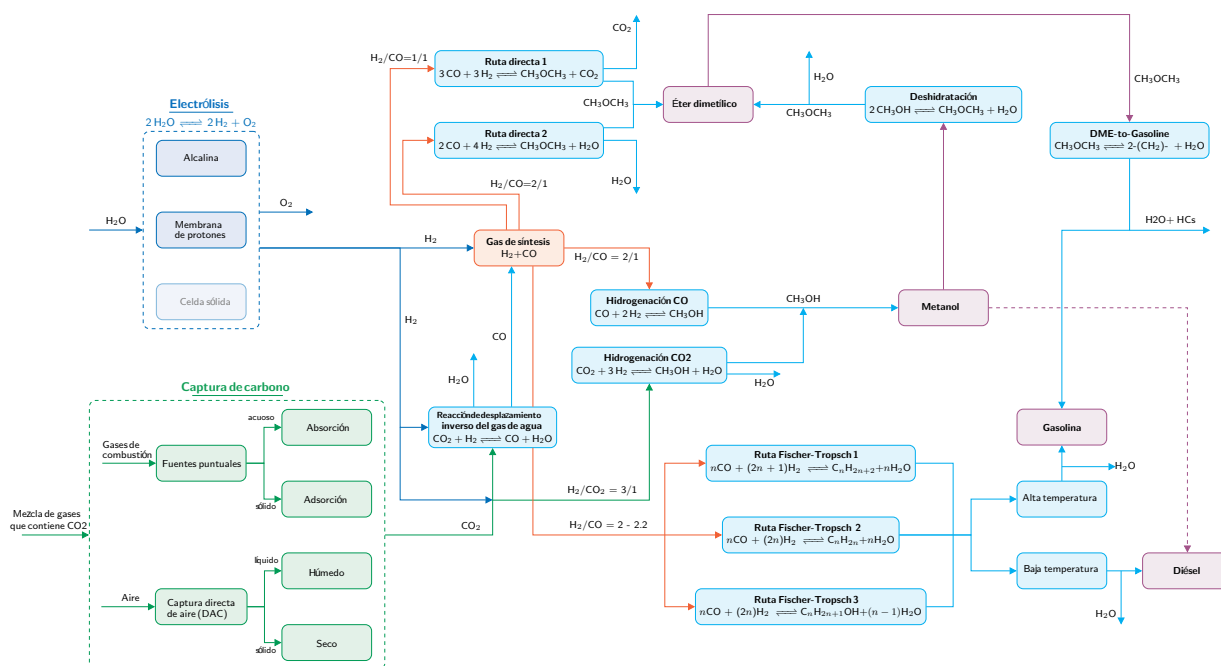


Figura 2.3: Caminos principales para la producción de combustibles sintéticos.

- (AEL) electrolizador alcalino: tecnología madura, con buena eficiencia y larga vida útil. Opera entre 60–90°C y puede alcanzar presiones de 10–30 bar. Es flexible, pero con tiempos de arranque más largos que otras tecnologías [49].
- (PEM) electrolizador de Membrana de Intercambio de Protones: Tiene mejor respuesta dinámica que la AEL, puede operar a mayor densidad de corriente (hasta 2 A/cm<sup>2</sup>) y es adecuada para operar en condiciones variables, como las de fuentes renovables. Su eficiencia y costos son similares a la AEL, pero con una mayor flexibilidad operativa [49].
- (SOEC) célula electrolítica de óxidos sólidos: Aún en etapa de investigación, opera a altas temperaturas (700–900°C), lo que le permite alcanzar eficiencias eléctricas teóricas superiores al 100 % (basado en el poder calorífico inferior del hidrógeno). Además, puede producir directamente SynGas mediante co-electrólisis de H<sub>2</sub>O y CO<sub>2</sub>, lo que resulta especialmente atractivo para procesos PtX. Sin embargo, enfrenta desafíos en cuanto a durabilidad de los materiales y operación a pre-

sión [41].

En resumen, mientras que AEL y PEM ya están disponibles a escala industrial (MW), la SOEC presenta un gran potencial técnico pero requiere aún superar importantes barreras tecnológicas para su comercialización.

2. Captura de carbono: La captura de carbono representa una etapa crítica en los procesos PtX, ya que proporciona el dióxido de carbono necesario para la síntesis de combustibles líquidos. Existen principalmente dos rutas para obtener el CO<sub>2</sub> requerido [50, 51, 52]:

- a) Captura desde fuentes puntuales industriales: se realiza a partir de corrientes gaseosas con alta concentración de CO<sub>2</sub>, como las provenientes de plantas termoeléctricas, refinerías, cementeras o acerías. Este tipo de captura es más eficiente y menos costosa debido a la mayor presión parcial del CO<sub>2</sub> en los gases de escape.
- b) Captura directa del aire (DAC): emplea tecnologías de absorción o adsorción para extraer CO<sub>2</sub> directamente de la atmósfera. Aunque permite cerrar completamente el ciclo del carbono, este método requiere el procesamiento de grandes volúmenes de aire y consume más energía. Por ello, sus costos pueden ser hasta diez veces mayores que los de la captura desde fuentes industriales. No obstante, se espera que la mejora tecnológica y las economías de escala reduzcan significativamente estos costos hacia 2040.

En ambos casos, se emplean diversas tecnologías, entre ellas:

- **Absorción química en líquidos**, típicamente soluciones acuosas de aminas, donde el CO<sub>2</sub> es removido y posteriormente liberado por desorción térmica.
- **Adsorción en sólidos porosos**, como carbones activados, zeolitas o sílica, con regeneración por cambio de presión o temperatura.

- **Captura seca mediante compuestos inorgánicos**, como el looping de carbonato cálcico, en el que el  $\text{CO}_2$  se fija como  $\text{CaCO}_3$  y luego se libera por calcinación.

La elección de la tecnología depende de factores como la concentración de  $\text{CO}_2$ , los costos energéticos, la escala del sistema y la ubicación geográfica. La disponibilidad de  $\text{CO}_2$  purificado y a presión adecuada es clave para garantizar una síntesis eficiente y estable dentro del esquema PtX.

3. Fundamentos del ciclo de síntesis y diseño de reactor: La conversión de  $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$  y  $\text{H}_2$  en productos como metanol, DME o combustibles tipo Fischer–Tropsch es un proceso altamente exotérmico, lo que implica que la conversión de equilibrio se favorece a bajas temperaturas, mientras que la velocidad de reacción mejora a temperaturas más elevadas. Esta contradicción termocinética exige un diseño de reactor que permita un control preciso de la temperatura y una gestión eficaz del calor generado, especialmente para evitar puntos calientes que podrían desactivar el catalizador o generar subproductos indeseados [53]. El ciclo de síntesis con sus principales equipos pueden ser observados en la Figura 2.4. Principalmente se cuenta con un reactor e intercambiadores de calor para los procesos de metanol, DME y síntesis de FT. El gas de alimentación fresca se mezcla con el gas reciclado. Esta corriente combinada puede ser precalentada opcionalmente antes de ingresar al reactor de síntesis, donde el gas de síntesis se convierte parcialmente. Luego, el gas reaccionado se enfría y los líquidos se separan mediante condensación. Este producto crudo debe ser posteriormente purificado para cumplir con las especificaciones requeridas. El gas de síntesis no reaccionado se recicla, purgando una pequeña fracción para evitar la acumulación de gases inertes. Para maximizar la conversión, es necesario reciclar el gas de síntesis no convertido ( $\text{H}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$ ), ya que el equilibrio limita la conversión por pasada. Esto también ayuda a diluir los reactivos, reducir el aumento de temperatura en el reactor y mantener condiciones óptimas para el catalizador. La composición óptima del gas de entrada se define a través del **número**

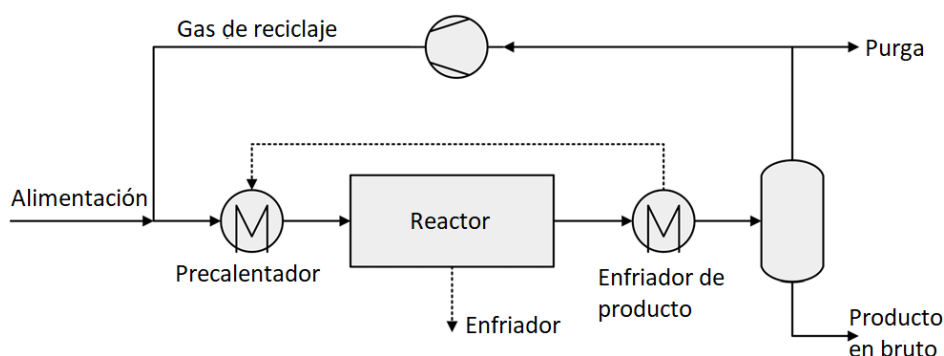


Figura 2.4: Bucle de síntesis convencional en metanol, DME y procesos FT. Adaptado desde [33].

**estequiométrico** (SN), que representa la relación molar entre los reactivos [33]:

$$SN = \frac{H_2 - CO_2}{CO + CO_2} \quad (2.1)$$

En cuanto al diseño del reactor, se pueden emplear diferentes configuraciones dependiendo del producto objetivo y la escala del proceso, detallados en la Tabla 2.1. Entre ellas se incluyen reactores adiabáticos, de lecho fijo con enfriamiento intermedio, reactores isotérmicos refrigerados por agua (*steam-raising converters*), reactores con lecho fluidizado o reactores en fase líquida. La selección del tipo de reactor impacta directamente en la eficiencia térmica, la vida útil del catalizador y la escalabilidad del sistema.

4. Algunas tecnologías alternativas de síntesis: Además de las rutas convencionales de síntesis en fase gaseosa, se han propuesto tecnologías alternativas que podrían ofrecer ventajas en términos de eficiencia, diseño de planta y flexibilidad operativa. Entre estas destaca la **síntesis directa de dimetil éter (DME)** a partir de  $CO_2$  y  $H_2$ , en lugar del enfoque secuencial tradicional que requiere primero producir metanol y luego deshidratarlo. Esta vía integrada permite una mayor conversión del gas de síntesis y una simplificación del sistema de reacción [58]. Otra línea de investigación se enfoca en la **síntesis en fase líquida**, en la cual el catalizador se encuentra suspendido en un

Cuadro 2.1: Resumen de los diseños de reactores aplicados para la síntesis de metanol, DME y combustibles Fischer–Tropsch [54, 55, 56, 57].

Diseño de reactor	Lecho fijo adiabático	Lecho fijo tipo <i>Quench</i>	Lecho fijo SRC <sup>a</sup>	Lecho fijo GCC <sup>b</sup>	Lecho fluido	Fase líquida
<b>Modo de operación</b>	Adiabático	Politrópico	Isotérmico	Politrópico	Isotérmico	Isotérmico
<b>Estado del catalizador</b>	Lecho catalítico	Lecho dividido en secciones	Catalizador en carcasa o tubo	Catalizador en carcasa o tubo	Catalizador en lecho fluidizado	Catalizador suspendido en hidrocarburos líquidos
<b>Concepto de enfriamiento</b>	Serie de reactores con enfriamiento intermedio	Inyección de gas frío entre secciones	Evaporación de agua en el lado opuesto del catalizador	Precalentamiento de gas frío que pasa por tubos dentro del lecho	Intercambiador de calor tipo serpentín sumergido	hidrocarburos líquidos como medio térmico; remoción interna del calor
<b>Ventajas</b>	Escalado simple, sin esfuerzo mecánico sobre el catalizador, tiempo de residencia definido	Sin esfuerzo mecánico sobre el catalizador, mejor control de temperatura	Alta eficiencia de recuperación de calor, buena transferencia y control	Alta transferencia térmica, distribución uniforme de temperatura	Coefficientes de transferencia de calor altos, distribución uniforme de temperatura	Excelente transferencia de calor, perfil isotérmico de reacción
<b>Desventajas</b>	Baja transferencia de calor, riesgo de puntos calientes, múltiples recipientes a presión y tuberías	Requiere gran volumen de catalizador	Gran número de tubos, costoso	Transferencia de calor limitada	Tiempo de residencia no uniforme (formación de burbujas), desgaste y erosión del catalizador, difícil de escalar	Alto esfuerzo mecánico sobre el catalizador

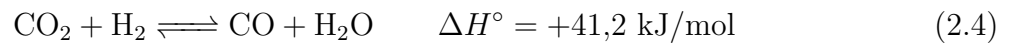
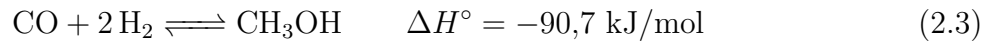
<sup>a</sup>SRC = Steam Raising Converter (generador de vapor).

<sup>b</sup>GCC = Gas-Cooled Converter (convertidor enfriado por gas).

medio líquido que actúa como fluido de transferencia térmica. Esta tecnología permite operar bajo condiciones isotérmicas, mejorando el control de temperatura y disminuyendo el riesgo de formación de puntos calientes. Aunque el concepto ha sido conocido desde hace décadas [59], su implementación industrial aún enfrenta desafíos técnicos significativos. También se ha investigado la posibilidad de **catalizadores homogéneos** para la conversión de CO<sub>2</sub> a metanol en condiciones suaves. En estos sistemas, el catalizador y los reactivos se encuentran en una sola fase, permitiendo un control químico preciso. Sin embargo, aún existen barreras relacionadas con la recuperación del catalizador y la escalabilidad del proceso [60]. Finalmente, se ha explorado la **electrosíntesis directa** como una alternativa disruptiva, en la que la electricidad se usa no solo para producir H<sub>2</sub>, sino también para reducir directamente el CO<sub>2</sub> en productos químicos de valor. Este enfoque, aunque prometedor, se encuentra en etapas iniciales de desarrollo y requiere avances significativos tanto en eficiencia como en selectividad [61]. Estas tecnologías emergentes, aunque aún en desarrollo, representan un potencial considerable para transformar los esquemas PtX en configuraciones más compactas, eficientes y sostenibles [62].

## Procesos de síntesis

**Metanol** La síntesis de metanol es una tecnología industrial ampliamente desarrollada, basada en la hidrogenación de monóxidos de carbono (CO) y dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) en presencia de hidrógeno (H<sub>2</sub>). La reacción se lleva a cabo típicamente sobre catalizadores de Cu/ZnO/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> en condiciones moderadas de temperatura (200–300°C) [57, 63] y presión (50–100 bar) [64], optimizando la actividad catalítica y la estabilidad térmica del sistema. Los mecanismos de reacción pueden involucrar tanto al CO como al CO<sub>2</sub> como fuente de carbono, y las tres principales reacciones que rigen el sistema son [46, 65, 66]:



La Ecuación 2.2 corresponde a la hidrogenación directa del  $\text{CO}_2$ , mientras que la Ecuación 2.3 es la ruta clásica a partir de  $\text{CO}$ . La Ecuación 2.4 representa la reacción inversa de desplazamiento de gas de agua (*reverse water-gas shift*, RWGS), la cual está acoplada a los otros equilibrios y afecta la composición del gas de síntesis. Dado que todas las reacciones son equilibradas y altamente exotérmicas, la conversión por pasada se encuentra limitada por consideraciones termodinámicas. Por esta razón, las plantas industriales suelen operar con sistemas de reciclaje de gases no convertidos y utilizan estrategias de enfriamiento intermedio o reactores isotérmicos para evitar la desactivación térmica del catalizador [33]. El proceso convencional está siendo adaptado a esquemas *Power-to-Methanol*, en los cuales el hidrógeno proviene de electrólisis alimentada por fuentes renovables y el  $\text{CO}_2$  es capturado de emisiones industriales o del aire [29]. Estos sistemas imponen nuevos desafíos técnicos, tales como la necesidad de gestionar insumos intermitentes, variaciones en la pureza del gas y escalas más pequeñas, por lo que requieren rediseños tanto en el lazo de síntesis como en los sistemas de control térmico y separación.

Los productos potenciales a obtener de este proceso de síntesis, considerando *product upgrade* son metanol, DME, gasolina, GLP renovable, keroseno, entre otros hidrocarburos pesados.

**DME** El DME usualmente es un *by-product* o producto secundario de la síntesis de metanol [57]. La síntesis directa del dimetil éter (DME) se realiza principalmente mediante dos rutas industriales: un proceso en dos etapas (vía metanol) y un proceso directo desde gas de síntesis [33]. En la ruta convencional de dos etapas, el metanol se produce primero a partir de CO o CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>, y luego es deshidratado sobre un catalizador ácido para formar DME [67]:



Esta reacción de deshidratación es exotérmica y típicamente se lleva a cabo sobre catalizadores sólidos ácidos como aluminas, zeolitas o sílica-alúmina [68]. El proceso en dos etapas ofrece flexibilidad operativa y permite optimizar la síntesis de metanol por separado. Por otro lado, la síntesis directa de DME (también conocida como proceso unificado) combina en un solo reactor la formación de metanol desde gas de síntesis y su posterior deshidratación a DME, utilizando catalizadores bifuncionales que integran sitios metálicos (para la formación de metanol) y sitios ácidos (para la deshidratación) [69]:



La reacción global para la síntesis directa de DME a partir de CO y H<sub>2</sub> es:



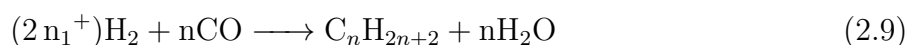
Y, desde CO<sub>2</sub>:



El proceso directo permite una mayor conversión del gas de síntesis por pasada, ya que al consumir el metanol de forma simultánea, se desplaza el equilibrio de su formación. Sin embargo, presenta desafíos técnicos como la necesidad de desarrollar catalizadores estables

y altamente activos que resistan el vapor de agua y las condiciones térmicas del sistema. También se debe controlar cuidadosamente la distribución de calor y el equilibrio entre las funciones metálica y ácida del catalizador bifuncional [69]. Actualmente, la síntesis directa de DME está siendo evaluada para aplicaciones en esquemas PtX, ya que el DME presenta ventajas como su alto contenido energético, facilidad de almacenamiento y transporte, y su potencial uso como combustible limpio en motores de combustión interna o como vector de hidrógeno.

**Fischer-Tropsch** La síntesis Fischer-Tropsch (FT) es un proceso catalítico que convierte gas de síntesis, compuesto por CO y H<sub>2</sub>, en una amplia gama de hidrocarburos líquidos y cerosos [70, 71]. Estos productos pueden ser refinados posteriormente para obtener combustibles sintéticos como diésel, gasolina o queroseno [72]. La reacción global del proceso FT para la formación de alcanos lineales puede representarse como:



donde C<sub>n</sub>H<sub>2n+2</sub> representa un alcano de cadena lineal. También pueden formarse alquenos (C<sub>n</sub>H<sub>2n</sub>), especialmente a temperaturas más elevadas. Los catalizadores más utilizados en el proceso FT son los de Fe y Co [73]. El proceso se clasifica según la temperatura de operación [74, 75, 76]:

- **FT de baja temperatura (LTFT):** 200–240 °C, favorece la producción de ceras y combustibles pesados.
- **FT de alta temperatura (HTFT):** 300–350 °C, genera fracciones más ligeras como gasolina.

La distribución de productos sigue la ley de Anderson-Schulz-Flory (ASF), lo cual

implica la producción simultánea de múltiples fracciones [77]. Por ello, es habitual que la síntesis FT se complemente con procesos de hidrotratamiento y separación para adaptar los productos a las especificaciones comerciales. En el marco de los esquemas PtX, el proceso FT permite la producción de combustibles drop-in compatibles con la infraestructura existente, aunque plantea desafíos técnicos como el control de la temperatura del reactor, la optimización de la selectividad y la integración con sistemas de electrólisis y captura de carbono [78].

Los productos potenciales a obtener de este proceso de síntesis, considerando *product upgrade* son diésel, gasolina, GLP renovable, keroseno, ceras, entre otros hidrocarburos pesados [70].

### **Nivel de Preparación Tecnológica de los procesos de síntesis**

El Technology Readiness Level (TRL), o Nivel de Preparación Tecnológica, es un indicador crucial para evaluar el grado de desarrollo y madurez de una tecnología en particular antes de su implementación práctica [79, 80]. En el contexto del proceso de *Methanol-to-Gasoline* (MtG), que abarca desde la producción de gases de síntesis hasta la síntesis de productos finales como combustibles líquidos y gaseosos, es fundamental considerar los diversos niveles de TRL asociados a cada etapa del proceso. Este permite una evaluación precisa del progreso tecnológico y ayuda a identificar los desafíos restantes antes de la implementación a gran escala. Esto es fundamental para garantizar la viabilidad técnica y económica de la producción de combustibles líquidos sintéticos mediante este proceso innovador. En particular, para el proceso de MtG se requiere producir H<sub>2</sub> a través de electrólisis (TRL 9 para alcalino [81] y PEM [82]), *SynGas* a partir del CO<sub>2</sub> a través del proceso *reverse water gas shift* (RWGS) con un TRL 6 o 9 [83]. En general, el proceso de MtG cuenta con un TRL de 9, siendo una tecnología bien desarrollada que puede producir tanto gasolina,

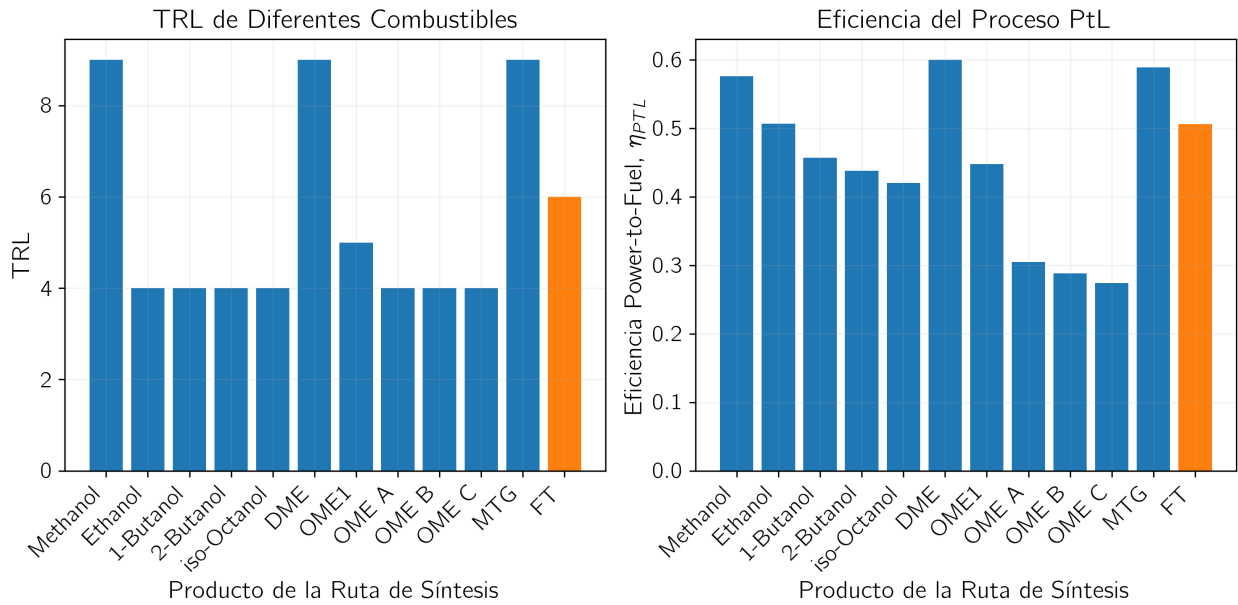


Figura 2.5: TRLs para la producción de distintos combustibles sintéticos.

como gas licuado [84]. La Figura 2.5 muestra los TRLs estimados para distintas tecnologías involucradas en la producción de combustibles sintéticos [84].

### 2.1.2. Materia prima

Como se mencionó anteriormente, para la síntesis de cualquier combustible es necesario obtener carbono e hidrógeno. El hidrógeno se puede obtener de la electrólisis del agua, y el carbono desde su captura o gasificación a partir de fuentes biológicas.

#### H<sub>2</sub> - Electrólisis

El proceso de electrólisis, facilita la separación del oxígeno y el hidrógeno de las moléculas de agua para producir hidrógeno molecular. Los electrolizadores desempeñan un papel clave en este proceso. Actualmente, hay dos tecnologías principales de electrolizadores

disponibles en el mercado: alcalina y de membrana de intercambio de protones (PEM, por sus siglas en inglés). Sin embargo, en un contexto más amplio, hay un total de cuatro tecnologías de electrolizadores disponibles.

**Electrolizador Alcalino (AEL)** La electrólisis alcalina es una tecnología confiable y rentable utilizada a nivel comercial en todo el mundo para la producción de hidrógeno. El proceso implica dos electrodos separados por una membrana o un diafragma separador de gas. El material del cátodo es óxido de cobalto y el material del ánodo es óxido de níquel [85]. Se utilizan elementos químicos no nobles como catalizadores en ambos electrodos, lo que reduce significativamente los costos de construcción [86]. Los electrodos están inmersos en un electrolito líquido, típicamente una solución acuosa concentrada de agua destilada con hidróxido de potasio (KOH) alrededor del 25-30 % en peso para mejorar la conductividad iónica [87]. La Tabla 2.2 presenta sus ventajas y desventajas.

**Electrolizador de Membrana de Intercambio de Protones (PEM)** Los electrolizadores de Membrana de Intercambio de Protones (PEM) utilizan un electrolito sólido, típicamente una membrana delgada de polímero, para evitar la mezcla de gases y la conducción electrónica. Esta membrana contiene grupos funcionales de ácido sulfónico ( $-\text{SO}_3\text{H}$ ), que facilitan la conducción de protones ( $\text{H}^+$ ) a través de ella [88]. Nafion es la membrana más comúnmente utilizada para la electrólisis del agua debido a su alta conductividad de protones, estabilidad química y durabilidad mecánica [89, 90]. Los electrodos requieren metales preciosos debido al ambiente ácido en estos electrolizadores, lo que lamentablemente aumenta el costo de la tecnología. Sin embargo, con la inversión y la investigación adecuadas, es posible encontrar materiales alternativos que puedan reducir el costo sin comprometer la eficiencia del proceso. El proceso en este tipo de electrolizador es el siguiente: el agua pasa a través del ánodo donde se divide en oxígeno, protones ( $\text{H}^+$ ) y electrones. Los protones luego

Cuadro 2.2: Ventajas y desventajas del electrolizador AEL obtenidas de [49].

**Ventajas**

1. tecnología de electrólisis desarrollada (con una vida útil de 100,000 horas).
2. Baja degradación ( $< 3 \mu\text{V/h}$ ).
3. Alta producción de hidrógeno (hasta  $760 \text{ Nm}^3/\text{h}$ ) con equipos de potencia en el rango de MW.
4. Área celular alta (hasta  $4\text{m}^2$ ).
5. Menor costo en comparación con la tecnología PEM debido a una mayor madurez tecnológica.

**Desventajas**

1. Rango de producción limitado entre 20 % y 100 %.
2. Las membranas separadoras no evitan la mezcla de  $\text{H}_2\text{-O}_2$ , lo que conduce al aumento de impurezas.
3. Bajo rendimiento ( $<40\%$ ), baja producción y mayor difusividad entre los gases  $\text{H}_2\text{-O}_2$ .
4. Baja densidad de corriente y densidad de potencia permitida ( $<1 \text{ mW/cm}^2$ ).
5. Presión de operación relativamente baja (electrolito líquido) en comparación con la electrólisis PEM.

pasan a través de la membrana del electrolito y se combinan nuevamente con electrones en el cátodo, siguiendo el circuito de energía externa, produciendo hidrógeno. Esta tecnología es ampliamente conocida como Electrólisis de Membrana de Intercambio de Protones porque el ion transferido entre los electrodos es el protón [91]. La Tabla 2.3 esboza sus ventajas y desventajas.

Cuadro 2.3: Ventajas y desventajas del electrolizador PEM obtenidas de [49].

**Ventajas**

1. Alta conductividad de protones (0.1 S/cm) en la membrana (20-300  $\mu\text{m}$ ).
2. Alta presión de operación (hasta 300 bar): producción de  $\text{H}_2$  a alta presión (compresión electroquímica), volumen de burbujas reducido, problemas mínimos de la membrana, menor sobre-potencial.
3. Pila compacta.
4. Permite una alta densidad de corriente (valores superiores a 2 A/cm<sup>2</sup>) debido a la conductividad de la membrana.
5. Amplio rango de operación (entre 10 % y 100 %).
6. Produce hidrógeno con mayor pureza debido a la ausencia de contaminación por KOH.
7. No requiere tanto equipo de electrónica de potencia para gestionar la respuesta dinámica.

**Desventajas**

1. Alto costo de componentes.
2. Ambiente ácido corrosivo (requiere metales nobles como oro y paladio).
3. Vida útil más corta (<50000 h).
4. La comercialización está limitada debido a un menor grado de madurez en comparación con la electrólisis ALC.
5. Problemas con alta presión (membranas entrecruzadas, más gruesas).

**Celda Electrolítica de Óxido Sólido (SOEC)** El electrolizador opera a altas temperaturas, específicamente entre 700°C y 850°C, utilizando celdas electrolíticas de óxido sólido [92, 93, 94]. Los electrodos de níquel son una opción ideal debido a su excelente conductividad

eléctrica y asequibilidad, lo que resulta en una menor demanda de electricidad [95]. La energía necesaria se obtiene exclusivamente del calor liberado por el electrolizador. La utilización del calor residual puede aumentar aún más la eficiencia del equipo, logrando eficiencias del 100 % [96]. En este caso, la transferencia de electrones tiene lugar a través de un mecanismo que reduce  $\text{CO}_2$  a  $\text{CO}$  y  $\text{H}_2\text{O}$  a hidrógeno, reacciones que tienen lugar en el cátodo. El principal desafío con este tipo de electrolizador es la degradación de los materiales utilizados, las condiciones térmicas y la corriente de electrólisis. Es importante señalar que este tipo de electrolizador solo está disponible a pequeña escala, a nivel de kW [97], y por lo tanto no está siendo considerado para la selección de electrolizadores del proyecto.

**Resumen de los principales parámetros** Los principales parámetros relacionados con la eficiencia, los costos de inversión, la vida útil y la flexibilidad se resumen en la Tabla 2.4.

## **CO<sub>2</sub> - Captura de carbono**

Las tecnologías de captura y almacenamiento de carbono (CCS, por sus siglas en inglés) son una ruta prometedora para lograr una reducción significativa en las emisiones de  $\text{CO}_2$  a corto plazo. Objetivos de reducción de emisiones, como el 80-90 % de las emisiones de  $\text{CO}_2$  de fuentes fijas [98], se discuten habitualmente en el contexto de los objetivos alcanzables mediante tecnologías CCS. Hay numerosas opciones tecnológicas que son generalmente compatibles con la actividad CCS, pero relativamente pocas han ganado algún grado de aceptación desde un punto de vista industrial. Tres opciones tecnológicas que son generalmente aceptadas como adecuadas para implementación comercial a corto y mediano plazo son la captura de  $\text{CO}_2$  post-combustión utilizando solventes de amina, la combustión con oxígeno y, finalmente, las tecnologías de bucle de calcio [99].

Cuadro 2.4: Resumen de los principales parámetros para las tecnologías actuales de electrólisis del agua, resumidos de Buttler y Spliethoff (2018) [41].

	<b>AEL</b>	<b>PEM</b>	<b>SOEC</b>
<b>Parámetros de operación</b>			
Temperatura de la celda (°C)	60-90	50-80	700-900
Presión típica (bar)	10-30	20-50	1-15
Densidad de corriente ( $A\ cm^{-2}$ )	0.25-0.45	1.0-2.0	0.3-1.0
<b>Flexibilidad</b>			
Flexibilidad de carga (% de carga nominal)	20-100	0-100	$\pm 100$
Tiempo de arranque en frío	1-2 h	5-10 min	Horas
Arranque en caliente	1-5 min	<10 s	15 min
<b>Eficiencia</b>			
Eficiencia nominal del stack (LHV)	63-71 %	60-68 %	100 <sup>1</sup>
Eficiencia nominal del sistema <sup>2</sup> (LHV)	51-60 %	46-60 %	76-81 %
<b>Capacidad disponible</b>			
Potencia nominal máxima por stack (MW)	6	2	<0.01
Producción de H <sub>2</sub> por stack ( $N\ m^3\ h^{-1}$ )	1400	400	<10
<b>Durabilidad</b>			
Vida útil (kh)	55-120	60-100	(8-20)
Degradación de eficiencia (% por año)	0.25-1.5	0.5-2.5	3-50
<b>Parámetros económicos</b>			
Costo de inversión (\$/kW)	800-1500	1400-2100	(>2000) <sup>3</sup>
Costos de mantenimiento (% de costos de inversión por año)	2-3	3-5	

<sup>1</sup> Operando a voltaje termoneutro.

<sup>2</sup> Incluyendo auxiliares y suministro de calor (SOEC).

<sup>3</sup>Alta incertidumbre debido al estado precomercial del SOEC.

**Opciones tecnológicas de CCS** Estas opciones se describen a continuación [51]:

- En la captura de CO<sub>2</sub> basada en aminas, el flujo de gas rico en CO<sub>2</sub> se pone en contacto con una solución acuosa de amina. El solvente de amina reacciona de manera reversible con el CO<sub>2</sub>, formando sales solubles en agua. Dada la naturaleza reactiva de

la absorción, los procesos de solvente basados en aminas son adecuados para capturar  $\text{CO}_2$  de corrientes diluidas y de baja presión. Como consecuencia, esta tecnología es aplicable a la mayoría de las grandes fuentes fijas existentes de  $\text{CO}_2$  y se prevé que podría ser adaptada con relativa facilidad en la parte posterior de una central eléctrica existente.

- En los procesos de combustión con oxígeno, el combustible se quema en una mezcla de oxígeno casi puro (típicamente con una pureza superior al 95 %) y  $\text{CO}_2$ , este último reciclado del escape del proceso. La principal atracción de esta tecnología es que produce un gas de combustión que es predominantemente  $\text{CO}_2$  y  $\text{H}_2\text{O}$ . El contenido de  $\text{H}_2\text{O}$  se elimina fácilmente por condensación, dejando una corriente de  $\text{CO}_2$  pura que es adecuada para la compresión, el transporte y el almacenamiento.
- En la tecnología de bucle sólido considerada en este documento, el óxido de calcio ( $\text{CaO}$ ) y el  $\text{CO}_2$  reaccionan de manera reversible para formar carbonato de calcio ( $\text{CaCO}_3$ ). Este proceso es algo análogo a los procesos de absorción basados en aminas convencionales en el sentido de que la captura de  $\text{CO}_2$  ocurre en un recipiente, conocido como el carbonatador, luego el material de sorbente “cargado”,  $\text{CaCO}_3$ , se pasa a un segundo recipiente, conocido como el calcinador, donde el material de sorbente se regenera, produciendo una corriente pura de  $\text{CO}_2$ . Hay ciertas ventajas termodinámicas en esta tecnología, que conducen a una penalización de eficiencia menor que el promedio en una central eléctrica. El proceso también se integra muy bien con la fabricación de cemento.

**Métodos de captura de  $\text{CO}_2$**  Respecto a los métodos de captura, se definen dos formas: obtención desde la fuente y obtención desde la captura de aire [51, 52, 50]. Para la obtención desde la fuente se encuentran:

- **Tecnologías de Absorción:** El  $\text{CO}_2$  se elimina de los gases de escape mediante la absorción en solventes líquidos. normalmente se utilizan soluciones de aminas acuosas, y se forman sales solubles en agua en el proceso. Posteriormente, el  $\text{CO}_2$  puede ser recuperado en una columna de desorción.
- **Tecnologías de Adsorción:** Se utilizan adsorbentes sólidos para la captura de  $\text{CO}_2$ . Los adsorbentes típicos incluyen carbones, alúmina, sílice y zeolitas, pero también se están investigando nuevos adsorbentes, como polímeros. Se implementan procesos cíclicos para la carga y regeneración de los adsorbentes, particularmente la adsorción oscilante de vacío y la adsorción oscilante de temperatura. Además, se pueden utilizar procesos de bucle de carbonato, que se basan en la quimisorción. El proceso más destacado es el bucle de calcio (utilizando  $\text{CaO}$  como sorbente). El  $\text{CO}_2$  se captura formando carbonato de calcio. Posteriormente, el sorbente se regenera mediante calcinación, liberando el  $\text{CO}_2$ .

Mientras que, para la captura de aire se encuentran:

- **Captura de aire húmedo:** El  $\text{CO}_2$  del aire ambiente se absorbe en una solución líquida dentro de columnas empacadas, torres de convección o sistemas de contratistas de torres de pulverización. Un ejemplo es el proceso de soda/cal basado en una solución de hidróxido de sodio.
- **Captura de aire seco:** Típicamente, se utilizan adsorbentes sólidos a base de organoaminas para la captura de  $\text{CO}_2$ . La desorción ocurre a temperaturas elevadas en una corriente de gas inerte; sin embargo, solo se genera una corriente de  $\text{CO}_2$  diluido. Los desarrollos más recientes se centran en mejorar las condiciones de regeneración.

**Rango de costos por fuente de captura de  $\text{CO}_2$**  En la Tabla 2.5 se presentan rangos de costos para las distintas fuentes de obtención de  $\text{CO}_2$  [53, 100, 101, 102].

Cuadro 2.5: Rango de costos por tonelada capturada de CO<sub>2</sub> en dolares americanos (USD).

Fuente de CO <sub>2</sub>	Costo USD/ton CO <sub>2</sub>
Generadora con Gasificación de carbón	32.2-46
Generadora de carbón	35.7-56.4
Generadora de gas	54.1-103.5
Refinerías y procesamiento de gas natural	20.7-81.7
Acerería	80.5-84
Cementera	66.7-100.1
Planta de biogás	0-103.5
Captura directa	255.3-308.2

**Por etapa de captura (pureza)** Según el grado de pureza en la corriente de salida de CO<sub>2</sub>, se emplean diferentes tecnologías. A continuación se presentan las tres principales tecnologías de captura de CO<sub>2</sub> para el sector energético, a saber: la oxicomcombustión, la captura precombustión y la captura postcombustión.

**Oxicombustión** En la actualidad, una de las principales tecnologías de captura de CO<sub>2</sub> de las centrales térmicas es la oxicomcombustión [103]. Este método de captura consta de una unidad de separación de aire (ASU) para producir una corriente de oxígeno de alta pureza que se mezcla con gas de combustión reciclado (flue gas), proporcionando un entorno de oxidación en el que quemar el combustible que es bajo en nitrógeno pero tiene características similares a las encontradas en la combustión de aire. El gas de combustión producido por la oxicomcombustión variará en pureza, y aún requiere deshidratación, purificación adicional y compresión para que sea adecuado para el transporte y el almacenamiento. Esto último se realiza mediante una unidad de compresión y purificación de CO<sub>2</sub> (CO<sub>2</sub>CPU). Existen a escala comercial tres modelos de CO<sub>2</sub>CPU.

El primer modelo es el más simplista y consiste en un sistema de compresión y deshidratación de seis etapas. Los dos modelos restantes son sistemas más complejos, contruidos sobre el modelo de compresión y deshidratación, con diferentes purzas de flujo de producto. Uno consiste en un sistema de doble flash con integración de calor y el otro en una columna de destilación de seis etapas también con integración de calor. A medida que aumenta la complejidad de estos modelos, también aumenta la pureza del producto con variaciones en la eficiencia de captura, la penalización energética y los costos de capital y operativos. A continuación se presenta en la Tabla 2.6 datos referenciales para el gas de reciclaje (flue gas), los que pueden variar de acuerdo de la composición del combustible quemado, pero que muestra un orden de magnitud de las composiciones molares. La sección de la planta

Cuadro 2.6: Propiedades del gas de reciclaje o flue gas (entrada de la unidad de procesamiento central - CPU) [104].

Especie	Composición (mol %)
CO <sub>2</sub>	76.38
O <sub>2</sub>	7.83
N <sub>2</sub>	11.34
Ar	3.11
H <sub>2</sub> O	1.34
SO <sub>2</sub>	(100 ppm)

dedicada a la unidad de compresión y purificación de CO<sub>2</sub> (CPU), puede ocuparse de la eliminación de los componentes no condensables de N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub> y Ar, y de la compresión del flujo de producto a altas presiones (> 100 bar). Después de una serie de procesos de compresión, la presión resultante de CO<sub>2</sub> sería de 120 bar. A continuación, se entregan propiedades y costos referenciales para esta tecnología por CPU en la Tabla 2.7.

Cuadro 2.7: Propiedades y costos por tecnología de la CPU, obtenidos de [103, 104].

	Compresión y deshidratación	Doble flash	Destilación
Potencia Bruta (MW)	400	400	400
Potencia Neta (MW)	310	270.6	265.8
Eficiencia Neta de la Planta, HHV (%)	33.81	29.51	28.99
Factor de Capacidad (%)	96.5	96.5	96.5
Factor de Carga Fijo (%)	17.21	17.21	17.21
Flujo de CO <sub>2</sub> Producto (Mt/año)	2.88	2.25	2.16
Costo de Capital (MUSD)	42	43	65
Costo Operativo Anual (MUSD)	35	41	43
Pureza del CO <sub>2</sub> Producto (mol %):	77.40	96.61	99.99
Eficiencia de Captura de CO <sub>2</sub>	100 %	92 %	90 %
energía Unitaria (kWh/t de CO <sub>2</sub> capturado)	103	150	172
Tasa de emisión de CO <sub>2</sub> (kg/MWh)	0	84.5	107.5
CO <sub>2</sub> Capturado (kg/MWh)	1108	997.4	974.8
Capital Total Requerido (USD/kW-neto)	3806	4371	4608
Costos Totales de O&M (MUSD/año)	101.9	102.0	103.6
Costo de Electricidad (USD/MWh)	116.3	133.5	139.8
Costo Evitado de CO <sub>2</sub> (USD/t CO <sub>2</sub> )	70.97	103.52	116.1
<b>Composición de la Corriente de Producto:</b>			
CO <sub>2</sub> (mol %)	77.69	96.61	99.99
O <sub>2</sub> (mol %)	7.61	1.40	0.55 ppmv <sup>1</sup>
N <sub>2</sub> (mol %)	11.63	1.46	0.34 ppmv
Ar (mol %)	2.98	0.51	0.22 ppmv
H <sub>2</sub> O (ppmv)	126	0	0
SO <sub>2</sub> (ppmv)	126	136	137
SO <sub>3</sub> (ppmv)	1.31	1.63	1.69
HCl (ppmv)	8.27	–	–
NO <sub>x</sub> (NO/NO <sub>2</sub> ) (ppmv)	424/22.3	81	20
NH <sub>3</sub> (ppmv)	5.2	–	–

<sup>1</sup> ppmv: Partes por millón en volumen.

**Pre-combustión** Las impurezas en el flujo de CO<sub>2</sub> producto de las aplicaciones plantas de combustion-CCS surgen principalmente de los componentes contenidos en el Syn-Gas producido a partir de la gasificación del carbón u otros combustibles (por ejemplo, biomasa). Otras fuentes de impurezas incluyen los disolventes físicos como los basados en

metanol (por ejemplo, Rectisol®) [103]. Las especies de azufre del SynGas consisten predominantemente en sulfuro de hidrógeno ( $\text{H}_2\text{S}$ ) con aproximadamente 5% de las especies de azufre siendo sulfuro de carbonilo (COS). El COS se puede convertir en  $\text{H}_2\text{S}$  en un reactor de cambio de gas de agua y los mismos disolventes físicos utilizados para la captura de  $\text{CO}_2$  en plantas de combustión también se utilizan para capturar  $\text{H}_2\text{S}$ .

Existen dos posibles procesos de separación para tratar el  $\text{H}_2\text{S}$  capturado: la captura separada y la co-captura. En la configuración de captura separada, el  $\text{H}_2\text{S}$  se aísla en una corriente separada y se transforma en azufre elemental. En la configuración de captura conjunta, el  $\text{H}_2\text{S}$  se separa del flujo de  $\text{CO}_2$  y se elimina la necesidad de una planta de procesamiento de  $\text{H}_2\text{S}$ . La configuración de co-captura ofrece importantes ahorros de capital y de costos de operación y mantenimiento en comparación con el enfoque de captura por separado, ya que se puede utilizar una planta de captura más pequeña con un menor requerimiento de energía. Una desventaja económica de la configuración de co-captura es la pérdida de ingresos por la venta de azufre elemental. A pesar de las ventajas económicas de la co-captura, existe preocupación por el impacto del  $\text{H}_2\text{S}$  en la captura y almacenamiento posterior. Sin embargo, en las aplicaciones de recuperación mejorada de petróleo (EOR), se sabe que el  $\text{H}_2\text{S}$  reduce la presión mínima de miscibilidad de las mezclas de petróleo y  $\text{CO}_2$  y, por tanto, puede tener un efecto beneficioso al reducir las necesidades energéticas de la EOR.

El proceso Selexol™ también es relativamente menos complejo que el proceso necesario para otro disolvente a base de metanol considerado para combustión-CCS, es decir, Rectisol®. Los costos operativos de Rectisol® también pueden ser más altos debido al requisito de refrigeración para bajas temperaturas operativas. Sin embargo, Rectisol® puede usarse en un proceso flexible que puede conducir a corrientes de SynGas y  $\text{CO}_2$  de mayor pureza. A continuación, se entregan propiedades y costos referenciales para esta tecnología por proceso en la Tabla 2.8.

Cuadro 2.8: Propiedades y costos por tecnología de solvente, obtenidos de [103].

	Selexol™ captura separada	Selexol™ co-captura	Rectisol® captura separada
Potencia Bruta (MW)	343.3	343.3	343.3
Potencia Neta (MW)	268.7	295.2	259.6
Eficiencia Neta de la Planta, HHV (%)	30.78	33.83	29.73
Factor de Capacidad (%)	96.5	96.5	96.5
Factor de Carga Fijo (%)	17.21	17.21	17.21
Eficiencia de Captura de CO <sub>2</sub>	95.0	95.0	95.0
Tasa de emisión de CO <sub>2</sub> (kg/MWh)	95.18	86.63	98.55
CO <sub>2</sub> Capturado (kg/MWh)	885.3	806.7	916.3
Capital Total Requerido (USD/kW-neto)	4125	3490	4764
Costos Totales de O&M (MUSD/año)	93.90	90.08	99.10
Costo de Electricidad (USD/MWh)	125.2	107.1	142.03
Costo Evitado de CO <sub>2</sub> (USD/t CO <sub>2</sub> )	46.49	21.73	67.22
<b>Composición de la Corriente de Producto:</b>			
CO <sub>2</sub> (mol %)	97.91	97.64	99.51
CO (mol %)	0.2	0.2	0.073
H <sub>2</sub> (mol %)	1.8	1.7	0.295
CH <sub>4</sub> (ppmv)	112	112	980
H <sub>2</sub> S (ppmv)	72	3794	1.5
COS (ppmv)	trazas	1	0
NH <sub>3</sub> (ppmv)	38	38	–
HCl (ppmv)	17.5	17.5	–
H <sub>2</sub> O (ppmv)	300	300	0
N <sub>2</sub> (ppmv)	200	200	50
Ar (ppmv)	200	200	40
metanol (ppmv)	–	–	160

**Post-combustión** La captura postcombustión (PCC) puede aplicarse a centrales que funcionan con diversos combustibles. Los disolventes comerciales a base de aminas, como Econamine FG Plus, pueden ofrecer una mayor eficiencia del proceso, lo que repercute en los costos totales, por lo que se justifica la realización de estudios comparativos cruzados del rendimiento de los disolventes. En la modelización también se tuvieron en cuenta otras técnicas de control medioambiental, como el control de NO<sub>x</sub> en el hogar, las unidades de separación de partículas por precipitador electrostático, la reducción catalítica selectiva (SCR) en caliente para un mayor control de NO<sub>x</sub> y las unidades de desulfuración de gases de combustión para la eliminación de SO<sub>x</sub>.

Para tener en cuenta los numerosos factores que afectan a la producción de energía, el costo de la electricidad, las emisiones y el costo de las centrales PCC-CCS, se deben considerar para realizar los cálculos tecnoeconómicos. Estos casos están en paridad con las centrales de oxidación presentados anteriormente, pero con la diferencia fundamental de la elección de la tecnología de captura. En cada caso, la central es una instalación de 400 MW de potencia bruta con captura de carbono; sin embargo, en el caso PCC, el tamaño base de la central es mayor en comparación con el caso de oxidación debido a la mayor necesidad de energía para el uso de vapor de amina. La penalización energética asociada a la captura de carbono da como resultado una central con una producción eléctrica neta reducida.

Se consideran dos escenarios: una planta de proceso que cuenta con todas las técnicas de control ambiental mencionadas (controles de NOx en el hogar, ESP, SCR y FGD) y un caso similar pero con las áreas de proceso SCR y FGD eliminadas. En ambos casos se utiliza un pulidor de SO<sub>2</sub> para limitar aún más los niveles de azufre de los gases de combustión a niveles bajos (< 10 ppmv) a su entrada en la planta de captura postcombustión. De este modo se evita una pérdida excesiva de amina debido a la formación de sales termoestables a partir de la combinación de SO<sub>2</sub> con la amina, y también tiene la ventaja añadida de reducir otras impurezas. Para mantener la paridad con los casos de oxidación, los costos indicados se refieren a las instalaciones retroadaptadas, amortizándose en un 25 % el capital total necesario para las zonas sin instalaciones de captura y almacenamiento. A continuación, se entregan propiedades y costos referenciales para esta tecnología por proceso en la Tabla 2.9.

Cuadro 2.9: Propiedades y costos por tecnología, obtenidos de [103].

Parámetro	ESP (solo control de partículas)	Con control NOx por LNB/SCR y control SO <sub>2</sub> por Wet-FGD
Potencia Bruta Generada (MW)	400	400
Potencia Neta Generada (MW)	321.6	313.8
Eficiencia de la Planta Neta, HHV (%)	25.95	25.66
Factor de Capacidad (%)	96.5	96.5
Factor de Cargo Fijo (%)	17.21	17.21
Precio del combustible (USD/GJ, HHV)	1.75	1.75
Eficiencia de Captura de CO <sub>2</sub> (%)	90	90
Tasa de emisión de CO <sub>2</sub> (kg/MWh)	119.8	121.6
CO <sub>2</sub> capturado (kg/MWh)	1078	1094
Capital total requerido (USD/kW-net)	3204	3572
Costos totales de O&M (MUSD/año)	147.1	142.8
Costo de electricidad (USD/MWh)	119.3	126.5
Costo de evitar CO <sub>2</sub> (USD/tCO <sub>2</sub> )	102.1	100.2
<b>Composición de la Corriente de Producto:</b>		
CO <sub>2</sub> (mol%)	99.95	99.99
HCl (ppmv)	349	35
SO <sub>2</sub> (ppmv)	83	91
SO <sub>3</sub> (ppmv)	11	11
NO <sub>2</sub> (ppmv)	38	10

## Gasificación desde fuentes biológicas

Al lidiar con un proceso de alta complejidad, elegir el tipo adecuado de biomasa para alimentar el paso de gasificación requiere un análisis cuidadoso de las principales propiedades que podrían influir en el resultado del proceso. Entre los diversos tipos de biomasa, la biomasa leñosa es la que tiene los mayores contenidos de lignina y carbono (47-50 % en peso) [105], lo que resulta en valores de poder calorífico más altos. Además, la biomasa leñosa suele presentar un contenido de cenizas más bajo, así como una menor presencia de contaminantes, como nitrógeno, azufre y cloro [106]. Debido a estas características, la biomasa leñosa es apropiada para alimentar el proceso de gasificación.

El proceso de gasificación consiste en la oxidación parcial de material rico en carbono en presencia limitada de oxígeno, lo que resulta en la producción de una mezcla de

gases combustibles llamada SynGas o simplemente “**SynGas**”. Además del SynGas, también se forman pequeñas fracciones de líquidos (alquitranes) y sólidos (carbones). Debido a su oxidación parcial, la mayor parte del contenido energético de la biomasa (materia prima) permanece presente en el SynGas resultante. La composición exacta del SynGas es difícil de predecir. El equilibrio de elementos que constituyen la mezcla gaseosa depende fundamentalmente de las condiciones de gasificación, como la temperatura y presión de operación, la velocidad de calentamiento, el tipo de gasificador, la elección del agente gasificante y la composición de la materia prima [107]. En general, el SynGas está compuesto principalmente por monóxido de carbono (CO) e hidrógeno (H<sub>2</sub>), así como fracciones más pequeñas de nitrógeno (N<sub>2</sub>), metano (CH<sub>4</sub>), dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) e hidrocarburos gaseosos (CH<sub>s</sub>) [107]. El SynGas de alta calidad puede definirse como una mezcla gaseosa con alto contenido de monóxido de carbono (CO) e hidrógeno (H<sub>2</sub>) y bajo contenido de metano (CH<sub>4</sub>) [108]. Los principales parámetros utilizados para evaluar el rendimiento de los gasificadores son la eficiencia en la conversión de carbono y la llamada “eficiencia de gas frío”. Ambos parámetros se han determinado de acuerdo con las siguientes fórmulas.

$$\text{Eficiencia de conversión de carbono (\%)} = \left(1 - \frac{C_{\text{NC}}}{C_{\text{F}}}\right) \times 100 \quad (2.10)$$

Donde: C<sub>NC</sub> representa la cantidad de carbono que no ha sido convertido (kmol/h); y C<sub>F</sub> representa la cantidad de carbono en la materia prima (kmol/h).

$$\text{Eficiencia del gas frío (\%)} = \left(\frac{\text{HHV}_{\text{S}}}{\text{HHV}_{\text{F}}}\right) \times 100 \quad (2.11)$$

Donde: HHV<sub>S</sub> representa el valor de calentamiento superior del SynGas (MWth); y HHV<sub>F</sub> representa el valor de calentamiento superior de la materia prima (MWth).

## SynGas

Luego de obtener H<sub>2</sub> y CO<sub>2</sub> desde la materia prima, se necesita producir SynGas que será un producto intermedio que se utiliza para la mayoría de los procesos de conversión

hacia combustibles sintéticos.

El proceso de limpieza de gas se ha dividido en dos pasos principales: (i) el enfriamiento directo con agua, para la eliminación de cenizas, partículas, lodo y otros contaminantes, y (ii) la reacción de desplazamiento de agua-gas, para ajustar correctamente la relación  $H_2:CO$ .

La corriente de SynGas que llega para el enfriamiento directo con agua está compuesta principalmente por  $H_2$ ,  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $CH_4$ ,  $H_2O$ , contaminantes y material inerte. El enfriamiento directo con agua elimina cenizas, lodo, partículas y contaminantes como amoníaco ( $NH_3$ ) y cloruro de hidrógeno ( $HCl$ ) [109]. Además, el contacto directo con agua resulta en el enfriamiento del SynGas, reduciendo su temperatura. Para los propósitos de este estudio, hemos considerado que el amoníaco y el cloruro de hidrógeno han sido completamente eliminados de la corriente de SynGas.

La reacción de desplazamiento de agua-gas se utiliza para ajustar la relación  $H_2:CO$  en el SynGas. Diferentes procesos de conversión requieren diferentes ajustes de composición. Para la síntesis de Fischer-Tropsch de combustibles diésel, la relación  $H_2:CO$  óptima es de 2.1 [109]. Sin embargo, como medida más conservadora y para garantizar la disponibilidad de  $H_2$  para la mejora del producto en el proceso aguas abajo, este estudio ha establecido una relación  $H_2:CO$  de 2.3. Una temperatura típica del proceso de Reverse Water Shift Reaction (RWGS) es de alrededor de 300 °C. La eliminación de gases ácidos incluye la absorción física de gases ácidos ( $H_2S$  y  $CO_2$ ), la unidad de recuperación de azufre y la etapa de compresión de  $CO_2$  (cuando se considera la captura de carbono). En la mayoría de las plantas se emplea el proceso Selexol de dos etapas (un solvente físico compuesto por una mezcla de éteres dimetílicos de polietilenglicoles). El proceso Selexol de dos etapas tiene como objetivo recuperar el  $H_2S$  (en la primera etapa) y el  $CO_2$  (en la segunda etapa). Esto se puede lograr debido a que el proceso Selexol tiene una buena selectividad de  $H_2S$  sobre  $CO_2$  [110, 111]. La composición del solvente considera un 95 % de DEPG (Selexol) y un 5 % de  $H_2O$ .

El contenido de agua no debe exceder el 5 %, debido al aumento de la viscosidad del solvente cuando la participación del agua supera este límite [110]. Ambas columnas de absorción operan con 30 platos, y a una temperatura de aproximadamente 40 °C [111]. Típicamente, la eficiencia de eliminación de CO<sub>2</sub> es del 95 % [112]. El SynGas limpio que sale se dirige hacia la etapa de síntesis o para uso directo, cuya composición se detalla en la Tabla 2.10. El solvente se recupera mediante el despojo. El H<sub>2</sub>S se dirige hacia la unidad de eliminación de azufre.

Cuadro 2.10: Especificaciones del SynGas crudo.

Componente	Concentración (mol % húmedo - 5 % H <sub>2</sub> O)
hidrógeno	20.25
Monóxido de Carbono	40.50
dióxido de carbono	12.75
Vapor de Agua	25.00
Otros	1.50

### 2.1.3. Proyectos de combustibles sintéticos y vectores energéticos en Chile

#### Capacidades técnicas

En marzo de 2023 se publica la “Descripción integrada de proyectos para la generación de hidrógeno verde en el SEIA” [113]. El Servicio de Evaluación Ambiental (SEIA) entrega ciertos lineamientos sobre cómo se deben presentar proyectos para su posterior aprobación. Esto, haciendo hincapié en el hecho de que el desarrollo de la industria del hidrógeno verde no contempla necesariamente el desarrollo de un único proyecto por etapas, sino que más bien se compone por distintas tipologías de proyectos que describen de manera conjunta los

procesos y subprocesos involucrados. Estos conforman la cadena de valor del H<sub>2</sub>, entendiendo que dicha industria no se remite a una de las tipologías establecidas en el artículo 10 de la Ley N°19.300 complementado por el artículo 3° del D.S. N°40/2012, del Ministerio del Medio Ambiente, Reglamento del Sistema de Evaluación de Impacto Ambiental (RSEIA o Reglamento del SEIA).

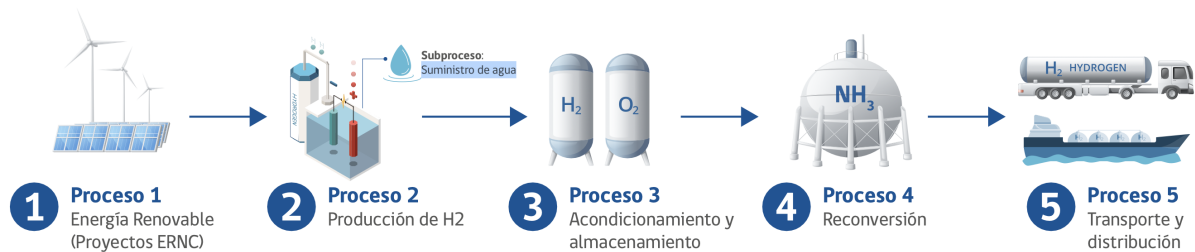


Figura 2.6: Diagrama de la cadena de valor del H<sub>2</sub>V (Hidrógeno verde).

### 1. Proceso 1: energías renovables

Se debe detallar la fuente de energía a utilizar, siendo los proyectos de generación el primero proceso de la cadena de valor. Dentro de este proceso se incluyen los proyectos de transmisión que evacúan la energía generada, pudiendo ser éstos una línea de transmisión eléctrica ya sea en una configuración soterrada o no soterrada, y la respectiva implementación de una subestación eléctrica con la finalidad de interconectar la fuente de energía para el suministro de la planta electrolizadora y los sistemas auxiliares que se contemplen.

### 2. Proceso 2: Producción de hidrógeno

Tal como se mencionó en la Sección 2.1.2, para producir hidrógeno, se lleva a cabo el proceso de electrólisis. El suministro de agua para este proceso requiere que sea tratada previamente para alcanzar una alta pureza, eliminando sales disueltas hasta lograr una conductividad entre 1 a 5  $\mu\text{S}/\text{cm}$ . Esto generalmente se logra mediante

un subproceso de osmosis inversa, que puede estar asociado a plantas desalinizadoras sujetas a regulaciones ambientales según la Ley N°19.300. Adicionalmente, se puede considerar la implementación de una subestación eléctrica para conectar la fuente de energía necesaria para el electrolizador y sistemas auxiliares.

### **3. Proceso 3: Almacenamiento y acondicionamiento**

El hidrógeno obtenido por electrólisis puede contener impurezas que requieren procesos de purificación según su uso final. Considerado un gas peligroso, su almacenamiento presenta riesgos basados principalmente en la cantidad almacenada y no en la capacidad de producción. La forma más común de almacenamiento es en tanques de hidrógeno comprimido a presiones de 350 y 700 bar. Otras tecnologías como el hidrógeno criocomprimido están en estudio para mejorar la densidad del gas. Además, se utilizan distintas tecnologías de compresión y métodos de almacenamiento, incluyendo la licuefacción y sistemas basados en materiales. Las instalaciones de almacenamiento deben seguir estrictas normativas de seguridad y evaluaciones ambientales para minimizar riesgos.

### **4. Proceso 4: Reconversión**

El H<sub>2</sub>V (hidrógeno verde) tiene desafíos en almacenamiento y transporte debido a sus requerimientos específicos. Para facilitar su manejo, se explora su conversión en productos como amoníaco, metanol o combustibles sintéticos, que son más fáciles de almacenar y transportar. Se debe detallar en caso de hacer un proceso de reconversión ya que la actividad o proyecto debe ser abordado considerando los riesgos e implicancias de las instalaciones asociadas a este proceso de la cadena de valor del H<sub>2</sub>V.

### **5. Proceso 5: Transporte y distribución**

El transporte del hidrógeno, que no siempre se produce en el lugar de su uso final, requiere sistemas especializados debido a las necesidades específicas de su acondiciona-

miento y almacenamiento. Este proceso puede incluir almacenamiento in situ y transporte posterior, o distribución directa a través de tuberías, gasoductos, camiones presurizados o criogénicos, y buques criogénicos para traslados intercontinentales. Además, es crucial manejar los riesgos asociados, como fugas y otros peligros, mediante planes de contingencia y emergencia adecuados.

## Mapa de proyectos y sus respectivas características

### 1. Copec: Hidrógeno para transporte

- **Producción:** Copec -a través de Copec Voltex- presentó su primera “hidrolinera” desarrollada junto a Linde, empresa encargada de proveer el hidrógeno al dispensador para uso vehicular. La estación, en una primera instancia, será destinada específicamente para operar el bus a hidrógeno importado a Chile por Andes Motor. Este último será utilizado en faenas mineras, trasladando a los trabajadores de Anglo American en la zona norte del país.
- **Ejecutor del proyecto:** Copec Voltex, filial que nace en 2018, busca acelerar la transición energética con el objetivo de masificar la electromovilidad en Chile desarrollando sistemas de recarga para vehículos eléctricos. Actualmente, cuenta con más de 1.300 puntos de carga en todos sus segmentos y alimenta a 11 terminales en Santiago y a uno en Antofagasta, que surten a una flota de 1.000 y 40 buses eléctricos respectivamente abarcando al 50 % del total de vehículos eléctricos del transporte público. Se realiza colaboración con Linde, una empresa líder en gases industriales e ingeniería con experiencia en la producción, procesamiento, almacenamiento y distribución de hidrógeno, que opera desde hace más de 15 años en Chile. Linde tiene cerca de 200 estaciones de servicio de hidrógeno instaladas, más de 80 plantas de electrólisis de hidrógeno en todo el mundo y

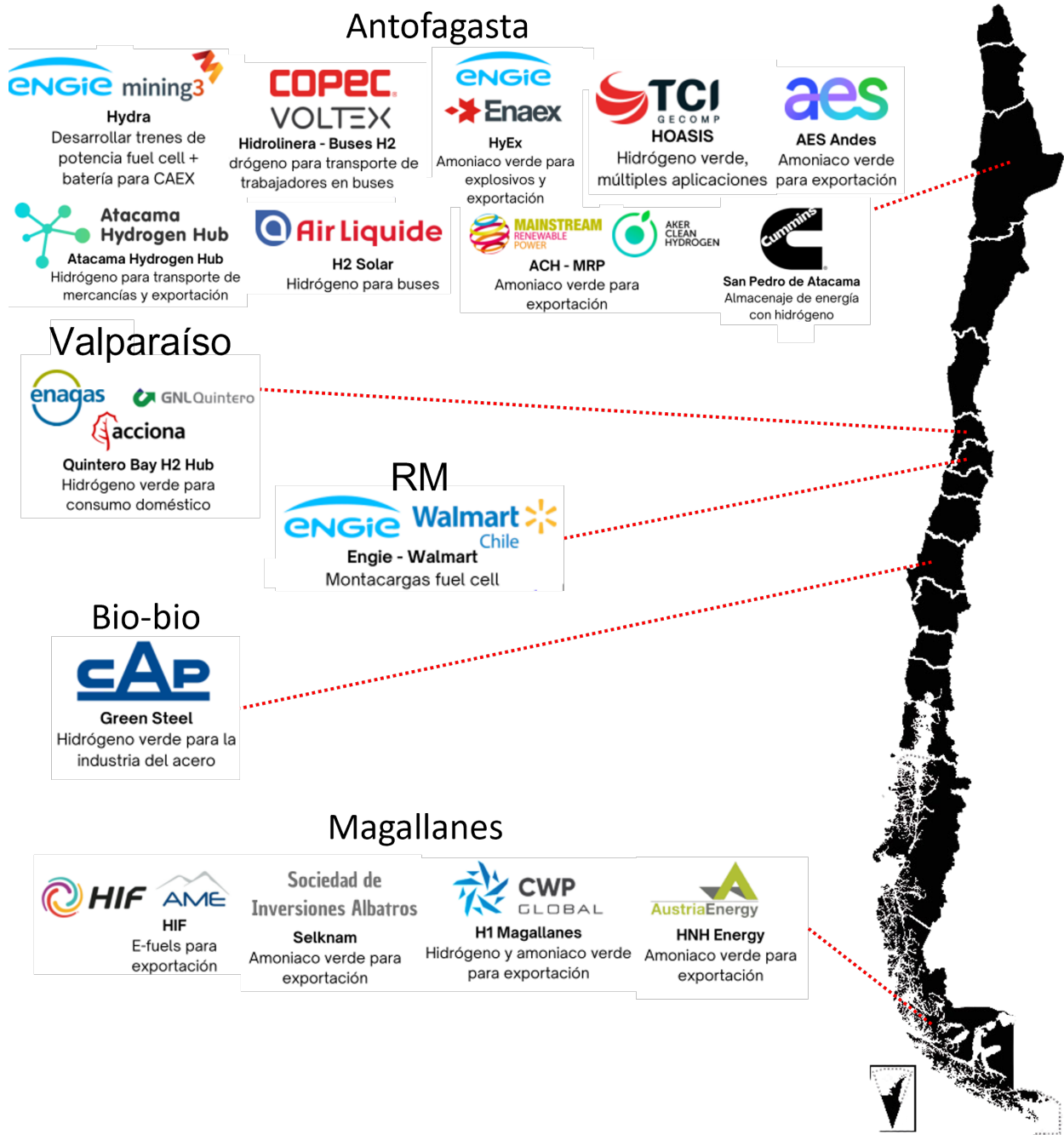


Figura 2.7: Proyectos actualmente en desarrollo por región en Chile al año 2024.

opera el sistema de distribución de hidrógeno líquido más grande del mundo.

## 2. AES Andes: Amoníaco verde para exportación

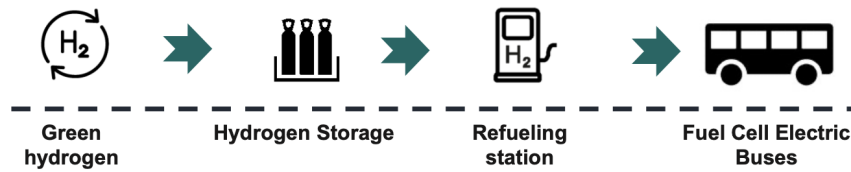


Figura 2.8: Diagrama de Flujo Hidrolinera.

Aprovechando los fuertes vientos y la radiación solar de Chile, el proyecto pretende producir amoníaco verde a gran escala para la exportación y el abastecimiento de combustible al transporte marítimo. Dentro de las proyecciones, se espera una capacidad de 800 MW en energía renovable, y 50.000 toneladas de hidrógeno para la producción de amoníaco verde por año.

- **Producción:** Con energía renovable y agua de una planta desalinizadora desalinizadora, el proyecto producirá hidrógeno ecológico un proceso de electrólisis, que combinado con nitrógeno del aire producirá amoníaco verde.
- **Ejecutor del proyecto:** AES ANDES es una filial de AES Corporation, empresa energética mundial con más de 5 GW de capacidad instalada. Desde hace más de 2 años, la empresa desarrolla iniciativas relacionadas con el amoníaco en países como Brasil, Argentina y Colombia, así como en Chile. AES ANDES tiene una calificación crediticia (BBB-) y más de 3,5 GW de capacidad instalada en Chile. Es socio del proyecto y será el desarrollador y proveedor de tecnología.

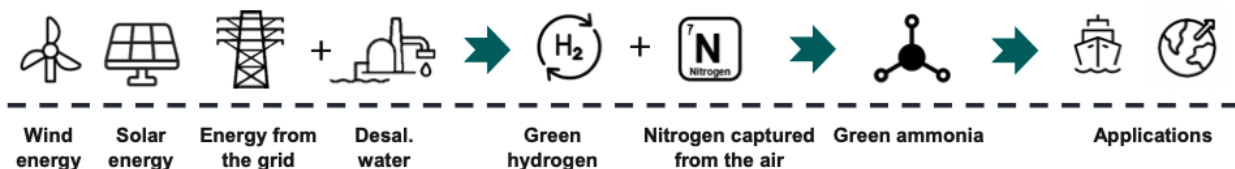


Figura 2.9: Diagrama de Flujo Planta AES Andes.

### 3. HyEx: Amoníaco verde para exportación

HyEx busca producir amoníaco verde en el norte de Chile para el consumo nacional e internacional, sustituyendo importaciones. Los propietarios del proyecto son ENAEX y ENGIE.

- **Producción:** Utilizando energía renovable y agua desalinizada, el proyecto producirá hidrógeno verde mediante un proceso de electrólisis. A continuación, el hidrógeno se combinará con nitrógeno capturado del aire, y mediante el proceso Haber-Bosch se producirá amoníaco verde. Durante la fase piloto, toda la producción se enviará por camión a la planta de ENAEX en el Reino Unido, sustituyendo parte de sus importaciones actuales. La segunda fase contempla la producción de amoníaco para el consumo de ENAEX, la exportación y otras aplicaciones.
- **Ejecutor del proyecto:** ENGIE es una empresa de referencia mundial en energía y servicios bajos en carbono, que cuenta con una Unidad de Negocio dedicada al hidrógeno renovable desde 2018. La cartera actual de proyectos de H<sub>2</sub> renovable en desarrollo y en construcción supera los 70 proyectos en 10 países de cuatro continentes.

ENAEX es el principal productor de nitrato de amonio y proveedor de servicios integrales de fragmentación de rocas para la industria minera en América Latina. Con más de 100 años de experiencia y presencia en 10 países, ENAEX está activamente comprometida con la sostenibilidad.

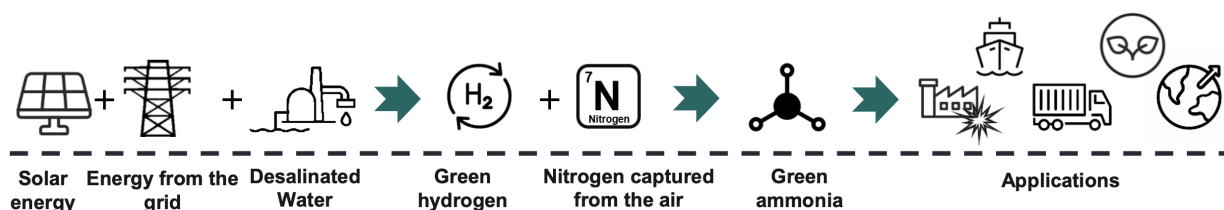


Figura 2.10: Diagrama de Flujo Planta HyEx.

#### 4. Faraday: Amoníaco verde para exportación

- **Producción:** Utilizando energía renovable y agua de una planta desalinizadora, el proyecto producirá hidrógeno verde mediante un proceso de electrólisis, que combinado con nitrógeno capturado del aire se utilizará para producir amoníaco verde.
- **Ejecutor del proyecto:** ACH y MRP son filiales de AKER Horizons, una empresa dedicada a incubar y desarrollar empresas que resuelvan retos fundamentales para la existencia sostenible o la inversión positiva para el planeta. ACH es un desarrollador y operador de producción de hidrógeno limpio a escala industrial, con un modelo de ejecución probado y capacidades únicas de integración y optimización de activos de extremo a extremo. MRP es una de las principales renovables en Chile y tiene un pipeline mundial de 12.1GW de energía eólica y solar, con más de 1.4 GW en construcción y 1.1 GW en operación.

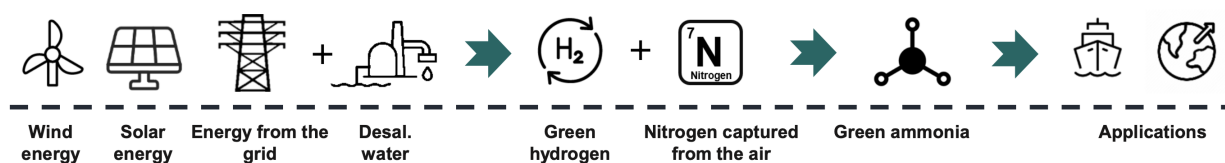


Figura 2.11: Diagrama de Flujo Planta Faraday.

## 5. HYDRA: Desarrollo de trenes de potencia fuel cell + batería para CAEX

El proyecto pretende descarbonizar el sector minero mediante el desarrollo de trenes de potencia de pilas de combustible + baterías para reequipar los camiones de transporte minero y sustituir el consumo de diésel. Este proyecto ha recibido una subvención de 330.000 USD de la Corporación de Fomento de la Producción, CORFO, para el desarrollo de la Fase 2.

- **Producción:** El proyecto Hydra contempla la sustitución del motor de combustión interna de los camiones de transporte minero de gran capacidad (>200

toneladas) por un sistema híbrido de pilas de combustible de hidrógeno y baterías. Así se sustituirán unos 3.000 litros de consumo diario de diésel por camión, lo que equivale a un consumo diario de hidrógeno de hasta 1 tonelada métrica.

- **Ejecutor del proyecto:** MINING3 es una organización de investigación minera liderada por la industria minera mundial para desarrollar y ofrecer tecnología transformadora que mejore la productividad, la sostenibilidad y la seguridad de la industria minera. ENGIE fue anteriormente descrita en el proyecto HyEx.

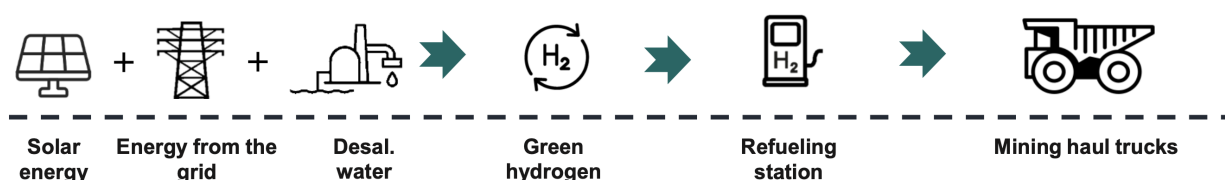


Figura 2.12: Diagrama de Flujo Planta HYDRA.

## 6. San Pedro de Atacama: Almacenaje de energía con hidrógeno

El proyecto de San Pedro de Atacama tiene el ambicioso objetivo de incorporar hidrógeno verde y energía renovable a los sistemas de generación de combustibles fósiles existentes en zonas aisladas como la situada en San Pedro de Atacama, en el norte de Chile, con los niveles de radiación más altos del mundo.

- **Producción:** El proyecto tiene por objeto modificar el sistema eléctrico aislado existente, operado por la Cooperativa Eléctrica de San Pedro de Atacama (CES-PA), para incorporar generación solar fotovoltaica, almacenamiento en baterías y tecnologías de hidrógeno con el fin de proporcionar un suministro eléctrico con un elevado porcentaje de energías renovables al centro cultural y turístico que es San Pedro de Atacama.
- **Ejecutor del proyecto:** CUMMINS es una empresa líder que proporciona soluciones energéticas, trabajando con diésel, gas natural, biogás, batería e hidrógeno

(producción y pilas de combustible). Es el propietario y desarrollador del proyecto.

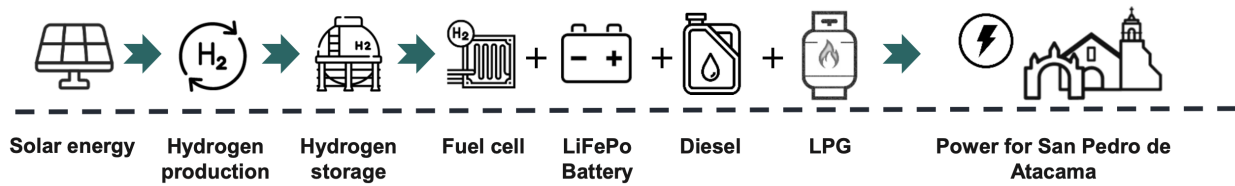


Figura 2.13: Diagrama de Flujo Planta San Pedro de Atacama.

## 7. H2 Solar: Hidrógeno para buses

El proyecto pretende desarrollar un ecosistema para el desplazamiento sin emisiones de los trabajadores mineros desde las ciudades a los yacimientos de la cordillera de los Andes.

- **Producción:** Se utilizará energía solar para producir hidrógeno verde por electrólisis. Este hidrógeno se almacenará en una estación de recarga de hidrógeno para abastecer a los autobuses destinados a los desplazamientos de los trabajadores mineros. El proyecto pretende desplegar autobuses eléctricos de pila de combustible que puedan hacer frente a las condiciones del desierto, como la altitud y las temperaturas extremas, entre otras.
- **Ejecutor del proyecto:** Air Liquide es líder mundial en gases, tecnologías y servicios para la Industria y la Salud. Con más de 100 años de experiencia, operan en diversas industrias a través de una combinación de productos, equipos y servicios.

## 8. Atacama Hydrogen Hub: Hidrógeno para transporte de mercancías y exportación

El proyecto ATACAMA HYDROGEN HUB tiene por objeto construir una instalación de electrólisis a gran escala con potencial de exportación en el norte de la Región de

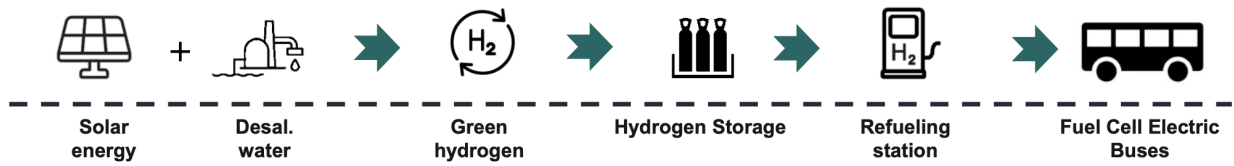


Figura 2.14: Diagrama de Flujo Planta H<sub>2</sub> Solar.

Antofagasta.

- Producción:** La energía solar se utiliza para alimentar una planta de electrólisis, que utiliza agua desalinizada para obtener oxígeno e hidrógeno. Una planta Haber-Bosch transforma el hidrógeno para obtener amoníaco verde destinado a la exportación.
- Ejecutor del proyecto:** HUMBOLDT HIDROGENO VERDE (H2V) es una empresa creada por empresarios Chilenos para el desarrollo de proyectos de producción, transporte y aplicación de hidrógeno en el norte de Chile, es el promotor del proyecto. COMPLEJO PORTUARIO MEJILLONES (CPM), filial de Codelco, la Corporación Nacional del Cobre de Chile, es un puerto situado en la Región de Antofagasta. Este proporcionará la infraestructura para el proyecto.

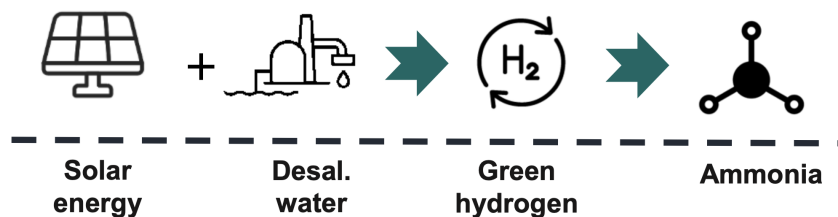


Figura 2.15: Diagrama de Flujo Planta Atacama Hydrogen Hub.

## 9. HOASIS: Hidrógeno verde

El proyecto HOASIS, en la región de Antofagasta, promueve el hidrógeno como solución para aumentar la independencia energética y apoyar el desarrollo local basado en la economía circular.

- **Producción:** 2GW de producción a gran escala de hidrógeno verde y oxígeno para producir amoníaco, que se utilizará en la reforestación, la agricultura de precisión, la recuperación de residuos y la creación de sinergias con las industrias locales. HOASIS también contempla la construcción de 2.000 Ha de invernaderos para producir cultivos locales y la reforestación de la zona a partir de la plantación de 100 Ha de árboles.
- **Ejecutor del proyecto:** TCI GECOMP está especializada en proyectos de energías renovables, con más de 1 GW instalados en Europa y América Latina. Actualmente, TCI está ampliando su negocio para desarrollar proyectos y servicios relacionados con el hidrógeno verde en Europa, África y América Latina.

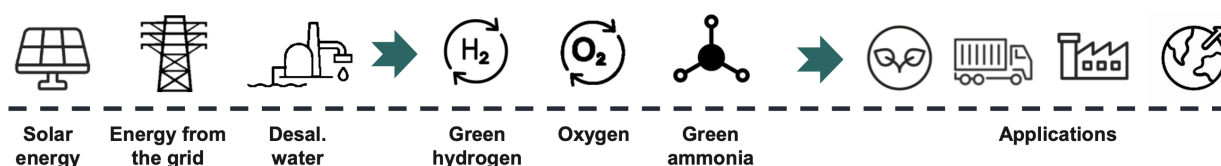


Figura 2.16: Diagrama de Flujo Planta HOASIS.

## 10. Quintero Bay H<sub>2</sub> Hub: Hidrógeno verde para consumo doméstico

GNL Quintero, la mayor terminal de regasificación de GNL de Chile ubicada en la bahía de Quintero, pretende aprovechar su cercanía a zonas industriales con alta demanda energética y consumo de hidrógeno gris para producir hidrógeno verde para el mercado nacional.

- **Producción:** La producción de hidrógeno verde en la zona central de Chile, a pesar de enfrentarse a precios energéticos más elevados, podría ser competitiva debido a la cercanía a potenciales compradores. Esto posiciona al hidrógeno como una alternativa atractiva para sustituir la demanda local de combustible fósil e hidrógeno gris utilizando energía renovable de la red y reduciendo así las emisiones

en varias industrias.

- **Ejecutor del proyecto:** GNL Quintero es un terminal de recepción, descarga, almacenamiento y regasificación de Gas Natural Licuado (GNL). En operación desde 2009, abastece la demanda de gas natural de la zona central de Chile, transportando gas tanto por gasoducto como por camiones. El 20 % de la compañía es propiedad de la Empresa Nacional del Petróleo de Chile (ENAP).

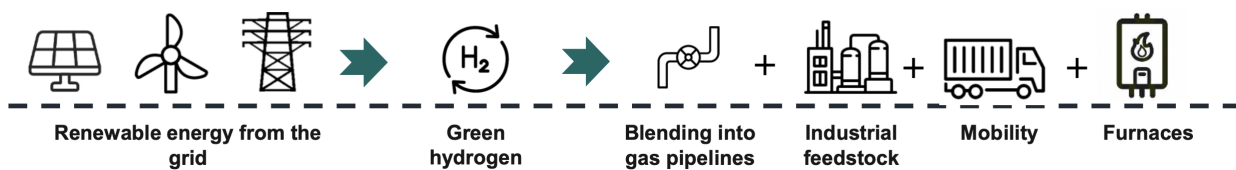


Figura 2.17: Diagrama de Flujo Planta Quintero Bay H<sub>2</sub> Hub.

## 11. Hydrogen Forklifts: Montacargas fuel cell

El objetivo del proyecto es reequipar los montacargas a batería existentes con pilas de combustible en uno de los centros de distribución de Walmart en Chile para alimentarlas con hidrógeno verde producido in situ.

- **Producción:** Consiste en una planta ecológica de producción de hidrógeno que utilizará energía solar y agua para alimentar sus electrolizadores. Los montacargas alimentados por baterías se utilizan para mover los pallets de mercancías dentro del centro de distribución. Sus baterías se reequiparán para alimentarlas con pilas de combustible que funcionen con hidrógeno verde.
- **Ejecutor del proyecto:** Walmart Chile es líder en la industria de supermercados en Chile con su estrategia multiformato que atiende de la mejor manera las necesidades de los clientes en todo el país. Walmart Chile es una filial de Walmart. Con sede en EE.UU., Walmart opera aproximadamente 10.500 tiendas y clubes

bajo 48 marcas en 24 países y sitios web de comercio electrónico, empleando a 2.2 millones de asociados en todo el mundo.

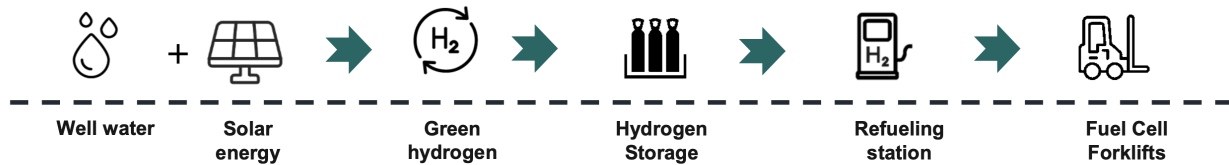


Figura 2.18: Diagrama de Flujo Hydrogen Forklifts.

12. **Green Steel: Hidrógeno verde para la industria del acero.** La siderúrgica HUACHIPATO forma parte del Grupo siderúrgico integrado CAP y es el principal productor de acero de Chile. La empresa tiene previsto reducir las emisiones de  $CO_2$  de sus procesos de producción de acero desarrollando una tecnología que permita incorporar hidrógeno verde a lo largo de su cadena de valor.

- Producción:** Producción de hidrógeno verde en la zona centro-sur de Chile mediante un proceso de electrólisis utilizando energías renovables. El hidrógeno verde se destinará a dos usos: Mezcla en los altos hornos de CAP para reducir el consumo de carbón coque y, eventualmente, sustituirlo por completo. En segundo lugar, la reducción directa del mineral de hierro y la producción de acero verde.
- Ejecutor del proyecto:** La acería de Huachipato fue fundada en 1950. Abastece a los sectores metalúrgico, minero y de la construcción en Chile. El proyecto fue premiado por CORFO con una subvención de 3.6 millones de dólares para su desarrollo.

13. **HIF: E-fuel para exportación**

Se espera que el HIF produzca la primera planta a escala industrial que producirá combustibles sintéticos neutros para la exportación.

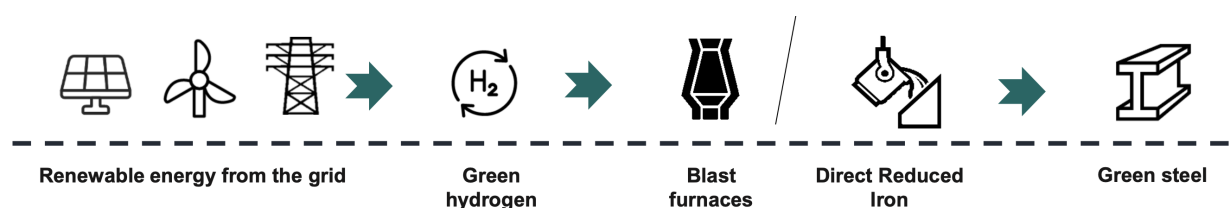


Figura 2.19: Diagrama de Flujo Planta Green Steel.

- Producción:** Una central eólica alimentará un electrolizador que producirá hidrógeno verde. Éste se combinará con el dióxido de carbono capturado para producir metanol sintético. Una parte de este metanol se convertirá en gasolina sintética (eGasoline).
- Ejecutor del proyecto:** El nombre HIF representa la misión de la empresa: proporcionar combustibles Altamente Innovadores (Highly Innovative Fuels) para hacer posible la descarbonización del planeta ahora. La visión de HIF es convertirse en el mayor productor de eFuels del mundo, produciendo 150.000 barriles diarios de eFuels para 2035, capturando más de 25 millones de toneladas de CO<sub>2</sub> y convirtiendo 5 millones de vehículos en carbono neutrales.

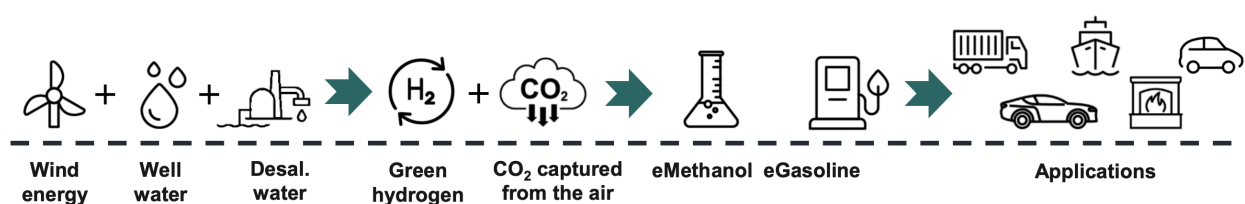


Figura 2.20: Diagrama de Flujo Planta HIF.

#### 14. H1 Magallanes: Hidrógeno y amoníaco verde para exportación

CWP Global está desarrollando el proyecto “H1 Magallanes” en Chile con la ayuda de su empresa regional H1 América, con el objetivo de construir una instalación ecológica de producción de hidrógeno y amoníaco a escala mundial.

- **Producción:** El proyecto consistirá en la generación de energía eólica y la producción de hidrógeno y amoníaco ecológicos. Se instalarán sistemas auxiliares de desalinización de agua, almacenamiento inteligente de hidrógeno, energía de reserva, almacenamiento de amoníaco e instalaciones de exportación. El objetivo es construir un tren de síntesis de amoníaco a escala mundial que permita economías de escala y costes competitivos.
- **Ejecutor del proyecto:** CWP cuenta con 15 años de experiencia en proyectos de generación de energía renovable a gran escala, con un exitoso historial de más de 3.000 millones de dólares en activos financiados. CWP Global forma parte de la iniciativa Green Hydrogen Catapult.

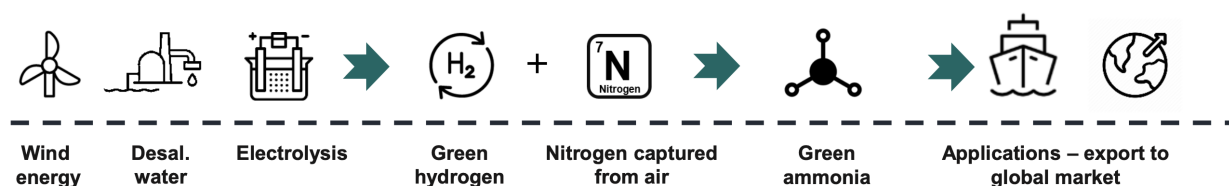


Figura 2.21: Diagrama de Flujo Planta H1 Magallanes.

## 15. HNH Energy: Amoníaco verde para exportación

El proyecto HNH Energy pretende producir amoníaco verde a gran escala en Magallanes para la exportación, aprovechando los abundantes recursos eólicos presentes en la región.

- **Producción:** La energía eólica se utiliza para alimentar una planta de electrolisis, que utiliza agua desalinizada para obtener oxígeno e hidrógeno. A continuación, el hidrógeno se combinará con el nitrógeno capturado del aire mediante el proceso Haber-Bosch, para producir amoníaco verde. El proyecto también contempla la construcción de infraestructuras portuarias para la exportación.

- **Ejecutor del proyecto:** AustriaEnergy se encarga del desarrollo, construcción, operación y gestión de proyectos de energía a escala de servicios públicos con cerca de 1 GW desarrollados en Chile, de los cuales existen 300 MW en operación y cerca de 300 MW en construcción.

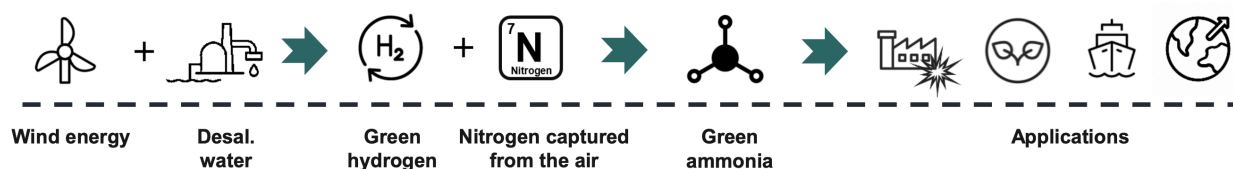


Figura 2.22: Diagrama de Flujo Planta HNH Energy.

## 16. Llaquedona: Amoníaco verde para exportación

LLAQUEDONA aprovechará los fuertes vientos de la isla de Tierra del Fuego, con un factor de capacidad medido superior al 60 %, para producir amoníaco verde destinado a la exportación.

- **Producción:** La energía eólica se utiliza para alimentar una planta de electrólisis para obtener oxígeno e hidrógeno. A continuación, el hidrógeno se combinará con el nitrógeno capturado del aire mediante un proceso Haber-Bosch, para producir amoníaco verde.
- **Ejecutor del proyecto:** ALBATROS lleva más de 30 años en el mercado inmobiliario de la región de Magallanes y está comprometida con la promoción de las energías renovables y la eficiencia energética.

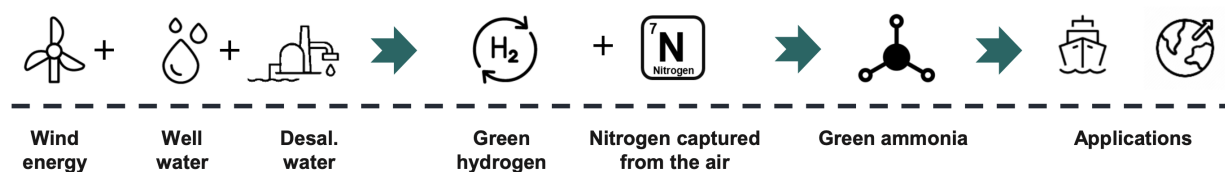


Figura 2.23: Diagrama de Flujo Planta Llaquedona.

## 2.2. Análisis normativo

### 2.2.1. Normas sobre hidrocarburos gaseosos

Los gases licuados de petróleo son constituyentes del petróleo crudo o de los condensados provenientes de pozos de gas natural, conteniendo principalmente hidrocarburos  $C_3$  y  $C_4$  [114]. Su uso originalmente estaba restringido a las refinerías para calor de proceso. En la primera mitad del siglo XX, su uso comercial y doméstico se extendió, lo que forzó a la industria a desarrollar normas para la refinación del producto y así ofrecer un producto homogéneo y sin variabilidad. Estas normas principalmente definen las especificaciones de los diferentes productos comercializados bajo la categoría de GLP y los métodos de ensayo aceptados para verificar las propiedades de las especificaciones.

#### Normas internacionales

Las principales normas internacionales son las siguientes:

- NFPA 58, *The industry benchmark for safe LP-Gas storage, handling, transportation, and use, NFPA 58 mitigates risks and ensures safe installations, to prevent failures, leaks, and tampering that could lead to fires and explosions.*
- GPA 2140-17, *Standard for Liquid Petroleum Gas Specifications and Test Methods.*

- ASTM D1835-20, *Standard Specification for Liquefied Petroleum (LP) Gases*.
- BS 4250:2014, *Specification for commercial butane and commercial propane*.
- ISO 8216-3:1987, *Petroleum products - Fuels (class F) - Classification - Part 3: Family L (Liquefied petroleum gases)*.
- ISO 9162:2013, *Petroleum products — Fuels (class F) — Liquefied petroleum gases — Specifications*.

Estas normas no definen valores específicos para la composición de los productos de GLP. En cambio, definen distintos tipos de productos, los que tienen especificaciones determinadas:

- Propano comercial: mezcla de hidrocarburos compuesta principalmente por propano o propeno. Usado en aplicaciones donde se requiere alta volatilidad.
- Butano comercial: mezcla de hidrocarburos compuesta principalmente por butanos y butenos. Usado en aplicaciones donde se requiere baja volatilidad, lo que implica que su uso se restringe mayoritariamente a aplicaciones industriales donde la vaporización del combustible no es un problema.
- Mezclas propano – butano comercial: mezcla de hidrocarburos consistente de propano, butanos, propilenos y butilenos con un rango acotado de ebullición. Se destaca que en esta definición de la ASTM se menciona la ebullición del producto. Esta definición se complementa con la entregada por la norma NFPA 58, que indica que el GLP es cualquier material cuya presión de vapor no excede la presión de vapor permitida para el propano comercial.
- Propano HD-5: producto compuesto principalmente por propano. Es un producto con

menor variabilidad en su composición, presentando características anti-*knocking* y principalmente usado en motores de combustión interna.

Las dos primeras definiciones presentadas en el listado anterior son prácticamente iguales para las definiciones norteamericanas y europeas. Sin embargo, las normas europeas (BS 4250, ISO 8216 e ISO 9162) no definen mezclas de propano – butano ni propano HD-5. La Tabla 2.11 presenta las principales especificaciones definidas por las normas antes mencionadas relacionadas con su composición, o de acuerdo con la norma ASTM D1835, hidrocarburos contaminantes.

Cuadro 2.11: Requerimientos detallados de contenidos de hidrocarburos contaminantes para las distintas normas analizadas.

Producto	ISO 9162			ASTM D1835 / GPA 2140			BS 4250			NCh 72	
	>C <sub>4</sub>	>C <sub>5</sub>	Olefinas	>C <sub>4</sub>	>C <sub>5</sub>	Olefinas	>C <sub>4</sub>	>C <sub>5</sub>	Olefinas	>C <sub>4</sub>	>C <sub>5</sub>
Propano comercial	7,5	0,2	0,5 (diene)	2,5	–	–	10,0	2,0	0,5 (diene) 1,0 (etileno)	2,5	–
Butano comercial	–	2,5	0,5 (diene)	–	2,0	–	–	2,0	0,5 (diene)	–	2,0
Mezclas prop.-but.	–	–	–	–	2,0	–	–	–	–	30,0	2,0
Propano HD-5	–	–	–	2,5	–	5,0 (propileno/propeno)	–	–	–	–	–

**NFPA 58** La NFPA 58 [115], conocida como el Código de Gas Licuado de Petróleo (GLP), es una referencia fundamental para la seguridad en instalaciones que utilizan gas propano en hogares, negocios e industrias. A continuación, se presenta un análisis de los aspectos clave de la NFPA 58:

- **Objetivo Principal:** La NFPA 58 tiene como objetivo principal establecer requisitos para salvaguardar las instalaciones de gas propano en diversas aplicaciones, desde residenciales hasta industriales.
- **Alcance:** Cubre todos los aspectos relacionados con el diseño, construcción, instalación

y operación segura del sistema de GLP, abordando temas como el almacenamiento, transporte, y la ubicación de los contenedores.

- **Algunas normativas detalladas:** Proporciona normativas detalladas para garantizar la seguridad en la manipulación, almacenamiento y distribución del GLP, abordando temas como válvulas de seguridad, sistemas de tuberías, y procedimientos de emergencia.
- **Recursos Complementarios:** Además del código principal, la NFPA 58 ofrece recursos complementarios, como el Manual del Código de GLP, que brinda orientación adicional sobre la correcta aplicación de las normativas.
- **Actualizaciones Periódicas:** La norma se actualiza periódicamente para reflejar avances tecnológicos y mejores prácticas de seguridad, asegurando que la regulación esté alineada con las condiciones y requisitos actuales de la industria del GLP.
- **Énfasis en la seguridad:** La NFPA 58 pone un fuerte énfasis en la seguridad, con disposiciones específicas para la prevención de fugas, la instalación adecuada de equipos, y la capacitación del personal involucrado en el manejo del GLP.
- **Facilidad de Acceso:** Ofrece herramientas prácticas como pestañas autoadhesivas para facilitar la consulta rápida y eficiente del código.

En resumen, la NFPA 58 es una guía integral que establece estándares de seguridad cruciales para la industria del GLP, contribuyendo a la prevención de incidentes y garantizando prácticas seguras en el uso de gas licuado de petróleo. Su continua actualización demuestra un compromiso con la mejora constante de la seguridad en este sector.

**GPA 2140** La norma GPA 2140 [116] establece especificaciones y métodos de prueba para los gases de petróleo licuados (GLP). Publicada en 2017 por la Gas Processors Association (GPA), esta norma aborda las propiedades físicas y características de los GLP para su uso


**3.3.34 Liquefied Petroleum Gas (LP-Gas).** Any material having a vapor pressure not exceeding that allowed for commercial propane that is composed predominantly of the following hydrocarbons, either by themselves or as mixtures: propane, propylene, butane (normal butane or isobutane), and butylenes.  208 psig  
(1434 kPa (g))

Figura 2.24: Extracto de la NFPA 58.

en diversas aplicaciones. Algunos aspectos clave incluyen la calidad y seguridad de los GLP, abarcando propiedades como el contenido de azufre y métodos de prueba específicos.

■ Características Principales:

- Definición de Propiedades Físicas: La norma abarca la especificación de propiedades físicas clave de los GLP, como densidad, punto de ebullición, contenido de azufre, entre otras.
- Métodos de Prueba: Proporciona métodos detallados y estandarizados para evaluar las propiedades físicas mencionadas, asegurando la coherencia en las mediciones.

■ Importancia:

- Calidad y seguridad: Establece estándares para garantizar la calidad y seguridad en el manejo, almacenamiento y transporte de GLP.
- Aplicabilidad General: Al ser una norma reconocida, proporciona directrices aplicables a una variedad de situaciones y entornos.

Cuadro 2.12: Especificaciones de gases licuados de petróleo GPA 2140-2017 Midstream.

Características del producto	P comercial	B comercial	PB comercial	PHD-5	Métodos de ensayo
Composición	Principalmente propano y/o propeno	Principalmente butanos y/o butenos	Principalmente mezclas de butanos y/o butenos con propano y/o propeno	No menos del 90 % de propano líquido. No más del 5% de propeno líquido	ASTM D2163, GPA 2177 o GPA 2186 (si hay otros olefinas) <i>Nota E</i>
<b>Presión de vapor:</b>					
a 100°F, psig, máx.	208	70	208	208	ASTM D1267 o D2598
a 37,8°C, kPa, máx.	1434	483	1434	1434	<i>Nota D</i>
<b>Residuo volátil:</b>					
Temperatura al 95 % evaporado					
°F, máx.	-37	36	36	-37	ASTM D1837
°C, máx.	-38,3	2,2	2,2	-38,3	ASTM D1837
Butano y más pesados, % vol., máx.	2,5	—	2,0	2,5	ASTM D2163
Pentano y más pesados, % vol., máx.	—	2,0	2,0	—	ASTM D2163
<b>Materia residual:</b>					
Residuo por evaporación de 100 mL, máx.	0,05 mL	—	—	0,05 mL	ASTM D2158
Observación de mancha de aceite	pasa (1)	—	—	pasa (1)	ASTM D2158
Corrosión, tira de cobre, máx.	N° 1	N° 1	N° 1	N° 1	ASTM D1838 (Nota A)
Azufre total, ppm masa, máx.	185	140	140	123	ASTM D6667 ASTM D5623 GPA 2199 (Nota B)
Contenido de humedad	pasa	—	—	pasa	ASTM D2713
Contenido de agua libre	—	Ninguno	Ninguno	—	<i>Nota C</i>

**Notas:**

1. Un producto aceptable no debe producir una mancha persistente de aceite cuando se añaden 0,3 mL de mezcla residual a un papel de filtro en incrementos de 0,1 mL y se examina a la luz del día después de 2 minutos según ASTM D2158.
2. *Nota A:* Este método puede no determinar con precisión la corrosividad del GLP si la muestra contiene inhibidores de corrosión u otras sustancias químicas que disminuyen su efecto.
3. *Nota B:* Asegúrese de que los límites de azufre total incluyen compuestos de azufre

para odorización, pero no azufre elemental. Si está presente, se aplicará el método de corrosión con tira de cobre.

4. *Nota C*: Se visualiza con prueba visual o pruebas con Karl Fischer o equivalentes.
5. *Nota D*: En caso de disputa, ASTM D1267 es el método de referencia para la presión de vapor.
6. *Nota E*: GPA 2177 y GPA 2186 son métodos utilizables cuando el fluido no contiene olefinas.

**ASTMD1835-18** La norma ASTM D1835-18 [117] establece la especificación para los gases licuados de petróleo (GLP), incluyendo propano, propeno (propileno), butano y mezclas de estos materiales. Este estándar aborda las características y propiedades físicas de los GLP, garantizando su calidad y seguridad en su uso. La norma se centra en aspectos como la composición de los GLP, los métodos de prueba para determinar propiedades físicas y químicas, y las condiciones de envasado. Asimismo, establece criterios para asegurar la calidad del producto y su conformidad con los estándares de la industria.

Cuadro 2.13: Requisitos detallados para gases licuados de petróleo según norma ASTM D1835-18.

Requisito	P Comercial	B Comercial	PB Comercial	P Especial	Método ASTM
Presión de vapor a 37,8 °C (100 °F), kPa (psig), máx.	1435 (208)	483 (70)	*	1435 (208)	D1267 o D2598 o D6897
<b>Contaminantes de hidrocarburos más pesados:</b>					
Butano y más pesados, % en volumen, máx.	2,5	...	...	2,5	D2163
Pentano y más pesados, % en volumen, máx.	...	2,0	2,0	...	D2163
Contenido de propeno, % en volumen, máx.	...	...	...	5,0	D2163
<b>Materia residual:</b> Se debe cumplir uno de los siguientes requisitos:					
(1) Residuo por evaporación de 100 mL, mL, máx.	0,05	0,05	0,05	0,05	D2158
Observación de mancha de aceite o	pasa	pasa	pasa	pasa	D2158
(2) Residuo por cromatografía de gases, mg/kg, máx.	350	350	350	350	D7756
Densidad a 15 °C o densidad relativa a 15,6 °C / 15,6 °C (60/60 °F)					D1657 o D2598
Corrosión, tira de cobre	N° 1	N° 1	N° 1	N° 1	D1838
Azufre, mg/kg (ppm masa), máx.	185	140	...	123	D6667
Sulfuro de hidrógeno	pasa	pasa	...	pasa	D2420
Contenido de humedad	pasa	pasa	...	pasa	D2713
Contenido de agua libre	...	ninguno	ninguno	...	—

<sup>a</sup> Equivalente a Propano HD-5 del estándar GPA 2140.

<sup>b</sup> Las presiones de vapor permisibles para productos clasificados como mezclas PB no deben superar 208 psig (1435 kPa), y además no deben superar la presión calculada en psig a partir de la siguiente relación entre la presión de vapor observada a 100 °F (37,8 °C) y la densidad relativa observada a 60 °F o 15,6 °C:

$$\text{Presión de vapor (psig), máx.} = 1167 - 1880 \times (\text{densidad relativa a } 60^{\circ}\text{F}/60^{\circ}\text{F}) \quad (2.12)$$

---

Presión de vapor (psig), máx. =  $1167 - 1880 \times (\text{densidad relativa a } 15,6^{\circ}\text{C}/15,6^{\circ}\text{C})$  (2.13)

(1) Para base a 60 °F.

(2) Para base a 15,6 °C.

Una mezcla específica debe identificarse por su presión de vapor a 100 °F (en libras por pulgada cuadrada manométrica). Para cumplir con la designación, la presión de vapor de la mezcla debe estar dentro del rango de +0 psi a -10 psi respecto a la especificada.

**BS 4250:2014** Esta norma británica [118] establece los requisitos de calidad para el butano y el propano comercial utilizados como combustibles. Su objetivo principal es asegurar que estos gases licuados, que se utilizan en aplicaciones domésticas, industriales y comerciales (como calefacción, cocina, automoción y procesos industriales), cumplan con especificaciones que garantizan su seguridad, eficiencia y uniformidad.

- Requisitos específicos: La norma detalla parámetros críticos que deben cumplir el butano y el propano, tales como:
  - Composición química: Especifica los niveles de hidrocarburos presentes, como etano, propano, butano y otros componentes menores.
  - Impurezas: Define los límites aceptables para contaminantes como el agua, compuestos de azufre y olefinas, que podrían afectar la calidad del gas y su seguridad.
  - Propiedades físicas: Incluye requisitos sobre la presión de vapor, densidad, índice de octano (para aplicaciones automotrices) y contenido de energía, para asegurar un rendimiento adecuado en diversas aplicaciones.
- Importancia: La norma facilita el comercio y el uso de estos gases al establecer especificaciones claras, lo que garantiza la seguridad del almacenamiento, transporte y consumo de butano y propano comerciales.

**ISO 8216-3:1987** Esta norma internacional [119] se centra en la clasificación de los combustibles de clase F, específicamente la familia L, que abarca los gases licuados del petróleo (GLP). Su propósito es proporcionar una nomenclatura estándar para identificar y diferenciar tipos específicos de GLP utilizados en distintas aplicaciones, facilitando el comercio global de estos productos.

- **Clasificación de combustibles:** Define categorías basadas en las propiedades físicas y químicas de los gases, tales como:
  - **Punto de ebullición y presión de vapor:** Estos parámetros ayudan a identificar las condiciones de almacenamiento y transporte necesarias para cada tipo de GLP.
  - **Tipos de hidrocarburos presentes:** Como propano, butano y mezclas de ambos, que determinan las aplicaciones adecuadas para cada tipo de GLP.
- **Importancia:** La clasificación uniforme permite a los productores, proveedores y usuarios finales entender las especificaciones de cada tipo de GLP, asegurando que los productos correctos se utilicen para las aplicaciones adecuadas y reduciendo la posibilidad de malentendidos en las transacciones comerciales.

**ISO 9162:2013** Esta norma [120] establece las especificaciones técnicas para los gases licuados del petróleo (GLP) utilizados como combustibles. Se centra en garantizar la seguridad y eficiencia del GLP destinado a aplicaciones comerciales, industriales y domésticas, proporcionando requisitos específicos que deben cumplir estos productos antes de ser distribuidos y consumidos.

- **Requisitos Específicos:** Incluye una variedad de especificaciones técnicas que aseguran la calidad del GLP, como:

- Pureza del producto: Establece niveles mínimos para componentes principales (como propano y butano) y límites máximos para impurezas (como agua, compuestos de azufre y olefinas) que podrían afectar el rendimiento y seguridad del gas.
  - Propiedades físico-químicas: Detalla parámetros críticos, como la presión de vapor, la densidad, la capacidad calorífica, y la estabilidad del producto, que aseguran que el gas funcione correctamente en los equipos diseñados para su uso.
  - seguridad y manipulación: Especifica las propiedades necesarias para garantizar que el GLP sea seguro durante su almacenamiento y transporte, minimizando riesgos de explosiones, fugas y otros peligros potenciales.
- Importancia: Las especificaciones detalladas ayudan a los productores a mantener un estándar de calidad consistente, permitiendo a los consumidores finales confiar en que el producto que están utilizando es seguro, eficiente y adecuado para sus necesidades.

### **Selección de normas nacionales**

La revisión de otras normas y reglamentos en otros países de Sudamérica y del resto del mundo revela resultados similares. La norma Chilena NCh 72 es muy similar a las normas norteamericanas. Sin embargo, la NCh 72 es la única de las normas analizadas que establece límites máximos al contenido de butano en las mezclas de propano – butano. En términos de olefinas contaminantes, la norma NCh 72 sólo establece límites para el GLP catalítico. Al momento de realizar la investigación no existen regulaciones en específico para el e-GL. Se tiene en conocimiento que se encuentran en construcción en conjunto a la Superintendencia de Electricidad y combustibles (SEC). Las normas que existen actualmente regulando el mercado Chileno de GLP y similares, son las que se detallan a continuación.

**DS108** Reglamento de seguridad para Instalaciones de Almacenamiento, Transporte y distribución GLP y Operaciones Asociadas:

- El Artículo 1 del DS108 [121] establece las generalidades del reglamento. Define los requisitos y normativas para garantizar la seguridad en las instalaciones de almacenamiento, transporte y distribución de Gas Licuado de Petróleo (GLP). Este artículo sienta las bases para la regulación integral de estas operaciones, abarcando aspectos clave para la prevención de riesgos.
- El Artículo 4 detalla los requisitos específicos para las instalaciones de almacenamiento de GLP. Se abordan aspectos como la ubicación, diseño y construcción de los depósitos, asegurando condiciones óptimas para prevenir accidentes y garantizar la seguridad de las instalaciones.
- El Artículo 6 se centra en las operaciones de transporte de GLP, estableciendo normativas para la carga, descarga y traslado del gas. Define medidas de seguridad, protocolos de emergencia y requisitos para los vehículos utilizados en estas operaciones.

**NCh 72** La norma Chilena NCh 72 [27] establece las especificaciones para el Gas Licuado de Petróleo (GLP) en Chile. En resumen, la NCh 72 proporciona lineamientos detallados sobre la composición del GLP, garantizando su seguridad, calidad y cumplimiento con estándares específicos. En cuanto a la composición del GLP, la norma aborda varios aspectos clave:

- **Proporciones de Componentes:** La NCh 72 define las proporciones de los componentes principales del GLP, que comúnmente son propano y butano. Estas proporciones pueden variar según el uso previsto del GLP, ya sea comercial, industrial o doméstico.

**Artículo 1°.-** Este reglamento establece los requisitos mínimos de seguridad que deberán cumplir las instalaciones de gas licuado de petróleo, en adelante "GLP", en las etapas de diseño, construcción, operación, mantenimiento, inspección y término definitivo de operaciones, en las cuales se realizarán las actividades de almacenamiento, envasado, transporte, transferencia, distribución y abastecimiento de GLP, así como las obligaciones de las personas naturales y jurídicas que intervienen en dichas actividades, a objeto de desarrollarlas en forma segura, controlando el riesgo de manera tal que no constituyan peligro para las personas o las cosas.

**Artículo 4°.-** En materias de diseño, construcción, operación, mantenimiento, reparación, modificación, inspección y término definitivo de operaciones de Instalaciones de GLP, la Superintendencia de Electricidad y Combustibles, en adelante "la Superintendencia", podrá permitir el uso de tecnologías diferentes a las establecidas en el presente reglamento, siempre que se mantenga el nivel de seguridad que el presente texto normativo contempla. Estas tecnologías deberán estar técnicamente respaldadas en normas, códigos o especificaciones nacionales o extranjeras, así como en prácticas recomendadas de ingeniería internacionalmente reconocidas.

**Artículo 6°.-** Para los efectos del presente reglamento, los siguientes términos, relativos a Instalaciones de GLP y operaciones asociadas a éstas, tendrán el significado y alcance que se indica a continuación:

6.11 Gas Licuado de Petróleo o GLP: Mezcla de hidrocarburos en estado líquido, cuyos requisitos están establecidos en la Norma Chilena NCh72.Of1999, "Gases licuados de petróleo - Especificaciones", declarada oficial de la República de Chile por Decreto Supremo Nº 361, de 1999, del Ministerio de Economía, Fomento y Reconstrucción.

Figura 2.25: Extracto del DS108, artículos 1, 4 y 6.

- Impurezas y contaminantes: La norma establece límites para impurezas y contaminantes presentes en el GLP. Esto incluye especificaciones para el contenido de azufre, agua y otros componentes que podrían afectar la calidad y el desempeño del GLP.
- Análisis de normativas: La NCh 72 detalla los métodos de análisis para determinar la composición del GLP. Esto podría incluir técnicas como la medición de la densidad relativa, pruebas de contenido de azufre y análisis de otros componentes críticos.
- Cumplimiento con Estándares Internacionales: La norma puede hacer referencia a estándares internacionales reconocidos para la composición del GLP, asegurando que el producto cumpla con criterios de calidad aceptados a nivel global.

Según lo delineado en la normativa actual, el e-GL no se ajusta a la definición requerida para ser categorizado como un sustituto viable del GLP. Es imperativo considerar una revisión y actualización de la normativa vigente, dado el surgimiento de nuevos tipos

Cuadro 2.14: Requisitos de los gases licuados de petróleo según NCh72.

Nº	Características	P	B	P-B	Unidad	Método de ensayo
1	Odorización	Sí	Sí	Sí	-	NCh2394
2	Corrosión de la lámina de cobre N°, máx.	1	1	1	-	NCh76
3	Contenido de azufre máx.	0,015	0,015	0,015	% masa	NCh1962
4	Presión de vapor a 37,8°C (100°F), máx.	1 430 (208)	1 430 (208)	917 (133)	kPa (psig)	NCh77
5	<b>Residuo volátil:</b>					
	Temp. ebullición a 95 % evaporado, máx.	-38,3	-2,2	-	°C	NCh74
	Butanos y más pesados, vol. máx.	2,5	30,0	-	%	NCh1941
	Pentanos y más pesados, vol. máx.	0,5	2,0	-	%	NCh1961
6	Humedad	cumple			-	NCh75
7	Contenido de agua libre	No	No	No	-	Nota en tabla
8	<b>Material residual:</b>					
	Residuo en evaporación de 100 mL, máx.	0,05	0,05	-	mL	NCh1940
	Observación de la mancha de aceite	cumple			-	NCh1940
9	Densidad relativa 60/60°F, mín.	0,500	-	0,500	-	NCh1961

Cuadro 2.15: Composición GLP extracto de la NCh 72, artículos 4 y Tabla 1.

Compuesto	% volumen
Propano y Propeno	24,57 %
Butanos y Butenos	72,87 %
Péntanos y más pesados	0,24 %

de combustibles, como el e-GL, que no se contemplan adecuadamente en las disposiciones actuales. La evolución de la tecnología y la diversificación de fuentes de energía exigen una adaptación continua de las regulaciones para asegurar una cobertura completa y precisa de los distintos combustibles disponibles. En este contexto, es crucial revisar las definiciones existentes y actualizarlas para incluir términos y categorías emergentes, como el e-GL, y garantizar así una normativa acorde con los avances en la industria de los combustibles. Este proceso de actualización no solo permitirá una regulación más eficaz, sino que también

facilitará la transición hacia opciones energéticas más sostenibles y avanzadas, alineadas con las demandas cambiantes del panorama energético actual. Es fundamental que la normativa refleje con precisión las características y propiedades de los nuevos combustibles para garantizar su integración segura y eficiente en el mercado.

**NCh 77** La NCh77:1985 [122] es una norma Chilena que establece el método para la determinación de la presión de vapor de los Gases Licuados de Petróleo (GLP) mediante el Método GLP. Este método proporciona una medida aproximada de la presión de vapor de los GLP, un factor importante para su almacenamiento y manipulación. La norma se utiliza para evaluar la cantidad de constituyentes de punto de ebullición de los GLP, lo que es crucial para garantizar su seguridad y conformidad con los estándares de calidad.

### **2.2.2. Captura de CO<sub>2</sub>**

La permanencia del almacenamiento de CO<sub>2</sub> es un factor vital para la eliminación de carbono mediante instalaciones de captura directa de aire (DAC). Se han desarrollado normas internacionales (ISO 27914:2017) para el almacenamiento geológico de CO<sub>2</sub>, incluidos los requisitos técnicos de MMV (measurement, monitoring and verification) y las mejores prácticas que pueden adoptar los responsables políticos y los reguladores. Los marcos de contabilidad del carbono para la RCD (remoción de CO<sub>2</sub>) tendrán que considerar el potencial de reversión o re-liberación del CO<sub>2</sub>.

**ISO 27914**

norma ISO 27914:2017 Carbon dioxide capture, transportation and geological storage. [123].

1. Establece requisitos y recomendaciones para el almacenamiento geológico de flujos de CO<sub>2</sub>, con el propósito de promover un almacenamiento comercial, seguro y a largo plazo de dióxido de carbono de manera que minimice los riesgos para el medio ambiente, los recursos naturales y la salud humana.
2. Es aplicable tanto para el almacenamiento geológico en tierra como en el mar, dentro de estratos geológicos permeables y porosos, incluidos los reservorios de hidrocarburos donde no se inyecta un flujo de CO<sub>2</sub> con el propósito de producción de hidrocarburos o para almacenamiento en asociación con CO<sub>2</sub>-EOR.
3. Incluye actividades asociadas con la selección y caracterización del sitio, diseño y desarrollo, operación de los sitios de almacenamiento y preparación para el cierre del sitio.
4. Reconoce que la selección y gestión del sitio son únicas para cada proyecto y que los riesgos técnicos intrínsecos y las incertidumbres se manejarán de manera específica para cada sitio.
5. Reconoce que se requerirá autorización y aprobación por parte de las autoridades reguladoras a lo largo del ciclo de vida del proyecto, incluido el período de cierre, aunque el proceso de obtención de permisos no está incluido en ISO 27914:2017.
6. Proporciona requisitos y recomendaciones para el desarrollo de sistemas de gestión, participación de la comunidad y otros interesados, evaluación de riesgos, gestión de riesgos y comunicación de riesgos.

7. No se aplica, modifica, interpreta ni reemplaza ninguna regulación, tratado, protocolo o instrumento nacional o internacional que de otro modo sería aplicable a las actividades abordadas en ISO 27914:2017.
8. No se aplica ni modifica ningún derecho de propiedad o interés sobre la superficie o el subsuelo (incluidos los derechos minerales), ni ningún contrato comercial preexistente o arreglo relacionado con dicha propiedad.

El ciclo de vida de un proyecto de almacenamiento geológico de CO<sub>2</sub> cubre todos los aspectos, períodos y etapas del proyecto, desde aquellos que conducen al inicio del proyecto (incluyendo la selección del sitio, caracterización, evaluación, ingeniería, obtención de permisos y construcción), pasando por el inicio de la inyección y continuando con operaciones subsiguientes hasta el cese de la inyección y culminando en el período posterior a la inyección, que incluye un período de cierre.

## **Ley 21.455**

En Chile, el 30 de mayo de 2022 se promulga la **Ley 21.455: Ley Marco de cambio climático** [124]. La presente ley establece un marco jurídico para abordar los desafíos del cambio climático, con el objetivo de alcanzar la neutralidad en las emisiones de gases de efecto invernadero para el año 2050. Determina la institucionalidad ambiental necesaria, asignando funciones y responsabilidades a los organismos nacionales, regionales y locales, siendo el Ministerio del Medio Ambiente la autoridad líder. Además, se crea un Sistema Nacional de Información y Participación Ciudadana en materia de cambio climático. El Ministerio de Obras Públicas tiene la tarea de desarrollar Planes Estratégicos de Recursos Hídricos en las cuencas, para gestionar y balancear los recursos hídricos del país. Estos planes deben ser públicos y revisarse cada cinco años. La ley también incluye modificaciones a otras

normativas para integrar estos nuevos enfoques.

### **2.2.3. Producción, almacenamiento y transporte de H<sub>2</sub>**

En Chile, el hidrógeno ha sido utilizado durante varios años; sin embargo, aún no existen regulaciones específicas que moderen su uso, almacenamiento, transporte, entre otros aspectos. Se espera que los nuevos lineamientos a ser presentados por el gobierno clarifiquen las normas o estándares aplicables al uso de hidrógeno en combustibles sintéticos. No obstante lo anterior, se han hecho avances en la materia, los cuales son descritos a continuación.

#### **Ley de eficiencia energética**

Con fecha 13 de Febrero 2021 La Ley de Eficiencia Energética 21305 en su artículo 7° modifica el decreto de Ley N°2.224, de 1978, que crea al Ministerio de energía y la Comisión Nacional de energía . Dentro de los alcances modifica las competencias del Ministerio de energía, incorporando al hidrógeno y combustibles a partir del hidrógeno, y demás fuentes y vectores energéticos como competencias del Ministerio de energía.

#### **Guía SEC**

Mientras no se dicte la regulación del hidrógeno como vector energético, existe la guía de Proyectos Especiales de hidrógeno de la SEC Superintendencia de Electricidad y combustibles, dicha guía tiene como objetivo el orientar la aprobación de operación de proyectos de hidrógeno que consideren instalaciones relacionadas con la producción, acondicionamiento, transporte, distribución, almacenamiento o consumo de hidrógeno como combustible. Algunas de las normas internacionales que se pueden utilizar para avalar la seguridad del proyecto

son ANSI, ASME, ASTM, AWS, BS, EN, ISO, NFPA, y UNE [125]. Luego del análisis respectivo la SEC autoriza el proyecto, posterior a dicha aprobación, se permitirá el registro de dicha instalación.

## **Guía SERNAGEOMIN**

Actualmente no hay regulación respecto al uso del hidrógeno en faenas mineras. La seguridad en dichas faenas se encuentra regulada por el SERNAGEOMIN. El objetivo de la guía de implementación de pilotos y validación de tecnologías en donde se produzca, acondicione, transporte y distribuya, almacene y/o utilice hidrógeno H<sub>2</sub> como combustible, en las faenas y operaciones mineras. La guía de la SERNAGEOMIN es complementaria a la guía de la SEC, los campos de acción de la SERNAGEOMIN son, el recambio de tanques de H<sub>2</sub>, el uso de H<sub>2</sub> como combustible en equipos móviles de uso tanto en minería subterránea como de rajo y el mantenimiento de estos equipos en el taller de mantenimiento de la mina y sus cuidados en el estacionamiento de los mismo equipos.

## **DDU 470**

El 21 de noviembre del 2022, el Ministerio de Vivienda y Urbanismo (MINVU) emitió la DDU470 [126], que lleva por título “Uso de suelo aplicable a edificaciones, instalaciones y redes asociados a la generación de hidrógeno”. Dentro de las conclusiones del documento publicado por el MINVU, se tiene que:

- Los proyectos que tengan por finalidad la generación de hidrógeno, independientemente del proceso que se utilice para obtener ese energético, corresponden al tipo de uso de infraestructura Energética, por ajustarse al artículo 2.1.29 de la OGUC (Ordenanza General de Urbanismo y Construcciones). Esto tiene como beneficio directo que las

redes o trazados de cualquier de los componentes de los proyectos, que estén destinados al transporte del hidrógeno, siempre estarán admitidos. Junto con lo anterior, y dado que la producción de hidrógeno contempla transformación, las instalaciones y edificaciones deberán ser calificadas por la SEREMI de Salud, según lo establecido por el artículo 2.1.29 OGUC.

- Los proyectos en los que el producto final sea una sustancia que no forma parte del sector energía, como por ejemplo el amoníaco, siendo el hidrógeno un insumo para su producción, se consideraran como Actividades Productivas, según lo establecido por el artículo 2.1.28 de la OGUC. Si el proyecto de generación contempla diversas actividades, como por ejemplo almacenamiento y/o distribución, y dichas actividades se emplazan en diferentes predios, se deberá dar cumplimiento a la normativa urbanística, en particular el uso de suelo respecto a cada uno de los predios en particular, ateniendo a la naturaleza de la ediciones e instalaciones que se proyecten en ellos.
- Respecto a los proyectos ubicados en zonas rurales, se indica que los proyectos deberán dar cumplimiento al artículo 55° de la LGUC (Ley General Urbanismo y Construcción).

## **DS13**

El reglamento establece los requisitos mínimos de seguridad que deberán cumplir las instalaciones de hidrógeno con fines energéticos, en las etapas de diseño, construcción, operación, mantenimiento, reparación, modificación, inspección y término definitivo de operaciones, y en las cuales se realizarán las actividades de producción, acondicionamiento, almacenamiento, transferencia y consumo de hidrógeno.

Se establecen, además, las obligaciones y responsabilidades de las personas naturales y jurídicas que intervienen en dichas actividades, con el objetivo de desarrollar en forma

segura y controlando el riesgo, de manera tal, que no constituyan para las personas o las cosas.

El reglamento tiene 4 exclusiones:

1. Las instalaciones surtidoras de hidrógeno para vehículos terrestres , ferroviarios, aéreos o marítimos.
2. Las redes de transporte y distribución de hidrógeno que se utilizan para trasladar el hidrógeno fuera de la instalación de hidrógeno.
3. Los vehículos que operen con hidrógeno, sean terrestres, ferroviarios, aéreos o marítimos.
4. Los vehículos, ferrocarriles, naves o aeronaves que transporten hidrógeno.

Dichas exclusiones tendrán que ser evaluadas por la SEC utilizando la guía de proyectos especiales.

## 2.3. Modelamiento teórico y numérico

Esta sección tiene por objetivo establecer el marco teórico y numérico que sustenta el análisis de la intercambiabilidad de gases combustibles, así como su comportamiento en procesos de combustión y sus respectivas emisiones. Se presentan definiciones clave y parámetros relevantes, tales como el poder calorífico, el índice de *Wobbe*, la temperatura adiabática de llama, entre otros. Se realizará un estudio la intercambiabilidad, combustión y emisiones de una mezcla de combustibles gaseosos representativos del electro-Gas Licuado (e-GL) que será distribuido por GASCO S.A. El estudio será llevado a cabo para cubrir los aspectos señalados en clientes típicos de sectores domésticos, comerciales e industriales. Los resultados servirán como herramienta para comprender el grado de penetración que puede tener la introducción del e-GL en los mercados señalados, bajo consideraciones de seguridad en su empleo, desempeño de equipos corrientes, reducción de emisiones y de gases de efecto invernadero.

### 2.3.1. Intercambiabilidad

La intercambiabilidad entre combustibles se refiere a la capacidad de sustituir un tipo de combustible gaseoso por otro en equipos de combustión sin afectar significativamente el rendimiento o la eficiencia del sistema. Este concepto es esencial en aplicaciones donde se utilizan diferentes tipos de gases, como el gas natural, gas licuado de petróleo, gasolina, gasoil, entre otros.

## Poder calorífico

El poder calorífico es la cantidad de energía liberada por unidad de masa o volumen de una sustancia durante una reacción química, comúnmente la combustión. En otras palabras, representa la capacidad de un combustible para generar calor cuando se quema.

Existen dos medidas principales de poder calorífico:

1. **Poder calorífico Superior (PCS, o HHV en inglés):** Es la cantidad total de calor liberado durante la combustión completa de una unidad de masa de combustible, incluyendo el calor latente de vaporización del agua. Se puede expresar como:

$$PCS = \sum Q_i \quad (2.14)$$

2. **Poder calorífico Inferior (PCI, o LHV en inglés):** Es el PCS menos el calor latente de vaporización del agua generada durante la combustión. Se expresa como:

$$PCI = PCS - \Delta H_v \quad (2.15)$$

Donde:

- $\sum Q_i$  es la suma de las entalpías de reacción de los productos de la combustión.
- $\Delta H_v$  es el calor latente de vaporización del agua generada.

En resumen, el poder calorífico proporciona una medida crucial de la eficiencia energética de los combustibles, influyendo en su idoneidad para diversas aplicaciones, desde la generación de energía hasta la calefacción.

## Índice de *Wobbe*

El Índice de *Wobbe* (WI) es comúnmente utilizado como un indicador de intercambiabilidad entre combustibles. Este índice tiene en cuenta la composición química y las

propiedades físicas de los gases, permitiendo evaluar su capacidad para sustituirse entre sí sin provocar variaciones sustanciales en la potencia de la combustión. La intercambiabilidad se estudia teórica, numérica y experimentalmente, considerando factores como la composición de los gases y la validación experimental de los índices de intercambiabilidad, que suelen mantenerse dentro de un rango aceptable, como el 5,5 % en comparación con el gas base [127]. Para poder calcular el Índice de *Wobbe*, se puede hacer de la siguiente manera:

$$WI = \frac{PCS}{\sqrt{SG}} \quad (2.16)$$

donde  $SG$  es la densidad relativa del combustible, es una comparación de la densidad de un combustible ( $i$ ) con la densidad de otra sustancia de referencia ( $ref$ ), que generalmente es el agua. Se expresa como la relación entre la densidad del combustible y la densidad del agua. La fórmula general es:

$$SG = \frac{\rho_i}{\rho_{ref}} \quad (2.17)$$

### Temperatura adiabática de llama

La temperatura adiabática de Llama ( $T_{\text{adiabática}}$ ) es un parámetro importante en la combustión de gases y se refiere a la temperatura que se alcanzaría en una llama si no hubiera intercambio de calor con el entorno. Se calcula utilizando la ecuación de balance de energía para una reacción de combustión adiabática:

$$T_{\text{adiabática}} = T_{\text{inicial}} + \frac{\Delta H_{\text{combustión}}}{C_p} \quad (2.18)$$

Donde:

1.  $T_{\text{inicial}}$  es la temperatura inicial del reactivo.
2.  $\Delta H_{\text{combustión}}$  es el cambio de entalpía de combustión.
3.  $C_p$  es la capacidad calorífica a presión constante del gas de combustión.

Esta temperatura representa un caso ideal donde no hay pérdida ni ganancia de calor hacia el entorno.

### Datos de validación para la intercambiabilidad

La intercambiabilidad entre propano e iso-butano es fundamental en diversas aplicaciones industriales, energéticas y de combustión. Son dos los gases que representan una composición de un 80 % del e-GL. Los siguientes datos de referencia proporcionan información esencial para comprender y evaluar la intercambiabilidad de estos dos gases.

**Poderes caloríficos referenciales** El poder calorífico, expresado en unidades de energía por unidad de masa o volumen, es crucial para determinar la eficiencia como combustible. Los valores del poder calorífico tanto del propano, como del iso-butano, fueron obtenidos desde la base de datos del NIST [128] y plasmados en la Tabla 2.16.

Cuadro 2.16: Poderes caloríficos de gases de referencia.

Gas	P.C.I. (kcal/kg)	P.C.S. (kcal/kg)
Propano	11.082	12.052
Iso-butano	10.902	11.730

**Índices de Wobbe Referenciales** El índice de *Wobbe* es una medida utilizada en la industria del gas para cuantificar la capacidad calorífica de un gas combustible. Se define como la cantidad de energía liberada por la combustión completa de una unidad de volumen del gas, manteniendo constantes la presión y la temperatura. Los valores de este indicador para el propano, iso-butano y GLP se encuentran en la Tabla 2.17 [129].

Cuadro 2.17: Índice de *Wobbe* de gases de referencia.

Gas	Valor inferior WI (MJ/m <sup>3</sup> )	Valor superior WI (MJ/m <sup>3</sup> )
Propano	74,54	81,07
Iso-butano	84,71	91,96
GLP	73,5	87,5

**Temperaturas adiabática de llama referenciales** En la Figura 2.26 se muestran las temperaturas adiabáticas de llama para los combustibles propano e iso-butano. Estas temperaturas adiabáticas son indicadores cruciales de la eficiencia de la combustión y se refieren a las temperaturas teóricas alcanzadas durante la reacción de combustión completa en condiciones adiabáticas, es decir, sin pérdida de calor hacia el entorno.

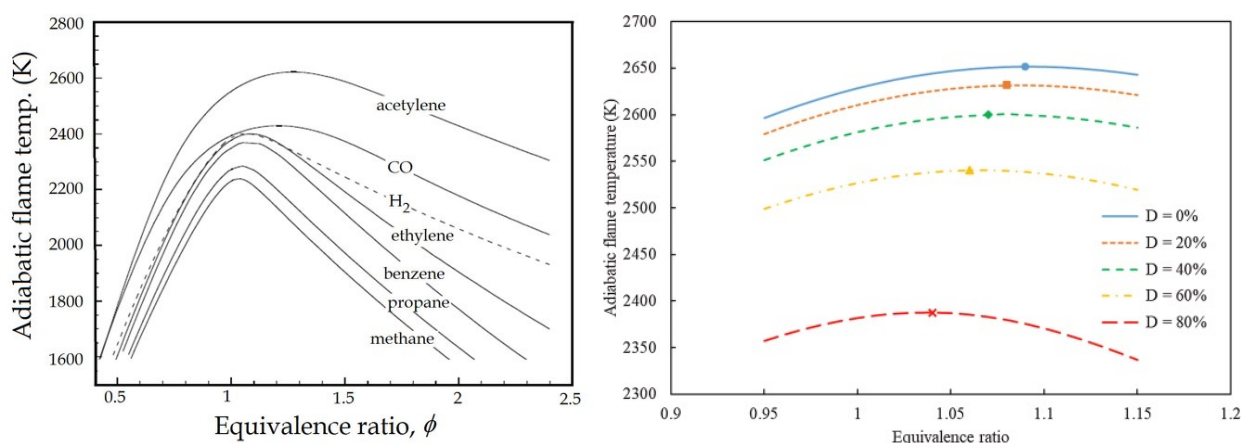


Figura 2.26: temperatura adiabática de llama de propano (izq) [130] e iso-butano (der, D = 0%) [131], en función del ratio de equivalencia ( $\phi$ ).

### 2.3.2. Seguridad y condiciones de flamabilidad

Esta subsección aborda los aspectos asociados a la seguridad del uso de mezclas combustibles como el e-GL, con énfasis en sus propiedades de inflamabilidad y comportamiento

en condiciones extremas. Se justifica su inclusión debido a la necesidad de garantizar que la introducción de nuevos combustibles en aplicaciones residenciales, comerciales e industriales no implique riesgos adicionales en comparación con los combustibles convencionales. Se presentarán herramientas teóricas y experimentales, tales como el uso de tubos de choque, la determinación de velocidades de llama laminar, tiempos de retardo de ignición y límites de inflamabilidad, que permiten caracterizar y validar el comportamiento seguro del e-GL bajo distintas condiciones operativas.

### Tubo de choque

Los tubos de choque son dispositivos experimentales ampliamente utilizados para estudiar reacciones químicas en fase gaseosa y fenómenos dinámicos de alta energía. Estos dispositivos permiten recrear condiciones extremas de temperatura, presión y tiempo, proporcionando un entorno controlado para analizar procesos químicos y físicos en escalas de tiempo que van desde microsegundos hasta milisegundos. Las temperaturas alcanzadas suelen estar en el rango de varios miles de kelvins, lo que los hace ideales para investigar procesos como la combustión, la dinámica de gases y la descomposición de moléculas complejas. El funcionamiento básico de un tubo de choque se basa en la generación de una onda de

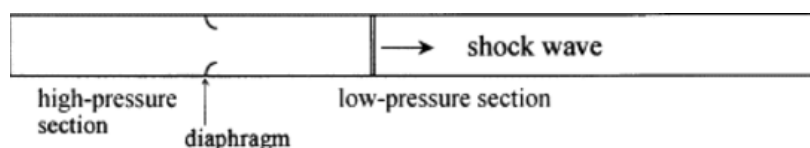


Figura 2.27: Diagrama simplificado de un tubo de choque, obtenido desde [132].

choque mediante la ruptura de un diafragma que separa dos cámaras y que es observable en Figura 2.27: una de alta presión (generalmente con gases como hidrógeno o helio) y otra de baja presión, que contiene el gas reactivo diluido en un gas inerte, como argón. Al romperse el diafragma, la onda de choque se propaga a velocidades supersónicas, comprimiendo y ca-

lentando rápidamente el gas reactivo en un tiempo inferior a un milisegundo. Este fenómeno es altamente reproducible y puede ser modelado matemáticamente para predecir condiciones experimentales.

### 1. Estudio de Reacciones Químicas y Mecanismos de Descomposición

- Los tubos de choque son herramientas esenciales para analizar la cinética de reacciones químicas en fase gaseosa, incluyendo la descomposición de moléculas poliatómicas y la formación de productos intermedios. Por ejemplo, se pueden medir constantes de velocidad y mecanismos de reacción, lo cual es crucial para el desarrollo de modelos de combustión y procesos industriales.
- En experimentos de choque simple (single-pulse), se obtiene un perfil completo de los productos finales, permitiendo validar teorías sobre rutas de reacción y productos intermedios.

### 2. Espectroscopía Óptica y emisión de Especies Reactivas

- Las técnicas de detección, como la espectroscopía de emisión o absorción, permiten analizar especies químicas en estados excitados. Por ejemplo, en mezclas de CH y NH, los tubos de choque generan bandas de emisión características de C<sub>2</sub> y CN, mientras que polvos de Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> producen señales de AlO.

### 3. Validación y Desarrollo de Modelos Computacionales

- Los datos obtenidos en experimentos con tubos de choque son fundamentales para validar simulaciones y teorías predictivas en dinámica de gases y química computacional. Estos modelos son herramientas clave para diseñar tecnologías avanzadas, como motores hipersónicos y sistemas de combustión más eficientes.

### 4. Análisis de Intermediarios Inestables

- Una ventaja particular de los tubos de choque es la capacidad de detectar intermediarios químicos inestables que se forman durante la reacción, proporcionando información detallada sobre las primeras etapas de la reacción química.

#### 5. Fenómenos de Alta energía

- Los tubos de choque también se utilizan en estudios astrofísicos y de física de plasma, simulando eventos como explosiones de supernovas o la entrada de meteoritos a la atmósfera terrestre.

### Velocidad de llama laminar

La velocidad de llama laminar ( $S_L$ ) es un parámetro en la combustión que representa la velocidad a la cual se propaga la llama en una mezcla de combustible y oxidante sin turbulencia. Se puede calcular utilizando la ecuación de velocidad de llama de Markstein:

$$S_L = S_{L0} + \frac{A \cdot \nabla C}{C} \quad (2.19)$$

Donde:

1.  $S_{L0}$  es la velocidad de llama en condiciones ideales.
2.  $A$  es la constante de Markstein.
3.  $\nabla C$  es el gradiente de concentración de la mezcla.
4.  $C$  es la concentración promedio de la mezcla.

Esta ecuación describe cómo la velocidad de la llama varía en respuesta a cambios en el gradiente de concentración. Esta propiedad se aplica en estudios de intercambiabilidad entre sistemas de combustión con llamas de premezcla parcial o total.

## Tiempo de retardo de ignición

El tiempo de retardo de ignición ( $\tau$ ) se refiere al intervalo de tiempo entre el inicio de la ignición y el comienzo real de la combustión en un sistema. Puede calcularse utilizando la siguiente ecuación empírica de Arrhenius:

$$\tau = \frac{1}{A \cdot e^{\left(-\frac{E}{RT}\right)}} \quad (2.20)$$

Donde:

1.  $A$  es el factor preexponencial.
2.  $E$  es la energía de activación.
3.  $R$  es la constante de los gases ideales.
4.  $T$  es la temperatura absoluta.

Esta ecuación describe cómo la temperatura y la energía de activación afectan el tiempo de retardo de ignición. Esta propiedad se aplica en estudios de intercambiabilidad entre sistemas de combustión con llamas de premezcla parcial o total.

## Límites de inflamabilidad

Los límites de inflamabilidad se refieren a los rangos de concentración de una mezcla de gas en el aire dentro de los cuales puede ocurrir la ignición. Estos límites se dividen en límite inferior de inflamabilidad (LII, o LFL en inglés) y límite superior de inflamabilidad (LSI, o UFL en inglés). La relación entre la concentración de combustible y la inflamabilidad puede expresarse mediante la ecuación de Le Chatelier:

$$\begin{aligned}
 LII &= \frac{\phi}{1 + \phi} \cdot 100 \% \\
 LSI &= \frac{1}{\phi + 1} \cdot 100 \%
 \end{aligned}
 \tag{2.21}$$

Donde  $\phi$  es la relación de mezcla ( $\frac{\text{concentración de combustible}}{\text{concentración de aire}}$ ). Estas ecuaciones proporcionan los límites de inflamabilidad en términos de la relación de mezcla. La ley de Le Chatelier se puede aplicar a mezclas gaseosas en los límites de inflamabilidad, que son los rangos de concentración de un gas o vapor en el aire donde la mezcla es inflamable. La ley establece que cuando se aplica un cambio de condiciones a un sistema en equilibrio, el sistema se ajustará para contrarrestar ese cambio y restaurar un nuevo equilibrio. En el contexto de los límites de inflamabilidad, esto significa que si se altera la concentración de combustible o aire en una mezcla inflamable, el sistema se ajustará para mantener la mezcla dentro de los límites de inflamabilidad. Por ejemplo, si se aumenta la concentración de combustible, el sistema se desplazará hacia una menor concentración de combustible para restablecer el equilibrio. Esta ley refleja la tendencia de las mezclas gaseosas inflamables a ajustarse en respuesta a cambios en las condiciones para evitar situaciones peligrosas. En casos de mezclas de gases con diferentes fracciones molares ( $x_i$ ) o en masa ( $y_i$ ), la ley de Le Chatelier se puede aplicar de la siguiente manera para obtener los límites representativos de la mezcla:

$$\begin{aligned}
 LII_{mix} &= \frac{1}{\sum_{i=1}^n \frac{y_i}{LII_i}} \cdot 100 \% \\
 LSI_{mix} &= \frac{1}{\sum_{i=1}^n \frac{y_i}{LSI_i}} \cdot 100 \%
 \end{aligned}
 \tag{2.22}$$

## Datos de validación para la seguridad y flamabilidad

**Velocidad de llama laminar referenciales** La Figura 2.28 presentada ilustra las velocidades de llama laminar para los combustibles propano e iso-butano. Estas velocidades son parámetros fundamentales que describen la propagación de la llama en condiciones de mezcla estequiométrica y laminar, sin considerar turbulencias ni interacciones externas.

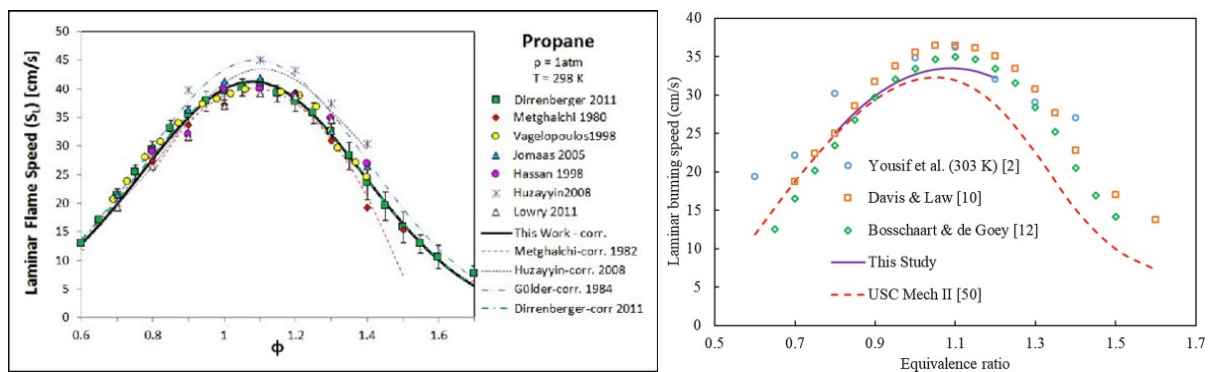


Figura 2.28: velocidad de llama laminar de propano (izq) [133, 134, 135] e iso-butano (der,  $D = 0\%$ ) [131, 136, 137], en función del ratio de equivalencia ( $\phi$ ).

**Tiempo de retardo de ignición de llama referenciales** La Figura 2.29 que se presenta muestra los tiempos de retardo de ignición de llama para los combustibles propano e iso-butano. Estos tiempos de retardo son indicadores críticos que describen el lapso entre la introducción de una fuente de ignición y el inicio de la combustión en condiciones controladas.

**Límites de inflamabilidad referenciales** La Tabla 2.18 que se presenta detalla los límites de inflamabilidad para los combustibles propano e iso-butano. Estos límites son rangos de concentración de gas en mezclas con aire dentro de los cuales la mezcla es inflamable. Se expresan como porcentajes de volumen de gas en la mezcla. Tanto el propano como el

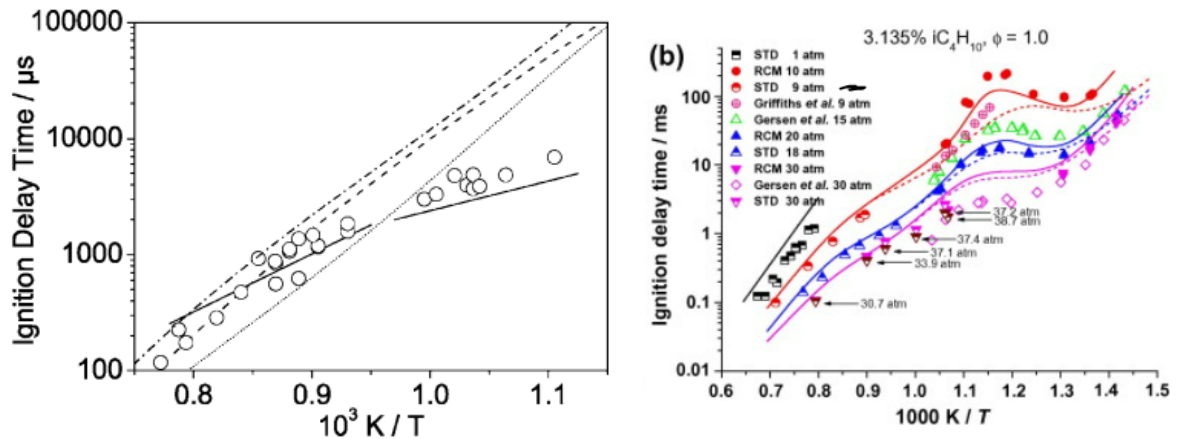


Figura 2.29: Tiempo de retardo de ignición del propano (izq) [138] e iso-butano (der,  $D = 0\%$ ) [139], en función del inverso de la temperatura.

iso-butano son combustibles gaseosos que exhiben límites de inflamabilidad característicos. La figura destaca cómo estos límites varían según la proporción específica de combustible-aire. Es crucial comprender estos límites para garantizar la seguridad en entornos donde se utilizan o almacenan estos gases. La figura puede resaltar cómo la estructura molecular única del iso-butano puede influir en los límites de inflamabilidad en comparación con el propano. Estos datos son esenciales para el diseño de sistemas de seguridad y la implementación de medidas preventivas en instalaciones donde se manejan estos combustibles gaseosos. La comprensión de los límites de inflamabilidad contribuye a mitigar riesgos y garantizar prácticas seguras en entornos industriales y comerciales.

Cuadro 2.18: Límites de inflamabilidad de gases de referencia

Gas	LII (%)	LSI (%)
Propano [140]	2,1	10,1
Iso-butano [141]	1,68	7,8

### 2.3.3. Diagrama ternario

El Diagrama ternario de combustión representa las relaciones entre los componentes principales en la combustión: combustible, oxígeno ( $O_2$ ), y nitrógeno ( $N_2$ ). Aquí se presenta un paso a paso para construir el diagrama con los parámetros mencionados:

1. Definición de Componentes:

- Combustible (C): Representa la sustancia que se va a quemar, como hidrocarburos.
- Oxígeno ( $O_2$ ): El gas necesario para la combustión.
- Nitrógeno ( $N_2$ ): Componente inerte en el aire.

2. Establecimiento de Ejes: Dibujar un triángulo equilátero para representar los tres componentes.

3. Determinación de Puntos:

- Identificar los vértices del triángulo como C,  $O_2$ , y  $N_2$ .
- Asignar porcentajes para indicar las mezclas de los tres componentes.

4. Parámetros Principales:

- LFL (Lower Flammability Limit): Marcar la concentración mínima de combustible en la mezcla para que sea inflamable.
- UFL (Upper Flammability Limit): Marcar la concentración máxima de combustible en la mezcla para que sea inflamable.
- Cst (Constante): Dibujar una línea estequiométrica que representa la relación estequiométrica entre C y  $O_2$ .
- Air Line: Representar la mezcla aire-combustible.

- Upper Limit with O<sub>2</sub>: Marcar el límite superior cuando solo se considera O<sub>2</sub>.
5. Flammability Zone: Rellenar la zona entre LFL y UFL, indicando la región donde la mezcla es inflamable.

### Diagramas Ternarios referenciales

En un Diagrama ternario de combustión (véase Figura 2.30), los ejes representarían las proporciones molares de los tres componentes principales en la mezcla: propano o iso-butano, nitrógeno y oxígeno. Los vértices del triángulo indicarían composiciones extremas, como 100 % propano o iso-butano, 100 % nitrógeno y 100 % oxígeno.

1. **Vértice 1 (Propano o Iso-butano puro):** 100 % propano o iso-butano, 0 % oxígeno y 0 % nitrógeno.
2. **Vértice 2 (Oxígeno puro):** 0 % propano o iso-butano, 100 % oxígeno y 0 % nitrógeno.
3. **Vértice 3 (Nitrógeno puro):** 0 % propano o iso-butano, 0 % oxígeno y 100 % nitrógeno.

Las líneas dentro del triángulo indicarían las mezclas en diferentes proporciones. Puntos específicos en estas líneas representarían composiciones específicas, y la región dentro del triángulo indicaría las mezclas inflamables. Las interacciones químicas y las propiedades de combustión se observarían en función de la posición en el diagrama.

### 2.3.4. Huella de carbono

Calcular la huella de carbono en la combustión implica determinar la cantidad de dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) equivalente emitido durante este proceso. A continuación, se presenta

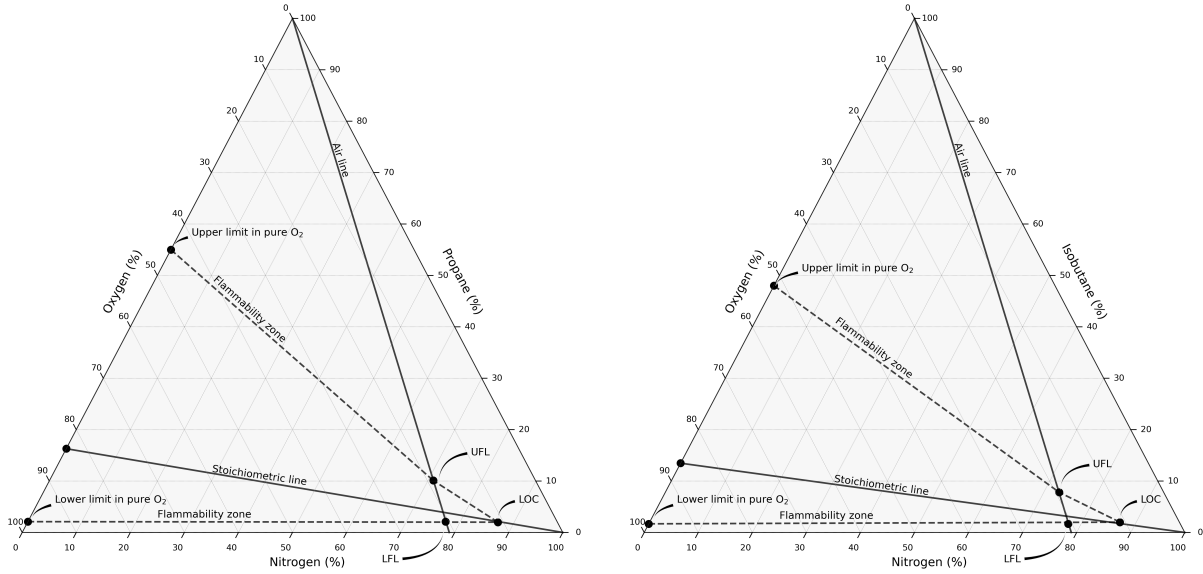


Figura 2.30: Diagrama ternario del propano y del iso-butano obtenidos por Cantera usando JetSurf, respectivamente.

un enfoque paso a paso con ecuaciones simplificadas:

1. Identificación del combustible (C) utilizado: Define el tipo y cantidad de combustible consumido (carbón, gasolina, gas natural, etc.).
2. Factor de emisión del combustible (FE): Encuentra el factor de emisión específico para el tipo de combustible. Este valor representa la cantidad de CO<sub>2</sub> emitida por unidad de combustible quemado.

$$FE = \frac{\text{Emisiones de CO}_2}{\text{Cantidad de energía total}} \quad (2.23)$$

3. Cálculo de Emisiones (E): Para determinar las emisiones totales de CO<sub>2</sub> se puede obtener con  $E = \text{Cantidad de combustible} \times FE$ .
4. Convertir a CO<sub>2</sub> Equivalente (CO<sub>2</sub>e): Puedes convertir otras emisiones de gases de efecto invernadero a su equivalente en CO<sub>2</sub> utilizando factores de equivalencia.

$$CO_2e = E \times \text{Factor de Equivalencia} \quad (2.24)$$

5. **Sumar Todas las Emisiones:** Si hay varias fuentes de emisiones, suma todas las contribuciones para obtener la huella de carbono total.

### 2.3.5. Mecanismos cinéticos

Los mecanismos cinéticos químicos desempeñan un papel crucial en la comprensión y modelización de los procesos de combustión. Un mecanismo químico detallado para simulaciones se refiere a un conjunto exhaustivo de reacciones químicas y los parámetros cinéticos asociados que describen las transformaciones químicas en un sistema. Estos mecanismos son fundamentales para simular procesos químicos complejos, como la combustión, la química atmosférica o las reacciones químicas en sistemas biológicos. Los componentes clave de un mecanismo cinético son los siguientes:

1. **Reacciones Químicas:** Especifican las transformaciones moleculares en el sistema.
2. **Reactantes y Productos:** Define claramente los participantes en cada reacción.
3. **Parámetros Cinéticos:** Asigna coeficientes de velocidad y energías de activación.
4. **Transporte de Especies:** Considera la difusión y convección de especies químicas.
5. **Termodinámica:** Incorpora datos termodinámicos para describir cambios de energía.
6. **Dependencia de Presión y temperatura:** Considera la sensibilidad a cambios en estos parámetros.
7. **Solver y Métodos Numéricos:** Implementa solucionadores y métodos numéricos para simular la evolución temporal del sistema.
8. **Validación y Análisis de Sensibilidad:** Valida el mecanismo comparándolo con datos experimentales y realiza análisis de sensibilidad.

Además a continuación se ofrece una visión general de los mecanismos más avanzados:

1. **Desarrollo de mecanismos cinéticos químicos:** Un debate exhaustivo sobre la historia del modelado cinético químico, centrado en el desarrollo de mecanismos que describen los procesos de combustión de combustibles [142].
2. **Mecanismo químico para la combustión a alta temperatura:** Presentación de un mecanismo químico diseñado para la combustión a alta temperatura de una amplia gama de combustibles de hidrocarburos, desde el metano hasta el isooctano [143].
3. **Generación de modelos cinéticos químicos detallados:** Información sobre la generación de modelos cinéticos químicos detallados para procesos de combustión, incluyendo varios mecanismos en línea como GRI-mech, LLNL, Leeds, Konnov, NUIG, POLIMI, Jet-Surf, UCSD [144].
4. **Mecanismo cinético químico reducido:** Desarrollo de un modelo de reacción detallado para la combustión de n-alcanos hasta C16, conocido como mecanismo "JetSurF", haciendo hincapié en el objetivo de conseguir un mecanismo reducido [145].

Estos mecanismos, como GRI-Mech y JetSurF, representan la vanguardia de la investigación en cinética química, ayudando a la simulación y comprensión de procesos de combustión complejos.

## Cantera

Cantera es una suite de herramientas de código abierto diseñada para abordar problemas en cinética química, termodinámica y procesos de transporte en Python. Desarrollada para facilitar la simulación y análisis en el campo de la química y la ingeniería, Cantera ofrece funcionalidades avanzadas para modelar reacciones químicas, equilibrios termodinámicos y

fenómenos de transporte. La biblioteca Cantera permite realizar simulaciones detalladas de sistemas químicos complejos, proporcionando una amplia gama de funciones para gestionar especies químicas, reacciones, y propiedades termodinámicas y de transporte. Es especialmente útil en aplicaciones que involucran combustión, procesos de combustión, celdas de combustible, y más. Para utilizar Cantera, los usuarios pueden acceder a su documentación oficial, que detalla las funciones disponibles y proporciona ejemplos para guiar el uso efectivo de la biblioteca. Además, Cantera es reconocida como una herramienta valiosa en proyectos de química computacional, y está disponible para su instalación a través de PyPI.

### **Mecanismo cinético JetSurf 2.0**

JetSurF [146] representa un modelo avanzado de reacción química focalizado en la combustión de sustitutos del combustible de aviación. Desarrollado en una colaboración de investigación entre la Universidad de Stanford y la Universidad de Princeton, este proyecto cuenta con el respaldo financiero de la Air Force Office of Scientific Research en los Estados Unidos. Su principal propósito es el análisis de llamas de hidrocarburos sobre  $C_3$ , específicamente aquellas con ignición a elevadas temperaturas y propensas a detonaciones. El modelo enfrenta el desafío de mayor incertidumbre a medida que se incrementa el número de reacciones consideradas. Con una complejidad notable, JetSurF abarca 348 especies y 2163 reacciones químicas en su composición, lo que permite una representación detallada de los procesos de combustión. Este enfoque especializado ha llevado a la utilización de JetSurF en 194 artículos de corriente principal, donde se ha aplicado en situaciones de dimensiones reducidas, como casos de 0D y 1D.

Alcance: A pesar de ser un mecanismo extenso, no entrega productos basado en nitrógeno como  $NO_x$ , dado a que no posee incorporado en la base este tipo de reacciones.

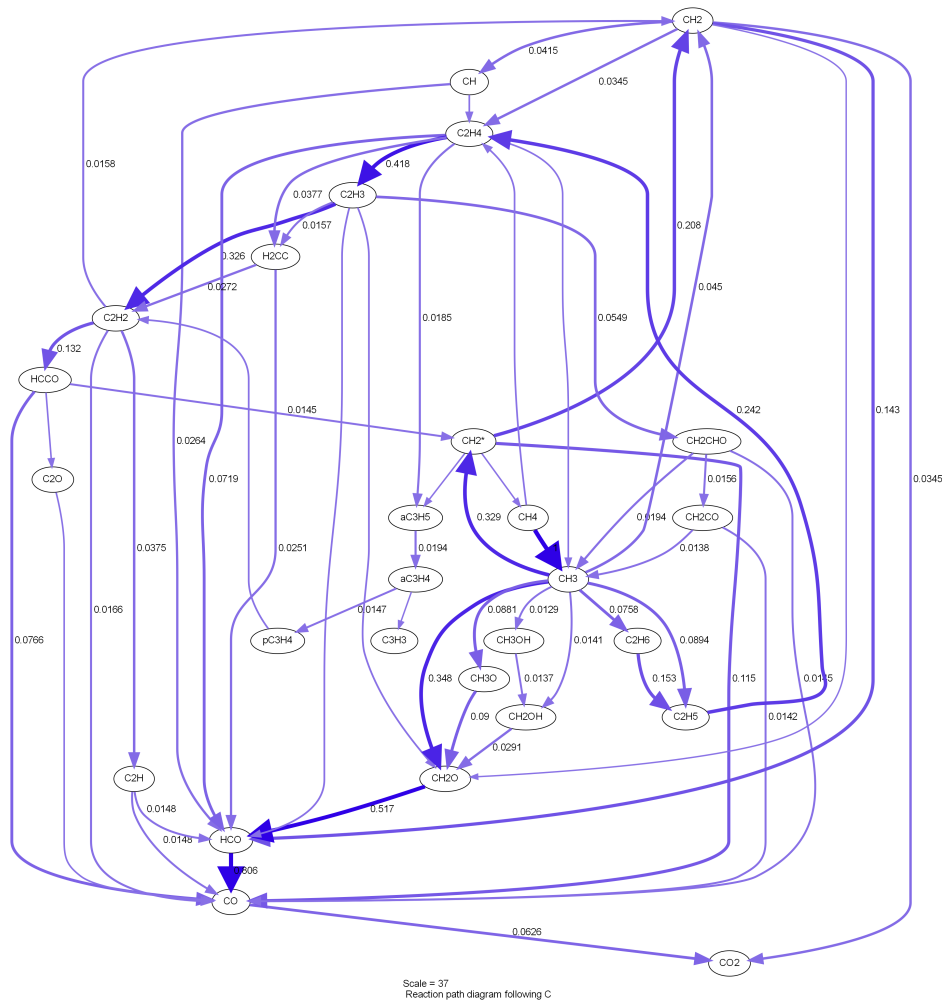


Figura 2.31: Esquema de reacción del metano, obtenido por JetSurF en Cantera.

## Validación del mecanismo

La validación de un mecanismo cinético en Cantera, como JetSurF, con datos experimentales implica comparar los resultados simulados con los datos reales medidos en experimentos. Aquí hay un enfoque general para llevar a cabo esta validación:

1. **Adquisición de Datos Experimentales:** Obtener datos experimentales relevantes para las condiciones de interés, en caso de disponer del arreglo experimental o también utilizar datos que se encuentren publicados en revistas indexadas. Esto puede incluir

perfiles de temperatura, concentraciones de especies, velocidades de llama, o cualquier otra cantidad relevante para el sistema que estás modelando.

2. **Preparación de Condiciones Iniciales y de Contorno:** Configurar el modelo en Cantera con condiciones iniciales y de contorno que reflejen fielmente las condiciones experimentales.
3. **Selección de Escenarios de simulación:** Definir escenarios de simulación que representen los casos específicos que se compararán con los datos experimentales.
4. **Configuración del Mecanismo Cinético:** Asegurarse de que se está utilizando el mecanismo cinético correcto en Cantera, en este caso, Jetsurf. Cargar el mecanismo cinético en tu simulación.
5. **Simulación en Cantera:** Ejecutar simulaciones en Cantera para replicar las condiciones experimentales. Ajusta los parámetros según sea necesario, y realiza múltiples simulaciones si hay incertidumbres en los datos iniciales.
6. **Comparación con Datos Experimentales:** Comparar los resultados de la simulación con los datos experimentales. Evaluar la concordancia en términos de perfiles temporales y distribuciones espaciales.
7. **Análisis de Sensibilidad y Ajustes:** Realizar análisis de sensibilidad para identificar las reacciones clave que afectan los resultados. Si es necesario, ajustar los parámetros cinéticos o las condiciones iniciales para mejorar la concordancia.
8. **Documentación y Reporte:** Documentar detalladamente el proceso de validación, incluyendo las configuraciones de simulación, condiciones experimentales, y cualquier ajuste realizado. Genera un informe que destaque la validez del mecanismo cinético.
9. **Iteración si es Necesario:** Si los resultados iniciales no son satisfactorios, repetir el proceso de ajuste y simulación. La iteración puede ser necesaria para mejorar la

concordancia.

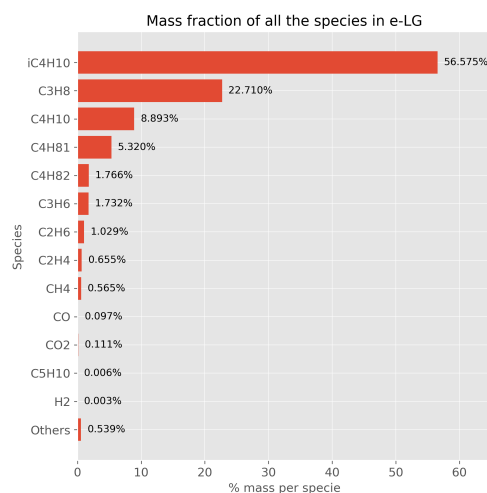
Es importante tener en cuenta que la validación es un proceso continuo, y siempre es necesario considerar las limitaciones y suposiciones del modelo cinético y del experimento. La colaboración con expertos en la temática específica y la comparación con múltiples conjuntos de datos experimentales fortalecerán la robustez de la validación.

### **Composición teórica e-GL**

En el siguiente cuadro (Tabla 2.19), se presenta la composición en masa de diversas especies químicas en una mezcla denominada e-GL. Esta composición es teórica, y fue entregada por GASCO para la elaboración de las simulaciones, la cual fue obtenida numéricamente y entregada por HIF, empresa controladora de la planta Haru-Oni. La tabla incluye el nombre del compuesto, su fórmula química correspondiente y la proporción en masa expresada en porcentaje. Esta tabla proporciona una visión detallada de la distribución de las especies químicas presentes en la mezcla, destacando la abundancia relativa de cada componente. Los porcentajes de composición en masa están expresados con respecto al total de la mezcla.

Cuadro 2.19: Composición teórica en masa del e-GL.

Nombre Compuesto	Fórmula Química	Composición en Masa (%)
Iso-butano	iC <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	56.5750
Propano	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	22.7105
Butano	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	8.8926
Isobutileno	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub>	5.3197
Buteno	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub>	1.7657
Propileno	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>	1.7318
Etileno	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	1.0291
Eteno	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	0.6549
Metano	CH <sub>4</sub>	0.5647
Monóxido de Carbono	CO	0.0970
dióxido de carbono	CO <sub>2</sub>	0.1113
Iso-pentano	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub>	0.0059
hidrógeno	H <sub>2</sub>	0.0026
Otras especies	-	0.5392



## 2.4. Materiales y métodos experimentales

### 2.4.1. Introducción

El propósito principal de la segunda fase del proyecto es llevar a cabo mediciones experimentales del e-GL en diversas condiciones. Esto tiene como objetivo verificar aspectos relacionados con la seguridad, emisiones, estabilidad de llama y rendimiento de equipos. Las condiciones específicas de medición incluyen:

1. e-GL con aire a 21 % en volumen de O<sub>2</sub> (OI = 21).
2. e-GL con aire a índice de OI <21 % (replicar efecto de altura).
3. Mezcla GLP (corriente de Gasco S.A.) con e-GL.

Se espera que los resultados experimentales se vean reflejados con los de la simulaciones previamente obtenidas.

Para pavimentar el camino a las mediciones definidas en la propuesta del trabajo, se realizaron medidas experimentales con otros combustibles, implementando la misma metodología que se espera implementar con el e-GL. La metodología experimental se encuentra definida en la Subsección 2.4.2.

## 2.4.2. Marco experimental

Para caracterizar la llama generada por e-LG, se emplea el montaje experimental descrito en la figura. Se emplea un quemador de coflujo Gülder (1) acoplado a una etapa de motor lineal (13) para generar una llama laminar, axisimétrica y no premezclada de e-LG y propano. El quemador consta de un tubo central para la inyección de combustible de 10,9 mm de diámetro interior, rodeado por un tubo concéntrico co-annular de 100 mm de diámetro interior para el coflujo de oxidante [147]. El combustible y el aire necesarios para generar la llama se suministran mediante dos controladores térmicos de flujo másico (MFC) de la serie Bronhorst F-201CV (14). El oxígeno y/o nitrógeno necesario para variar el índice de oxígeno también se suministran a través de los MFC. Las composiciones del combustible se analizaron mediante cromatografía de gases (c.f. Tabla 2.20), siguiendo el procedimiento estándar UOP-539, dando como resultado una fórmula química de  $C_{3,674}H_{9,012}$  para el e-LG y  $C_{2,992}H_{7,984}$  para el HD5. Esto reveló una pureza de aproximadamente el 97 % para el propano (HD5) y una mezcla mayoritaria de aproximadamente el 72 % de propano e isobutano para el e-LG. Los experimentos se realizaron para mantener la tasa de liberación de calor (HRR) calculada para una inyección constante de 60 sccm ( $\dot{m}_{fuel}$ :  $1,96 \times 10^{-6}$  kg/s,  $\dot{m}_{carbon}$ :  $1,60 \times 10^{-6}$  kg/s, HRR: 90,96 W y LHV: 46,346 MJ/kg) HD5, lo que dio lugar a un flujo de 50,527 sccm ( $\dot{m}_{fuel}$ :  $2,01 \times 10^{-6}$  kg/s,  $\dot{m}_{carbon}$ :  $1,67 \times 10^{-6}$  kg/s, HRR: 90,96 W y LHV: 45,235 MJ/kg) para e-LG. Además, se impuso un coflujo de aire a 100 L/min (referencia a 0°C y 1,013 bar) en la corriente de coflujo. El coflujo de aire se define como  $Q_{air} = 100 - Q_{rep}$ , donde

$Q_{rep}$  es el flujo reemplazado de aire por  $N_2$  u  $O_2$ . Estos flujos se detallan en la Tabla 2.21. Asimismo, se calculó la temperatura adiabática para ambos combustibles con Cantera [148], utilizando el mecanismo JetSURF 2.0 [149], obteniéndose 2280 K para e-LG y 2270 K para HD5 a una relación de equivalencia de 1 y condiciones atmosféricas estándar. Las mezclas de combustibles a ser estudiadas, se encuentran mostradas en la Tabla 2.22, con el identificador correspondiente.

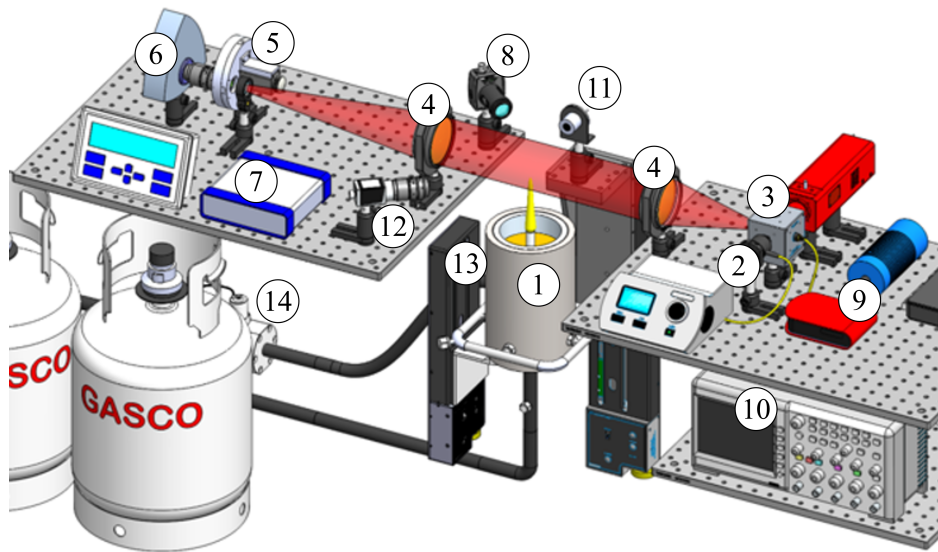


Figura 2.32: Arreglo experimental utilizado para las mediciones de extinción-emisión de luz, altura de la llama, radiación y estabilidad en llamas de difusión laminar de e-GL y propano con aire. La descripción de los elementos se encuentra incorporada en el texto.

### 2.4.3. Metodología experimental

#### Mediciones de extinción/emisión de luz

Para caracterizar la llama generada por e-GL, se emplearon técnicas no intrusivas. Inicialmente, se realizaron mediciones de emisión/extinción de luz para determinar las propiedades ópticas del hollín, de acuerdo con la metodología descrita por Yon et al. [147]. La

Cuadro 2.20: Composición de Propano (HD5) y e-GL (% Vol) con Fórmulas Químicas.

Componente	Fórmula química	Propano HD5 (% vol)	e-GL (% vol)
Propano	$C_3H_8$	<b>97.42</b>	<b>23.60</b>
Etano	$C_2H_6$	1.66	0.39
i-Butano	i- $C_4H_{10}$	0.82	<b>48.99</b>
n-Butano	$C_4H_{10}$	0.08	5.49
Propileno	$C_3H_6$	0.02	6.86
Etileno	$C_2H_4$	-	0.86
1-Buteno	$C_4H_8$	-	1.10
i-Butileno	i- $C_4H_8$	-	3.50
T-2-Buteno	$C_4H_8$	-	2.08 <sup>a</sup>
C-2-Buteno	$C_4H_8$	-	1.28
i-Pentano	i- $C_5H_{12}$	-	4.65
n-Pentano	$C_5H_{12}$	-	0.10 <sup>b</sup>
Oxígeno	$O_2$	-	0.01
Nitrógeno	$N_2$	-	1.09

<sup>a</sup> Reemplazado por C-2-Buteno, <sup>b</sup> Reemplazado por i-Pentano.

Cuadro 2.21: Flujo de aire con variación en el índice de oxígeno (OI) en L/min.

OI (%)	$Q_{rep} O_2$	$Q_{air}$	$Q_{rep} N_2$
17		81.0	19.0
21		100.0	
25	5.06	94.9	
29	10.13	89.9	
33	15.19	84.8	

Cuadro 2.22: Proporciones de mezcla de e-GL y HD5 en los experimentos realizados.

Experimento (Exp)	e-GL (%)	HD5 (%)
1	0	100
2	20	80
3	40	60
4	60	40
5	80	20
6	100	0

metodología implica la evaluación del coeficiente de extinción ( $\kappa_{ext,\lambda}$ ) mediante la utilización de mediciones de atenuación a lo largo de la línea de visión (LOSA), junto con la evaluación de la emisión local del hollín, representada por  $J_\lambda = \kappa_{abs,\lambda} I_\lambda^{bb}$ , a través del análisis de las emisiones espectrales del hollín en diferentes longitudes de onda. En esta ecuación, el coeficiente de absorción, representado por  $\kappa_{abs,\lambda}$ , depende de la función de radiación de cuerpo negro de Planck, representada por  $I_\lambda^{bb}$ . Lo anterior depende tanto de la temperatura  $T$  del hollín como de la longitud de onda  $\lambda$  de la luz emitida. El presente estudio examinará dos longitudes de onda distintas  $\lambda = [532, 810] \pm 5$  nm. La última, situada cerca del rango IR, permite que se pueda ignorar el efecto de dispersión [150, 151], y entonces  $\kappa_{ext,810} = \kappa_{abs,810}$ . El coeficiente de absorción  $\kappa_{abs,810}$  se puede evaluar con la emisión local de hollín obtenida,  $J_\lambda$ . Esta longitud de onda se utilizará para evaluar la pirometría de un solo color para obtener la temperatura,  $T$ . Además, la razón de la función de absorción del hollín ( $E_{m,\lambda_1}/E_{m,\lambda_2}$ ) se puede determinar a través del análisis de los datos experimentales, específicamente la razón de las intensidades medidas en las longitudes de onda  $\lambda_1$  y  $\lambda_2$ , que se puede expresar como  $J_{\lambda_1} \lambda_1 I_{\lambda_2}^{bb} / J_{\lambda_2} \lambda_2 I_{\lambda_1}^{bb}$ . Posteriormente, el coeficiente de madurez ( $\beta$ ) se puede derivar a partir de una relación de ley de potencias entre las dos variables, es decir,  $E_{m,\lambda_1}/E_{m,\lambda_2} = (\lambda_2/\lambda_1)^\beta$ .

**Extinción de luz** La técnica de extinción de luz (LOSA: line-of-sight attenuation [152]) ha sido ampliamente utilizada por nuestro laboratorio en varias revistas científicas con alto factor de impacto. En particular, se busca implementar estas mediciones para el quemador Gülder. Para obtener mediciones precisas de extinción/emisión, se generó una iluminación de fondo uniforme mediante la combinación de un LED pulsado (2), una esfera de integración (3) y una lente acromática (4). Esta configuración fue seleccionada para asegurar la uniformidad y precisión en las mediciones. Posteriormente, la luz atenuada se filtra mediante filtros de paso de banda (5) y se enfoca en la cámara CCD de 14 bits (6). Se capturaron un total de 100 imágenes para la extinción de luz (diferencia entre LED encendido y apagado) y la emisión de hollín (LED apagado). La medición final se realizó utilizando una cámara calibrada para la radiancia espectral absoluta, empleando el sistema Labsphere USLR-V08F, siguiendo el procedimiento descrito en [153]. Todos los dispositivos electrónicos fueron sincronizados mediante un generador de pulsos externo Quantum 9214 (7).

Aquí, partículas de hollín al ser sometidas a la luz de un rayo láser de baja energía, generan un fenómeno de extinción de luz, el cual principalmente se compone a su vez, de la suma de dos efectos: Absorción (abs) y Dispersión (disp). Según la Ley de Bouguer-Lambert-Beer [154], la intensidad incidente  $I_0$  de una onda electromagnética monocromática (es decir, que actúa a una longitud de onda única y constante) se ve atenuada por el medio que atraviesa según:

$$I = I_0 \exp\left(-\int_0^L \kappa_{ext} ds\right) \quad (2.25)$$

en donde  $I$  corresponde a la intensidad de la onda detectada tras atravesar un medio de camino óptico de longitud  $L$ , y  $\kappa_{ext}$  corresponde al coeficiente de extinción de las partículas.

Además, el coeficiente de extinción viene dado por:

$$\kappa_{ext} = \frac{\pi}{4} C_n \int_0^\infty Q_{ext}(D) N(D) D^2 dD \quad (2.26)$$

en donde  $C_n$  corresponde al número de densidad de partículas,  $D$  corresponde al diámetro de partícula,  $N(D)$  a la distribución de tamaño de partículas y  $Q_{ext}(D)$  corresponde a la

eficiencia de extinción de las partículas. Si se considera que la luz monocromática tiene una longitud de onda  $\lambda$  considerablemente más grande que el diámetro de partículas, es decir  $x$  mucho mayor que 1, y por tanto  $Q_{disp}$  se vuelve despreciable con respecto  $Q_{abs}$ . Luego, si se considera que  $x = (\pi D/\lambda)$ ,

$$Q_{ext}(D) = Q_{abs} = 4x \text{Im} \left( \frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right). \quad (2.27)$$

Combinando las ecuaciones Ecuación 2.25, Ecuación 2.26 y Ecuación 2.27,  $I$  quedaría como

$$I = I_0 \exp \left( -\pi^2 \frac{L}{\lambda} \text{Im} \left( \frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right) C_n \int_0^\infty N(D) D^2 dD \right). \quad (2.28)$$

Además,  $f_s$  se relaciona con  $C_n$  de la siguiente forma:

$$f_s = \frac{\pi}{6} C_n \int_0^\infty N(D) D^3 dD \quad (2.29)$$

La transmitancia espectral  $\tau$ , correspondiente a la razón entre  $I$  e  $I_0$ , puede ser expresada reordenando la Ecuación 2.25 del siguiente modo:

$$-\ln(\tau) = \int_0^L \kappa_{ext} ds \quad (2.30)$$

Finalmente, reemplazando la Ecuación 2.29 en Ecuación 2.28, utilizando la Ecuación 2.30, y considerando que  $\kappa_{ext}$  es constante en el camino óptico, se obtiene:

$$f_s = \frac{\lambda}{6\pi E(m)} \frac{-\ln(\tau)}{L}, \quad (2.31)$$

en donde  $E(m)$  es una función del índice refractivo complejo  $m$  del hollín. Una forma alternativa de presentar la Ecuación 2.31, común en la literatura, es considerar al coeficiente de absorción en una determinada longitud de onda como  $C_\lambda = 6\pi E(m)$ . Además, se suele expresar la fracción en volumen de hollín en función del coeficiente de extinción en una longitud de onda  $\kappa_\lambda$ , tal como se presenta a continuación:

$$f_s = \frac{\lambda \kappa_\lambda}{C_\lambda} \quad (2.32)$$

La señal captada se encuentra convolucionada, es decir, corresponde a la suma de la extinción producida por la onda al atravesar toda la llama, siendo que se necesita la información de un corte transversal, y por lo tanto debe ser deconvolucionada. Si la llama se considera axisimétrica, la Ecuación 2.30 se puede expresar en términos del radio  $r$  de la llama, para cualquier altura, a través de la ecuación de Abel:

$$-\ln(\tau_\lambda) = 2 \int_y^R \frac{f(r)r}{\sqrt{r^2 - y^2}} dr \quad (2.33)$$

en donde  $R$  es el radio máximo de la llama,  $y$  corresponde a la posición en un eje de referencia radial y  $f(r)$  corresponde a la fracción en volumen de hollín en un anillo. Para resolver este problema, se utiliza un método conocido como *Onion-Peeling* [155], en el cual se realiza una discretización de la solución de la ecuación de Abel Ecuación 2.33, dividiendo la llama en capas.

Luego, dividiendo la llama en  $N$  anillos concéntricos de ancho  $\Delta r = R/(N - 1/2)$ . Luego, denotando como  $P_i$  a al valor que toma  $-\ln(\tau_\lambda)$  a una distancia  $i$  desde el centro de la llama a través del eje de referencia, con transmitancia espectral constante, se puede replantear la Ecuación 2.33 en su forma discreta del siguiente modo

$$P_i = 2 \sum_{j=i}^{N-1} \kappa_\lambda(r_j) \int_{\substack{r_i, j=i \\ r_j - \Delta r/2, j > i}}^{r_j + \Delta r/2} \frac{r}{\sqrt{r^2 - y_i^2}} dr, \quad (2.34)$$

donde  $y_i = i\Delta r$ ,  $r_j = j\Delta r$ ,  $P_i = P(y_i)$  y  $\kappa_\lambda(r_j)$  es el coeficiente de absorción en el anillo ubicado en  $r_j$ . Gracias a la discretización, este problema de puede reescribir de forma matricial, y puede ser resuelto de manera sencilla por sustitución hacia atrás aprovechando su forma de matriz triangular.

$$A_{op}x = b \quad (2.35)$$

En esta ecuación,  $x$  corresponde a las variables incógnitas, con  $x^T = \{\kappa_\lambda(r_j), j = 0, 1, \dots, N-1\}$ , mientras que  $b$  tiene los datos proyectados, es decir:  $b^T = \{P_i, i = 0, 1, \dots, N-1\}$ . Así,  $A_{op}$  es una matriz triangular superior, y tiene un carácter puramente geométrico, representando el

largo de los anillos concéntricos, y por tanto viene dada por:

$$A_{op} = \begin{cases} 0, & i > j \\ 2\Delta r[(j + 1/2)^2 - i^2]^{1/2}, & i = j \\ 2\Delta r[((j + 1/2)^2 - i^2)^{1/2} - ((j - 1/2)^2 - i^2)^{1/2}], & i < j. \end{cases}$$

Finalmente, el valor de  $f_s$  puede ser determinado por la Ecuación 2.36, asumiendo que las partículas de hollín son mas pequeñas que la longitud de onda de la luz (régimen de Rayleigh), dada por [156]:

$$\tau_\lambda = \exp \left( - \int_0^l f_s \frac{6\pi E_m}{\lambda} \cdot ds \right), \quad (2.36)$$

donde  $E_m$  es una propiedad óptica del hollín, obtenida de espacialmente y  $l$  es el ancho de la llama. Para obtener  $f_s$ , la integral es invertida aplicando la deconvolución de onion-peeling con regularización de Tikhonov [156] sería aplicada sobre el promedio de las imágenes.

**Emisión de luz** La temperatura de la llama puede ser obtenida a partir de los campos de la extinción del hollín ( $\kappa_{ext}$ ) y su emisión ( $J_\lambda$ ) a  $\lambda = 810$  nm. Al usar un filtro de detección cercano al espectro infrarrojo, es posible despreciar el fenómeno de dispersión de luz, disminuyendo la incerteza de la técnica [152]. Para este propósito, el campo de transmisividad del hollín ( $\tau_\lambda$ ) fue obtenido sustrayendo las imágenes de la llama con y sin iluminación. Así, los campos de  $\kappa_{ext}$  y  $J_\lambda$  serían obtenidos gracias a un proceso de deconvolución espacial de  $\tau_\lambda$  y la emisión de la llama [157], respectivamente. Finalmente, la temperatura del hollín es obtenida por:

$$T_s = \left[ -\frac{k_b \lambda}{hc} \ln \left( \frac{\lambda^5 J_\lambda}{2hc^2 \gamma \kappa_{ext,\lambda}} \right) \right]^{-1}, \quad (2.37)$$

donde  $\gamma$  es el factor de calibración,  $c$  es la constante de velocidad de la luz, y  $k_b$  y  $h$  son la constante de Boltzmann y de Planck, respectivamente.

**Madurez del hollín** Según Michelsen [158], el nivel de madurez de una partícula de hollín se caracteriza por el grado de desarrollo que ha experimentado desde su origen hasta alcanzar un estado completamente maduro, similar al grafito (consulte la Figura 2.33). Este proceso de maduración implica alteraciones en diversas propiedades físicas y químicas de las partículas de hollín, como la configuración de los átomos de carbono, la relación entre carbono e hidrógeno (C/H) y el índice de refracción. De manera inherente, los cambios en la composición química también inciden en la capacidad de la partícula para absorber luz.

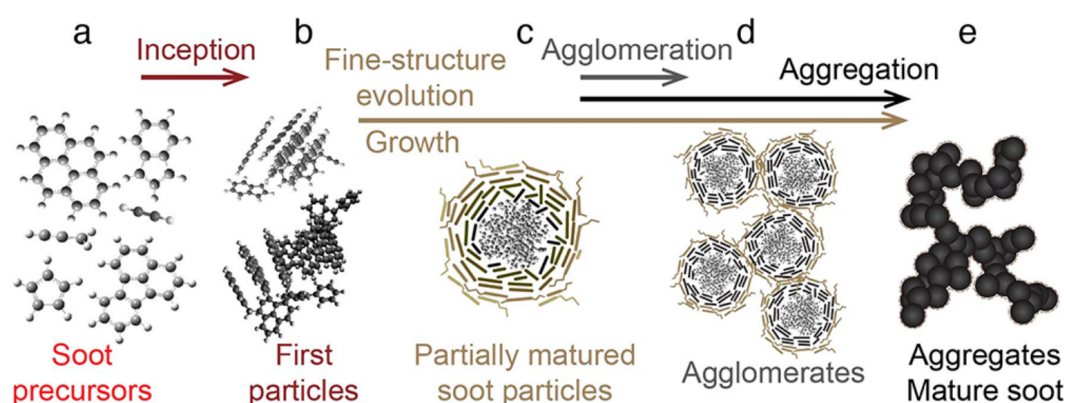


Figura 2.33: Diagrama esquemático de las principales etapas de la formación del hollín y las especies representativas producidas a medida que avanza el proceso. La escala relativa de estas imágenes cambia entre los paneles, las estructuras varían entre  $<1$  nm (a) y  $\sim 100$  nm (e) [158].

Los primeros pasos en el complejo proceso de formación de hollín comienzan con la generación de especies precursoras de hollín en fase gaseosa (consulte la Figura 2.33a), seguido por la transición de estas especies hacia partículas en fase condensada (Figura 2.33b). En la fase inicial de formación, el hollín puede estar compuesto por una variedad de hidrocarburos, tanto saturados como no saturados, alifáticos, aromáticos, PAHs, y otras especies precursoras [159]. Estos precursores del hollín son moléculas en fase gaseosa que actúan como componentes moleculares en la formación y crecimiento de las partículas de hollín. La evidencia experimental sugiere que estas primeras partículas son probablemente de natura-

leza líquida [160, 161], y presentan una absorción limitada en el espectro visible [162, 163]. Este cambio de fase, conocido como “iniciación de partículas” o “inicio de hollín”, marca el comienzo de la transformación, aunque las partículas formadas en este momento (Figura 2.33b) aún no pueden ser clasificadas como hollín maduro, sólido y carbonizado. Durante esta etapa inicial de formación de hollín, las partículas incipientes experimentan un rápido crecimiento debido tanto a la coagulación como a la conversión de gas a partícula. Además, pierden hidrógeno mediante un proceso de carbonización a alta temperatura, adquiriendo parcialmente una estructura grafitica (Figura 2.33c). A medida que estas partículas atraviesan el proceso de carbonización, sus propiedades ópticas experimentan cambios notables, volviéndose capaces de absorber y emitir luz en las regiones espectrales visible y cercano al infrarrojo. Además, su densidad aumenta y su reactividad superficial puede modificar. A medida que las partículas evolucionan, se produce la colisión y la formación de aglomerados laxos de partículas primarias cuasi-esféricas (Figura 2.33d), los cuales eventualmente se consolidan en agregados de partículas primarias en cadenas ramificadas (Figura 2.33e) a medida que avanza el proceso [164, 165].

La presencia de compuestos orgánicos reduce significativamente la reflectancia de la luz, especialmente en longitudes de onda más largas dentro del espectro NIR . Como resultado, los materiales orgánicos, incluido el carbono nano-orgánico, presentan una marcada dependencia espectral de la reflectancia en comparación con el hollín completamente desarrollado, como se demuestra de manera consistente en diversos estudios mediante el exponente de Angström o de dispersión ( $\alpha$ ) [159]. Este comportamiento espectral distintivo contribuye a la apariencia característica de color marrón-carbón de los materiales orgánicos. Los materiales orgánicos presentan una característica distintiva en cuanto a su comportamiento óptico. A diferencia de su débil eficiencia de absorción, estos materiales muestran una notable eficiencia de dispersión. Esta propiedad única abre vías para su detección mediante sencillas mediciones de extinción [166].

Por otro lado, se ha informado que los valores del índice de refracción son relativamente constantes para el hollín maduro [167, 168, 169]. Sin embargo, se observa un cambio sensible en el índice de refracción para partículas más pequeñas, lo que indica una variación en las propiedades ópticas en función del tamaño de las partículas de hollín. Según una propuesta de diagnóstico novedoso, las partículas de hollín maduras en una llama de difusión de etileno muestran una dependencia espectral de la función de absorción del hollín,  $E(m)$ , y se propone un índice de madurez del hollín,  $\beta$ , para caracterizar este comportamiento [152]. Los cocientes experimentales de  $E(m, \lambda)$  pueden determinarse a partir de los campos  $J_\lambda$  y  $T$ , calculados para cada par de longitudes de onda de detección  $(\lambda_i, \lambda_j)$  [152], de la siguiente manera:

$$\frac{E(m, \lambda_i)}{E(m, \lambda_j)} = \frac{J_{\lambda_i} \lambda_i I_{\lambda_i}^{bb}(T)}{J_{\lambda_j} \lambda_j I_{\lambda_j}^{bb}(T)}, \quad (2.38)$$

Donde  $I_\lambda^{bb}$  es la intensidad de radiación de cuerpo negro (dada por la ley de Planck) dependiendo de  $T$  (Ecuación 2.37). Por otro lado, la dependencia espectral de  $E(m)$  puede utilizarse para caracterizar el grado de madurez del hollín, introduciendo el índice  $\beta$ :

$$\frac{E(m, \lambda)}{E(m, \lambda_{\text{ref}})} = \left( \frac{\lambda_{\text{ref}}}{\lambda} \right)^\beta, \quad (2.39)$$

Donde  $\lambda_{\text{ref}}$  es una longitud de onda de referencia y  $E(m, \lambda_{\text{ref}})$  es el valor correspondiente de  $E(m)$ . A partir de esta relación,  $\beta = 0$  indica una falta de dependencia espectral (hollín maduro), mientras que  $\beta > 0$  indica la presencia de compuestos orgánicos en la partícula de hollín. El parámetro  $\beta$  puede obtenerse a partir del mejor ajuste que minimiza las desviaciones de los cocientes teóricos (Ecuación 2.39) respecto a los experimentalmente determinados (Ecuación 2.38) [152]. Posteriormente, la relación entre  $\beta$ ,  $E(m, \lambda)$  y la cantidad de compuestos orgánicos en el hollín puede obtenerse utilizando una ley de mezcla, según

lo descrito por Bescond et al. [169], considerando únicamente hollín orgánico y grafitico, es decir, sin presencia de hollín amorfo.

Finalmente, la fracción de volumen de hollín se obtiene al considerar la variación espacial de  $E(m, \lambda)$ , que a su vez está relacionada con la distribución de madurez del hollín en la llama, con  $f_s = \lambda \kappa_{a,\lambda} / (6\pi E(m, \lambda))$ .

En la Figura 2.34 se puede ver un resumen de la metodología para la obtención de la temperatura ( $T$ ), el índice de madurez del hollín ( $\beta$ ), la función de absorción del hollín ( $E(m)$ ) y la fracción en volumen de hollín ( $f_s$ ) con resolución espacial. El gráfico es una reproducción de la Fig. 2 de [152].

### **Altura de la llama**

Las imágenes visibles de la llama capturadas con una cámara CMOS (12) se procesan mediante un método de segmentación descrito por Ko et al. [170]. En este enfoque, las imágenes de la llama se convierten primero a escala de grises y luego se segmentan para producir una imagen binaria en blanco y negro. El proceso de segmentación requiere establecer un umbral de intensidad, que se ajusta gradualmente bajando el valor hasta que no se observan cambios significativos en el tamaño de la llama. Posteriormente, la imagen segmentada de la llama se encierra dentro de un rectángulo cuyas dimensiones corresponden a la altura de la llama y al diámetro de la base.

### **Radiación de la llama**

Una porción de la radiación térmica emitida por la llama se midió con un radiómetro Schmidt-Boelter Medtherm 64-0.2-15/SW-2C-150 (11) de rango 0-2 kW, y la variación global de la radiación de la llama se registró con un fotodiodo rápido de silicio Thorlabs PDA100A2

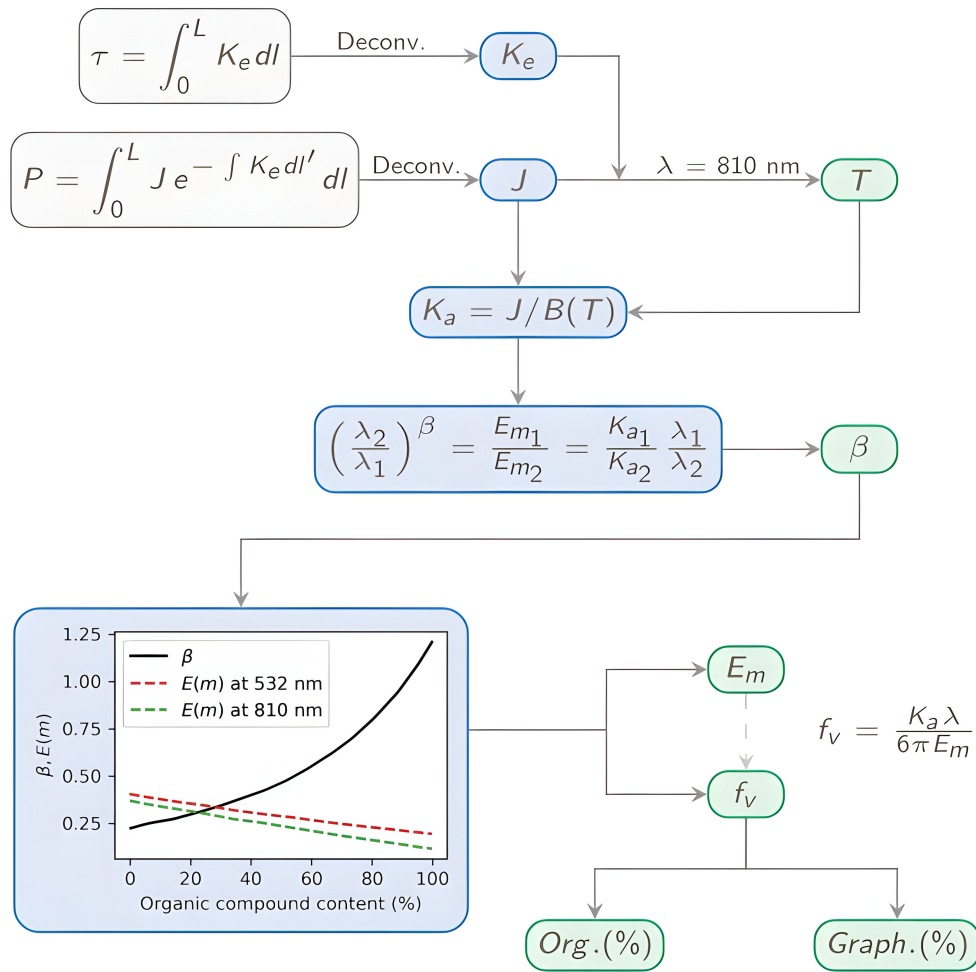


Figura 2.34: Road-map para la obtención de propiedades del hollín con variación espectral espacial.

(8). La constante de calibración del radiómetro es  $S = 3,845 \text{ mV}/(\text{kW}/\text{m}^2)$ , según lo informado por el proveedor. La incertidumbre expandida es de  $\pm 3\%$  de la sensibilidad. La salida de voltaje del radiómetro y del fotodiodo se midió con un registrador de datos Iotech Personal DAQ 3000 (9) y se acopló a un osciloscopio Lecroy WaveSurfer 3104z de 1 GHz (10) para la visualización de los datos. Dada la porción de radiación térmica emitida por la llama, la radiación total emitida por la llama,  $\dot{q}_{emi}$ , se puede estimar como:

$$\dot{q}_{emi} = \frac{\dot{q}_{inc,s}'' \cdot A_s}{F_{f \rightarrow s}}, \quad (2.40)$$

donde  $\dot{q}_{inc,s}''$  es el flujo de calor radiativo incidente al sensor (después de aplicar la constante de calibración,  $S$ ),  $A_s$  es el área sensible del radiómetro y  $F_{f \rightarrow s}$  es el factor de vista de la llama hacia el radiómetro, que representa la fracción de energía recibida por el sensor en relación con la energía total emitida por la llama. Una vez obtenida la radiación emitida por la llama, la fracción radiante,  $\chi_r$ , se puede estimar como:

$$\chi_r = \frac{\dot{q}_{emi}}{\Delta H_c \cdot \dot{m}}, \quad (2.41)$$

asumiendo que ocurre una combustión completa. Las expresiones  $\Delta H_c$  y  $\dot{m}$  corresponden al calor de combustión del combustible y a la tasa de flujo másico, respectivamente. El factor de vista entre la llama y el área sensible se calculó considerando la llama como un paraboloides y el área sensible como un disco. Un enfoque similar fue considerado en trabajos previos [171, 172]. La metodología empleada en este trabajo consistió en considerar los contornos de las superficies con el propósito de usar el teorema de Stokes [173]. Para estimar el factor de visión entre la llama y la zona sensible del radiómetro, el método empleado en este trabajo consiste en tratar la llama y el sensor como dos superficies finitas  $A_i$  y  $A_j$  definidas matemáticamente por sus contornos  $\Gamma_i$  y  $\Gamma_j$ , respectivamente.

$$F_{A_i \rightarrow A_j} = \frac{1}{2\pi A_i} \oint_{\Gamma_i} \oint_{\Gamma_j} \ln(R_{ij}) d\mathbf{r}_j d\mathbf{r}_i, \quad (2.42)$$

donde  $R_{ij}$  es la distancia entre los contornos descritos por los vectores  $\mathbf{r}_i$  y  $\mathbf{r}_j$ , respectivamente. En este trabajo, la llama se ha considerado como un paraboloides y el sensor como un disco. Figura 2.35a muestra la simplificación geométrica utilizada para la formulación del factor de visión, donde  $h_f$  es la altura de la llama sobre el quemador,  $r_f$  es el radio de la llama,  $d$  es la distancia horizontal entre la llama y la ubicación del sensor,  $b$  es la altura del sensor y  $p$  es el diámetro del sensor. Además, Figura 2.35b ilustra los contornos de la llama expresados en función de los parámetros geométricos  $h_f$  y  $r_f$ . Además, el contorno del sensor se expresa en términos de su ubicación central  $(0, d + r_f, b + p/2)$  y su diámetro. Dado lo anterior, la representación del contorno para el sensor viene dada por:

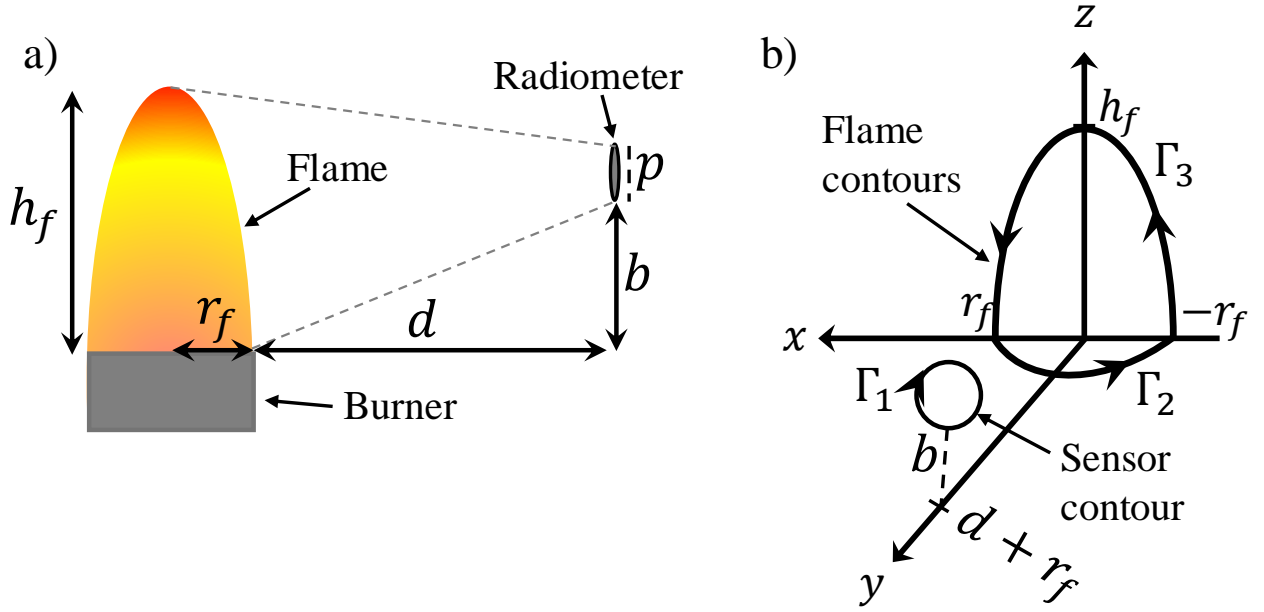


Figura 2.35: (a) Simplificación geométrica de la llama y el radiómetro. (b) Representación gráfica de los contornos de la llama y el sensor.

$$\Gamma_1 : \mathbf{r}_1(u) = \left( \frac{p}{2} \cos(u), d + r_f, \left( \frac{p}{2} \sin(u) + b + \frac{p}{2} \right), 0 \leq u \leq 2\pi \right) \quad (2.43)$$

y para la llama:

$$\Gamma_2 : \mathbf{r}_2(v) = \left( r_f \cos(v), r_f \sin(v), 0 \right), 0 \leq v \leq \pi \quad (2.44)$$

$$\Gamma_3 : \mathbf{r}_3(v) = \left( v, 0, h_f - \frac{h_f v^2}{r_f^2} \right), -r_f \leq v \leq r_f \quad (2.45)$$

Las distancias entre los contornos se dan por:

$$R_{12} = \sqrt{\left( \frac{p}{2} \cos(u) - r_f \cos(v) \right)^2 + \left( d + r_f - r_f \sin(v) \right)^2 + \left( \frac{p}{2} \sin(u) + b + \frac{p}{2} \right)^2} \quad (2.46)$$

$$R_{13} = \sqrt{\left( \frac{p}{2} \cos(u) - v \right)^2 + (d + r_f)^2 + \left( \frac{p}{2} \sin(u) + b + \frac{p}{2} - h_f + \frac{h_f v^2}{r_f^2} \right)^2} \quad (2.47)$$

El producto punto entre los vectores tangentes a los contornos se describe por:

$$d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 = \frac{p}{2} r_f \sin(u) \sin(v) du dv \quad (2.48)$$

$$d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_3 = -\frac{p}{2} \left( \sin(u) + \frac{2h_f v}{r_f^2} \cos(u) \right) du dv \quad (2.49)$$

Finalmente, el factor de vista de la llama al sensor se da por las integrales:

$$F_{f \rightarrow s} = \frac{1}{2\pi A_f} \left( \int_0^\pi \oint_0^{2\pi} \ln(R_{12}) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 + \int_{-r_f}^{r_f} \oint_0^{2\pi} \ln(R_{13}) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_3 \right) \quad (2.50)$$

donde  $A_f$  es la superficie de la llama y se puede estimar utilizando coordenadas polares:

$$A_f = \int_0^{2\pi} \int_0^{r_f} \sqrt{1 + \frac{4h_f^2}{r_f^4} r^2} r dr d\theta = \frac{\pi r_f^4}{6h_f^2} \left[ \left( 1 + \frac{4h_f^2}{r_f^2} \right)^{3/2} - 1 \right] \quad (2.51)$$

Las integrales dobles de la Ecuación (2.50) fueron aproximadas numéricamente con el método de cuadratura de Gauss, con un error de integración insignificante. Además, para cuantificar la incertidumbre del factor de vista,  $\delta_F$ , se utilizó una expresión que se puede encontrar en [174]:

$$\delta_F = \left| \frac{\partial F}{\partial h_f} \delta_{h_f} \right|, \quad (2.52)$$

donde  $\delta_{h_f}$  representa la desviación estándar de las mediciones repetidas de la altura de la llama.

## Estabilidad de la llama

La estabilidad de la combustión sería caracterizada capturando y analizando la radiación emitida por la llama en el rango de 400-1100 nm. Para esto se utilizará un arreglo óptico de lente Pentax  $f = 12$  mm acoplada a un fotodiodo rápido Thorlabs PDA100A2 (8) y conectado a un Data logger IOtech 3000 (9). Las señales son visualizadas con el Osciloscopio Teledyne Lecroy de 1 GHz (10). Con la finalidad de determinar las frecuencias características de pulsación de la llama, las medidas serán procesadas aplicando un análisis de frecuencias con la transformada rápida de Fourier (o FFT) y un tratamiento de ventanas de Hanning [175].

## Análisis de error

Se realizó un análisis de Monte Carlo para estimar el error propagado de  $\kappa_{ext,\lambda}$ ,  $J_\lambda$ ,  $T$ ,  $f_s$ ,  $E_{m,\lambda}$ ,  $\beta$ , siguiendo el procedimiento descrito por Crossland et al. [176]. La incertidumbre de cada resultado se determinó realizando cálculos repetidos a partir de las mediciones, con los datos modificados aleatoriamente dentro de su distribución de probabilidad de error. Inicialmente, los campos medios de extinción/emisión de hollín se perturbaron agregando ruido Gaussiano, con media cero y la desviación estándar calculada a partir de las imágenes medidas, para generar 500 campos perturbados.

# Capítulo 3

## Resultados

### Contenidos

---

3.1	Resultados análisis normativo . . . . .	<b>127</b>
3.1.1	Cumplimiento del e-GL en la normativa internacional . . . . .	127
3.1.2	e-GL en los mercados de interés . . . . .	130
3.1.3	Propuesta de mejora para cumplimiento normativo . . . . .	132
3.2	Resultados teóricos y numéricos . . . . .	<b>132</b>
3.2.1	Propiedades del e-GL simulados . . . . .	133
3.2.2	Intercambiabilidad . . . . .	134
3.2.3	Seguridad y condiciones de flamabilidad . . . . .	143
3.2.4	Mezclas e-GL con propano . . . . .	147
3.2.5	Análisis de contaminantes . . . . .	150
3.2.6	Comportamiento numérico del e-GL . . . . .	153
3.2.7	Potencial del e-GL como complemento al gas licuado de petróleo .	154
3.3	Resultados experimentales I: Caracterización e-GL vs propano HD5 . . .	<b>155</b>
3.3.1	Extinción y emisión de llama . . . . .	155
3.3.2	Temperatura de llama . . . . .	158
3.3.3	Madurez y fracción en volumen de hollín . . . . .	159
3.3.4	Radiación de la llama . . . . .	159
3.3.5	Propiedades generales de la llama: altura, carga de hollín generado y estabilidad . . . . .	162
3.3.6	Análisis global de propiedades . . . . .	164
3.3.7	Comparación entre e-GL y propano HD5 . . . . .	166
3.4	Resultados experimentales II: Efecto del cambio del índice de oxígeno (OI) en la combustión del e-GL para diferentes mezclas con propano HD5 . . .	<b>167</b>

3.4.1	Análisis de alternativas: mezclas de e-GL con propano a distintos OI167	
3.4.2	Resumen global de alternativas . . . . .	181
3.4.3	Análisis sobre tendencias de las mezclas . . . . .	186


---

## 3.1. Resultados análisis normativo

### 3.1.1. Cumplimiento del e-GL en la normativa internacional

El presente análisis de cumplimiento normativo del electro gas licuado (e-GL) se realizó a partir del documento “LPG Fuel Quality Standards, Issues & Good Practices” de GLOTEC, desarrollado por la World LPG Association (WLPGA) [177]. Este documento recopila de manera sistemática los estándares de calidad del gas licuado de petróleo (GLP) en más de 50 países y de diferentes normas mundiales (ASTM, BS, ISO, GPA), estableciendo los límites de composición, pureza y propiedades fisicoquímicas requeridas para garantizar la seguridad y el rendimiento del GLP en aplicaciones residenciales, industriales, automotrices, entre otras.

En el capítulo anterior se expusieron las principales normativas internacionales sobre GLP con el objetivo de proporcionar un marco de referencia técnico y comparativo. A partir de esta base, se procedió a evaluar la compatibilidad del e-GL —cuya composición fue determinada mediante cromatografía de gases, véase Tabla 2.20— con dichas regulaciones. El análisis cruzado entre las especificaciones normativas y la composición del e-GL permite determinar en qué países este combustible sintético puede ser comercializado directamente, sin necesidad de reformulaciones ni autorizaciones especiales.

Los resultados obtenidos se resumen en la Tabla 3.1. De acuerdo con estos, solo en un país (Kenia, ) el e-GL cumple completamente con al menos una normativa vigente de GLP. Considerando el conjunto de aproximadamente 50 países con normativas específicas para GLP, y más de 80 regulaciones individuales evaluadas, se concluye que el e-GL satisface solo una de estas normativas. La Figura 3.1 ilustra este bajo nivel de compatibilidad, mostrando que actualmente el e-GL no podría comercializarse directamente en la mayoría de los países analizados.

Este resultado pone en evidencia una brecha significativa entre la formulación actual del e-GL y las exigencias regulatorias del mercado internacional. Por lo tanto, se hace necesario explorar estrategias de adaptación del combustible o de actualización de los marcos normativos, las cuales serán discutidas en secciones posteriores. Para incrementar el índice

Cuadro 3.1: Países donde el e-GL con su actual composición (Tabla 2.20) si cumple regulaciones y donde no.

Países que SI	Países que NO
	

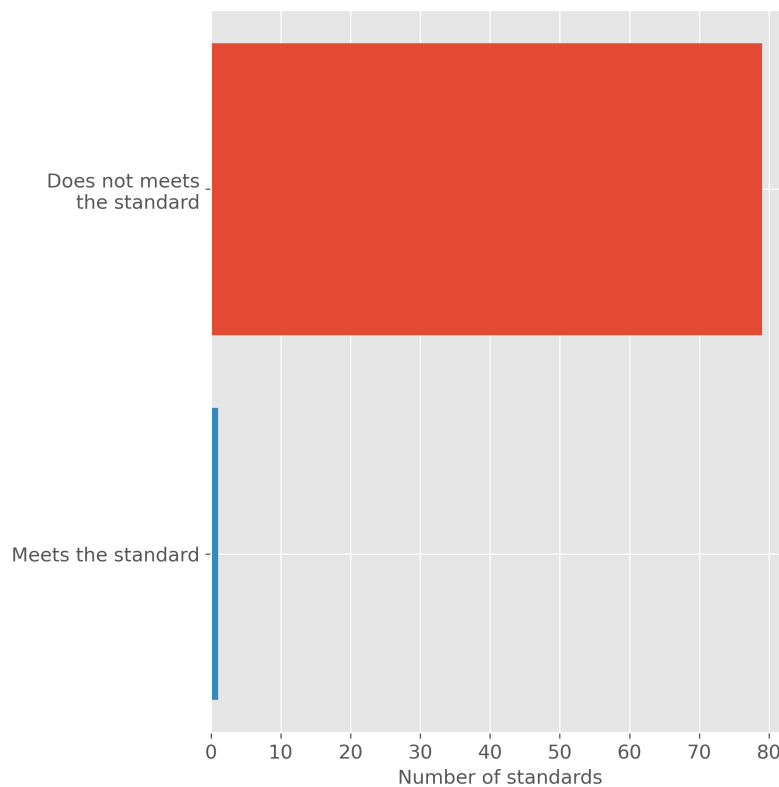


Figura 3.1: Número de regulaciones que cumple el e-GL con su composición actual (Tabla 2.20).

---

ce de aceptación de este nuevo combustible, es posible abordar dos estrategias principales, complementarias entre sí:

**1. Colaboración con las autoridades regulatorias:**

Establecer negociaciones activas con los gobiernos y organismos reguladores para impulsar la actualización de las normativas vigentes. Esto permitiría no solo facilitar la incorporación de este combustible sintético y carbono neutral, sino también abrir el camino para futuros desarrollos similares en el mercado. Este enfoque incluye la promoción de incentivos a las energías sostenibles, la adaptación de estándares técnicos, y la participación en mesas de trabajo que fomenten la transición hacia alternativas más ecológicas.

**2. Optimización de la composición del combustible:**



Realizar mejoras en la formulación actual mediante mezclas estratégicas (*blendings*) con hidrocarburos existentes, como el propano o el butano. Esta estrategia tiene el potencial de alinear el producto con las normativas actuales y facilitar su adopción en aplicaciones industriales y comerciales. En particular, se sugiere priorizar el propano debido a su amplia disponibilidad en el mercado, su elevado poder calorífico, y su predominancia dentro de la composición del Gas Licuado de Petróleo (GLP). Estas características lo convierten en un componente clave para desarrollar soluciones híbridas que combinen sostenibilidad y viabilidad técnica.


Ambas estrategias, ejecutadas en paralelo, permitirían aumentar la penetración de este combustible innovador en el mercado global, generando así un impacto significativo en la transición hacia fuentes de energía más sostenibles y ambientalmente responsables.

La Figura 3.2 muestra cómo varía el cumplimiento de las regulaciones en función del porcentaje de mezcla de e-GL (electrolytic gas liquid) con propano ( $C_3H_8$ ). En el eje

horizontal se representa el porcentaje de  $C_3H_8$  en la mezcla, mientras que en los ejes verticales se observan dos métricas: en el eje izquierdo, la cantidad que *cumple con los estándares* (curva azul), y en el eje derecho, la cantidad que *no cumple con los estándares* (curva roja). A medida que aumenta el porcentaje de  $C_3H_8$  en la mezcla, la proporción de mezclas que cumplen con los estándares también aumenta de forma significativa, especialmente después de un umbral cercano al 50–60 %. Simultáneamente, la cantidad de mezclas que no cumplen con los estándares disminuye de manera marcada. En particular, se observa un punto de cruce entre las dos curvas alrededor del 60 % de  $C_3H_8$ , donde ambas métricas se igualan, y a partir de este punto predominan las mezclas que cumplen con las regulaciones. Este análisis sugiere que la incorporación de propano a la mezcla mejora su alineación con las normativas vigentes, posiblemente debido a las propiedades del propano que cumplen con los estándares actuales. Se recomienda realizar un análisis más detallado para identificar el rango óptimo de mezcla que maximice el cumplimiento regulatorio sin comprometer otros factores clave, como el costo, el impacto ambiental o las propiedades técnicas del combustible.

### 3.1.2. e-GL en los mercados de interés

Dado a los resultados expuestos, se logra divisar que no será posible la comercialización directa en los países estudiados. Esto porque la composición del e-GL no se adecúa a la legislaciones vigentes. Por ejemplo, se muestra una comparación de las diferentes normas estudiadas para dos países del listado: Chile () y Estados Unidos ()

En Chile () , actualmente se rige bajo la norma Chilena 72 que data del año 1999 (NCh. 72-1999). Esta norma presenta tres opciones de requisitos para los gases licuados de petróleo. En particular:

- Propano: max 2.5 % Vol.  $C_4^+$ .

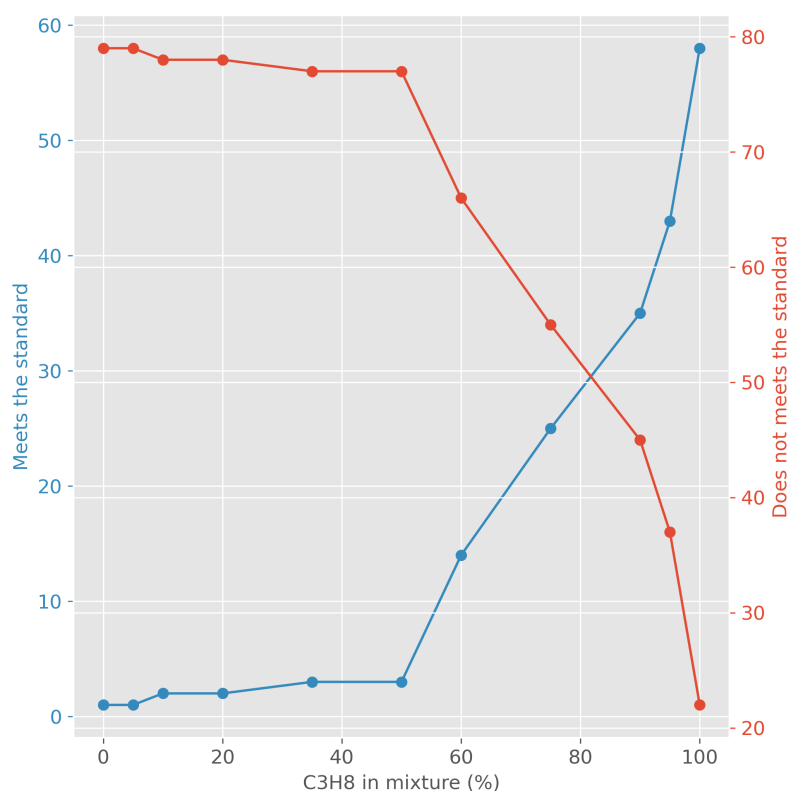


Figura 3.2: Número de regulaciones que cumple el e-GL mezclado con propano en volumen.

- Butano: max 2% Vol.  $C_5^+$ .
- GLP: max 30% Vol.  $C_4^+$  y 2% Vol.  $C_5^+$ .


No cumpliendo ninguna norma de la NCh. 72-1999, por lo que actualmente no podría comercializarse directamente en Chile (🇨🇱).

Por otro lado, en EE.UU. (🇺🇸) se rige actualmente por la norma GPA 2140-2017.

Esta norma presenta cuatro opciones de requisitos. En particular:

- Propano: max 2.5% Vol.  $C_4^+$ .
- Butano: max 2% Vol.  $C_5^+$ .
- Mezclas BP (GLP): max 2% Vol.  $C_5^+$ .

- HD5: min 90 % Vol.  $C_3H_8$ , max 5 % Vol.  $C_3H_6$  y 2.5 % Vol.  $C_4^+$ .

No cumpliendo actualmente con las cuatro opciones de la norma GPA 2140-2017, por lo que no podría comercializarse directamente en EE.UU. ()

### 3.1.3. Propuesta de mejora para cumplimiento normativo

Mientras la legislación actual no se actualice en Chile y en el Mundo, el e-GL no se podrá comercializar directamente. Esto debido a que se encuentra fuera de norma respecto a lo exigido en las normas de GLP descritas por [177]. Es por esto que se pueden estudiar dos alternativas: cambiar la composición mediante mezclas con propano hasta permitir su adopción por las normas vigentes, o directamente empujar a que los países se actualicen a este combustible (y los venideros). La primera opción es una alternativa de corto plazo y que permitirá vender mezclas a un precio más competitivo, reduciendo su huella de carbono; la segunda opción es de mediano-largo plazo, dado a la incorporación de nuevos combustibles sintéticos a la matriz energética, dando un marco de fácil incorporación al mercado actual.

## 3.2. Resultados teóricos y numéricos

En esta sección se presenta una simulación numérica unidimensional (1D) utilizando el software Cantera, con el mecanismo cinético JetSurF, enfocada en estudiar las propiedades termodinámicas y de combustión del e-GL bajo condiciones controladas. En particular, se simuló una configuración de llama libre plana (“free flame”), representativa del comportamiento idealizado de un quemador en régimen laminar. Esta configuración permite comparar directamente los resultados teóricos con las condiciones experimentales utilizadas más adelante en la caracterización de llama. La elección de una simulación 1D se basa en su capacidad

para capturar los principales fenómenos de combustión (temperatura, velocidad de llama, índice de Wobbe, etc.) con un bajo costo computacional y alta resolución en la zona de reacción. Los resultados se detallan a continuación:

### 3.2.1. Propiedades del e-GL simulados

La simulación numérica del combustible e-GL en el software Cantera, mediante el empleo del mecanismo JetSurf, proporciona una visión detallada de las propiedades termodinámicas y características fundamentales de este combustible bajo condiciones específicas. A continuación, se presentan las propiedades simuladas del e-GL a una temperatura de 298 K y una presión de  $1.0132 \times 10^5$  Pa, con una densidad de  $2.1272 \text{ kg/m}^3$  y un peso molecular promedio de  $52.018 \text{ kg/kmol}$ , en fase gaseosa. La Tabla 3.2 detalla diversas propiedades termodinámicas clave simuladas por Cantera para el e-GL. Estas propiedades termodinámicas son esenciales para comprender el comportamiento del e-GL durante procesos de combustión y proporcionan información valiosa para la formulación de modelos y la predicción de su rendimiento en condiciones específicas.

Cuadro 3.2: Propiedades simuladas del e-GL por cada 1 kg y 1 kmol.

Propiedades	1 kg	1 kmol
Enthalpy J	-2,0897e+06	-1,087e+08
Internal Energy J	-2,1373e+06	-1,1118e+08
Entropy J/K	5.695,2	2,9625e+05
Gibbs Function J	-3,7869e+06	-1,9699e+08
Heat capacity $c_p$ J/K	1.648,6	85.754
Heat capacity $c_v$ J/K	1.488,7	77.439

La entalpía negativa para ambas cantidades indica que el proceso de combustión li-

bera energía. Asimismo, la variación de la energía interna muestra una tendencia similar, confirmando la liberación de energía durante la reacción de combustión. La entropía, medida de la dispersión de la energía en el sistema, es notablemente mayor en términos absolutos para el e-GL en comparación con su equivalente por kilogramo, indicando una mayor dispersión de energía en una escala molar. Este hallazgo es esencial para entender la contribución del e-GL a la entropía total del sistema. El cambio en la función de Gibbs, que combina entalpía y entropía, revela la dirección de la reacción, indicando que el e-GL experimenta una disminución en su función de Gibbs durante el proceso de combustión. Las capacidades caloríficas, tanto a presión constante ( $c_p$ ) como a volumen constante ( $c_v$ ), son fundamentales para caracterizar el comportamiento térmico del combustible. Los valores proporcionados permiten calcular cambios de temperatura y evaluar el impacto de la combustión en las propiedades térmicas del e-GL.

En conclusión, esta simulación detallada y las propiedades resultantes ofrecen una comprensión profunda del comportamiento termodinámico del combustible e-GL bajo condiciones específicas, lo que es esencial para la formulación precisa de modelos y la evaluación de su rendimiento en aplicaciones prácticas.

### 3.2.2. Intercambiabilidad

La Tabla 3.3 presenta información crucial sobre el poder calorífico, densidad específica e índice de Wobbe de diferentes gases, incluyendo el e-GL. Estos parámetros son fundamentales para evaluar la intercambiabilidad y la eficiencia de un combustible en diversas aplicaciones. A continuación, se comentan los resultados en términos de la intercambiabilidad del e-GL en comparación con otros gases estudiados ( $C_3H_8$  e  $iC_4H_{10}$ ).

Cuadro 3.3: Poder calorífico, densidad específica e índice de Wobbe de los diferentes gases estudiados.

Gas	PCS (MJ/m <sup>3</sup> )	SG	WI (MJ/m <sup>3</sup> )
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	96,83	1,52	78,32
iC <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	125,19	2,02	88,2
e-GL	111,98	1,80	83,39

A continuación, en la Figura 3.3, se presentan los poderes caloríficos (izquierda) y el índice de Wobbe (derecha) para los tres gases analizados a distintas relaciones de equivalencia. Observamos que los valores obtenidos para estos gases son consistentes con los datos publicados en las referencias [128]. Además, se destaca que el e-GL exhibe comportamientos similares a los esperados para el iso-butano y el propano.

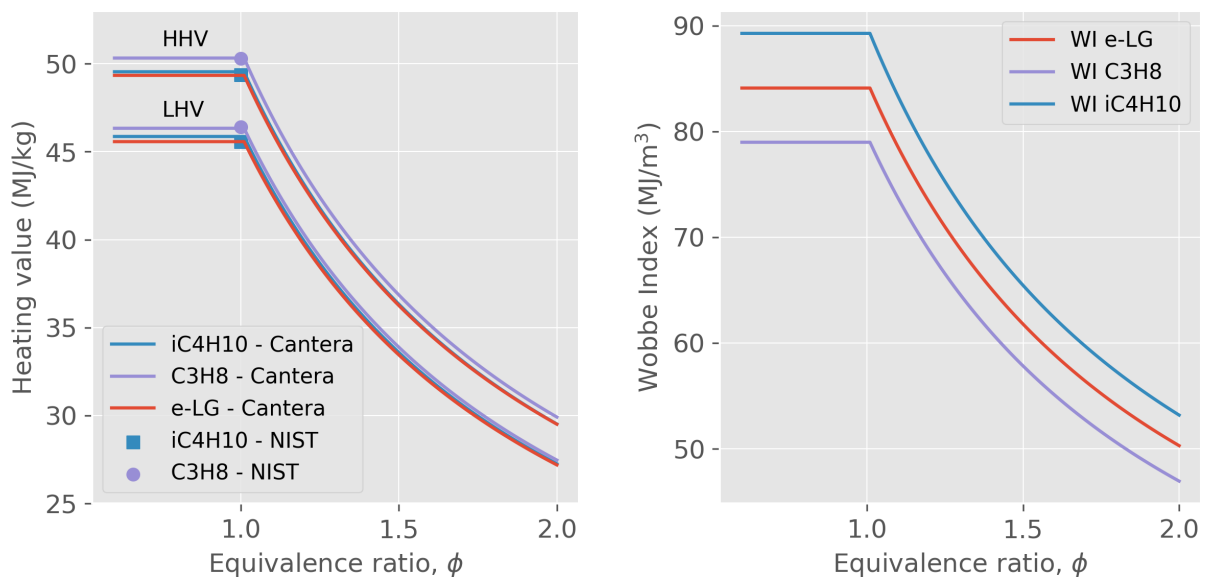


Figura 3.3: Propiedades de intercambiabilidad de los combustibles estudiados: Poder calorífico (izq) e Índice de Wobbe (der), ambos a diferentes ratios de equivalencia ( $\phi$ ).

- El e-GL muestra un valor de poder calorífico intermedio entre el propano (C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>) e

iso-butano ( $iC_4H_{10}$ ). Aunque el  $iC_4H_{10}$  tiene el mayor poder calorífico específico, el e-GL se posiciona como una opción competitiva en términos de contenido energético, ofreciendo una alternativa eficaz para diversas aplicaciones.

- La densidad específica del e-GL está más cerca a la del propano que a la del iso-butano, lo que sugiere que el e-GL podría compartir ciertas características logísticas y de manejo con el propano. Esta similitud en densidad específica puede facilitar la transición o mezcla del e-GL en sistemas que originalmente utilizan propano.
- El índice de Wobbe es esencial para evaluar la compatibilidad de los gases en aplicaciones de combustión. Aunque el e-GL se sitúa entre el propano y el iso-butano en términos de WI, su valor se aproxima más al del iso-butano. Esto sugiere que, en ciertos contextos, el e-GL podría ser intercambiable con el iso-butano y el propano sin comprometer significativamente el rendimiento.

En general, la tabla indica que el e-GL presenta propiedades intermedias entre el propano y el iso-butano, lo que respalda su potencial intercambiabilidad en diversas aplicaciones. La elección del combustible dependerá de consideraciones específicas, como la infraestructura existente, los requisitos de rendimiento y las consideraciones medioambientales.

La Tabla 3.4 presenta las diferencias porcentuales en los índices de Wobbe entre el propano ( $C_3H_8$ ) y el combustible e-GL, así como entre el iso-butano ( $iC_4H_{10}$ ) y el e-GL.

Cuadro 3.4: Diferencias porcentuales de los índice de Wobbe, contrastados con el e-GL.

Gas	Var. %
$C_3H_8$ vs e-GL	+ 6,5 %
$iC_4H_{10}$ vs e-GL	- 5,5 %

- **C<sub>3</sub>H<sub>8</sub> vs. e-GL:** Un resultado positivo indica que el índice de Wobbe del e-GL es un 6.5 % mayor que el del propano. Esta diferencia sugiere que, en términos relativos, el e-GL tiene un mayor contenido energético o una mayor capacidad calorífica ajustada en comparación con el propano. Esto puede ser relevante al considerar la adaptabilidad y la eficiencia en sistemas que originalmente utilizan propano.
- **iC<sub>4</sub>H<sub>10</sub> vs. e-GL:** Una variación negativa del 5.5 % indica que el índice de Wobbe del e-GL es un 5.5 % menor que el del iso-butano. Esta diferencia sugiere que, en comparación con el iso-butano, el e-GL tiene un índice de Wobbe ligeramente más bajo. Este aspecto puede ser significativo al evaluar la compatibilidad del e-GL como sustituto del iso-butano en ciertos contextos.

En resumen, las diferencias porcentuales en los índices de Wobbe revelan cambios relativos en la capacidad calorífica ajustada de los combustibles analizados. La interpretación precisa de estos resultados dependerá de las aplicaciones específicas y los requisitos de los sistemas de combustión en los que se considere la intercambiabilidad de estos combustibles.

Los valores típicos de los índices de Wobbe (WI) para combustibles convencionales proporcionan un contexto valioso para evaluar y contextualizar los resultados obtenidos en este chat para el propano (C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>), iso-butano (iC<sub>4</sub>H<sub>10</sub>) y el combustible simulado (e-GL):

- WI típicos para C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>: 74.54 - 81.07 MJ/m<sup>3</sup>: El resultado obtenido en la comparación C<sub>3</sub>H<sub>8</sub> vs. e-GL (+6.5 %) cae dentro del rango típico para el propano. Esto indica que el e-GL, en términos de índice de Wobbe, se alinea de manera razonable con las expectativas para el propano, lo que sugiere una intercambiabilidad potencial en sistemas que originalmente utilizan propano.
- WI típicos para iC<sub>4</sub>H<sub>10</sub>: 84.71 - 91.96 MJ/m<sup>3</sup>: La comparación iC<sub>4</sub>H<sub>10</sub> vs. e-GL (-5.5 %)

también se encuentra dentro del rango típico para el iso-butano. Esto indica que, en términos de índice de Wobbe, el e-GL es coherente con las expectativas para el iso-butano. Esto puede ser relevante al considerar la sustitución del iso-butano por el e-GL en aplicaciones específicas.

- WI típicos para LPG: 79.94 – 86.84 MJ/m<sup>3</sup>: Los valores de WI típicos para el Gas Licuado de Petróleo (LPG), que engloba tanto al propano como al iso-butano, son consistentes con las variaciones observadas en las comparaciones específicas. El rango proporciona un marco de referencia general para la intercambiabilidad de combustibles gaseosos.

Otro parámetro crucial en la simulación de seguridad es la temperatura adiabática, la cual se ilustra detalladamente en la Figura 3.4. En esta representación gráfica, se incluyen los datos correspondientes a los tres gases objeto de estudio. Al observar la figura, en la parte izquierda se evidencia que los tres gases alcanzan temperaturas aparentemente similares. No obstante, al realizar un acercamiento más detenido, se revelan diferencias de aproximadamente 6 K entre ellos, siendo la variación más significativa observada en el caso del e-GL. Este fenómeno, que podría pasar desapercibido a simple vista, adquiere relevancia al considerar la posible explicación de tales disparidades. La presencia de otras especies, como el H<sub>2</sub> (vea Tabla 2.19), podría desempeñar un papel crucial en la variación de la temperatura adiabática entre los gases estudiados. Este hallazgo sugiere que la composición química, incluso en pequeñas proporciones, puede influir significativamente en las propiedades termodinámicas y, por ende, en la seguridad de los gases analizados. Así, la Figura 3.4 y los análisis detallados resaltan la importancia de examinar minuciosamente los parámetros termodinámicos, como la temperatura adiabática, en la evaluación de la seguridad de gases. Estos resultados ofrecen valiosa información para comprender mejor las complejidades de las reacciones químicas involucradas y mejorar los modelos de simulación utilizados en la evaluación de riesgos en situaciones prácticas.

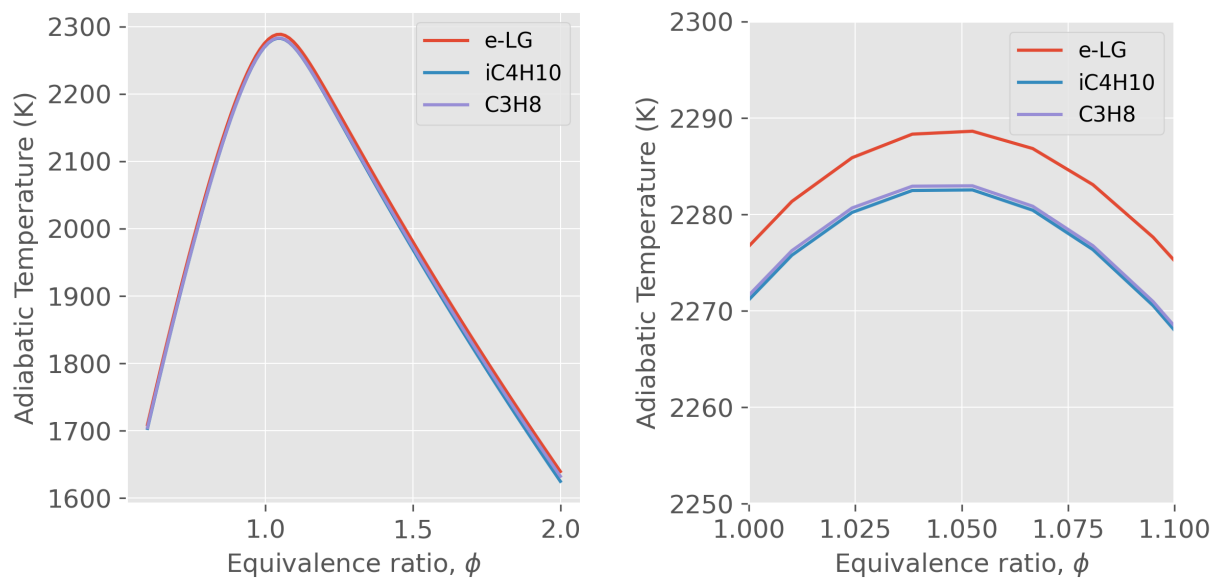


Figura 3.4: La temperatura adiabática para los tres gases a diferentes  $\phi$ . A la derecha se encuentra un zoom de la curva de la izquierda.

En general, los resultados obtenidos en esta simulación, sugieren que el combustible simulado (e-GL) se alinea adecuadamente con las propiedades de referencia del propano y el iso-butano. Estos resultados respaldan la viabilidad del e-GL como un sustituto potencial en aplicaciones que utilizan estos combustibles convencionales. No obstante, la aplicación específica y los requisitos del sistema deben considerarse para evaluar completamente la idoneidad del e-GL en situaciones prácticas.

La Figura 3.5 muestra los tiempos de retraso de ignición (*ignition delay times*) para dos combustibles clave, iso-butano ( $iC_4H_{10}$ ) y propano ( $C_3H_8$ ), en función de la inversa de la temperatura ( $1000/T$ ). Esta representación se utiliza comúnmente en cinética química para evaluar y comparar el comportamiento inflamable de diferentes combustibles bajo condiciones controladas. En la gráfica se incluyen tanto los datos simulados obtenidos mediante Cantera (líneas continua y punteada) como datos experimentales previamente reportados en la literatura, específicamente por Healy *et al.* [139] para el iso-butano y Herzler *et al.* [138]

para el propano, ambos simulados en un reactor de gases ideales. Para el caso del iso-butano, se simuló el reactor a una presión de 9 atm para un rango de temperatura de 1000 a 1567 K y  $\phi = 1$  al igual que el experimento realizado por Healy et al [139]. Para el caso del propano, se simuló el reactor a una presión de 10 atm para un rango de temperatura de 900 a 1300 K y  $\phi = 0,5$  al igual que el experimento realizado por Herzler *et al.* [138]. Consecuentemente se realiza la simulación del tiempo de retardo de ignición del e-GL, considerando ambos casos (véase Figura 3.5). La excelente concordancia observada entre los datos simulados y experimentales refuerza la validez del modelo utilizado, demostrando que las simulaciones realizadas capturan con precisión los mecanismos de oxidación y las propiedades cinéticas de ambos combustibles en el rango de temperaturas estudiado. En términos de tendencias, se observa que los tiempos de retraso de ignición disminuyen a medida que aumenta la temperatura, un comportamiento esperado debido al incremento de las tasas de reacción con el aumento de la energía térmica disponible. Además, las diferencias en los tiempos de ignición entre el iso-butano y el propano reflejan las particularidades cinéticas de cada combustible, siendo el propano más reactivo en las condiciones evaluadas. Esta validación, basada en la comparación con resultados experimentales confiables, no solo respalda la precisión del modelo de Cantera, sino que también asegura la confianza en las predicciones realizadas para otros combustibles, como el e-GL, bajo condiciones similares. En consecuencia, este análisis contribuye significativamente al desarrollo de estrategias de modelado y simulación para el diseño y la evaluación de nuevos combustibles sintéticos y sostenibles.

Se presentan los mapas de contorno del tiempo de autoignición para mezclas estequiométricas de e-GL (en Figura 3.6),  $C_3H_8$  (en Figura 3.7) e i- $C_4H_{10}$  (en Figura 3.8), en función de la temperatura y la razón de equivalencia  $\phi$ , bajo presiones de 2, 4 y 6 atm. Se observa una tendencia decreciente del tiempo de autoignición con el incremento de la temperatura, en línea con el comportamiento esperado de los mecanismos de cinética química dominados por reacciones de cadena térmica. En la zona donde no hay valores, el mecanismo cinético

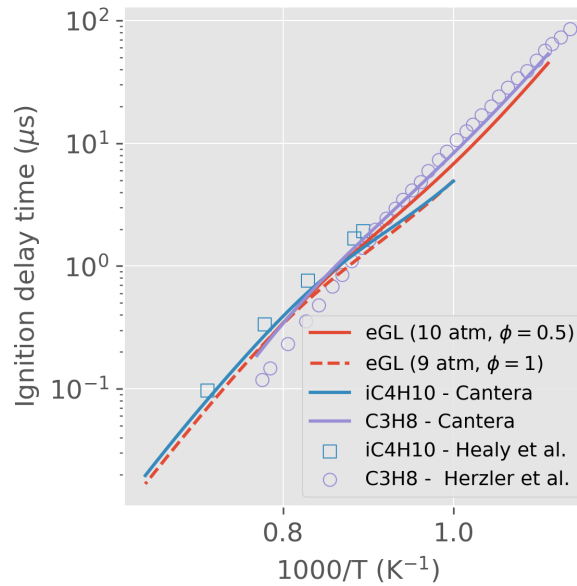


Figura 3.5: Tiempo de retardo de ignición simulado con Cantera.

no detecta ignición, lo cual puede estar explicado por limitaciones de la simulación y/o que en esas zonas efectivamente no hay condiciones para que la ignición ocurra. Para un mismo rango de condiciones termodinámicas, el combustible sintético renovable e-GL exhibe tiempos de autoignición mayores en comparación con los hidrocarburos puros C<sub>3</sub>H<sub>8</sub> e i-C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>. Esta diferencia puede atribuirse a la menor reactividad química intrínseca del e-GL, dada su composición basada en mezclas más oxigenadas y con menor número de átomos de carbono por molécula. Asimismo, al aumentar la presión, se observa una disminución significativa del tiempo de autoignición para los tres combustibles, efecto consistente con el aumento de la concentración de radicales intermedios que catalizan la ignición. Estos resultados son coherentes con la literatura (iC<sub>4</sub>H<sub>10</sub> [178] y C<sub>3</sub>H<sub>8</sub> [179, 180]) y aportan evidencia al análisis de intercambiabilidad en sistemas de combustión por autoignición. En particular, el mayor tiempo de retardo observado para el e-GL a condiciones bajas de temperatura y presión representa un desafío técnico relevante para su implementación en aplicaciones de motores de encendido por compresión, donde la sincronización precisa del evento de ignición es crítica. Esto plantea la necesidad de considerar el tiempo de autoignición como un parámetro

determinante en la estabilidad del sistema, y su potencial susceptibilidad a fenómenos como el *knocking*.

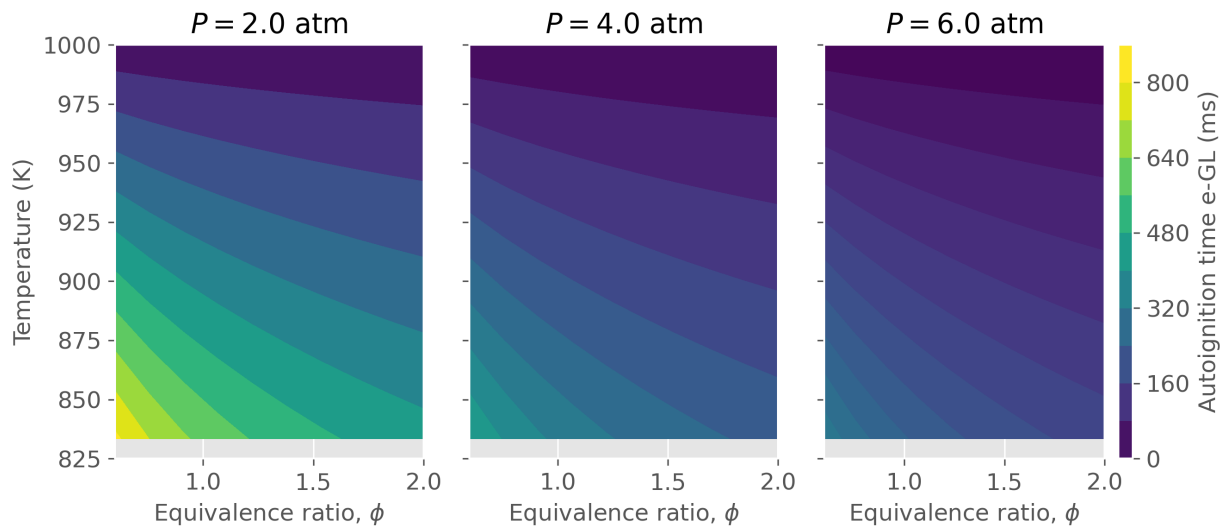


Figura 3.6: Tiempo de autoignición simulado con Cantera para el e-GL.

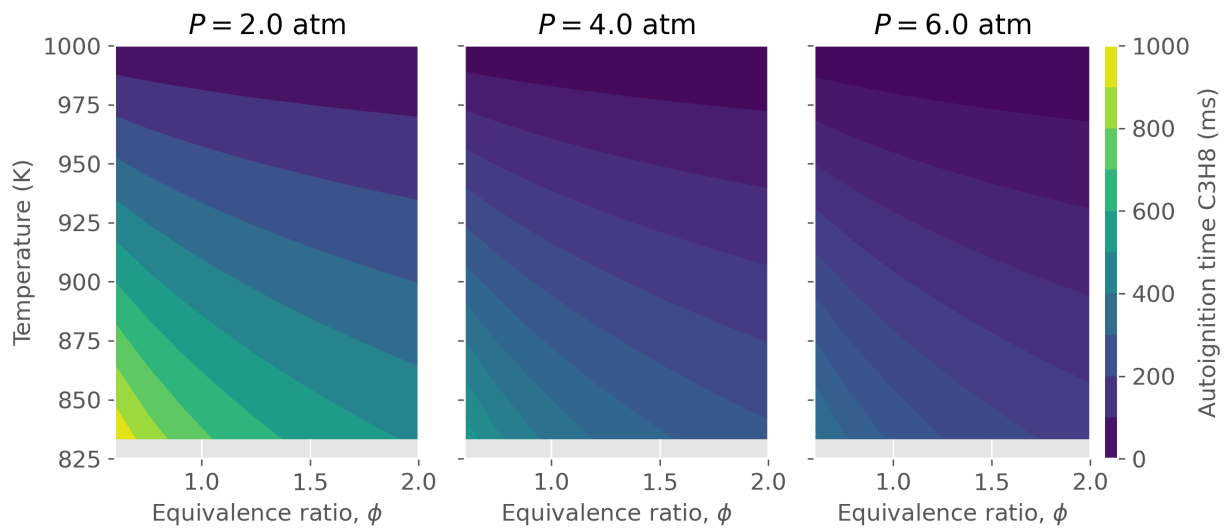


Figura 3.7: Tiempo de autoignición simulado con Cantera para el  $\text{C}_3\text{H}_8$ .

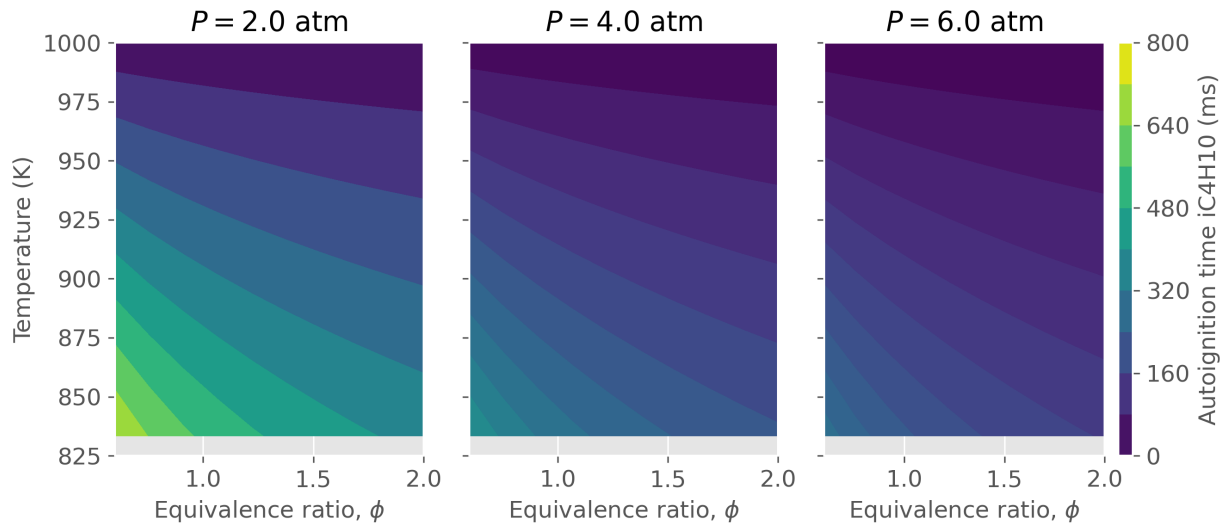


Figura 3.8: Tiempo de autoignición simulado con Cantera para el  $iC_4H_{10}$ .

### 3.2.3. Seguridad y condiciones de flamabilidad

Se llevó a cabo un exhaustivo estudio de seguridad para evaluar el comportamiento del gas e-GL, centrándose en dos parámetros críticos: la velocidad de llama laminar y la construcción de un Diagrama ternario. Estos parámetros son fundamentales para comprender las propiedades inflamables y la estabilidad de este gas en diversas condiciones. Para el cálculo de la velocidad de llama laminar, se simuló una *free flame* utilizando el software Cantera, en un dominio representativo de un tubo de choque con un ancho de 0.02 m. Este enfoque permite modelar de manera precisa el comportamiento de la llama bajo condiciones de mezcla aire-combustible controladas. El modelo se inicializó utilizando una solución química especificada en el archivo de mecanismo correspondiente, ajustando la temperatura ( $T$ ), presión ( $P$ ) y la composición inicial del gas mediante la relación de equivalencia ( $\phi$ ). Para garantizar la estabilidad y precisión de las simulaciones, se emplearon los siguientes parámetros de refinamiento de la malla:

- **temperatura:** Definida a 300 K.

- **Presión:** Definida a presión atmosférica.
- **Ratio de equivalencia:** Estudiado entre 0.6 a 2, con una definición de 100 valores.
- **ratio:** Este parámetro, definido como 3, controla la relación máxima de tamaño entre celdas adyacentes, evitando una transición brusca en el tamaño de la malla.
- **slope:** Establecido en 0.15, especifica el gradiente máximo de la solución permitida entre celdas, asegurando que las zonas de mayor variación, como la región de la llama, estén bien resueltas.
- **curve:** También ajustado a 0.15, regula el cambio en la curvatura de la solución, mejorando la resolución en áreas no lineales.
- **prune:** Con un valor de 0.1, permite eliminar celdas innecesarias en regiones donde la solución es relativamente uniforme, optimizando la eficiencia computacional.

El cálculo se realizó para un conjunto de valores de  $\phi$ , que variaron desde condiciones pobres en combustible ( $\phi < 1$ ) hasta condiciones ricas ( $\phi > 1$ ). En cada iteración, se actualizó la composición de entrada del gas, asegurando que las fracciones molares del combustible y del oxidante coincidieran con las definidas por el nuevo valor de  $\phi$ . Además, las propiedades de entrada de la llama se ajustaron para reflejar estas nuevas condiciones, con el fin de obtener resultados consistentes. La velocidad de la llama laminar ( $S_u$ ) se calculó a partir de la velocidad del flujo en la entrada y se reportó en unidades de cm/s. La Figura 3.9 presenta de manera integral la velocidad de llama de los tres gases sujetos a estudio. En esta representación, se incluyen los datos experimentales de iso-butano y propano, junto con los datos simulados correspondientes al e-GL. Lo destacable en esta figura es la consistencia evidente entre los datos experimentales y los simulados para el e-GL, lo que sugiere un comportamiento robusto y predecible de este gas en términos de velocidad de llama laminar. La buena concordancia entre los datos experimentales y los simulados no solo respalda la validez de

las simulaciones realizadas, sino que también indica una alta confianza en la estabilidad del e-GL bajo las condiciones estudiadas. La comparación con los datos experimentales de isobutano y propano refuerza aún más esta afirmación al demostrar que el e-GL sigue de cerca el comportamiento de estos dos gases de referencia, situándose dentro de un rango aceptable. Este análisis detallado no solo proporciona una visión más clara de la velocidad de llama laminar del e-GL, sino que también valida la capacidad del modelo de simulación utilizado para predecir con precisión su comportamiento en situaciones prácticas. La información obtenida contribuye significativamente a la comprensión de las características de seguridad del e-GL, permitiendo tomar medidas preventivas y correctivas eficientes en entornos donde se utilice este gas.

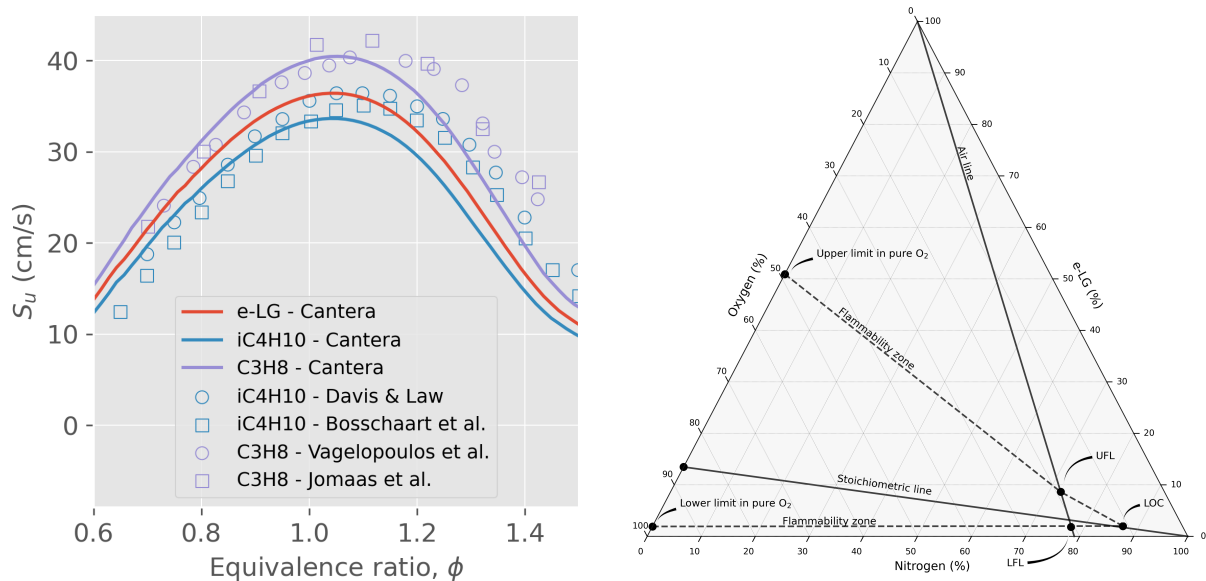


Figura 3.9: velocidad de llama laminar de los gases estudiados a distintos  $\phi$  (izq), y Diagrama ternario del e-GL (der).

Para llevar a cabo la construcción del Diagrama ternario, representado en la Figura 3.9, es necesario obtener algunos puntos críticos, tales como LII (LFL), LSI (UFL), LOC y Cst. Estos parámetros son esenciales para comprender los límites de inflamabilidad y la concentración estequiométrica del gas estudiado. La *flammability limits*, que establece la

proporción de gas y aire necesaria para la combustión, se define mediante el LFL (*Lower Flammability Limit*) y el UFL (*Upper Flammability Limit*). Para mezclas, como en el caso del e-GL, se puede aplicar la Ley de Le Châtelier (véase Ecuación 2.23). En la Tabla 3.5 se presentan los valores obtenidos del LII (LFL) y el LSI (UFL), fundamentales para determinar los límites de inflamabilidad del e-GL. Estos datos son esenciales para evaluar la seguridad y estabilidad del gas en diferentes condiciones ambientales.

Cuadro 3.5: Límites de inflamabilidad de los tres gases simulados.

Gas	LFL (%)	UFL (%)
e-GL	1,9	9
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	2,1	10,1
iC <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	1,68	7,8

Para calcular el LOC (*Limiting Oxygen Concentration*), se emplea la fórmula:

$$\text{LOC} = \text{LFL} \left( \frac{\text{moles } O_2}{\text{moles fuel}} \right)$$

Los resultados de este cálculo se muestran en la Tabla 3.6, proporcionando información valiosa sobre las concentraciones límite de oxígeno para el e-GL.

Cuadro 3.6: Limiting Oxygen Concentration (LOC) de los tres gases estudiados.

Gas	e-GL	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	iC <sub>4</sub> H <sub>10</sub>
LOC (%)	11,27	10,5	11,7

Adicionalmente, para determinar la Concentración Estequiométrica (C<sub>st</sub>), se utiliza la fórmula:

$$C_{\text{st}} = \frac{\text{moles } O_2}{\text{moles } O_2 + \text{moles fuel}}$$

Los resultados de estos cálculos se presentan en la Tabla 3.7, ofreciendo una perspectiva detallada de la concentración estequiométrica del e-GL.

Cuadro 3.7: Concentración estequiométrica (Cst) de los tres gases estudiados.

Gas	e-GL	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	iC <sub>4</sub> H <sub>10</sub>
Cst (%)	85,65	83,71	86,53

Estos datos son esenciales para comprender y gestionar la seguridad del gas e-GL, proporcionando información valiosa para la toma de decisiones y la implementación de medidas preventivas. Finalmente, juntando los puntos mencionados pudieron ser construidas las Figura 2.30 y Figura 3.9(der). Muestra que el e-GL es un gran candidato para sustituir de manera segura y equivalente cada uno de los dos gases estudiados.

### 3.2.4. Mezclas e-GL con propano

Se llevará a cabo un estudio numérico para analizar cómo afectan las condiciones de intercambiabilidad e inflamabilidad al mezclar e-GL con propano (C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>) en distintas proporciones volumétricas. Este análisis permitirá evaluar el comportamiento de parámetros clave como el poder calorífico y el Índice de Wobbe (WI) en función de la composición de la mezcla.

La Figura 3.10(izq) muestra cómo varían los valores de poder calorífico superior (HHV) e inferior (LHV), junto con el Índice de Wobbe (WI), en función del porcentaje volumétrico de propano en la mezcla con e-GL. El eje  $x$  representa la fracción volumétrica de propano en la mezcla, mientras que los ejes  $y$  izquierdo y derecho representan, respectivamente, el poder calorífico en MJ/kg y el Índice de Wobbe en MJ/m<sup>3</sup>. El poder calorífico superior (HHV), representado por la línea continua azul, aumenta linealmente a medida que se incrementa la proporción de propano en la mezcla, reflejando la mayor densidad energética del propano en comparación con el e-GL. Por otro lado, el poder calorífico inferior (LHV), indicado por la línea discontinua azul, también muestra un incremento gradual, aunque me-

nos pronunciado. El Índice de Wobbe (WI), que mide la capacidad de un combustible para entregar energía a través de un quemador, está representado por la línea continua roja. Este índice disminuye linealmente con el aumento de propano en la mezcla. De manera particular, se observa que, a partir de un 75 % de propano en volumen, la mezcla comienza a salir del rango típico del Índice de Wobbe asociado a los gases licuados de petróleo (GLP), representado por la banda sombreada en la figura. Esto implica que una mayor proporción de propano podría reducir la equivalencia funcional de la mezcla como un GLP, afectando su compatibilidad con aplicaciones y equipos diseñados para operar con GLP estándar. Esta figura es crucial para evaluar la compatibilidad de la mezcla con aplicaciones prácticas en sistemas de combustión. La evolución simultánea de HHV, LHV y WI permite determinar si la mezcla cumple con los estándares de rendimiento energético y los requisitos técnicos de los equipos existentes. Además, sugiere posibles ajustes en las proporciones para optimizar su uso, manteniendo valores de WI dentro del rango aceptable para GLP.

La Figura 3.10(der) presenta un análisis de los límites de inflamabilidad de una mezcla de e-GL con propano ( $C_3H_8$ ) en distintas proporciones volumétricas. El eje  $x$  representa la fracción volumétrica de propano en la mezcla, mientras que los ejes  $y$  izquierdo y derecho muestran parámetros clave relacionados con los límites de inflamabilidad, como los límites inferior (LFL) y superior (UFL) de inflamabilidad, el contenido mínimo de oxígeno para la combustión (LOC) y el contenido de oxígeno en la atmósfera (UOC). El límite superior de inflamabilidad (UFL), representado por la línea azul continua, incrementa de forma casi lineal a medida que aumenta la proporción de propano en la mezcla, lo que indica que el rango de concentraciones en las que la mezcla es inflamable se expande con mayores porcentajes de propano. Por otro lado, el límite inferior de inflamabilidad (LFL), indicado por la línea azul discontinua, muestra un ligero incremento, aunque permanece relativamente estable a lo largo de la mezcla. El contenido mínimo de oxígeno para la combustión (LOC), representado por la línea roja, disminuye significativamente a medida que el porcentaje de propano se

acerca al 50 %, alcanzando su punto más bajo. Esto indica que la mezcla requiere menos oxígeno para sostener una combustión cuando está cercana a la composición equimolar entre e-GL y propano, lo que refleja una alta reactividad en esta región. Por último, el contenido de oxígeno de la atmósfera (UOC), mostrado por la línea violeta, permanece prácticamente constante, ya que representa un valor fijo en las condiciones ambientales típicas. Este análisis es fundamental para comprender las propiedades inflamables de la mezcla e-GL/propano y su comportamiento en diferentes proporciones volumétricas. Los resultados sugieren que el control preciso de la composición de la mezcla es esencial para garantizar la seguridad en aplicaciones donde puedan generarse condiciones inflamables. En particular, el aumento del rango de inflamabilidad (UFL) con mayores porcentajes de propano destaca la necesidad de precaución en concentraciones altas de este compuesto.

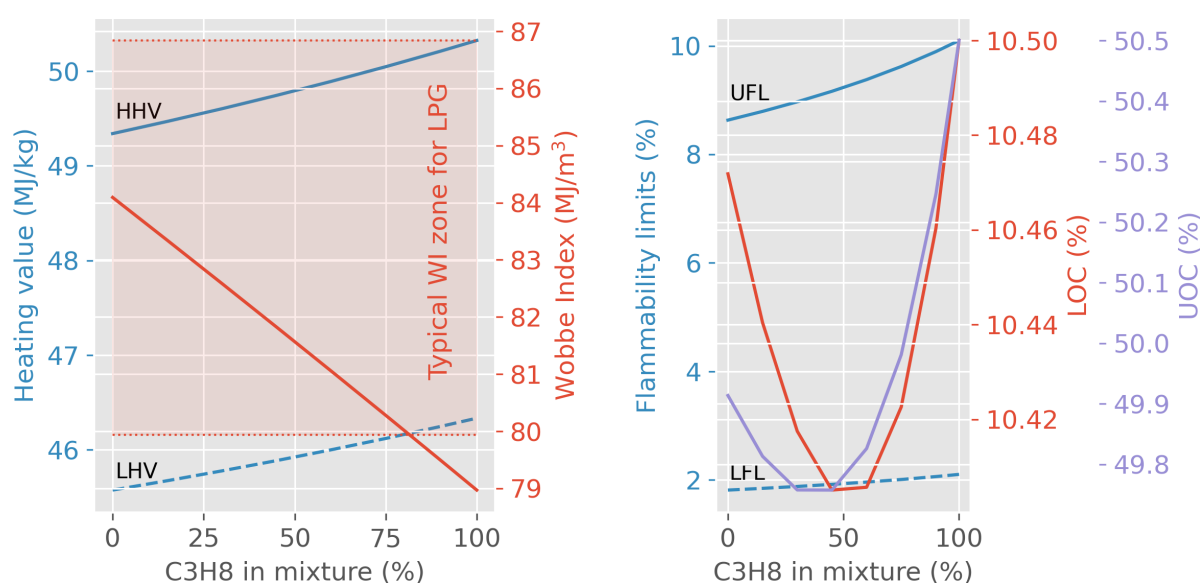


Figura 3.10: Poder calorífico e Índice de Wobbe del e-GL mezclado con propano en volumen (izq), y límites de inflamabilidad del e-GL mezclado con propano.

La Figura 3.11 muestra un Diagrama ternario que describe las zonas de inflamabilidad de mezclas de e-GL con propano ( $C_3H_8$ ) en presencia de oxígeno y nitrógeno, considerando diferentes proporciones de cada componente. Este tipo de diagrama es una herramienta fun-

damental para visualizar cómo las condiciones de composición afectan la inflamabilidad de las mezclas bajo diversas atmósferas. En el diagrama, los vértices representan composiciones puras de cada componente: oxígeno en la parte superior, nitrógeno en la parte inferior izquierda, y la mezcla e-GL + C<sub>3</sub>H<sub>8</sub> en la parte inferior derecha. La línea estequiométrica está marcada como una referencia clave, mostrando la relación de mezcla ideal para una combustión completa en presencia de oxígeno. La región sombreada, identificada como la “zona de inflamabilidad”, delimita las composiciones donde la mezcla puede inflamarse. Dentro de esta región, se destacan los límites inferior (LFL) y superior (UFL) de inflamabilidad, así como el Contenido Mínimo de Oxígeno (LOC), que define el mínimo porcentaje de oxígeno necesario para sostener la combustión. El límite superior en atmósferas de oxígeno puro se encuentra en la parte superior de la zona de inflamabilidad, mientras que el límite inferior está cerca de la base de la figura. El incremento en el porcentaje de propano en la mezcla e-GL + C<sub>3</sub>H<sub>8</sub> está indicado por líneas diagonales que atraviesan el diagrama. Este incremento tiene un impacto significativo en la forma y extensión de la zona de inflamabilidad, ya que el propano, con sus propiedades más inflamables en comparación con el e-GL, tiende a expandir esta zona, especialmente en composiciones ricas en oxígeno. Este diagrama es crucial para comprender las condiciones en las que las mezclas e-GL + C<sub>3</sub>H<sub>8</sub> pueden inflamarse, dependiendo de la composición del entorno gaseoso. Los resultados obtenidos permiten identificar composiciones seguras y zonas críticas de inflamabilidad, lo cual es esencial para el diseño de sistemas y procesos donde estas mezclas puedan ser utilizadas.

### 3.2.5. Análisis de contaminantes

La Tabla 3.8 presenta las fracciones másicas ( $y_i$ ) de los productos de combustión generados por el e-GL, C<sub>3</sub>H<sub>8</sub> y iC<sub>4</sub>H<sub>10</sub>, a través de la simulación en Cantera. Estos valores representan la proporción de cada especie en el total de productos de la combustión. Se

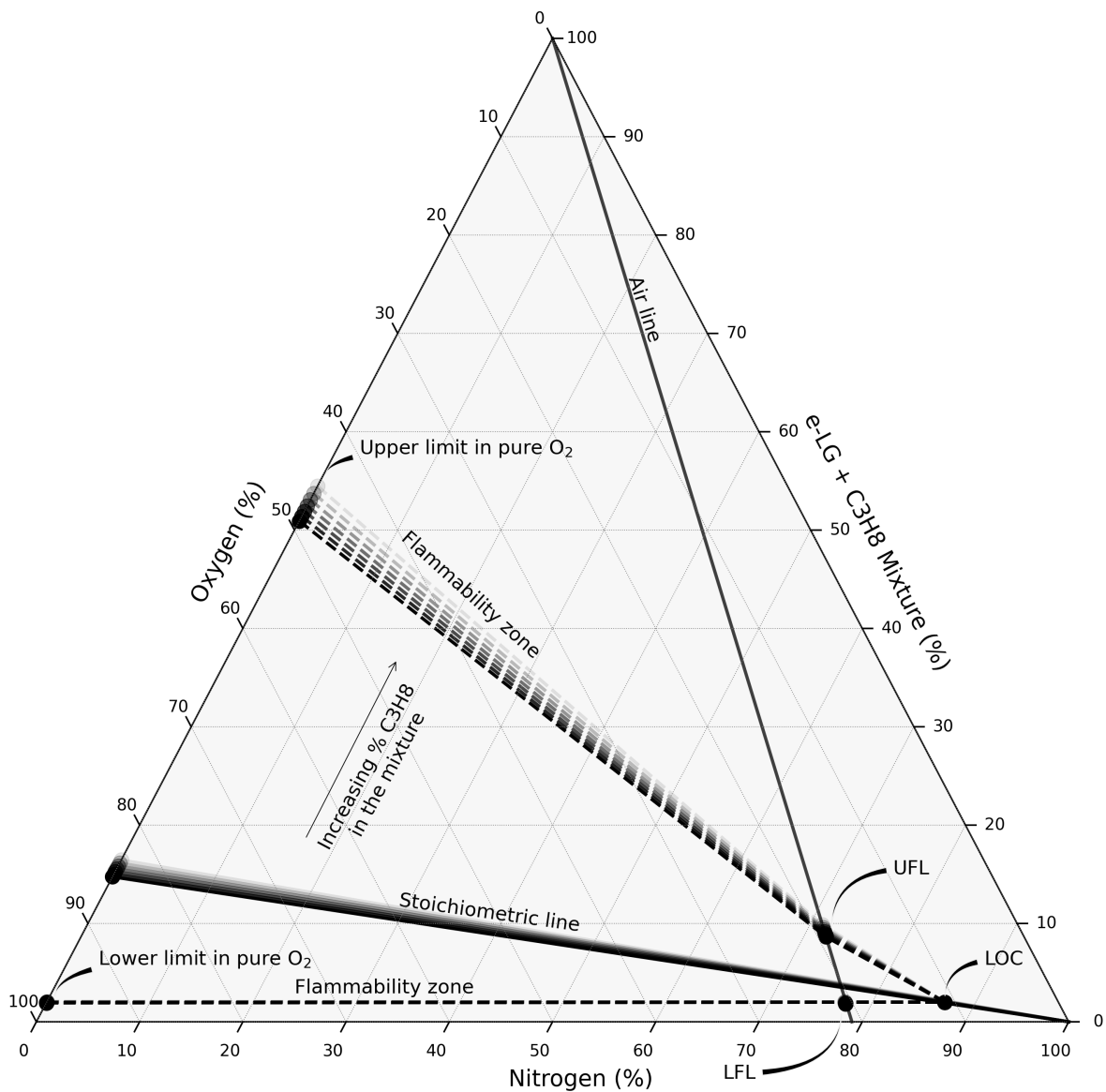


Figura 3.11: Diagrama ternario de e-GL mezclado volumétricamente con C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>.

destaca la predominancia del nitrógeno (el cual en su mayoría no reacciona y que no se encuentra como producto en el mecanismo JETSurf), dióxido de carbono y vapor de agua (los que son los productos de una combustión completa), así como la presencia de otras especies en proporciones más bajas. Este tipo de análisis es crucial para comprender los efectos ambientales y la eficiencia de los procesos de combustión.

Cuadro 3.8: Fracción másica ( $y_i$ ) de los productos de combustión para e-GL, C<sub>3</sub>H<sub>8</sub> e i-C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>.

Especie	e-GL	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	i-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>
N <sub>2</sub>	71,98 %	72,07 %	72,01 %
CO <sub>2</sub>	16,56 %	16,16 %	16,58 %
H <sub>2</sub> O	9,11 %	9,52 %	9,15 %
CO	1,26 %	1,21 %	1,23 %
O <sub>2</sub>	0,78 %	0,76 %	0,77 %
OH	0,23 %	0,13 %	0,13 %
H <sub>2</sub>	0,02 %	0,03 %	0,03 %
O	0,02 %	0,02 %	0,02 %
Otros	0,04 %	0,1 %	0,08 %

La Tabla 3.9 presenta los valores de los factores de emisión bruto de los tres gases estudiados. Se puede apreciar que los tres gases tienen valores similares de emisión de CO<sub>2</sub> por MWh de energía liberada en la combustión. Los valores obtenidos del menos al más contaminante se presentan a continuación: Propano, e-GL e iso-butano. Cabe recalcar que la **emisión neta del e-GL es cero**, ya que todo el CO<sub>2</sub> emitido, fue previamente absorbido, por lo que posee la emisión neta menor.

Cuadro 3.9: Factores de emisión brutos de los diferentes gases estudiados.

Gas	e-GL	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	iC <sub>4</sub> H <sub>10</sub>
MW (g/mol)	52	44,1	58,1
LHV (MWh/ton)	12,6	12,8	12,6
EF (tCO <sub>2</sub> /MWh)	0,239*	0,235	0,241

### 3.2.6. Comportamiento numérico del e-GL

Los resultados obtenidos en esta simulación numérica resaltan el potencial del e-GL como un combustible competitivo frente a los hidrocarburos convencionales, tanto en términos de propiedades termodinámicas como de intercambiabilidad. Las propiedades termodinámicas simuladas, incluyendo la entalpía negativa y las capacidades caloríficas, muestran que el e-GL podría integrarse eficazmente en aplicaciones como la generación de electricidad o calefacción. Sin embargo, su comportamiento en condiciones dinámicas, como las variaciones de presión y temperatura, requiere un análisis más detallado y validación experimental para garantizar su rendimiento en aplicaciones reales. Por otro lado, el índice de Wobbe intermedio del e-GL, comparado con el propano y el iso-butano, sugiere que podría ser una alternativa viable en sistemas diseñados para GLP, al tiempo que introduce un comportamiento energético único. Esto lo posiciona como un candidato prometedor para aplicaciones como microrredes urbanas, calefacción residencial y sistemas industriales que demandan eficiencia energética y sostenibilidad. No obstante, esta compatibilidad también plantea desafíos técnicos relacionados con el ajuste de sistemas existentes, especialmente en términos de diseño de quemadores y control de la combustión.

En términos de seguridad y límites de inflamabilidad, el e-GL presenta propiedades comparables a las de combustibles convencionales, lo que refuerza su potencial para aplicaciones prácticas. Sin embargo, su menor LOC en comparación con el propano podría requerir condiciones específicas de oxigenación en ciertas aplicaciones. Además, la construcción del Diagrama ternario revela cómo la composición afecta significativamente la inflamabilidad del e-GL, destacando la importancia del control preciso de las mezclas para evitar riesgos en entornos operativos. En particular, la expansión de los límites de inflamabilidad con mayores proporciones de propano refuerza la necesidad de manejar cuidadosamente las mezclas ricas en este componente.

Finalmente, los análisis de emisiones posicionan al e-GL como una alternativa sostenible frente a los combustibles fósiles. Aunque los factores de emisión brutos son similares a los del propano e iso-butano, el carácter de emisión neta cero del e-GL, derivado de su captura previa de CO<sub>2</sub>, lo convierte en una opción destacada para aplicaciones que buscan reducir su impacto ambiental. Este hallazgo, combinado con su competitividad energética y su adaptabilidad a sistemas existentes, posiciona al e-GL como un combustible clave para la transición hacia una matriz energética más sostenible, aunque se requiere mayor investigación para abordar los desafíos técnicos y garantizar su seguridad en aplicaciones específicas.

### **3.2.7. Potencial del e-GL como complemento al gas licuado de petróleo**

A partir de los resultados obtenidos en las simulaciones numéricas del e-GL, se pueden establecer las siguientes conclusiones parciales:

- Las propiedades termodinámicas simuladas, como la entalpía negativa y las capacidades caloríficas, confirman el potencial del e-GL como un combustible eficiente, comparable a los hidrocarburos convencionales. Estas propiedades destacan su viabilidad para aplicaciones energéticas como la generación de electricidad y calefacción.
- El índice de Wobbe del e-GL, intermedio entre el propano y el iso-butano, sugiere que este combustible podría integrarse en sistemas diseñados para GLP con adaptaciones mínimas, lo que refuerza su potencial como un combustible intercambiable en diversas aplicaciones.
- Los límites de inflamabilidad (LFL y UFL) y el LOC del e-GL son consistentes con los valores de combustibles convencionales, destacando su seguridad inherente en condiciones controladas. Sin embargo, su menor LOC en comparación con el propano podría

requerir ajustes en las condiciones de oxigenación en ciertas aplicaciones.

- La mezcla de e-GL con propano expande el rango de inflamabilidad a medida que aumenta la proporción de propano. Esto resalta la importancia de controlar cuidadosamente la composición de las mezclas para garantizar la seguridad en entornos operativos, especialmente en aplicaciones industriales.
- Los factores de emisión brutos del e-GL son comparables a los del propano y el isobutano. No obstante, el carácter de emisión neta cero del e-GL, derivado de la captura previa de CO<sub>2</sub>, posiciona a este combustible como una alternativa sostenible y alineada con los objetivos globales de reducción de emisiones.

En resumen, los resultados preliminares sugieren que el e-GL tiene el potencial de convertirse en un combustible clave para la transición energética, gracias a su eficiencia energética, sostenibilidad ambiental y adaptabilidad en sistemas existentes. Sin embargo, es necesario abordar ciertos desafíos técnicos y realizar validaciones experimentales para confirmar su desempeño en aplicaciones prácticas.

### **3.3. Resultados experimentales I: Caracterización e-GL vs propano HD5**

#### **3.3.1. Extinción y emisión de llama**

Para obtener el coeficiente de extinción de hollín y la emisión local de hollín, se realiza una operación de deconvolución espacial onion-peeling con regularización de Tikhonov de acuerdo con la metodología expuesta en [181, 182]. Figura 3.12 representa las mediciones en bruto de la extinción de la luz y la emisión de la llama, que se obtuvieron para cada

caso a  $\lambda = 810$  nm. Estos resultados abarcan la transmisividad del hollín (denotada como  $\tau$ ) y la emisión de llama integrada en la línea de visión (representada por  $P_y$ ). Figura 3.12a presenta los valores de  $\tau$ , que varían entre 0,92 y 1,00, lo que indica una clara diferencia en la capacidad de extinción de las partículas en las dos condiciones estudiadas. En el caso de e-GL (izquierda), se observa un mayor grado de atenuación, lo que puede ser indicativo de una elevada fracción volumétrica de hollín. Por el contrario, la región correspondiente a HD5 (derecha) muestra una menor extinción por partículas. Este comportamiento puede atribuirse a diferencias en la composición del combustible (presentada en Tabla 2.20) o en las condiciones de combustión, como la temperatura, que afectan a la generación de hollín en esta configuración. Figura 3.12b presenta el mapa de emisividad de la llama, denotado como  $P_y$ , medido en unidades físicas ( $\text{W}/\text{m}^3 \cdot \text{sr}$ ), para las configuraciones e-GL (izquierda) y HD5 (derecha). Este gráfico representa la distribución espacial de la energía radiada por las partículas de hollín dentro de la llama. Los valores de  $P_y$ , que oscilan entre  $0,5 \times 10^9 \text{ W}/\text{m}^3 \cdot \text{sr}$  y  $1,5 \times 10^9 \text{ W}/\text{m}^3 \cdot \text{sr}$ , indican que la emisión es más intensa en las regiones laterales de ambas llamas, lo que está asociado a la mayor concentración de partículas de hollín y a las zonas de mayor temperatura.

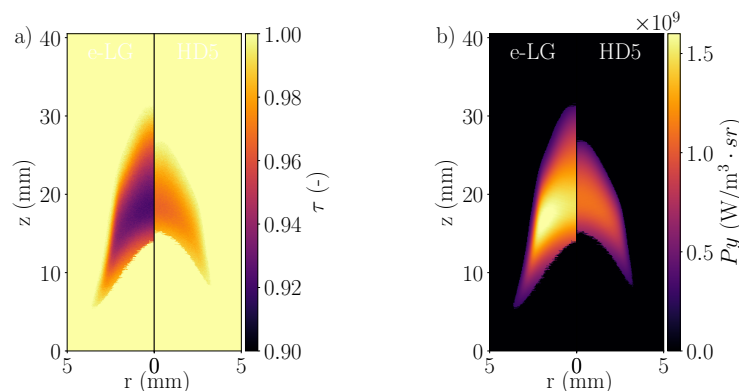


Figura 3.12: Imágenes de llama de (a) transmisividad ( $\tau$ ) y (b) emisividad ( $P_y$ ) para e-GL (izquierda) y HD5 (derecha) a 810 nm.

El coeficiente de extinción del hollín se obtuvo a 810 nm, donde puede despreciarse

la contribución de la dispersión, y se presenta en Figura 3.13a. Esta figura muestra el mismo comportamiento que  $\tau$ , mostrando valores más altos para el e-GL que para el HD5. Los valores máximos del coeficiente de extinción del hollín ( $\kappa_{ext}$ ) son 20 y 7  $\text{m}^{-1}$  para el e-GL y el HD5, respectivamente. Las regiones que presentan los valores más altos se encuentran en el interior del frente de reacción, a los lados de la llama, para los dos combustibles considerados. En lo sucesivo, esta zona se denominará ala de la llama. De forma similar, se obtuvo la emisión local de hollín para la misma longitud de onda y se presenta en Figura 3.13b. También muestra el mismo comportamiento que la  $\kappa_{ext,\lambda}$ . Este resultado era de esperar, dado que la zona con mayor concentración de hollín también presenta mayor extinción y emisión [183]. La temperatura obtenida con una pirometría monocolor ( $\lambda = 810 \text{ nm}$ ) y observada en Figura 3.13c, varía entre 1600 y 2050 K para ambos combustibles. En general, la temperatura y la distribución del hollín en el centro de la llama son aproximadamente uniformes, mientras que existen diferencias en las alas y el borde de la llama. La zona próxima a la zona de formación presenta los valores más bajos, mientras que la parte exterior de la llama alcanza los valores más altos, mostrando resultados similares a otros combustibles [183, 184, 182]. Se presenta una comparación radial detallada de e-GL y HD5 para  $\kappa_{ext}$ ,  $J$  y  $T$

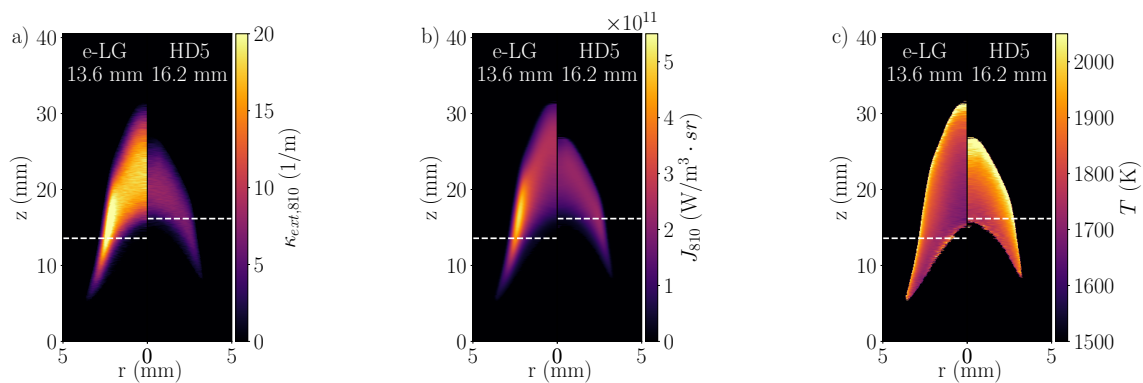


Figura 3.13: (a) Coeficiente de extinción del hollín ( $\kappa_{ext}$ ), (b) emisión local ( $J$ ) y (c) temperatura ( $T$ ) para e-GL (izquierda) y HD5 (derecha).

en Figura 3.14. La altura seleccionada se presenta en la figura superior de Figura 3.13a, b y c, y se determinó a la altura del valor máximo de  $f_s$  para cada combustible (véase

Figura 3.15b). Como se ilustra, las tres propiedades demuestran el comportamiento típico de los combustibles gaseosos a las alturas seleccionadas [147, 182, 185], que aumentan desde la línea central hasta el borde de la llama. Respecto a  $\kappa_{ext}$  y  $J$ , los valores alcanzados por el e-GL son mayores que los del HD5, aumentando la discrepancia hacia el borde de la llama.

### 3.3.2. Temperatura de llama

Los datos de temperatura indican una diferencia de aproximadamente 100 K entre el HD5 y el e-GL, alcanzando el HD5 una temperatura superior. Existe una zona en la que la temperatura de e-GL es mayor que la de HD5 (a  $r = 1$  mm), lo que puede atribuirse a una baja relación señal-ruido en la parte inferior interna de la llama. Además, la zona rellena representa el resultado del error de Monte Carlo para cada combustible, lo que indica que cerca del centro, el error se amplifica debido al procedimiento de deconvolución y a la menor señal en comparación con la región de máxima fracción de volumen de hollín. En cuanto a la temperatura, se observan valores de error típicos entre 10 y 30 K para ambos combustibles.

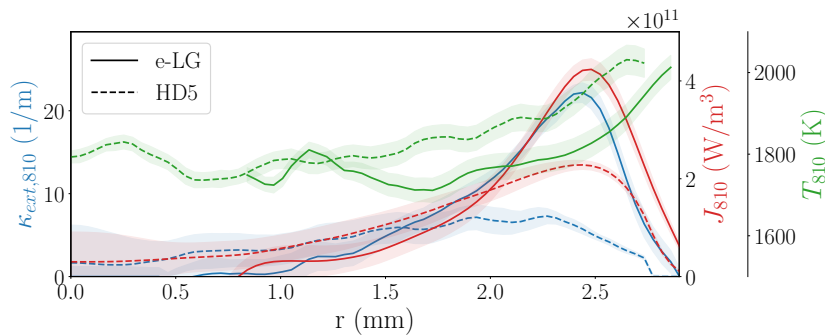


Figura 3.14: Perfiles radiales del coeficiente de extinción del hollín ( $\kappa_{ext}$ ), la emisión local ( $J$ ) y la temperatura ( $T$ ) obtenidos para ambos combustibles. La altura seleccionada se representa con una línea blanca en Figura 3.13.

### 3.3.3. Madurez y fracción en volumen de hollín

El índice de madurez del hollín ( $\beta$ ) y la fracción volumétrica de hollín ( $f_s$ ) se muestran en Figura 3.15. En Figura 3.15a la distribución bidimensional de  $\beta$  muestra una distribución similar para ambos combustibles, es decir, valores más altos cerca de la zona de formación y valores más bajos cerca del borde de la llama. A medida que  $\beta \rightarrow 0$ , se presenta un mayor porcentaje de compuestos grafiticos [147]. Esta distribución coincide con la observada en otros estudios [153, 183, 186, 187]. Existe una relación directa entre  $\beta$  y  $E_m$ , que permite calcular la  $f_s$  [147, 188] y se presenta en Figura 3.15b. Los valores obtenidos exhiben un rango de 1 a 6 ppm, observándose los valores más altos para el e-GL. En el caso del e-GL, se observa una distribución de  $f_s$  más típica, que exhibe un pico en la región alar. Por el contrario, HD5 presenta una distribución más uniforme de  $f_s$ . Figura 3.15c proporciona una ilustración más detallada del fenómeno mencionado. El pico observado en la fracción volumétrica de hollín para e-GL se localiza en las proximidades del ala, donde  $\kappa_{ext}$  es mayor. En el caso de HD5, se ha identificado un valor constante de  $1 \pm 0,25$  ppm en la altura del valor máximo de  $f_s$ . Los resultados indican que los valores más bajos de  $\beta$  ( $\rightarrow 0$ ) están asociados a valores máximos de  $f_s$ , situados en las proximidades del ala de la llama. Por el contrario, los valores más altos ( $\beta \gg 0$ ) se observan en las proximidades de la línea central de la llama, para ambos combustibles. Se observan valores de error típicos de 0,1 a 0,5 ppm, sobre todo en los casos en que se presentan valores elevados de  $f_s$ .

### 3.3.4. Radiación de la llama

Figura 3.16 presenta la divergencia del flujo radiativo ( $\nabla \cdot \dot{q}_r$ ), la radiación térmica ( $\dot{q}_{emi}$ ) y la fracción radiante ( $\chi_r$ ) emitida por la llama. En primer lugar, Figura 3.16a ilustra la divergencia del flujo radiativo de cada llama. Empleando la fracción volumétrica de hollín y la temperatura, se resolvió la ecuación de transferencia radiativa para obtener  $\nabla \cdot \dot{q}_r$ . El

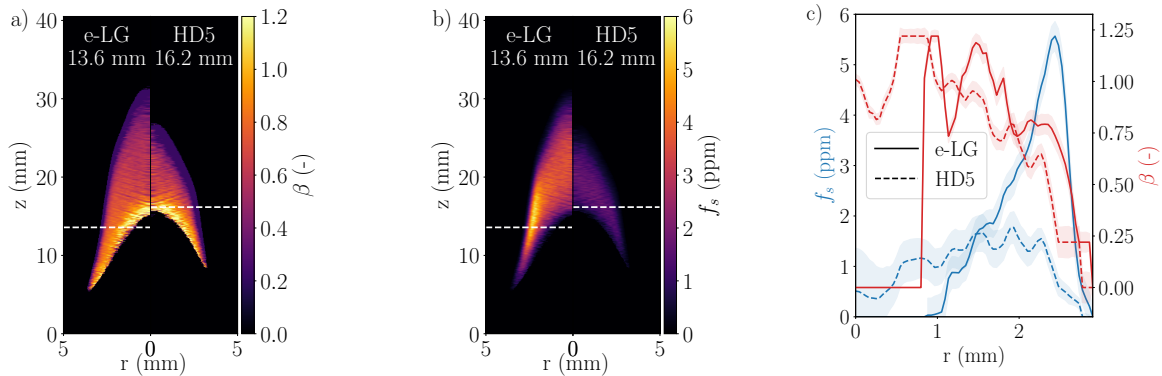


Figura 3.15: (a) Campos del índice de madurez del hollín ( $\beta$ ), (b) campos de la fracción de volumen del hollín ( $f_s$ ) y (c) perfiles para e-GL y HD5. La línea blanca representa la altura analizada en (c), que se indica en la parte superior de la figura (a) y (b).

El impacto de los distintos niveles de producción de hollín se cuantifica mediante este parámetro, manteniendo la distribución del campo, es decir, valores máximos en el ala de la llama y valores más bajos en el centro. Para e-GL y HD5, el valor máximo de la divergencia del flujo radiativo es de 40 y 15 MW/m<sup>3</sup>, respectivamente. Esto demuestra que el efecto de los valores de  $f_s$  sigue siendo consistente incluso cuando la temperatura de e-GL es inferior a la de HD5. Los perfiles radiales de  $\nabla \cdot \dot{q}_r$  se presentan en Figura 3.16b para ambos combustibles. Estos perfiles muestran valores más altos en el ala de la llama, que disminuyen hacia el eje de la llama. Los perfiles muestran una tendencia comparable en cuanto a los valores de  $f_s$  (véase Figura 3.15c), observándose una forma más pronunciada para e-GL y un perfil plano para HD5. Por otro lado, la radiación térmica emitida por la llama se presenta en Figura 3.16c. Los valores de radiación térmica se obtuvieron mediante un cálculo del factor de visión, cuyos detalles se pueden encontrar en el Material Suplementario. Dado que el radiómetro capta la totalidad de la radiación emitida por la llama dentro del rango espectral de 0,2 a 5,5  $\mu\text{m}$ , es imprescindible determinar la parte de esta captación que es atribuible al hollín. Para ello, la fracción de la radiación térmica ( $\dot{q}_s = 2\pi \int_0^\infty \int_0^\infty (\nabla \cdot \dot{q}_r) r dz dr$ ) y la fracción radiante emitida ( $\chi_s = \dot{q}_s/\text{HRR}$ ) por el hollín se calcularon a partir de  $\nabla \cdot \dot{q}_r$ . Los resultados indican

que la llama producida por e-GL exhibió un mayor nivel de radiación en comparación con la llama generada por HD5, como lo demuestran tanto  $\dot{q}_{emi}$  como  $\dot{q}_s$ . Adicionalmente, se observa que la contribución a la radiación emitida por el hollín ( $\dot{q}_s$ ) y la fracción radiante de hollín ( $\chi_s$ ) es mayor para el e-GL que para el HD5, resultado que concuerda con los resultados  $f_s$  y  $\nabla \cdot \dot{q}_r$  obtenidos. La radiación emitida por la llama ( $\dot{q}_{emi}$ ) generada a partir de e-GL y HD5 ha resultado ser de 13 W y 9 W, respectivamente, mientras que la radiación atribuible al hollín ( $\dot{q}_s$ ) se ha determinado que es de 5,4 y 1,7 W, respectivamente. Además, los valores de la fracción radiante para cada combustible indican que el e-GL y el HD5 liberan aproximadamente el 15 % y el 10 %, respectivamente, de su energía a través de la radiación, lo que concuerda con los resultados de Escudero et al. [182] para el propano y el butano a  $OI = 21$  %.  $\chi_s$  se encontró entre 5,2 % para e-GL y 1,6 % para HD5, respectivamente.

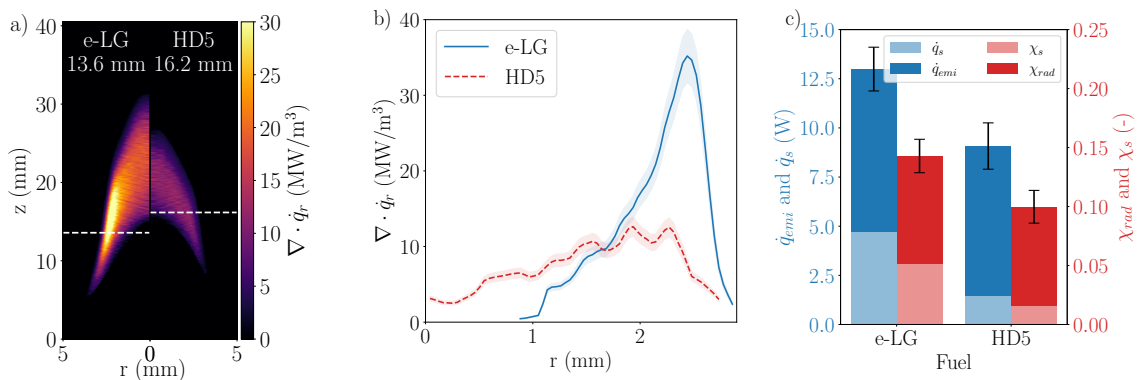


Figura 3.16: Divergencia del flujo radiativo ( $\nabla \cdot \dot{q}_r$ ) (a) campos y (b) perfiles, y (c) radiación térmica emitida ( $q_{emi}$  y  $\chi_r$ ) para e-GL y HD5. La línea blanca en (a) representa la altura analizada en (b) (indicada en la parte superior de la figura).

### 3.3.5. Propiedades generales de la llama: altura, carga de hollín generado y estabilidad

Figura 3.17 presenta la llama visible, indicando el  $h_f$  del caso, la fracción volumétrica de hollín integrada radialmente y la información de estabilidad de las llamas. En primer lugar, se presenta un campo visible de cada llama en Figura 3.17a. Cada campo se normaliza a su propio valor máximo para la aplicación del proceso de segmentación para obtener la altura de la llama  $h_f$ . Los valores de altura de la llama obtenidos para e-GL y HD5 son 33,1 y 29,1 mm, respectivamente. Estos valores son necesarios para calcular la radiación térmica y la fracción radiante emitida por la llama ( $\chi_r$ , ver Ecuaciones (2.40) y (2.41)). La  $f_s$  integrada radialmente, definida como  $B_s(z) = 2\pi \int_0^\infty f_s r dr$  se muestra en Figura 3.17b. La ubicación en la que se produce el pico de  $B_s(z)$  representa la posición en la que aproximadamente la formación de hollín y las tasas de oxidación se equilibran entre sí. Es importante señalar que ambas llamas estudiadas son de punta cerrada, consumiendo todas las partículas de hollín producidas dentro de la zona de la llama, no siendo liberadas de la llama al medio ambiente. En esta figura también se incluye, como línea vertical, la posición para el valor máximo de la fracción en volumen de hollín, mostrado en Figura 3.15. Estos se obtuvieron a diferentes alturas para cada combustible, con un pico a menor altura para el e-GL. Sin embargo, el pico de la fracción volumétrica de hollín integrada radialmente se produce a la misma altura para ambas llamas. Aunque el comportamiento local de la producción de hollín cambia, afectando a los picos locales, el comportamiento global de ambos combustibles produce un comportamiento de producción similar. La carga total de hollín ( $\Gamma_s = \int_0^\infty B_s dz$ ) resultó ser de 2507 y 1412 ppm·mm<sup>3</sup> para e-GL y HD5, respectivamente, lo que pone de manifiesto la mayor propensión al hollín de e-GL en condiciones iso-HRR. La discrepancia entre los valores integrales  $B_s$  y  $\Gamma_s$  puede atribuirse a la cantidad de combustible inyectado en la llama. Es importante señalar que, aunque la tasa de liberación de calor se mantuvo constante para ambos casos estudiados, la tasa de flujo de masa total se fijó más alta para e-

GL. Este efecto también puede observarse con la cantidad total de hollín por unidad de masa,  $\Gamma_s/\dot{m} = 0,72 \times 10^9$  (HD5) y  $1,25 \times 10^9$  (e-GL) ppm·mm<sup>3</sup>s/kg, donde el e-GL tiene un 57,6% más de producción de hollín por kg/s inyectado que el HD5. También se presenta la eficiencia de conversión de carbono en hollín (CtS), que representa la parte de carbono convertida en hollín a cada altura. Este valor se calcula como  $CtS = \dot{m}_{soot}/\dot{m}_{carbono}$ , donde  $\dot{m}_{soot}(z) = 2\pi \int_0^\infty \rho_s \sqrt{2g(\frac{T}{T_{infly}} - 1)z + (\frac{Q}{A})^2} f_s r dr$  es el flujo másico de hollín para cada altura,  $\rho_s = 1800$  kg/m<sup>3</sup> [189] es la densidad de hollín que se supone constante (este valor puede cambiar con la maduración de la partícula de hollín),  $g$  es la constante de aceleración de la gravedad,  $Q$  es el caudal de combustible,  $A$  es el área de la sección transversal del tubo de combustible, y  $T_\infty = 293$  K es la temperatura ambiente. Para calcular este valor, se utilizó la temperatura media de cada combustible (Véase Figura 3.18a), y se supuso que la aceleración axial por empuje viene dada por  $g(\frac{T}{T_\infty} - 1)$  [182, 190] y que las partículas de hollín siguen la velocidad del fluido. La componente radial de la velocidad se desprecia. Figura 3.17b muestra que la eficiencia de conversión del hollín a partir del carbono presente es mayor para el e-GL que para el HD5, 9,5% frente a 3,8% en el pico. Además, se observa que el pico se produce en la misma posición que  $B_s$ , lo que es indicativo de un equilibrio entre los mecanismos de formación y oxidación del hollín. Por último, se cuantificó la estabilidad de la llama dirigiendo un fotodiodo hacia la punta de ambas llamas. Figura 3.17c representa la respuesta de la señal de cada combustible en voltios (V) durante 100 segundos a 250 Hz. Puede observarse que ambas llamas presentan ligeras perturbaciones en torno a un valor medio constante a lo largo del tiempo. La estabilidad de la llama se determinó aplicando la transformada rápida de Fourier (FFT) a las señales de emisión detectadas, siguiendo el procedimiento descrito en [191]. Para ambas llamas, la frecuencia principal captada fue de 0 Hz, lo que indica estabilidad en la emisión de la llama.

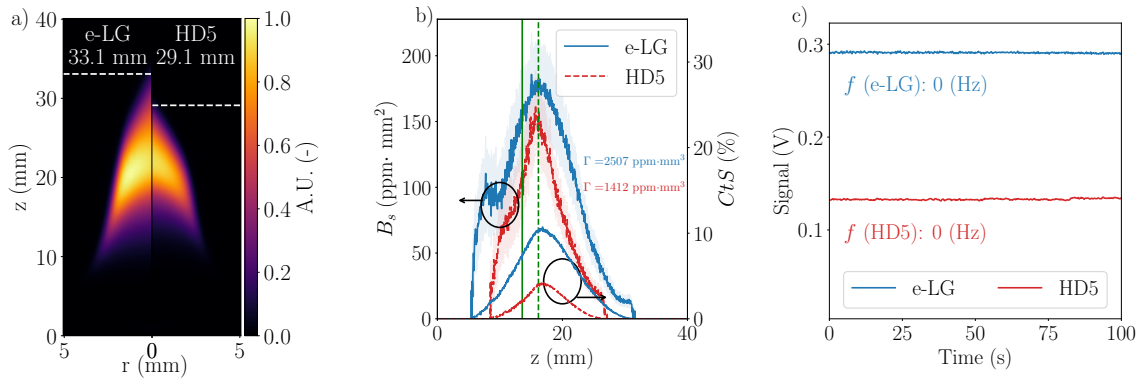


Figura 3.17: (a) Campos visibles de la llama ( $h_f$ ), (b) fracción volumétrica de hollín integrada radialmente ( $B_s$ ) y eficiencia de conversión de carbono en hollín ( $CtS$ ), y (c) emisión de llama de las llamas e-GL y HD5 medida en la punta de la llama mediante un fotodiodo de silicio. La línea blanca representa la altura de la llama en (a), y la línea verde en (b) representa la altura estudiada en Figura 3.13, Figura 3.15 y Figura 3.16. La frecuencia predominante obtenida por FFT se indica debajo de cada gráfico en (c).

### 3.3.6. Análisis global de propiedades

Para facilitar una evaluación exhaustiva de los datos de temperatura y fracción volumétrica de hollín de cada combustible, se presenta una distribución en forma de diagrama de violín en Figura 3.18. Los diagramas de violín integran las características de los gráficos de caja con estimaciones de densidad de núcleo, proporcionando así una visión detallada de la distribución de los datos. El Figura 3.18a presenta un gráfico de violín comparando la distribución de temperatura (en K) para e-GL y HD5. La distribución global muestra una discrepancia entre los valores mínimos y máximos alcanzados para cada combustible, lo que indica que, en ambos casos, el HD5 alcanza una temperatura global superior a la del e-GL. Las distribuciones de temperatura de los combustibles e-GL y HD5 mostraron que el e-GL tiene una temperatura mediana de aproximadamente 1750 K, mientras que el HD5 tiene una mediana ligeramente superior, de unos 1850 K. El HD5 mantiene temperaturas más

elevadas que el e-GL. Estas diferencias ponen de manifiesto la posibilidad de variaciones en el rendimiento de la combustión. En cambio, Figura 3.18b compara la fracción de volumen de hollín para e-GL y HD5. Los valores de  $f_s$  inferiores a 0,5 ppm no se tuvieron en cuenta en el análisis. La distribución de las fracciones de volumen de hollín indica que e-GL produce niveles de hollín notablemente elevados en comparación con HD5. La distribución de la concentración de volumen de hollín para los combustibles e-GL y HD5 muestra discrepancias notables. La mediana del e-GL es de aproximadamente 3 ppm, lo que indica unos niveles medios de hollín elevados y una mayor variabilidad en comparación con el HD5, cuya mediana es de aproximadamente 1,5 ppm con una dispersión más estrecha. En el caso de e-GL, la concentración de hollín abarca aproximadamente 6 ppm, con la mayor densidad de valores situada en torno a 2-4 ppm. Por el contrario, HD5 presenta un nivel de producción de hollín notablemente concentrado y reducido, con la mayoría de los valores situados entre 1 y 2 ppm y un intervalo más estrecho que se extiende hasta aproximadamente 1,5 ppm. Por último, Figura 3.18c representa la distribución de la divergencia del flujo radiativo para los dos combustibles. Este gráfico demuestra que el e-GL presenta una distribución notablemente más amplia con valores máximos elevados, lo que indica una gama y una intensidad más amplias del flujo de calor radiante en comparación con el HD5. El valor medio del flujo de calor radiante del e-GL también es mayor, lo que indica que emite una mayor cantidad de radiación durante la combustión. Esto podría contribuir a las diferencias en la eficiencia térmica y las características de combustión. Por el contrario, HD5 tiene una distribución más estrecha con valores máximos y medianos más bajos, lo que indica una emisión de calor radiante más consistente pero menor. Estas variaciones en la divergencia del flujo radiativo implican que el e-GL podría generar un calentamiento localizado más intenso. Estos resultados sugieren que el e-GL da lugar a una tasa de formación de hollín considerablemente mayor que el HD5, lo que podría tener implicaciones significativas para la eficiencia de la combustión, las emisiones y las estrategias de control de la contaminación, dependiendo de la aplicación prevista del combustible.

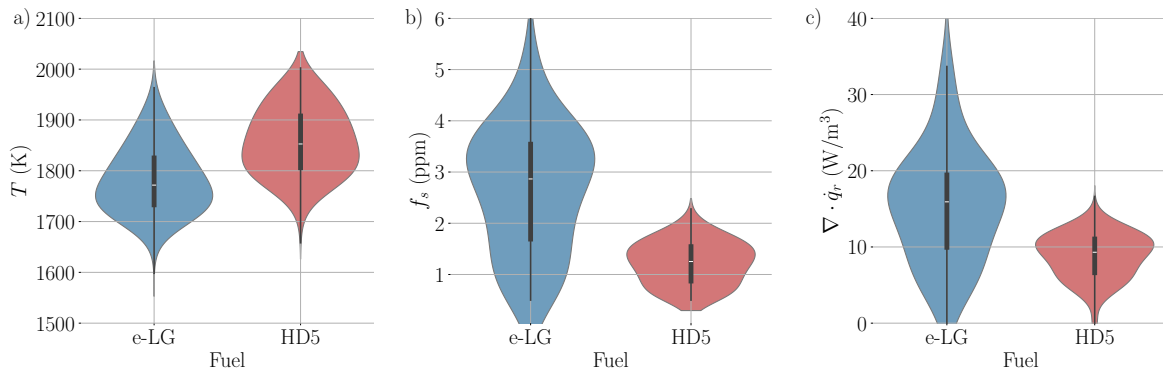


Figura 3.18: Distribución global (a) de la temperatura ( $T$ ), (b) de la fracción volumétrica de hollín ( $f_s$ ) y (c) de la divergencia del flujo radiativo ( $\nabla \cdot \dot{q}_r$ ) para e-GL y HD5.

### 3.3.7. Comparación entre e-GL y propano HD5

Se realizó un estudio experimental para caracterizar la llama de difusión laminar de e-GL, un combustible sintético renovable, en comparación con un combustible convencional como el propano HD5. Los principales resultados de este estudio indican que el e-GL, en comparación con el HD5, alcanza temperaturas comparables, genera mayores cantidades de hollín, presenta valores similares de índice de madurez y muestra una distribución espacial comparable de estas propiedades. Además, presenta una mayor altura de llama y una estabilidad de llama similar, Aunque la producción y la combustión de este combustible sintético son neutras en carbono en un 100 %, la producción bruta de partículas de hollín del combustible son superiores a las del HD5 convencional. Por el contrario, este estudio demuestra que las técnicas no intrusivas empleadas para medir las propiedades del hollín y la combustión del combustible siguen siendo aplicables a los combustibles sintéticos de nueva generación. El avance en la comprensión de la formación de hollín y las propiedades de combustión en las llamas e-GL y HD5 se ve respaldado por las principales conclusiones de este estudio. Además, proporcionan un amplio conjunto de datos para la validación de los modelos de producción de hollín.

---

### **3.4. Resultados experimentales II: Efecto del cambio del índice de oxígeno (OI) en la combustión del e-GL para diferentes mezclas con propano HD5**

#### **3.4.1. Análisis de alternativas: mezclas de e-GL con propano a distintos OI**

Debido a las estrictas regulaciones internacionales que limitan la comercialización directa del e-GL en los distintos mercados, se plantea como alternativa la mezcla de este combustible renovable con propano convencional, con el objetivo de mejorar su aceptación comercial y su viabilidad operativa. Estas mezclas permiten aprovechar los beneficios ambientales y energéticos del e-GL, mientras se mantienen características de combustión similares a las del propano puro, facilitando su integración en infraestructuras ya existentes. Para validar esta estrategia, resulta indispensable llevar a cabo un análisis experimental detallado de las condiciones de operación y los productos generados durante la combustión de estas mezclas. Esto incluye el estudio de parámetros como la generación de hollín, la radiación térmica, la estabilidad de la llama y la eficiencia térmica. Dicho análisis no solo permite entender las propiedades físicas y químicas de la mezcla durante la combustión, sino también identificar los posibles desafíos asociados, como el aumento de las emisiones de partículas o la necesidad de ajustar las condiciones operativas en función de las proporciones de los combustibles. En un contexto industrial, donde la eficiencia energética es clave, el estudio de la oxicomustión de estas mezclas adquiere especial relevancia. Este enfoque implica el uso de oxidantes enriquecidos con oxígeno, en lugar de aire atmosférico, con el fin de aumentar el rendimiento térmico de sistemas como calderas y hornos industriales. La oxicomustión no solo permite mejorar la transferencia de calor gracias a una mayor temperatura de llama,

sino que también facilita la captura de carbono al concentrar el  $\text{CO}_2$  en los gases de combustión, lo que contribuye a los objetivos globales de sostenibilidad. El análisis experimental bajo condiciones de oxicomcombustión es crucial para evaluar el impacto del índice de oxígeno en la eficiencia térmica y en las características de la combustión, especialmente en términos de producción de hollín y estabilidad de la llama. Además, este enfoque aborda la creciente demanda de tecnologías que combinen alta eficiencia energética con bajas emisiones contaminantes, posicionando las mezclas de e-GL y propano como una solución prometedora para aplicaciones industriales sostenibles. En definitiva, este estudio no solo busca superar las barreras regulatorias para el uso del e-GL, sino también optimizar su desempeño en entornos reales, estableciendo las bases para su integración como un componente clave en la transición energética hacia fuentes de energía más limpias y sostenibles.

En la Figura 3.19 se presentan los campos de transmisividad obtenida para las mezclas e-GL propano a distintos índices de oxígeno, capturados a 810 nm. La transmisividad de la llama, que mide la capacidad para permitir el paso de la luz, disminuye a medida que aumenta la proporción de e-GL en la mezcla. Esto refleja una mayor densidad óptica debido a la formación de partículas de hollín, característica del e-GL por su composición química. Este efecto es particularmente notable a un índice de oxígeno del 33 %, donde la combustión más intensa fomenta una mayor producción de hollín, reduciendo aún más la transmisividad y haciendo la llama más opaca. Este comportamiento no solo afecta la caracterización óptica de la llama, sino también su aplicación práctica, como en la eficiencia de dispositivos de monitoreo óptico y la transferencia de calor en sistemas industriales. Además, subraya la necesidad de controlar las emisiones de partículas para evitar impactos ambientales negativos. En resumen, la disminución de la transmisividad refleja el balance entre las propiedades ópticas del e-GL y su comportamiento en combustión, especialmente en condiciones enriquecidas con oxígeno.

La emisividad de hollín, mostrada en la Figura 3.20 para  $\lambda = 810$  nm, mide la can-

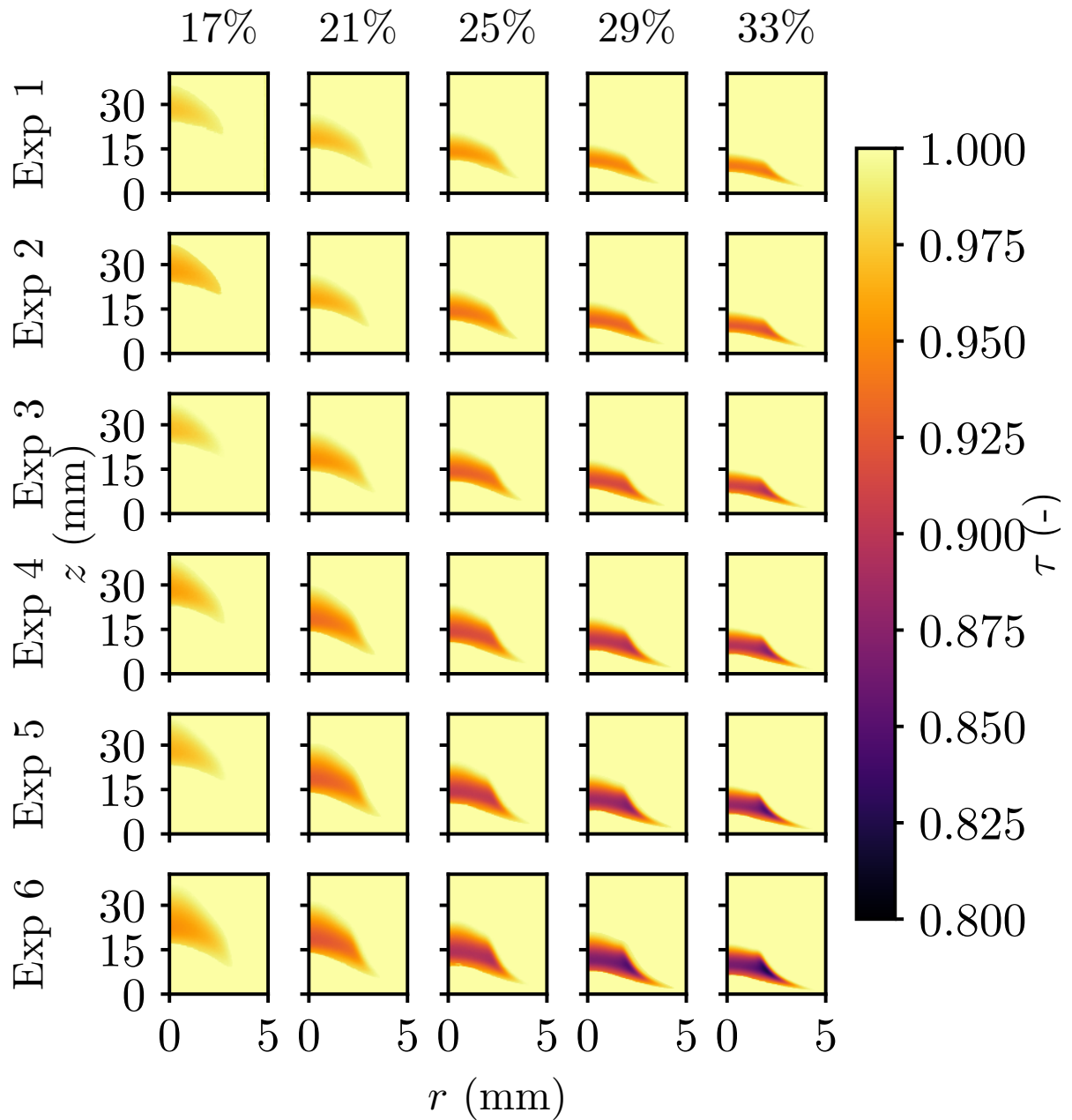


Figura 3.19: Imágenes de transmisividad de la llama a 810 nm ( $\tau$ ) para los casos estudiados.

tividad de energía radiada por las partículas de hollín en la llama. Este parámetro aumenta significativamente conforme se incrementa la proporción de e-GL en la mezcla. Esto se debe a la composición del e-GL, que presenta una mayor tendencia a generar partículas de hollín durante la combustión. Este efecto es especialmente pronunciado a índices de oxígeno

elevados, donde la combustión más intensa amplifica la producción de hollín y su capacidad radiativa. En la mezcla pura de e-GL (Exp 6) bajo un índice de oxígeno del 33 %, la intensidad de la radiación es aproximadamente el doble que la observada en el propano puro (Exp 1). Esto pone de manifiesto cómo el enriquecimiento con oxígeno no solo mejora la eficiencia de combustión, sino que también potencia las propiedades radiativas de la llama. Este comportamiento tiene implicaciones importantes en aplicaciones industriales, como la transferencia de calor en calderas y hornos, donde una mayor radiación puede traducirse en un mejor rendimiento térmico. Además, destaca la necesidad de controlar la emisión de hollín para minimizar su impacto ambiental, especialmente en escenarios donde el e-GL es el combustible predominante.

La Figura 3.21 presenta los campos del coeficiente de extinción del hollín ( $\kappa_{\text{ext}}$ ), medido a una longitud de onda de 810 nm, para diferentes mezclas de propano HD5 y e-GL bajo cinco índices de oxígeno (17 %, 21 %, 25 %, 29 % y 33 %). Este coeficiente óptico, que cuantifica la capacidad del hollín para atenuar la luz por absorción y dispersión, es fundamental para caracterizar las propiedades radiativas de las llamas. Los resultados muestran un incremento progresivo en los valores de  $\kappa_{\text{ext}}$  a medida que aumenta la proporción de e-GL en la mezcla, desde Exp 1 (100 % propano) hasta Exp 6 (100 % e-GL). Este aumento se debe a la mayor propensión del e-GL a generar hollín, atribuida a su composición química, que incluye una mayor proporción de isobutano y compuestos pesados en comparación con el propano HD5. Estos compuestos favorecen la formación de partículas de hollín durante la combustión, incrementando la densidad óptica de la llama. Adicionalmente, el efecto del enriquecimiento en oxígeno es evidente. Bajo condiciones de oxígeno elevado (29 % y 33 %), las reacciones de combustión son más intensas, lo que promueve aún más la formación de hollín y resulta en mayores valores de  $\kappa_{\text{ext}}$ . Esto refleja una interacción significativa entre la proporción de e-GL y el índice de oxígeno en la combustión, destacando cómo la disponibilidad de oxígeno intensifica la producción de partículas radiativas. Especialmente, los valores

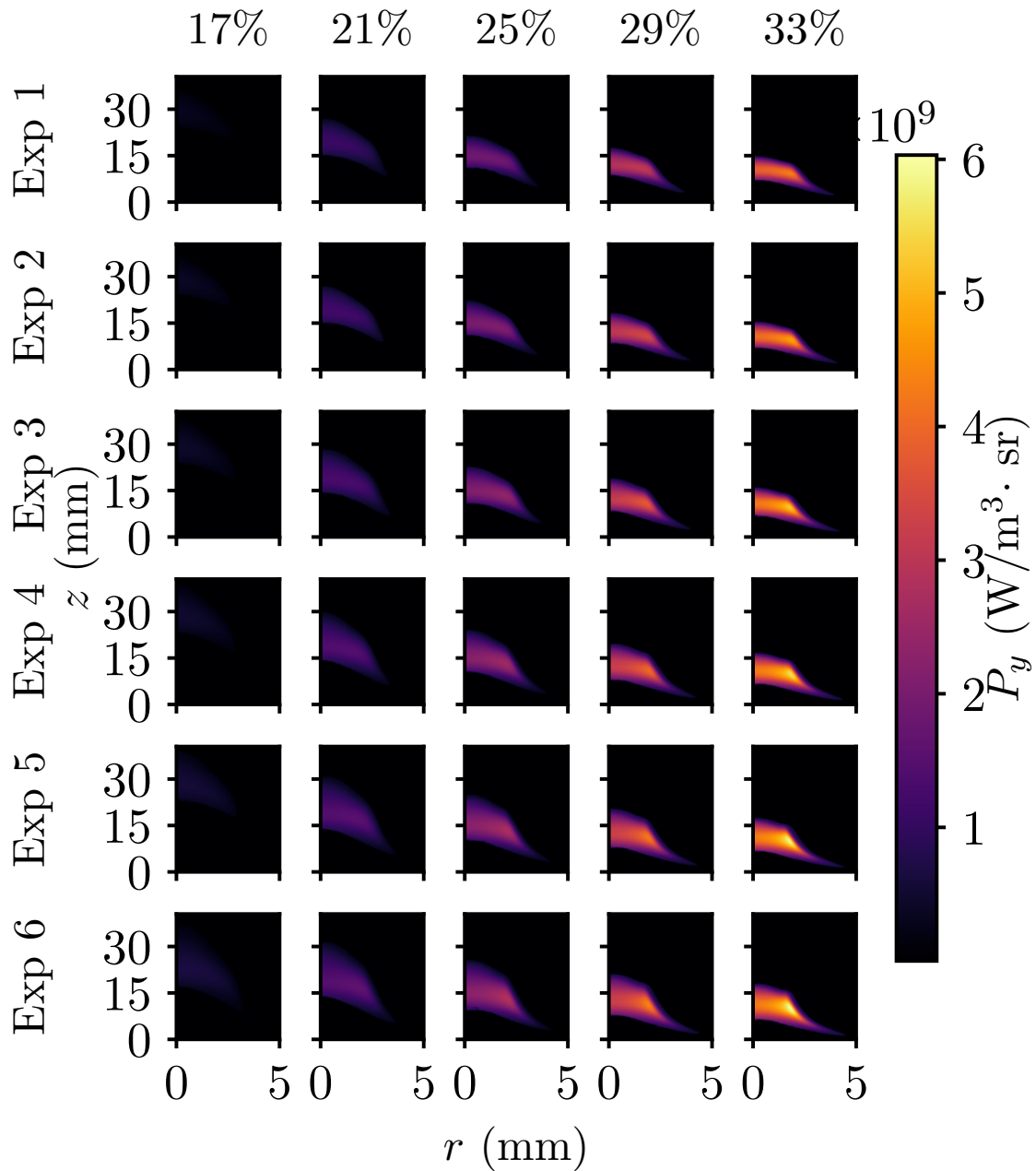


Figura 3.20: Imágenes de emisividad de la llama a 810 nm ( $P_y$ ) para los casos estudiados.

máximos de  $\kappa_{\text{ext}}$  se concentran en las regiones periféricas de la llama, conocidas como las “alas”, donde la concentración de hollín y la temperatura alcanzan sus picos. Estas zonas son características de las llamas laminares de difusión y están asociadas con un alto grado de formación y acumulación de hollín. En contraste, el centro de la llama muestra menores

valores de  $\kappa_{ext}$ , ya que la oxidación de hollín es más efectiva en esta región debido a la alta temperatura y disponibilidad de oxidante. La Figura 3.22 muestra los campos de emisión

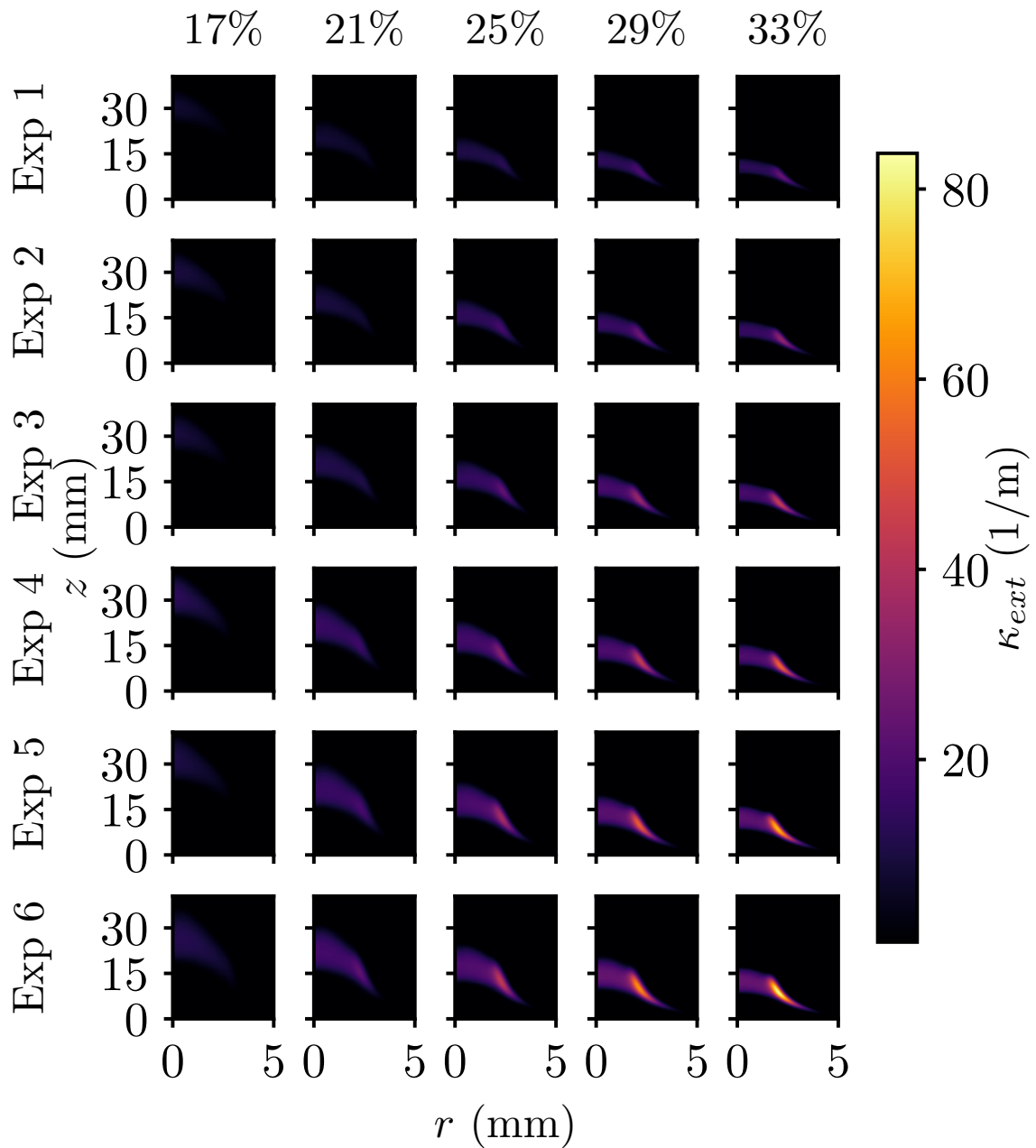


Figura 3.21: Imágenes del coeficiente de extinción de la llama a 810 nm ( $\kappa_{ext}$ ) para los casos estudiados.

local de hollín ( $J$ ), medidos en unidades de  $\text{W}/\text{m}^3 \cdot \text{sr}$ , para diversas mezclas de propano HD5

y e-GL bajo cinco índices de oxígeno (17 %, 21 %, 25 %, 29 % y 33 %). Este parámetro refleja la intensidad de radiación emitida por las partículas de hollín, siendo un indicador clave del comportamiento radiativo de las llamas. Se observa que el valor de  $J$  aumenta significativamente con el incremento de la proporción de e-GL en la mezcla, pasando de valores bajos en Exp 1 (100 % propano) a valores máximos en Exp 6 (100 % e-GL). Este comportamiento está directamente relacionado con la mayor tendencia del e-GL a producir hollín durante la combustión, lo que incrementa la intensidad de radiación emitida. Además, este efecto se intensifica en condiciones de mayor índice de oxígeno (29 % y 33 %), donde la combustión más eficiente genera mayores concentraciones de partículas de hollín altamente radiativas. Especialmente, los valores máximos de  $J$  se encuentran en las regiones periféricas de la llama (las “alas”), donde la acumulación de hollín y las altas temperaturas maximizan la emisión radiativa. En contraste, las regiones centrales de la llama presentan valores más bajos debido a la menor concentración de hollín y a la oxidación más eficiente de las partículas. La Figura 3.23 muestra los campos de temperatura ( $T$ ), expresados en Kelvin, junto con los valores medios de temperatura indicados en cada caso, para diferentes mezclas de propano HD5 y e-GL bajo cinco índices de oxígeno (17 %, 21 %, 25 %, 29 % y 33 %). Estas distribuciones térmicas son fundamentales para analizar el comportamiento de las llamas y las implicancias de la composición del combustible y las condiciones del oxidante. En términos generales, las temperaturas medias aumentan con el índice de oxígeno, ya que un mayor contenido de oxígeno en el oxidante favorece una combustión más eficiente y completa. Sin embargo, al comparar las mezclas, las llamas con mayor proporción de e-GL (Exp 6) muestran temperaturas medias y máximas ligeramente inferiores en comparación con las de propano puro (Exp 1). Esto se debe a que el e-GL genera más hollín, que absorbe y redistribuye parte de la energía térmica en forma de radiación, reduciendo así las temperaturas locales. Especialmente, los valores más altos de temperatura se concentran en las regiones centrales de la llama, mientras que en las regiones periféricas se observa una disminución progresiva, como es característico en llamas de difusión. Este comportamiento es consistente en todas

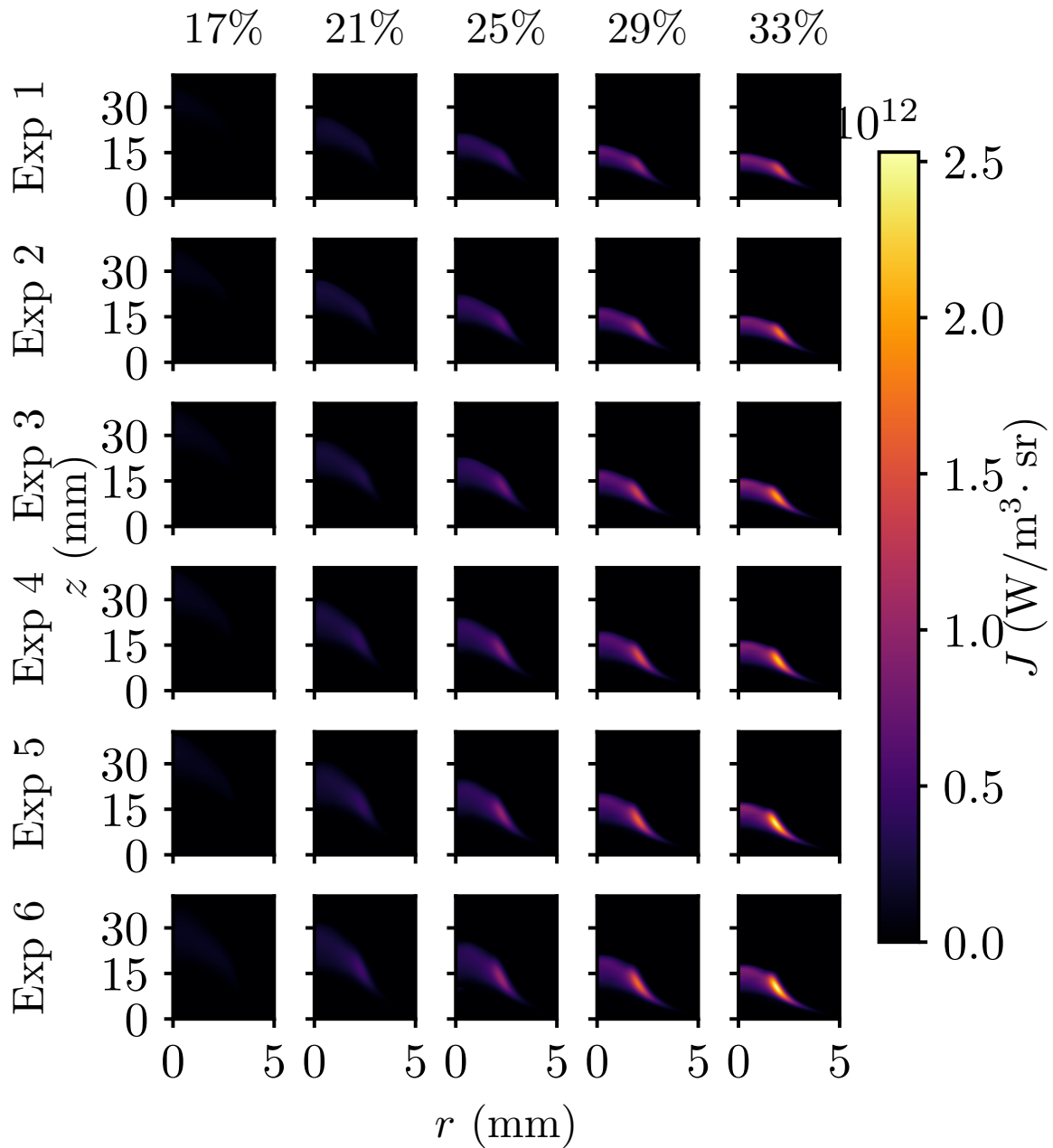


Figura 3.22: Imágenes de la emisión local del hollín en la llama a 810 nm ( $J$ ) para los casos estudiados.

las mezclas y niveles de oxígeno, aunque las diferencias entre las temperaturas centrales y periféricas se acentúan con índices de oxígeno más altos (29% y 33%), donde las reacciones de combustión son más intensas. Al observar los valores medios, en las llamas de propano

puro (Exp 1) las temperaturas alcanzan un máximo promedio de 1970 K al 33 % de oxígeno, mientras que en el caso del e-GL puro (Exp 6) el promedio máximo es de 1887 K bajo las mismas condiciones. Este patrón destaca la influencia del hollín generado por el e-GL, que no solo afecta las propiedades radiativas, sino también la distribución térmica general de la llama.

La Figura 3.24 presenta los campos del coeficiente de madurez del hollín ( $\beta$ ), junto con sus valores medios, para diferentes mezclas de propano HD5 y e-GL bajo cinco índices de oxígeno (17 %, 21 %, 25 %, 29 % y 33 %). Este coeficiente es un indicador clave de la evolución estructural del hollín, relacionado con su nivel de grafitización y propiedades ópticas y radiativas. En general, se observa que los valores de  $\beta$  son mayores en las llamas de propano puro (Exp 1) en comparación con las mezclas con mayor proporción de e-GL (Exp 6). Esto indica que el hollín generado en llamas con e-GL es menos maduro, con estructuras más amorfas y menores niveles de grafitización. Este comportamiento puede atribuirse a la composición química del e-GL, que favorece la formación de hollín en etapas tempranas pero limita su evolución estructural debido a una mayor formación de partículas y a la redistribución del calor en forma de radiación. Los valores medios de  $\beta$  también muestran una variación con el índice de oxígeno. En general, las llamas con mayor proporción de oxígeno (29 % y 33 %) presentan una disminución en  $\beta$ , lo que refleja un mayor grado de oxidación del hollín debido a la disponibilidad de oxígeno. Sin embargo, en mezclas con alta proporción de e-GL (Exp 6), esta disminución es menos pronunciada, lo que sugiere que la elevada generación de hollín supera la capacidad del oxígeno para oxidarlo completamente. Especialmente, los valores máximos de  $\beta$  tienden a localizarse en las regiones periféricas de la llama, donde la concentración de hollín es mayor y las temperaturas favorecen su maduración. En las regiones centrales,  $\beta$  presenta valores más bajos debido a una mayor oxidación del hollín en estas zonas más calientes y ricas en oxidante.

La Figura 3.25 presenta los campos de fracción en volumen de hollín ( $f_s$ ), expresados

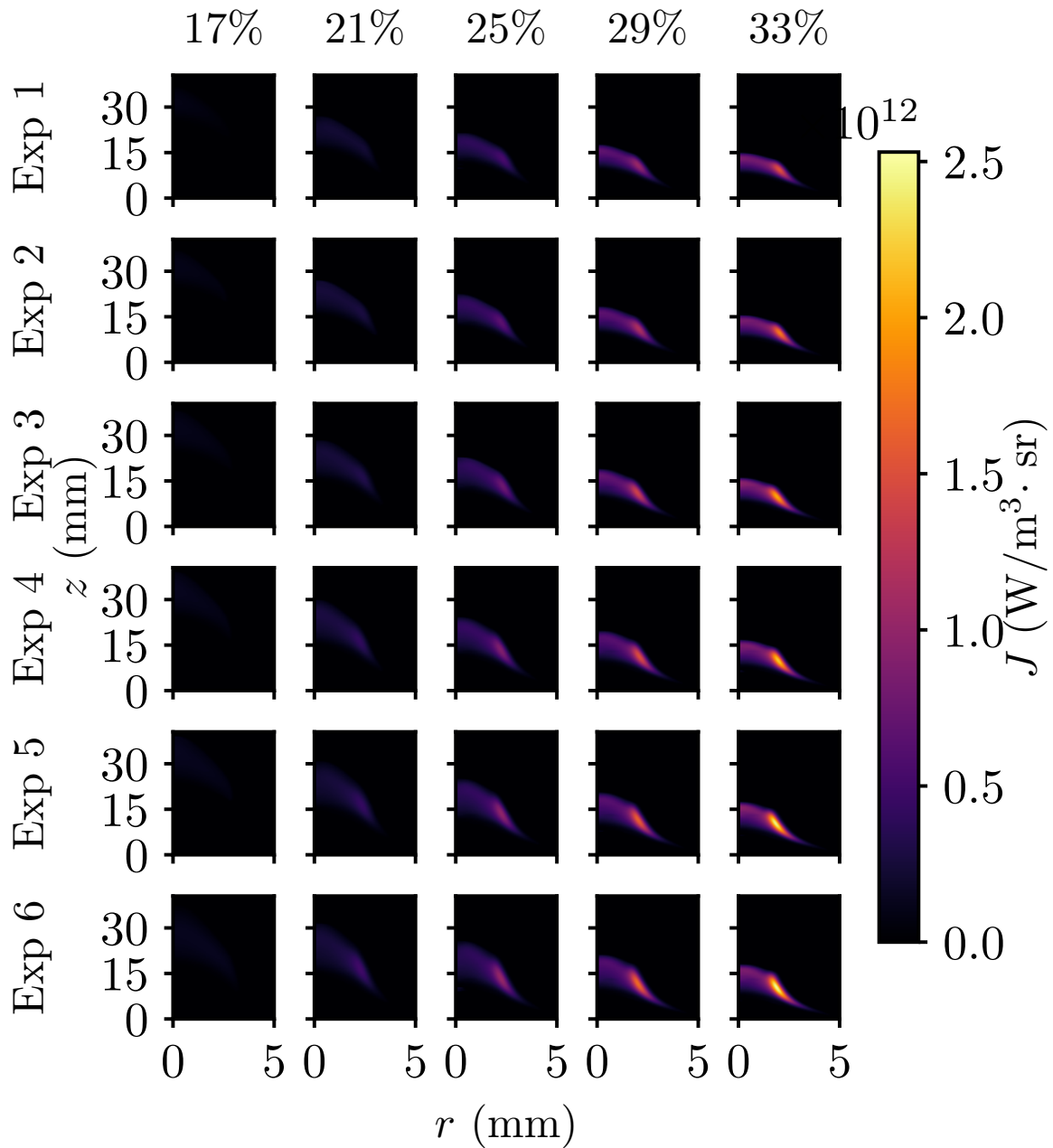


Figura 3.23: Imágenes de la temperatura de la llama ( $T$ ) para los casos estudiados. En cada caso se indica el valor medio de la temperatura.

en ppm, para diferentes mezclas de propano HD5 y e-GL bajo cinco índices de oxígeno (17%, 21%, 25%, 29% y 33%). Los valores indicados en cada caso representan el valor máximo de  $f_s$ , que es un indicador clave de la cantidad de hollín presente en la llama. Se observa un

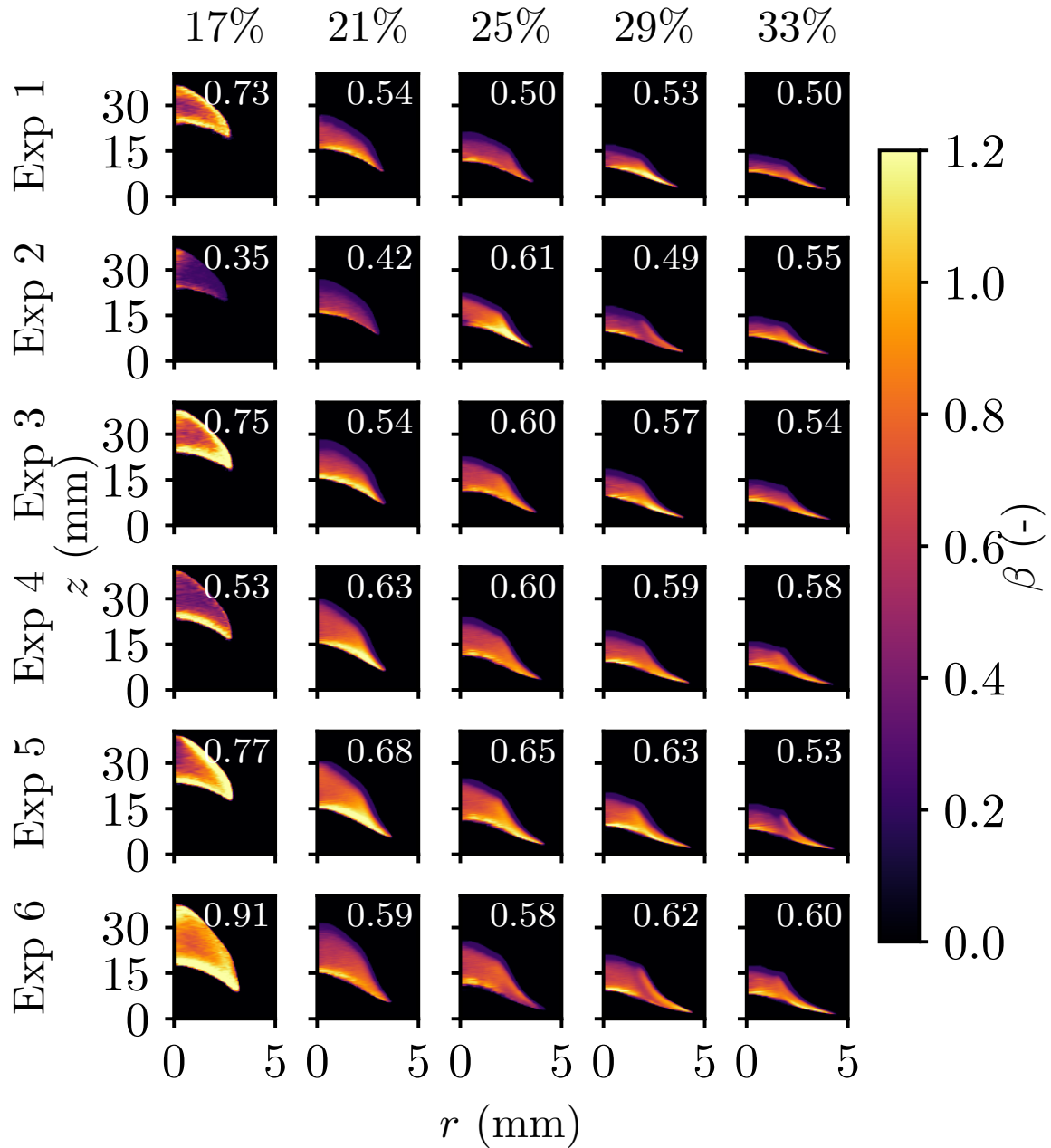


Figura 3.24: Imágenes del coeficiente de madurez del hollín ( $\beta$ ) para los casos estudiados. En cada caso se indica el valor medio del  $\beta$ .

incremento significativo en los valores máximos de  $f_s$  a medida que aumenta la proporción de e-GL en la mezcla. Esto refleja la mayor propensión del e-GL a generar hollín durante la combustión debido a su composición química, que favorece la formación de partículas de

hollín en comparación con el propano puro. Por ejemplo, en las llamas de e-GL puro (Exp 6), los valores máximos de  $f_s$  alcanzan 21.2 ppm con un índice de oxígeno del 33 %, más de tres veces superiores a los valores observados en el propano puro (Exp 1) bajo las mismas condiciones. El efecto del índice de oxígeno también es notable. A medida que aumenta el índice de oxígeno, los valores máximos de  $f_s$  incrementan en todas las mezclas, lo que sugiere que un oxidante más rico en oxígeno intensifica la combustión y favorece la formación de hollín. Este comportamiento es particularmente pronunciado en mezclas con alta proporción de e-GL, donde las condiciones enriquecidas en oxígeno amplifican la producción de hollín. Espacialmente, las zonas periféricas de la llama presentan las mayores concentraciones de hollín, mientras que el centro de la llama muestra valores más bajos debido a una oxidación más eficiente en las regiones más calientes y ricas en oxígeno. Esta distribución es consistente en todas las mezclas y niveles de oxígeno.

La Figura 3.26 muestra los campos de altura de la llama ( $h_f$ ), expresados en milímetros, para diferentes mezclas de propano HD5 y e-GL bajo cinco índices de oxígeno (17 %, 21 %, 25 %, 29 % y 33 %). Los valores numéricos indicados en cada subfigura corresponden a la altura máxima de la llama. En general, se observa que la altura de la llama disminuye con el incremento del índice de oxígeno, independientemente de la proporción de e-GL en la mezcla. Este comportamiento es consistente con la intensificación de las reacciones de combustión bajo condiciones de oxígeno elevado, que promueven una oxidación más eficiente y una mayor concentración de calor en zonas más bajas de la llama. Por ejemplo, en el caso del propano puro (Exp 1), la altura máxima de la llama disminuye de 40.6 mm a 17.7 mm al pasar de un índice de oxígeno del 17 % al 33 %. Al comparar las distintas mezclas de combustible, se aprecia un aumento gradual en la altura de la llama a medida que incrementa la proporción de e-GL. En la mezcla pura de e-GL (Exp 6), las alturas máximas son consistentemente mayores en todos los índices de oxígeno en comparación con el propano puro. Este incremento en la altura de la llama se debe a la mayor propensión del e-GL a generar

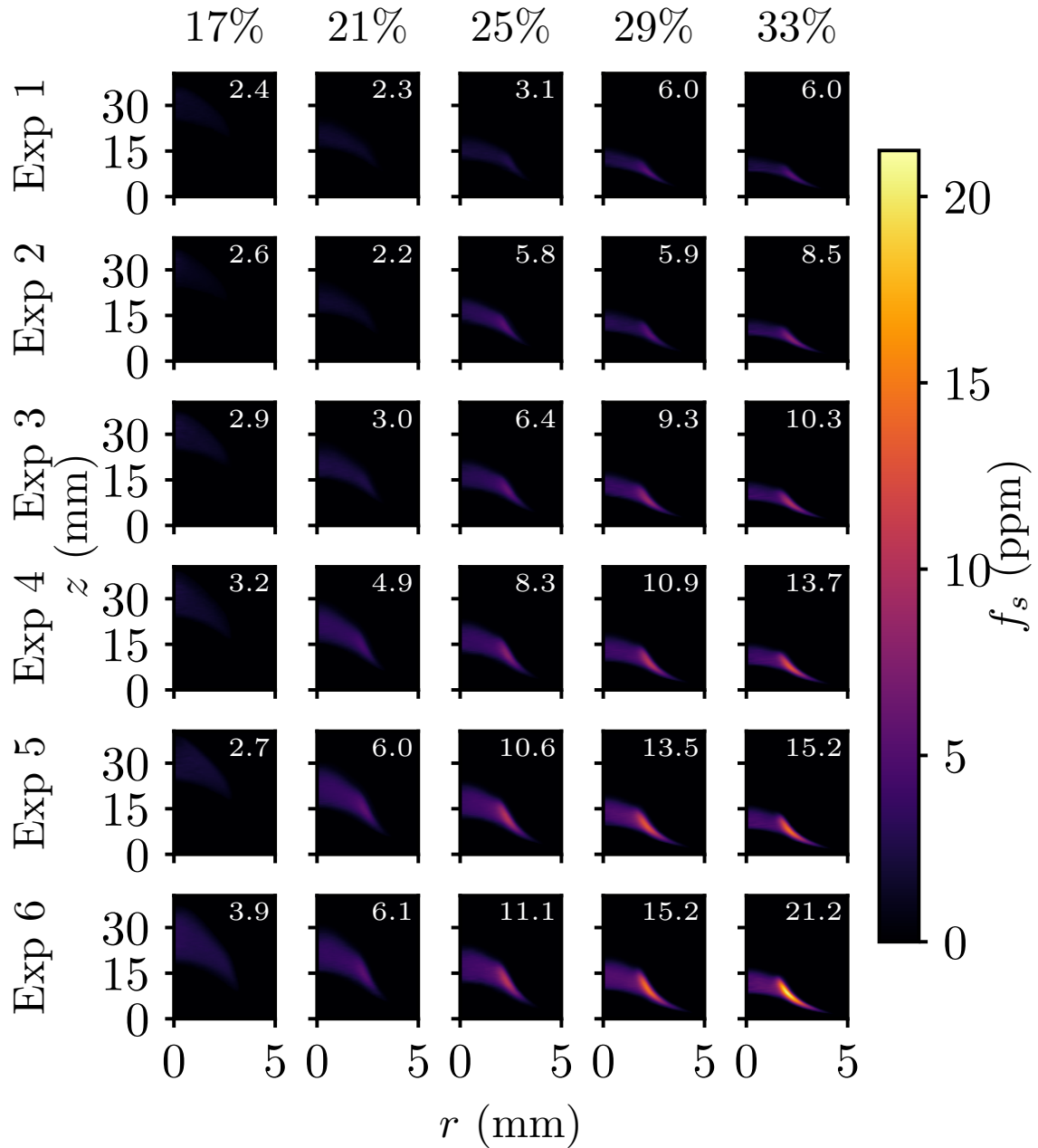


Figura 3.25: Imágenes de la fracción en volumen del hollín ( $f_s$ ) para los casos estudiados. En cada caso se indica el valor máximo del  $f_s$ .

hollín, que contribuye a un mayor calentamiento radiativo y a un aumento de la flotabilidad térmica en la llama. Especialmente, la distribución de la altura refleja un desplazamiento hacia mayores valores en las llamas con e-GL puro, lo que sugiere un comportamiento más

radiante en estas mezclas. Este comportamiento es particularmente notable en índices de oxígeno bajos (17% y 21%), donde la altura de la llama alcanza sus valores máximos.

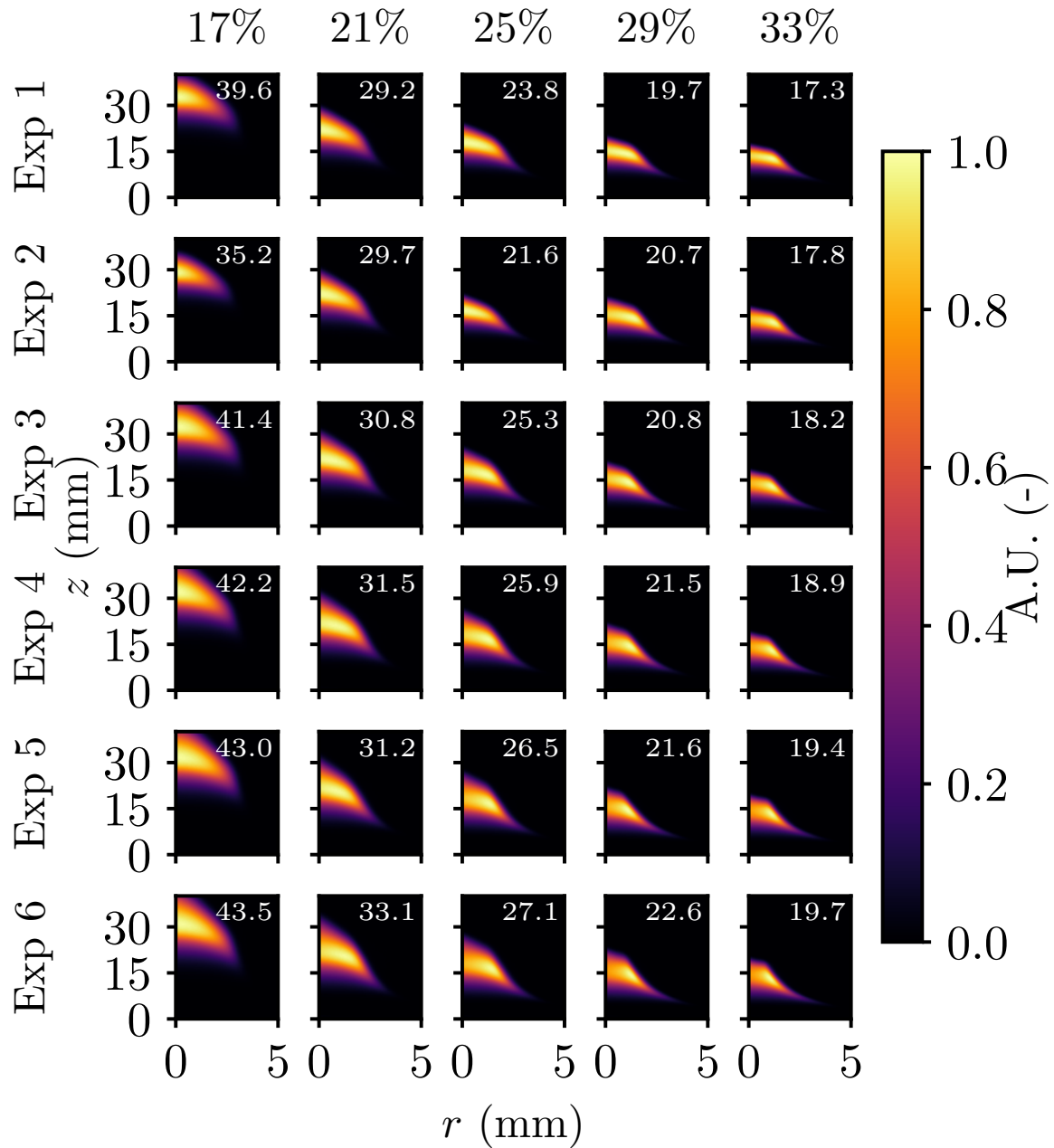


Figura 3.26: Imágenes de la altura de la llama ( $h_f$ ) para los casos estudiados. Los valores numéricos corresponden a la altura máxima de la llama.

### 3.4.2. Resumen global de alternativas

La Figura 3.27 muestra el mapa de calor de la potencia térmica emitida ( $\dot{q}_{emi}$ ) en función de los experimentos y el índice de oxígeno (OI). Este parámetro cuantifica la energía térmica radiada por la llama y es un indicador clave para evaluar el desempeño radiativo de las mezclas de propano HD5 y e-GL. En general, se observa que los valores de  $\dot{q}_{emi}$  aumentan con la proporción de e-GL en el combustible, alcanzando valores máximos en el Exp 6 (100 % e-GL). Esto se debe a la mayor propensión del e-GL a generar hollín, lo que intensifica la emisión de radiación térmica. Además, los valores de  $\dot{q}_{emi}$  también incrementan con el índice de oxígeno, especialmente entre 17 % y 25 %, donde las reacciones de combustión son más eficientes debido a la mayor disponibilidad de oxidante. Sin embargo, a índices de oxígeno más altos (29 % y 33 %), el incremento se estabiliza o incluso disminuye ligeramente en algunos casos, probablemente debido a la oxidación más efectiva del hollín que reduce su concentración radiativa. Espacialmente, el mapa de calor destaca la interacción entre el índice de oxígeno y la proporción de e-GL. Las mayores emisiones térmicas se observan en el Exp 6 con un índice de oxígeno del 25 %, alcanzando un valor máximo de 16.1 W, lo que subraya el impacto combinado de la composición del combustible y las condiciones de oxígeno en la transferencia de calor por radiación. Estos resultados tienen implicaciones importantes en aplicaciones industriales, donde una mayor emisión térmica puede mejorar la eficiencia energética de sistemas como calderas y hornos. Además, destacan la necesidad de equilibrar la generación de hollín para maximizar la radiación térmica sin exceder los límites de emisiones contaminantes.

La Figura 3.28 muestra el comportamiento de la altura de la llama ( $h_f$ ) en función de la proporción de e-GL en la mezcla y del índice de oxígeno (OI). Se observa que  $h_f$  disminuye de forma significativa a medida que aumenta el índice de oxígeno, independientemente de la proporción de combustible en la mezcla. Este comportamiento se explica por el hecho de

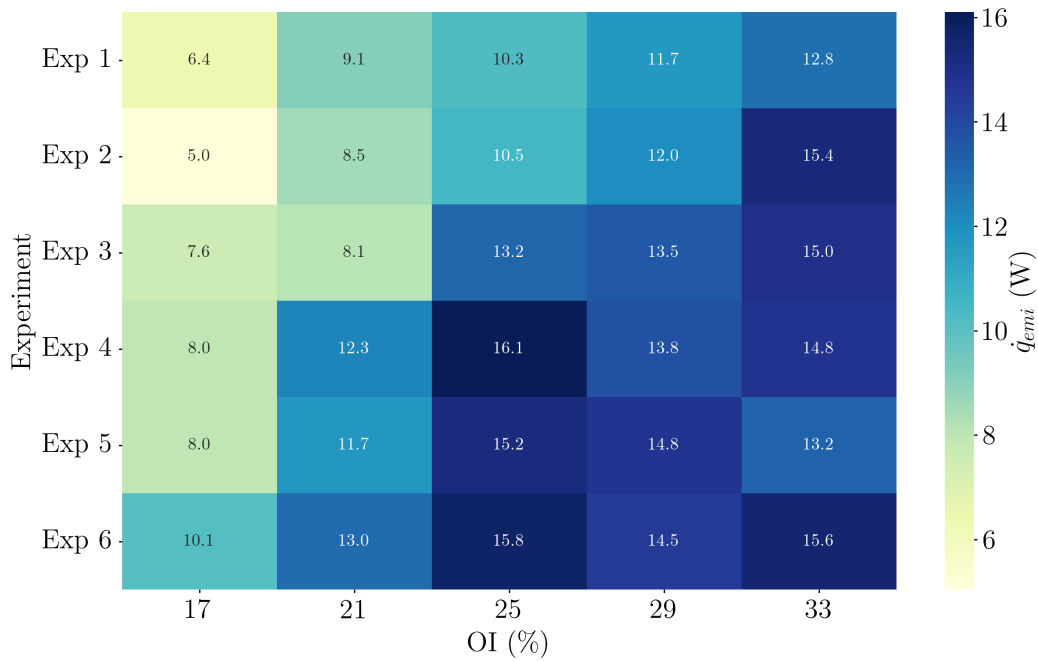


Figura 3.27: Mapa de calor de la potencia térmica emitida ( $\dot{q}_{emi}$ ) para los casos estudiados, en función del índice de oxígeno (OI) y el tipo de combustible.

que un mayor contenido de oxígeno en el oxidante favorece la intensidad de las reacciones químicas en la base de la llama, lo que produce una combustión más eficiente y compacta, reduciendo así la altura total de la llama. Al analizar las mezclas, se aprecia una clara tendencia al incremento de  $h_f$  conforme aumenta la proporción de e-GL en el combustible, alcanzando su valor máximo en el Exp 6 (100% e-GL) con un índice de oxígeno bajo (17%). Este aumento en la altura de la llama puede atribuirse a varias razones interrelacionadas. En primer lugar, el e-GL tiene una mayor propensión a generar hollín durante la combustión, lo cual contribuye a un incremento de la radiación térmica en la llama. Este mayor aporte radiativo eleva la temperatura local en las zonas superiores de la llama, incrementando su flotabilidad térmica y favoreciendo su extensión vertical. Por otro lado, el comportamiento diferencial entre índices de oxígeno altos y bajos destaca la interacción compleja entre las condiciones oxidantes y la formación de hollín. En mezclas con bajo contenido de oxígeno

(17%), el proceso de oxidación del hollín es menos eficiente, permitiendo que las partículas de hollín sobrevivan en las zonas superiores de la llama y contribuyan al calentamiento radiativo. Esto explica las mayores alturas observadas en estas condiciones. Sin embargo, en mezclas con altos índices de oxígeno (33%), el aumento en la disponibilidad de oxígeno favorece la oxidación del hollín en las regiones inferiores de la llama, reduciendo su densidad óptica y, consecuentemente, su capacidad para extenderse verticalmente. Es importante destacar que la tendencia creciente de  $h_f$  con el incremento de e-GL está directamente relacionada con las propiedades químicas y físicas del e-GL, las cuales promueven una combustión más radiante. Estudios previos han demostrado que combustibles con mayor producción de hollín generan llamas más largas debido a su capacidad para transferir energía por radiación. Este fenómeno es particularmente evidente en la comparación entre el Exp 1 (100% propano) y el Exp 6 (100% e-GL), donde las diferencias en  $h_f$  son significativas en todos los niveles de oxígeno.

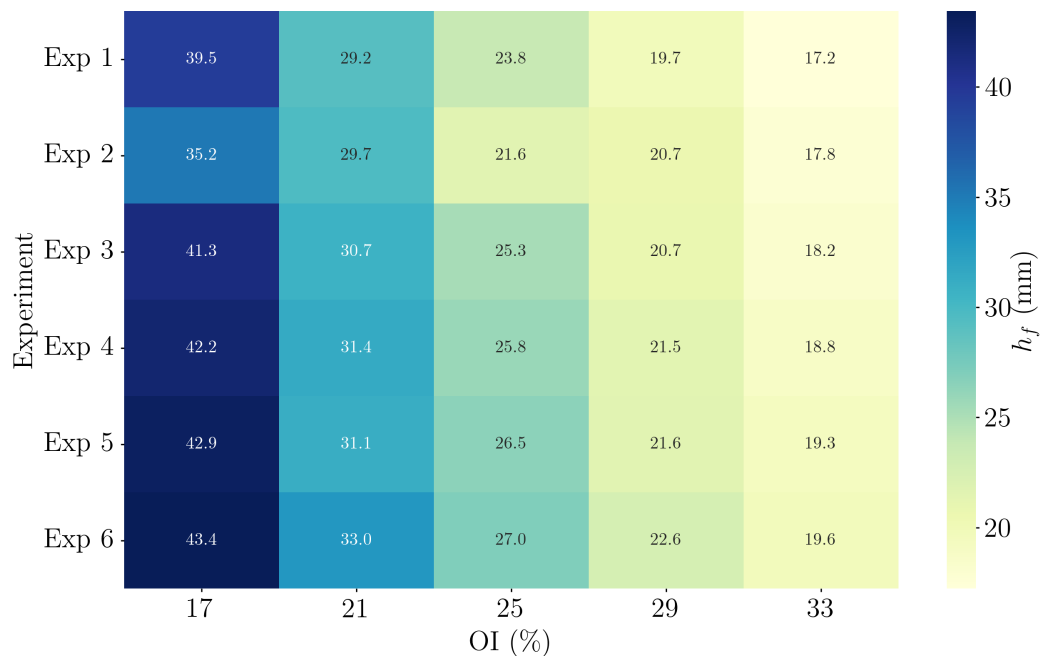


Figura 3.28: Mapa de calor de la altura de la llama ( $h_f$ ) para los casos estudiados en función del índice de oxígeno (OI).

La Figura 3.29 muestra las temperaturas medias de la llama ( $T$ ) para las diferentes combinaciones de combustible y oxidante. Se observa que  $T$  aumenta de manera consistente con el índice de oxígeno debido a la intensificación de las reacciones exotérmicas, que generan mayores cantidades de calor. Este comportamiento es esperado, ya que un contenido más alto de oxígeno en el oxidante mejora la eficiencia de la combustión al promover una oxidación más completa del combustible. Sin embargo, al comparar las mezclas de combustible, se observa que la proporción de e-GL impacta negativamente en las temperaturas medias. Las llamas con mayor proporción de e-GL (Exp 6) presentan temperaturas medias más bajas en comparación con las llamas de propano puro (Exp 1) bajo las mismas condiciones de oxígeno. Este comportamiento puede atribuirse a la mayor generación de hollín asociada al e-GL, la cual absorbe y redistribuye parte de la energía térmica en forma de radiación, disminuyendo así la energía disponible para aumentar la temperatura de la llama. Además, la influencia del hollín es más pronunciada en condiciones de oxígeno bajo (17%), donde las temperaturas medias en Exp 6 son considerablemente menores en comparación con Exp 1. Esto puede explicarse por la menor eficiencia de oxidación del hollín en mezclas con bajo contenido de oxígeno, lo que resulta en una mayor acumulación de partículas de hollín radiativas que dispersan el calor. Por otro lado, en índices de oxígeno más altos (29% y 33%), la oxidación del hollín se vuelve más eficiente, lo que contribuye a temperaturas medias más uniformes entre las diferentes mezclas, aunque todavía se observa una diferencia notable a favor del propano puro. La tendencia decreciente de  $T$  con el aumento de e-GL tiene implicaciones importantes en términos de eficiencia energética y estabilidad de la combustión. Las llamas con menor temperatura media pueden ser menos estables y producir mayores cantidades de emisiones contaminantes, como hollín y compuestos orgánicos incompletamente quemados. Sin embargo, estas llamas también presentan un mayor potencial radiativo debido a la acumulación de hollín, lo que podría ser aprovechado en aplicaciones donde la transferencia de calor radiativa es un factor relevante.

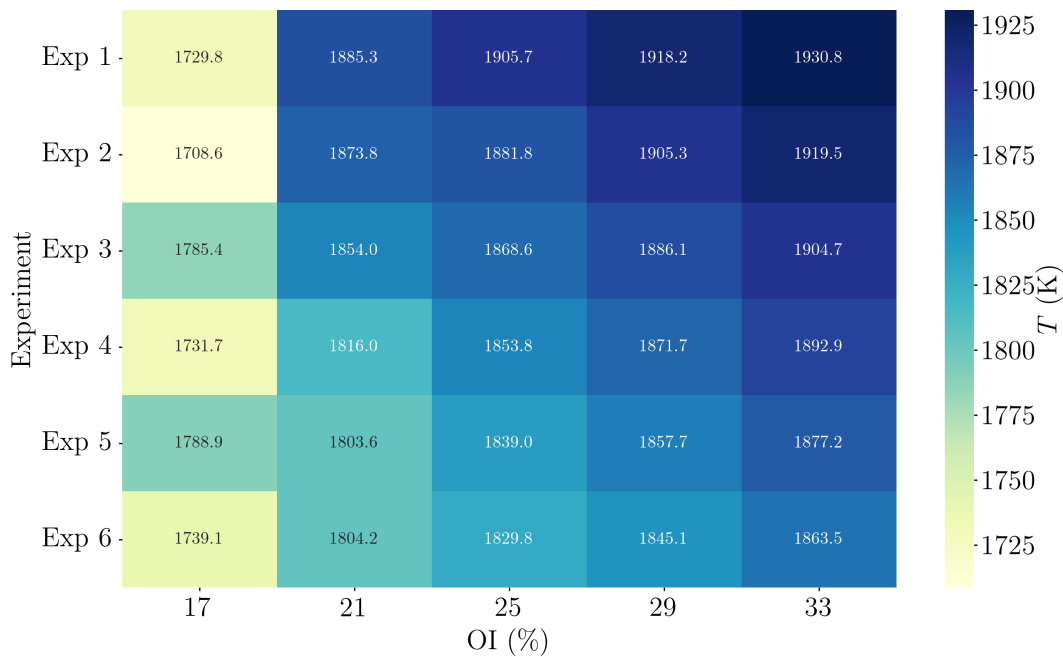


Figura 3.29: Mapa de calor de las temperaturas medias de la llama ( $T$ ) en función del índice de oxígeno (OI).

La Figura 3.30 presenta los valores máximos de la fracción volumétrica de hollín ( $f_s$ ) para las condiciones estudiadas. Como era de esperar,  $f_s$  muestra un aumento significativo tanto con la proporción de e-GL como con el índice de oxígeno (OI), alcanzando un valor máximo de 21.2 ppm en Exp 6 bajo un 33 % de oxígeno. Este comportamiento resalta la alta capacidad del e-GL para generar hollín durante la combustión, lo cual es consistente con sus características químicas que favorecen la formación de partículas de carbono no quemado. El incremento de  $f_s$  con el índice de oxígeno puede explicarse por la intensificación de las reacciones de combustión. Un mayor contenido de oxígeno en el oxidante no solo mejora la eficiencia de la combustión, sino que también promueve temperaturas más altas en la llama. Estas temperaturas, a su vez, aceleran las reacciones de nucleación y crecimiento de partículas de hollín, especialmente en mezclas con alta proporción de e-GL. Este efecto es más evidente en Exp 6, donde la combinación de un combustible altamente propenso

a la formación de hollín y un oxidante enriquecido en oxígeno maximiza la generación de partículas. Sin embargo, es importante destacar que el aumento en  $f_s$  no ocurre de manera lineal. En condiciones de bajo oxígeno (17% y 21%), las tasas de oxidación del hollín son menores, lo que resulta en una acumulación de partículas en la llama. Por el contrario, en índices de oxígeno más altos (29% y 33%), el incremento en  $f_s$  es más moderado, ya que la oxidación de las partículas de hollín se vuelve más eficiente, lo que limita parcialmente su acumulación, aunque todavía prevalecen altos valores en mezclas ricas en e-GL. La relación entre  $f_s$  y la proporción de e-GL también pone de manifiesto el impacto de las propiedades físicas y químicas del combustible. El e-GL, debido a su mayor contenido de compuestos pesados y su tendencia a formar cadenas largas de carbono durante la pirólisis, genera hollín en mayor cantidad que el propano puro. Este efecto se amplifica en condiciones de oxígeno elevado, donde la formación de partículas densas es favorecida por las altas temperaturas. En términos prácticos, estos resultados tienen implicaciones importantes en el diseño y operación de sistemas de combustión. Si bien el aumento en  $f_s$  puede ser beneficioso en aplicaciones donde la radiación térmica es deseable, como en calderas radiantes, también plantea desafíos relacionados con el control de emisiones. Un alto contenido de hollín no quemado puede contribuir a la contaminación ambiental y a la formación de depósitos en superficies de transferencia de calor, reduciendo la eficiencia del sistema.

### 3.4.3. Análisis sobre tendencias de las mezclas

En este estudio se analizó el impacto de la proporción de e-GL y el índice de oxígeno sobre diversos parámetros de combustión, incluyendo la altura de la llama ( $h_f$ ), la temperatura media ( $T$ ), la fracción volumétrica de hollín ( $f_s$ ), y propiedades radiativas como la transmisividad ( $\tau$ ) y la emisividad ( $P_y$ ). Los resultados muestran que el e-GL, al tener una mayor propensión a generar hollín, afecta significativamente la estructura y las caracterís-

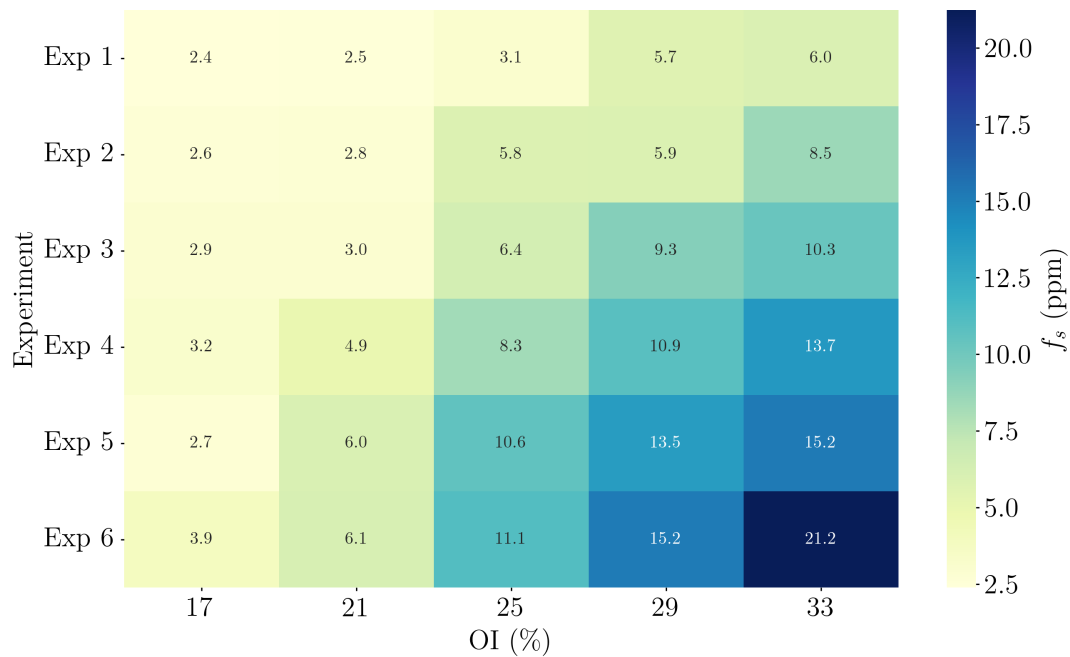


Figura 3.30: Mapa de calor de la fracción volumétrica máxima de hollín ( $f_s$ ) en función del índice de oxígeno (OI).

ticas radiativas de la llama. Se observó que  $h_f$  aumenta con la proporción de e-GL debido al incremento en la radiación térmica, mientras que disminuye con el índice de oxígeno por la intensificación de la oxidación. Las temperaturas medias, por otro lado, son menores en mezclas ricas en e-GL, ya que el hollín redistribuye el calor como radiación. Adicionalmente,  $f_s$  se incrementa con ambos factores, alcanzando máximos bajo condiciones de alta proporción de e-GL y alto índice de oxígeno, aunque con una tendencia a estabilizarse debido a la oxidación del hollín en niveles elevados de oxígeno. Estos hallazgos resaltan la necesidad de un control cuidadoso de las condiciones de combustión para equilibrar la generación de hollín, la eficiencia energética y las emisiones, especialmente en aplicaciones industriales donde el e-GL se utiliza como combustible alternativo.

# Capítulo 4

## Conclusiones

El presente estudio evaluó de forma integral la viabilidad técnica, regulatoria y experimental del gas licuado renovable (e-GL) como alternativa sustentable al gas licuado de petróleo (GLP). En un contexto de transición energética global y descarbonización de la matriz energética, el e-GL se posiciona como un combustible estratégico al permitir una reducción significativa de emisiones sin requerir modificaciones sustanciales en las infraestructuras actuales.

## Resultados Clave

- **Análisis normativo:** Se analizaron más de 80 regulaciones internacionales sobre GLP, determinándose que el e-GL actualmente cumple plenamente con solo una de ellas (Kenia) debido a su composición química, lo que representa un cumplimiento directo inferior al 2%. Esta brecha normativa implica que, pese a sus beneficios ambientales, el e-GL no puede ser comercializado en la mayoría de los países bajo los marcos regulatorios actuales, salvo que se modifiquen las normativas para incorporar combustibles renovables con distinta composición, o que se modifique la composición actual.
- **Modelación computacional:** Las simulaciones indicaron que el e-GL posee una temperatura adiabática de llama, poder calorífico e índice de Wobbe comparables al GLP, con un comportamiento térmico favorable en contextos industriales. Desde el punto de

vista de inflamabilidad y seguridad, se muestran resultados prometedores, mostrando que el e-GL es igual de seguro y estable al igual que el GLP. Finalmente se tiene que el e-GL es un combustible de cero emisiones de  $tCO_{2eq}$ , lo que lo convierte en un gran candidato para reemplazar/complementar el GLP dentro de la matriz energética mundial.

- **Ensayos experimentales:** Las pruebas de combustión revelaron un incremento del 57.6 % en la generación de hollín por kilogramo de combustible respecto al GLP, asociado a su alto contenido de isobutano. No obstante, se constató una estabilidad de llama adecuada y niveles de emisiones particuladas dentro de rangos aceptables, evidenciando su potencial uso seguro con medidas de control y mitigación adecuadas. Se observa que el e-GL alcanza temperaturas similares al GLP, teniendo comportamientos similares al incorporarse  $O_2$  en el oxidante. Se observó una liberación de energía por radiación térmica del 15 %, superior al 10 % del GLP convencional, lo que lo hace especialmente útil para aplicaciones de transferencia de calor.

## Viabilidad Técnica

Desde una perspectiva técnica, el e-GL cumple con los parámetros fundamentales para su utilización en aplicaciones residenciales e industriales. Su compatibilidad con redes de almacenamiento y distribución existentes, junto con su naturaleza renovable y baja huella de carbono, lo posicionan como un combustible estratégico en el proceso de descarbonización. No obstante, su mayor tendencia a la formación de hollín representa un desafío técnico relevante, que deberá ser abordado mediante rediseño de quemadores, control avanzado de la combustión y optimización de la formulación del combustible.

## Participación de GASCO

GASCO S.A. jugó un rol central en el desarrollo de esta investigación, al ser la entidad promotora del proyecto y proveer tanto el e-GL como la información técnica necesaria para su caracterización. Además, financió parte de las actividades de laboratorio y facilitó la articulación con el sector industrial y regulatorio. La empresa demostró un compromiso activo con la innovación y el desarrollo de soluciones energéticas sostenibles, promoviendo la validación técnica de un combustible producido íntegramente en Chile.

## Conclusión General

El e-GL se presenta como un combustible limpio, seguro y de alto potencial en la transición energética global. Este estudio demuestra que, desde el punto de vista técnico, es viable su uso como sustituto del GLP, ofreciendo ventajas en eficiencia térmica y sostenibilidad. Sin embargo, su incorporación a gran escala exige:

- La adecuación de los marcos normativos internacionales para incorporar combustibles renovables con composiciones distintas, o adecuar los combustibles sintéticos a las actuales regulaciones.
- La implementación de tecnologías de combustión limpia que reduzcan la emisión de hollín.
- Una estrategia nacional de desarrollo e implementación que integre la producción local de e-GL con el mercado energético.

Con estos avances, el e-GL podría consolidarse como un pilar de la nueva matriz energética, con proyección nacional e internacional, contribuyendo de manera concreta al

cumplimiento de los compromisos climáticos y a la generación de una economía más limpia, resiliente y competitiva.

# Bibliografía

- [1] T. Weidner, A. Yang y M. W. Hamm. “Energy optimisation of plant factories and greenhouses for different climatic conditions”. En: *Energy Conversion and Management* 243 (2021), pág. 114336. DOI: [10.1016/j.enconman.2021.114336](https://doi.org/10.1016/j.enconman.2021.114336).
- [2] T. N. Veziroğlu y S. Şahin. “21st Century’s energy: Hydrogen energy system”. En: *Energy Conversion and Management* 49.7 (2008), págs. 1820-1831. DOI: [10.1016/j.enconman.2007.08.015](https://doi.org/10.1016/j.enconman.2007.08.015).
- [3] A. Burke y S. Fishel. “A coal elimination treaty 2030: Fast tracking climate change mitigation, global health, and security”. En: *Earth System Governance* 3 (2020), pág. 100046. DOI: [10.1016/j.esg.2020.100046](https://doi.org/10.1016/j.esg.2020.100046).
- [4] S. Nicolay et al. “Conceptual design and optimization of a general aviation aircraft with fuel cells and hydrogen”. En: *International Journal of Hydrogen Energy* 46.64 (2021), págs. 32676-32694. DOI: [10.1016/j.ijhydene.2021.07.127](https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.07.127).
- [5] T. E. R. Estevão. “Hydrogen as fuel”. Tesis de mtría. Porto, Portugal: Faculty of Mechanical Engineering University of Porto, 2008.
- [6] L. Zhao, D. Wang y W. Qi. “Comparative study on air dilution and hydrogen-enriched air dilution employed in a SI engine fueled with iso-butanol-gasoline”. En: *International Journal of Hydrogen Energy* 45.18 (2020), págs. 10895-10905. DOI: [10.1016/j.ijhydene.2019.12.124](https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.12.124).
- [7] A. Davies y M. D. Simmons. “Demand for ‘advantaged’ hydrocarbons during the 21st-century energy transition”. En: *Energy Reports* 7 (2021), págs. 4483-4497. DOI: [10.1016/j.egy.2021.07.013](https://doi.org/10.1016/j.egy.2021.07.013).

- 
- [8] A. Boretti. “Production of hydrogen for export from wind and solar energy, natural gas, and coal in Australia”. En: *International Journal of Hydrogen Energy* 45.7 (2020), págs. 3899-3904. DOI: [10.1016/j.ijhydene.2019.12.080](https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.12.080).
- [9] P. Hartley et al. *National Hydrogen Roadmap*. Inf. téc. CSIRO, 2018. DOI: [10.25919/5B8055BC08ACB](https://doi.org/10.25919/5B8055BC08ACB).
- [10] W. C. Nadaleti, G. Borges dos Santos y V. A. Lourenço. “The potential and economic viability of hydrogen production from the use of hydroelectric and wind farms surplus energy in Brazil: A national and pioneering analysis”. En: *International Journal of Hydrogen Energy* 45.3 (2020), págs. 1373-1384. DOI: [10.1016/j.ijhydene.2019.08.199](https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.08.199).
- [11] Mark Allen Group. “France unveils national hydrogen plan as tool for energy transition”. En: *Fuel Cells Bulletin* 2018.7 (2018), págs. 10-10. DOI: [10.1016/s1464-2859\(18\)30252-9](https://doi.org/10.1016/s1464-2859(18)30252-9).
- [12] Mark Allen Group. “Green hydrogen plans for German region in GET H2 initiative”. En: *Fuel Cells Bulletin* 2019.5 (2019), págs. 11-12. DOI: [10.1016/s1464-2859\(19\)30205-6](https://doi.org/10.1016/s1464-2859(19)30205-6).
- [13] J. Michalski et al. “Hydrogen generation by electrolysis and storage in salt caverns: Potentials, economics and systems aspects with regard to the German energy transition”. En: *International Journal of Hydrogen Energy* 42.19 (2017), págs. 13427-13443. DOI: [10.1016/j.ijhydene.2017.02.102](https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.02.102).
- [14] N. Behling, M. C. Williams y S. Managi. “Fuel cells and the hydrogen revolution: Analysis of a strategic plan in Japan”. En: *Economic Analysis and Policy* 48 (2015), págs. 204-221. DOI: [10.1016/j.eap.2015.10.002](https://doi.org/10.1016/j.eap.2015.10.002).
- [15] Y. Li, X. Shi y H. Phoumin. “A strategic roadmap for large-scale green hydrogen demonstration and commercialisation in China: A review and survey analysis”. En:

- 
- International Journal of Hydrogen Energy* (2021). DOI: [10.1016/j.ijhydene.2021.10.077](https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.10.077).
- [16] S. Barrett. “Gasunie plans first 1 MW P2G hydrogen plant in Netherlands”. En: *Fuel Cells Bulletin* 2017.8 (2017), pág. 14. DOI: [10.1016/s1464-2859\(17\)30305-x](https://doi.org/10.1016/s1464-2859(17)30305-x).
- [17] M. Delpierre et al. “Assessing the environmental impacts of wind-based hydrogen production in the Netherlands using ex-ante LCA and scenarios analysis”. En: *Journal of Cleaner Production* 299 (2021), pág. 126866. DOI: [10.1016/j.jclepro.2021.126866](https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2021.126866).
- [18] R. Cowell y J. Webb. “Making useful knowledge for heat decarbonisation: Lessons from local energy planning in the United Kingdom”. En: *Energy Research & Social Science* 75 (2021), pág. 102010. DOI: [10.1016/j.erss.2021.102010](https://doi.org/10.1016/j.erss.2021.102010).
- [19] Y. M. Hamad et al. “A design for hydrogen production and dispensing for northeastern United States, along with its infrastructural development timeline”. En: *International Journal of Hydrogen Energy* 39.19 (2014), págs. 9943-9961. DOI: [10.1016/j.ijhydene.2014.04.174](https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2014.04.174).
- [20] W. C. Nadaleti, V. A. Lourenço y G. Americo. “Green hydrogen-based pathways and alternatives: Towards the renewable energy transition in South America’s regions – Part A”. En: *International Journal of Hydrogen Energy* 46.43 (2021), págs. 22247-22255. DOI: [10.1016/j.ijhydene.2021.03.239](https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.03.239).
- [21] IRENA. *Hydrogen: A Renewable Energy Perspective*. Accessed: 11/05/2022. 2019.
- [22] IRENA. *REmap: Roadmap for a Renewable Energy Future*. Accessed: 11/05/2022. 2016.
- [23] B. Vieira, W. C. Nadaleti y E. Sarto. “The effect of the addition of castor oil to residual soybean oil to obtain biodiesel in Brazil: Energy matrix diversification”. En: *Renewable Energy* 165 (2021), págs. 657-667. DOI: [10.1016/j.renene.2020.10.056](https://doi.org/10.1016/j.renene.2020.10.056).

- 
- [24] T. Diniz Oliveira, A. Costa Gurgel y S. Tonry. “Potential trading partners of a Brazilian emissions trading scheme: The effects of linking with a developed region (Europe) and two developing regions (Latin America and China)”. En: *Technological Forecasting and Social Change* 171 (2021), pág. 120947. DOI: [10.1016/j.techfore.2021.120947](https://doi.org/10.1016/j.techfore.2021.120947).
- [25] H. Dagdougui, A. Ouammi y R. Sacile. “A regional decision support system for onsite renewable hydrogen production from solar and wind energy sources”. En: *International Journal of Hydrogen Energy* 36.22 (2011), págs. 14324-14334. DOI: [10.1016/j.ijhydene.2011.08.050](https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2011.08.050).
- [26] Katharina Kohse-Hoinghaus. En: *Pure and Applied Chemistry* 91.2 (2019), págs. 271-288. DOI: [doi:10.1515/pac-2018-0608](https://doi.org/10.1515/pac-2018-0608).
- [27] *NCh 72*. Norma Chilena 72.
- [28] Rui Namorado Rosa. “The role of synthetic fuels for a carbon neutral economy”. En: *C* 3.2 (2017), pág. 11.
- [29] George A Olah, Alain Goeppert y GK Surya Prakash. “Chemical recycling of carbon dioxide to methanol and dimethyl ether: from greenhouse gas to renewable, environmentally carbon neutral fuels and synthetic hydrocarbons”. En: *The Journal of organic chemistry* 74.2 (2009), págs. 487-498.
- [30] Xiaojin Zhang et al. “Life Cycle Assessment of Power-to-Gas: Approaches, system variations and their environmental implications”. En: *Applied Energy* 190 (2017), págs. 326-338. ISSN: 0306-2619. DOI: [10.1016/j.apenergy.2016.12.098](https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2016.12.098).
- [31] Steffen Schemme et al. “Power-to-fuel as a key to sustainable transport systems—An analysis of diesel fuels produced from CO<sub>2</sub> and renewable electricity”. En: *Fuel* 205 (2017), págs. 198-221.
- [32] Iva Ridjan et al. “The feasibility of synthetic fuels in renewable energy systems”. En: *Energy* 57 (2013), págs. 76-84.

- 
- [33] Vincent Dieterich et al. “Power-to-liquid via synthesis of methanol, DME or Fischer–Tropsch-fuels: a review”. En: *Energy & Environmental Science* 13.10 (2020), págs. 3207-3252.
- [34] David Liederman et al. “Mobil methanol-to-gasoline process”. En: *Journal of Energy* 6.5 (1982), págs. 340-341.
- [35] Pamela L Spath y David C Dayton. *Preliminary screening–technical and economic assessment of synthesis gas to fuels and chemicals with emphasis on the potential for biomass-derived syngas*. Inf. téc. National Renewable Energy Lab.(NREL), Golden, CO (United States), 2003.
- [36] Andrea Nobili et al. “A kinetic study on the blending behavior of sustainable and conventional aviation fuels: Soot formation processes”. En: *Proceedings of the Combustion Institute* 40.1 (2024), pág. 105761. ISSN: 1540-7489. DOI: [10.1016/j.proci.2024.105761](https://doi.org/10.1016/j.proci.2024.105761).
- [37] Jiaying He et al. “Soot formation characteristics in hybrid pyrolysis of zero-carbon fuel ammonia and ethylene mixtures”. En: *Frontiers in Energy Research* 10 (2022), pág. 996813.
- [38] Martin Härtl et al. “Synthetic diesel fuel OME1 A pathway out of the soot-NOx trade-off”. En: *MTZ worldwide* 75.7 (2014), págs. 48-53.
- [39] Trung Thanh Bui et al. “Characteristics of PM and soot emissions of internal combustion engines running on biomass-derived DMF biofuel: a review”. En: *Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization, and Environmental Effects* 44.4 (2022), págs. 8335-8356.
- [40] Amela Ajanovic, Mitchell Sayer y Reinhard Haas. “The economics and the environmental benignity of different colors of hydrogen”. En: *International Journal of Hydrogen Energy* 47.57 (2022), págs. 24136-24154.
- [41] Alexander Buttler y Hartmut Spliethoff. “Current status of water electrolysis for energy storage, grid balancing and sector coupling via power-to-gas and power-to-liquids: A review”. En: *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 82 (2018), págs. 2440-2454.

- 
- [42] Andrew J Hunt et al. “Generation, capture, and utilization of industrial carbon dioxide”. En: *ChemSusChem: Chemistry & Sustainability Energy & Materials* 3.3 (2010), págs. 306-322.
- [43] Sonil Nanda et al. “The progressive routes for carbon capture and sequestration”. En: *Energy Science & Engineering* 4.2 (2016), págs. 99-122.
- [44] Berit Erlach, Benjamin Harder y George Tsatsaronis. “Combined hydrothermal carbonization and gasification of biomass with carbon capture”. En: *Energy* 45.1 (2012), págs. 329-338.
- [45] Mohammad Ali Zahed et al. “Biotechnology for carbon capture and fixation: Critical review and future directions”. En: *Journal of Environmental Management* 293 (2021), pág. 112830.
- [46] JB Hansen. *PEH Nielsen in Handbook of Heterogeneous Catalysis*. 2008.
- [47] Søren H Jensen, Peter H Larsen y Mogens Mogensen. “Hydrogen and synthetic fuel production from renewable energy sources”. En: *International Journal of Hydrogen Energy* 32.15 (2007), págs. 3253-3257.
- [48] George A Olah, GK Surya Prakash y Alain Goeppert. “Anthropogenic chemical carbon cycle for a sustainable future”. En: *Journal of the American Chemical Society* 133.33 (2011), págs. 12881-12898.
- [49] Martín David, Carlos Ocampo-Martínez y Ricardo Sánchez-Peña. “Advances in alkaline water electrolyzers: A review”. En: *Journal of Energy Storage* 23 (2019), págs. 392-403. ISSN: 2352-152X. DOI: [10.1016/j.est.2019.03.001](https://doi.org/10.1016/j.est.2019.03.001).
- [50] Mai Bui et al. “Carbon capture and storage (CCS): the way forward”. En: *Energy & Environmental Science* 11.5 (2018), págs. 1062-1176.
- [51] Niall MacDowell et al. “An overview of CO<sub>2</sub> capture technologies”. En: *Energy & Environmental Science* 3.11 (2010), págs. 1645-1669.

- 
- [52] Matthew E Boot-Handford et al. “Carbon capture and storage update”. En: *Energy & Environmental Science* 7.1 (2014), págs. 130-189.
- [53] Ana-Maria Cormos et al. “Techno-economic and environmental evaluations of decarbonized fossil-intensive industrial processes by reactive absorption & adsorption CO<sub>2</sub> capture systems”. En: *Energies* 13.5 (2020), pág. 1268.
- [54] Martin Bertau et al. *Methanol: the basic chemical and energy feedstock of the future*. Vol. 1. Springer, 2014.
- [55] Mark Dry y André Steynberg. *Fischer-Tropsch Technology*. Elsevier, 2004.
- [56] PJA Tijm, FJ Waller y DM Brown. “Methanol technology developments for the new millennium”. En: *Applied Catalysis A: General* 221.1-2 (2001), págs. 275-282.
- [57] Barbara Elvers et al. *Ullmann’s encyclopedia of industrial chemistry*. Vol. 17. Verlag Chemie Hoboken, NJ, 1991.
- [58] J.-L. Wang et al. “Recent progress for direct synthesis of dimethyl ether from syngas: Catalyst development and reaction mechanism”. En: *Applied Catalysis A: General* 525 (2017), págs. 68-76. DOI: [10.1016/j.apcata.2016.06.030](https://doi.org/10.1016/j.apcata.2016.06.030).
- [59] G. Schaub et al. “Methanol synthesis in the liquid phase: Catalyst performance and process aspects”. En: *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification* 42.3 (2003), págs. 179-189. DOI: [10.1016/S0255-2701\(02\)00097-2](https://doi.org/10.1016/S0255-2701(02)00097-2).
- [60] S. Wesselbaum et al. “Hydrogenation of carbon dioxide to methanol using a homogeneous ruthenium–phosphine catalyst”. En: *Chemical Science* 3.10 (2012), págs. 2770-2777. DOI: [10.1039/C2SC21131K](https://doi.org/10.1039/C2SC21131K).
- [61] J. Artz et al. “Sustainable conversion of carbon dioxide: An integrated review of catalysis and life cycle assessment”. En: *Chemical Reviews* 118.2 (2018), págs. 434-504. DOI: [10.1021/acs.chemrev.7b00435](https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.7b00435).

- 
- [62] N. Z. Muradov. “CO<sub>2</sub>-free production of hydrogen by catalytic pyrolysis of hydrocarbon fuel”. En: *Energy & Fuels* 15.2 (2001), págs. 367-371. DOI: [10.1021/ef000241f](https://doi.org/10.1021/ef000241f).
- [63] Irving Wender. “Reactions of synthesis gas”. En: *Fuel processing technology* 48.3 (1996), págs. 189-297.
- [64] Emil Supp. *How to produce methanol from coal*. Springer Science & Business Media, 2013.
- [65] GH Graaf et al. “Kinetics of the three phase methanol synthesis”. En: *Tenth International Symposium on Chemical Reaction Engineering*. Elsevier. 1988, págs. 2161-2168.
- [66] Mortaza Sahibzada, Ian S Metcalfe y DJJOC Chadwick. “Methanol synthesis from CO/CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub> over Cu/ZnO/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> at differential and finite conversions”. En: *Journal of catalysis* 174.2 (1998), págs. 111-118.
- [67] Kok Leong Ng, D Chadwick y BA Toseland. “Kinetics and modelling of dimethyl ether synthesis from synthesis gas”. En: *Chemical Engineering Science* 54.15-16 (1999), págs. 3587-3592.
- [68] K. Fujimoto et al., eds. *DME Handbook*. Tokyo: Japan DME Forum, 2007.
- [69] Takashi Ogawa et al. “Direct dimethyl ether synthesis”. En: *Journal of natural gas chemistry* 12.4 (2003), págs. 219-227.
- [70] Mark E Dry. “The fischer–tropsch process: 1950–2000”. En: *Catalysis today* 71.3-4 (2002), págs. 227-241.
- [71] AA Adesina, RR Hudgins y PL Silveston. “Fischer-Tropsch synthesis under periodic operation”. En: *Catalysis today* 25.2 (1995), págs. 127-144.
- [72] Chundong Zhang et al. “Efficient utilization of greenhouse gases in a gas-to-liquids process combined with CO<sub>2</sub>/steam-mixed reforming and Fe-based Fischer–Tropsch synthesis”. En: *Environmental science & technology* 48.14 (2014), págs. 8251-8257.

- 
- [73] Andrei Y Khodakov, Wei Chu y Pascal Fongarland. “Advances in the development of novel cobalt Fischer- Tropsch catalysts for synthesis of long-chain hydrocarbons and clean fuels”. En: *Chemical reviews* 107.5 (2007), págs. 1692-1744.
- [74] André P Steynberg y Herman G Nel. “Clean coal conversion options using Fischer–Tropsch technology”. En: *Fuel* 83.6 (2004), págs. 765-770.
- [75] ME Dry. “The fischer-tropsch synthesis”. En: *Catalysis science and technology* 1 (1981), págs. 159-255.
- [76] Mark E Dry. “High quality diesel via the Fischer–Tropsch process—a review”. En: *Journal of Chemical Technology & Biotechnology: International Research in Process, Environmental & Clean Technology* 77.1 (2002), págs. 43-50.
- [77] R. B. Anderson. “The Fischer–Tropsch synthesis”. En: *Academic Press* (1984).
- [78] Gregor Herz, Erik Reichelt y Matthias Jahn. “Techno-economic analysis of a co-electrolysis-based synthesis process for the production of hydrocarbons”. En: *Applied energy* 215 (2018), págs. 309-320.
- [79] A De Rose et al. “Technology readiness level: Guidance principles for renewable energy technologies”. En: *European Commission: Petten, The Netherlands* (2017), págs. 17-27.
- [80] POI Apache. “EN Horizon 2020 Work Programme 2016-2017”. En: (2017).
- [81] J. O. Jensen et al. *Pre-investigation of water electrolysis*. 2006-1-6287. PSO-F&U, 2006.
- [82] S Shiva Kumar y VJMSfET Himabindu. “Hydrogen production by PEM water electrolysis—A review”. En: *Materials Science for Energy Technologies* 2.3 (2019), págs. 442-454.
- [83] Patrick Schmidt et al. *Power-to-liquids: Potentials and perspectives for the future supply of renewable aviation fuel*. German Environment Agency, 2016.

- 
- [84] Steffen Schemme et al. “H<sub>2</sub>-based synthetic fuels: A techno-economic comparison of alcohol, ether and hydrocarbon production”. En: *International journal of hydrogen energy* 45.8 (2020), págs. 5395-5414.
- [85] Debabrata Chanda et al. “Optimization of synthesis of the nickel-cobalt oxide based anode electrocatalyst and of the related membrane-electrode assembly for alkaline water electrolysis”. En: *Journal of Power Sources* 347 (2017), págs. 247-258. ISSN: 0378-7753. DOI: [10.1016/j.jpowsour.2017.02.057](https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2017.02.057).
- [86] Jian Wang et al. “Non-precious-metal catalysts for alkaline water electrolysis: operando characterizations, theoretical calculations, and recent advances”. En: *Chem. Soc. Rev.* 49 (24 2020), págs. 9154-9196. DOI: [10.1039/D0CS00575D](https://doi.org/10.1039/D0CS00575D).
- [87] Jung Won Lee et al. “Cellulose nanocrystals–blended zirconia/polysulfone composite separator for alkaline electrolyzer at low electrolyte contents”. En: *Chemical Engineering Journal* 428 (2022), págs. 131149. ISSN: 1385-8947. DOI: [10.1016/j.cej.2021.131149](https://doi.org/10.1016/j.cej.2021.131149).
- [88] Ying-Ling Liu. “Developments of highly proton-conductive sulfonated polymers for proton exchange membrane fuel cells”. En: *Polym. Chem.* 3 (6 2012), págs. 1373-1383. DOI: [10.1039/C2PY20106B](https://doi.org/10.1039/C2PY20106B).
- [89] Rui-Ting Liu et al. “Recent advances in proton exchange membrane water electrolysis”. En: *Chem. Soc. Rev.* 52 (16 2023), págs. 5652-5683. DOI: [10.1039/D2CS00681B](https://doi.org/10.1039/D2CS00681B).
- [90] Bin Dong et al. “Super Proton Conductive High-Purity Nafion Nanofibers”. En: *Nano Letters* 10.9 (2010). PMID: 20731365, págs. 3785-3790. DOI: [10.1021/nl102581w](https://doi.org/10.1021/nl102581w). eprint: [10.1021/nl102581w](https://doi.org/10.1021/nl102581w).
- [91] Jundika C. Kurnia, Agus P. Sasmito y Tariq Shamim. “Advances in proton exchange membrane fuel cell with dead-end anode operation: A review”. En: *Applied Energy* 252 (2019), págs. 113416. ISSN: 0306-2619. DOI: [10.1016/j.apenergy.2019.113416](https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2019.113416).

- 
- [92] Günter Schiller et al. “High temperature water electrolysis using metal supported solid oxide electrolyser cells (SOEC)”. En: *Journal of Applied Electrochemistry* 39.2 (2009), págs. 293-301.
- [93] Michael Preininger et al. “Performance of a ten-layer reversible Solid Oxide Cell stack (rSOC) under transient operation for autonomous application”. En: *Applied Energy* 254 (2019), pág. 113695. ISSN: 0306-2619. DOI: [10.1016/j.apenergy.2019.113695](https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2019.113695).
- [94] Yu Luo et al. “Exergy analysis of an integrated solid oxide electrolysis cell-methanation reactor for renewable energy storage”. En: *Applied Energy* 215 (2018), págs. 371-383. ISSN: 0306-2619. DOI: [10.1016/j.apenergy.2018.02.022](https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2018.02.022).
- [95] Ahmed Sajid et al. “A perspective on development of fuel cell materials: Electrodes and electrolyte”. En: *International Journal of Energy Research* 46.6 (2022), págs. 6953-6988. DOI: [10.1002/er.7635](https://doi.org/10.1002/er.7635).
- [96] “Design and optimization of hydrogen production by solid oxide electrolyzer with marine engine waste heat recovery and ORC cycle”. En: *Energy Conversion and Management* 229 (2021), pág. 113775. ISSN: 0196-8904. DOI: [10.1016/j.enconman.2020.113775](https://doi.org/10.1016/j.enconman.2020.113775).
- [97] Jakub Kupecki et al. “Energy analysis of a 10 kW-class power-to-gas system based on a solid oxide electrolyzer (SOE)”. En: *Energy Conversion and Management* 199 (2019), pág. 111934. ISSN: 0196-8904. DOI: [10.1016/j.enconman.2019.111934](https://doi.org/10.1016/j.enconman.2019.111934).
- [98] Anand B Rao y Edward S Rubin. “A technical, economic, and environmental assessment of amine-based CO<sub>2</sub> capture technology for power plant greenhouse gas control”. En: *Environmental science & technology* 36.20 (2002), págs. 4467-4475.
- [99] Hexiang Deng et al. “Multiple functional groups of varying ratios in metal-organic frameworks”. En: *Science* 327.5967 (2010), págs. 846-850.

- 
- [100] Mahdi Fasihi, Olga Efimova y Christian Breyer. “Techno-economic assessment of CO<sub>2</sub> direct air capture plants”. En: *Journal of cleaner production* 224 (2019), págs. 957-980.
- [101] Sara Budinis et al. “An assessment of CCS costs, barriers and potential”. En: *Energy strategy reviews* 22 (2018), págs. 61-81.
- [102] Tobias Trost et al. “Erneuerbares Methan: Analyse der CO<sub>2</sub>-Potenziale für Power-to-Gas Anlagen in Deutschland”. En: *Interdisziplinäre Aspekte der Energiewirtschaft* (2016), págs. 295-312.
- [103] Richard TJ Porter et al. “Cost and performance of some carbon capture technology options for producing different quality CO<sub>2</sub> product streams”. En: *International Journal of Greenhouse Gas Control* 57 (2017), págs. 185-195.
- [104] Sebastian Posch y Markus Haider. “Optimization of CO<sub>2</sub> compression and purification units (CO<sub>2</sub>CPU) for CCS power plants”. En: *Fuel* 101 (2012), págs. 254-263.
- [105] Prabir Basu. *Biomass gasification and pyrolysis: practical design and theory*. Academic press, 2010.
- [106] Papiya Roy. “Characterization of biomass as a feedstock of alternate fuels”. En: *University of Guelph, Ontario, Canada* (2005).
- [107] Mustafa Balat et al. “Main routes for the thermo-conversion of biomass into fuels and chemicals. Part 2: Gasification systems”. En: *Energy conversion and management* 50.12 (2009), págs. 3158-3168.
- [108] Stefano Stendardo et al. “High quality syngas production via steam-oxygen blown bubbling fluidised bed gasifier”. En: *Energy* 103 (2016), págs. 697-708.
- [109] Ryan M Swanson et al. “Techno-economic analysis of biofuels production based on gasification, National Renewable energy Laboratory”. En: *Office of Energy Efficiency & Renewable Energy, operated by the Alliance for Sustainable Energy, LLC* (2010).

- 
- [110] Zoe Kapetaki et al. “Process simulation of a dual-stage Selexol process for 95 % carbon capture efficiency at an integrated gasification combined cycle power plant”. En: *International Journal of Greenhouse Gas Control* 39 (2015), págs. 17-26.
- [111] M Mercedes Maroto-Valer. *Developments and innovation in carbon dioxide (CO<sub>2</sub>) capture and storage technology: carbon dioxide (CO<sub>2</sub>) storage and utilisation*. Elsevier, 2010.
- [112] Alexander Zoelle et al. *Cost and performance baseline for fossil energy plants volume 1a: bituminous coal (PC) and natural gas to electricity revision 3*. Inf. téc. National Energy Technology Laboratory (NETL), Pittsburgh, PA, Morgantown, WV ..., 2015.
- [113] Servicio de Evaluación Ambiental. *Criterio de Evaluación en el SEIA: Descripción Integrada de Proyectos para la Generación de Hidrógeno Verde en el SEIA*. Diseño y diagramación por Servicio de Evaluación Ambiental. Fotografías interior y portada: Adobe Stock. Mar. de 2023.
- [114] R. H. Shipman. “Liquefied petroleum gas”. En: *Plant Engineer’s Reference Book (Second Edition)*. Ed. por Dennis A. Snow. Second Edition. Oxford: Butterworth-Heinemann, 2002, págs. 14-1-14-14. ISBN: 978-0-7506-4452-5.
- [115] National Fire Protection Association. *NFPA 58: Liquefied Petroleum Gas Code*. 2024.
- [116] Gas Processors Association. “GPA 2140: Standard for Liquid Petroleum Gas Specification and Test Method”. En: (2017).
- [117] ASTM International. *Standard Specification for Liquefied Petroleum Gases*. Inf. téc. D1835-18. ASTM International, 2018.
- [118] *Specification for Commercial Butane and Commercial Propane*. London, UK, 2014.
- [119] *Petroleum Products - Fuels (Class F) - Classification - Part 3: Family L (Liquefied Petroleum Gases)*. Geneva, Switzerland, 1987.

- 
- [120] *Petroleum Products — Fuels (Class F) — Liquefied Petroleum Gases — Specifications*. Geneva, Switzerland, 2013.
- [121] Ministerio de Energía. “Decreto Supremo N° 108 de 2014”. En: (2014).
- [122] *NCh 77:1985*. <https://ecommerce.inn.cl/nch77198540832>. Gases licuados de petróleo (GLP) - Determinación de la presión de vapor - Método GLP. Instituto Nacional de Normalización (INN), 1985.
- [123] *ISO 27914:20 Carbon dioxide capture, transportation and geological storage – Carbon dioxide storage using enhanced oil recovery (CO<sub>2</sub>-EOR)*. International Standard. Geneva, Switzerland, 2020.
- [124] *Ley 21.455: Ley Marco de Cambio Climático*. Ley Nacional. Santiago, Chile, 2021.
- [125] Ministerio de Energía de Chile y Superintendencia de Electricidad y Combustibles. *Guía de Apoyo para Solicitud de Autorización de Proyectos Especiales de Hidrógeno*. 2021. URL: [https://energia.gob.cl/sites/default/files/guia\\_proyectos\\_especiales\\_hidrogeno\\_2021.pdf](https://energia.gob.cl/sites/default/files/guia_proyectos_especiales_hidrogeno_2021.pdf).
- [126] Ministerio de Vivienda y Urbanismo. *Uso de suelo aplicable a edificaciones, instalaciones y redes asociados a la generación de Hidrógeno*. Documento de la División de Desarrollo Urbano. Emitido por el MINVU, establece normativas para el uso de suelo en proyectos relacionados con la generación de hidrógeno. Nov. de 2022.
- [127] Edwin Yair Uribe-Salazar, Bernardo Argemiro Herrera-Múnera e Iván Darío Bedoya-Caro. “Estudio teórico, numérico y experimental de la intercambiabilidad del gas natural en Antioquia”. En: *DYNA* 86.208 (2019), págs. 346-354.
- [128] National Institute of Standards and Technology. *Web book*. Accessed on: 27/12/2023. 2023.
- [129] The Engineering ToolBox. *Fuel Gases - Wobbe Index*. Accessed on: 27/12/2023. 2003.
- [130] Law C.K. *Combustion physics*. CUP, 2006. ISBN: 051124584X(9780511245848).

- 
- [131] Ziyu Wang et al. “Laminar burning speeds and flame instabilities of isobutane carbon dioxide air mixtures at high pressures and temperatures”. En: *Fuel* 268 (2020), pág. 117410. ISSN: 0016-2361.
- [132] Gabi Ben-Dor, Ozer Igra y Tov Elperin, eds. *Handbook of Shock Waves*. San Diego, CA: Academic Press, 2001. ISBN: 9780120864300.
- [133] Riccardo Amirante et al. “Laminar flame speed correlations for methane, ethane, propane and their mixtures, and natural gas and gasoline for spark-ignition engine simulations”. En: *International Journal of Engine Research* 18.9 (2017), págs. 951-970.
- [134] Christine M. Vagelopoulos y Fokion N. Egolfopoulos. “Direct experimental determination of laminar flame speeds”. En: *Symposium (International) on Combustion* 27.1 (1998). Twenty-Seventh Symposium (International) on Combustion Volume One, págs. 513-519. ISSN: 0082-0784.
- [135] G. Jomaas et al. “Experimental determination of counterflow ignition temperatures and laminar flame speeds of C2–C3 hydrocarbons at atmospheric and elevated pressures”. En: *Proceedings of the Combustion Institute* 30.1 (2005), págs. 193-200. ISSN: 1540-7489.
- [136] S. G. DAVIS y C.K. LAW. “Determination of and Fuel Structure Effects on Laminar Flame Speeds of C1 to C8 Hydrocarbons”. En: *Combustion Science and Technology* 140.1-6 (1998), págs. 427-449. DOI: [10.1080/00102209808915781](https://doi.org/10.1080/00102209808915781).
- [137] K.J. Bosschaart y L.P.H. de Goey. “The laminar burning velocity of flames propagating in mixtures of hydrocarbons and air measured with the heat flux method”. En: *Combustion and Flame* 136.3 (2004), págs. 261-269. ISSN: 0010-2180.
- [138] J. HERZLER, L. JERIG y P. ROTH. “SHOCK-TUBE STUDY OF THE IGNITION OF PROPANE AT INTERMEDIATE TEMPERATURES AND HIGH PRESSU-

- 
- RES”. En: *Combustion Science and Technology* 176.10 (oct. de 2004), págs. 1627-1637. ISSN: 0010-2202.
- [139] D. Healy et al. “Isobutane ignition delay time measurements at high pressure and detailed chemical kinetic simulations”. En: *Combustion and Flame* 157.8 (2010), págs. 1540-1551. ISSN: 0010-2180.
- [140] Lijuan Huang et al. “Influence of pressure on the flammability limits and explosion pressure of ethane/propane-air mixtures in a cylinder vessel”. En: *Journal of Loss Prevention in the Process Industries* 74 (2022), pág. 104638. ISSN: 0950-4230.
- [141] Shigeo Kondo et al. “Flammability limits of isobutane and its mixtures with various gases”. En: *Journal of Hazardous Materials* 148.3 (2007), págs. 640-647. ISSN: 0304-3894.
- [142] Henry J Curran. “Developing detailed chemical kinetic mechanisms for fuel combustion”. En: *Combustion and Flame* 203 (2019), págs. 86-96.
- [143] Guillaume Blanquart y Frédérique Battin-Leclerc. “Chemical mechanism for high temperature combustion of engine-relevant fuels”. En: *Combustion and Flame* 156.1 (2009), págs. 181-199.
- [144] Dario S Farina Jr. “Automating the generation of detailed kinetic models for combustion”. En: *Combustion and Flame* 249 (2023), págs. 111-127.
- [145] Luís Eduardo de Albuquerque Paixão e Freire de Carvalho y Fernando Luiz Sacomano Filho. “Laminar flame speed correlations for dual fuel flames in high-pressure conditions”. En: *Fuel* 334 (2023), pág. 126804. ISSN: 0016-2361. DOI: [10.1016/j.fuel.2022.126804](https://doi.org/10.1016/j.fuel.2022.126804).
- [146] H. Wang et al. *A High-Temperature Chemical Kinetic Model of n-Alkane (up to n-Dodecane), Cyclohexane, and Methyl-, Ethyl-, n-Propyl- and n-Butyl-Cyclohexane Oxidation at High Temperatures*. JetSurF version 2.0. September 19, 2010. 2010.

- 
- [147] Jérôme Yon et al. “Revealing soot maturity based on multi-wavelength absorption/emission measurements in laminar axisymmetric coflow ethylene diffusion flames”. En: *Combustion and Flame* 227 (2021), págs. 147-161.
- [148] David G Goodwin et al. “Cantera: An object-oriented software toolkit for chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes”. En: *Zenodo* (2018).
- [149] H. Wang et al. *A high-temperature chemical kinetic model of n-alkane (up to n-dodecane), cyclohexane, and methyl-, ethyl-, n-propyl and n-butyl-cyclohexane oxidation at high temperatures*. JetSurF version 2.0. Sep. de 2010.
- [150] Jérôme Yon et al. “Examination of wavelength dependent soot optical properties of diesel and diesel/rapeseed methyl ester mixture by extinction spectra analysis and LII measurements”. En: *Applied Physics B* 104 (2011), págs. 253-271.
- [151] F Migliorini, KA Thomson y GJ Smallwood. “Investigation of optical properties of aging soot”. En: *Applied Physics B* 104 (2011), págs. 273-283.
- [152] Jérôme Yon et al. “Revealing soot maturity based on multi-wavelength absorption/emission measurements in laminar axisymmetric coflow ethylene diffusion flames”. En: *Combustion and Flame* 227 (2021), págs. 147-161. ISSN: 0010-2180. DOI: [10.1016/j.combustflame.2020.12.049](https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2020.12.049).
- [153] Juan J Cruz et al. “Soot volume fraction measurements by auto-compensating laser-induced incandescence in diffusion flames generated by ethylene pool fire”. En: *Frontiers in Mechanical Engineering* 7 (2021), pág. 744283.
- [154] Craig Bohren. *Absorption and scattering of light by small particles*. New York: Wiley, 1983. ISBN: 978-0-471-29340-8.
- [155] Kyle J. Daun et al. “Deconvolution of axisymmetric flame properties using Tikhonov regularization”. En: *Appl. Opt.* 45.19 (jul. de 2006), págs. 4638-4646. DOI: [10.1364/AO.45.004638](https://doi.org/10.1364/AO.45.004638).

- 
- [156] F. Escudero et al. “Unified behavior of soot production and radiative heat transfer in ethylene, propane and butane axisymmetric laminar diffusion flames at different oxygen indices”. En: *Fuel* 183 (2016), págs. 668-679. ISSN: 0016-2361. DOI: [10.1016/j.fuel.2016.06.126](https://doi.org/10.1016/j.fuel.2016.06.126).
- [157] A. Rodríguez et al. “Retrieving soot volume fraction fields for laminar axisymmetric diffusion flames using convolutional neural networks”. En: *Fuel* 285 (2021), pág. 119011. ISSN: 0016-2361. DOI: [10.1016/j.fuel.2020.119011](https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.119011).
- [158] Hope A. Michelsen et al. “A Review of Terminology Used to Describe Soot Formation and Evolution under Combustion and Pyrolytic Conditions”. En: *ACS Nano* 14.10 (oct. de 2020), págs. 12470-12490. ISSN: 1936-0851. DOI: [10.1021/acsnano.0c06226](https://doi.org/10.1021/acsnano.0c06226).
- [159] Meng Li et al. “Role of elemental carbon in the photochemical aging of soot”. En: *Proceedings of the National Academy of Sciences* 115.30 (2018), págs. 7717-7722. DOI: [10.1073/pnas.1804481115](https://doi.org/10.1073/pnas.1804481115). eprint: <https://www.pnas.org/doi/pdf/10.1073/pnas.1804481115>.
- [160] Randall L. Vander Wal. “Soot precursor carbonization: Visualization using LIF and LII and comparison using bright and dark field TEM”. En: *Combustion and Flame* 112.4 (1998), págs. 607-616. ISSN: 0010-2180. DOI: [10.1016/S0010-2180\(97\)00171-5](https://doi.org/10.1016/S0010-2180(97)00171-5).
- [161] Mohammadreza Kholghy et al. “The evolution of soot morphology in a laminar coflow diffusion flame of a surrogate for Jet A-1”. En: *Combustion and Flame* 160.10 (2013), págs. 2119-2130. ISSN: 0010-2180. DOI: [10.1016/j.combustflame.2013.04.008](https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2013.04.008).
- [162] A. D’Alessio et al. “The spectroscopic characterisation of UV absorbing nanoparticles in fuel rich soot forming flames”. En: *Journal of Aerosol Science* 29.4 (1998), págs. 397-409. ISSN: 0021-8502. DOI: [10.1016/S0021-8502\(97\)00457-6](https://doi.org/10.1016/S0021-8502(97)00457-6).

- 
- [163] L.A. Sgro et al. “Measurement of nanoparticles of organic carbon in non-sooting flame conditions”. En: *Proceedings of the Combustion Institute* 32.1 (2009), págs. 689-696. ISSN: 1540-7489. DOI: [10.1016/j.proci.2008.06.216](https://doi.org/10.1016/j.proci.2008.06.216).
- [164] B.S. Haynes y H.Gg. Wagner. “Soot formation”. En: *Progress in Energy and Combustion Science* 7.4 (1981), págs. 229-273. ISSN: 0360-1285. DOI: [10.1016/0360-1285\(81\)90001-0](https://doi.org/10.1016/0360-1285(81)90001-0).
- [165] H.A. Michelsen. “Probing soot formation, chemical and physical evolution, and oxidation: A review of in situ diagnostic techniques and needs”. En: *Proceedings of the Combustion Institute* 36.1 (2017), págs. 717-735. ISSN: 1540-7489. DOI: [10.1016/j.proci.2016.08.027](https://doi.org/10.1016/j.proci.2016.08.027).
- [166] M. Leschowski et al. “Combination of LII and extinction measurements for determination of soot volume fraction and estimation of soot maturity in non-premixed laminar flames”. En: *Applied Physics B* 119.4 (jun. de 2015), págs. 685-696. ISSN: 1432-0649. DOI: [10.1007/s00340-015-6092-2](https://doi.org/10.1007/s00340-015-6092-2).
- [167] Patrizia Minutolo, Mario Commodo y Andrea D’Anna. “Optical properties of incipient soot”. En: *Proceedings of the Combustion Institute* 39.1 (2023), págs. 1129-1138. ISSN: 1540-7489. DOI: [10.1016/j.proci.2022.09.019](https://doi.org/10.1016/j.proci.2022.09.019).
- [168] Fuwu Yan et al. “An experimental study on the spectral dependence of light extinction in sooting ethylene counterflow diffusion flames”. En: *Experimental Thermal and Fluid Science* 100 (2019), págs. 259-270. ISSN: 0894-1777. DOI: [10.1016/j.expthermflusci.2018.09.008](https://doi.org/10.1016/j.expthermflusci.2018.09.008).
- [169] A. Bescond et al. “Soot optical properties determined by analyzing extinction spectra in the visible near-UV: Toward an optical speciation according to constituents and structure”. En: *Journal of Aerosol Science* 101 (2016), págs. 118-132. ISSN: 0021-8502. DOI: [10.1016/j.jaerosci.2016.08.001](https://doi.org/10.1016/j.jaerosci.2016.08.001).

- 
- [170] Byoung Chul Ko, Kwang-Ho Cheong y Jae-Yeal Nam. “Fire detection based on vision sensor and support vector machines”. En: *Fire Safety Journal* 44.3 (2009), págs. 322-329.
- [171] P Pinto et al. “Effects of wildland fuel moisture content on radiant heat flux emitted by a laminar non-premixed flame”. En: *Applied Thermal Engineering* 181 (2020), pág. 115968. DOI: [10.1016/j.applthermaleng.2020.115968](https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2020.115968).
- [172] P Pinto et al. “A simpler tractable contour technique to model thermal radiation from buoyant diffusion flames”. En: *Experimental Thermal and Fluid Science* (2023), pág. 111027. DOI: [10.1016/j.expthermflusci.2023.111027](https://doi.org/10.1016/j.expthermflusci.2023.111027).
- [173] E.M. Sparrow. “A new and simpler formulation for radiative angle factors”. En: *Journal of Heat Transfer* 85.2 (1963), págs. 81-87. DOI: [10.1115/1.3686058](https://doi.org/10.1115/1.3686058).
- [174] John Robert Taylor y William Thompson. *An introduction to error analysis: the study of uncertainties in physical measurements*. Vol. 2. Springer, 1982.
- [175] Yingping Huang et al. “On-line flicker measurement of gaseous flames by image processing and spectral analysis”. En: *Measurement Science and Technology* 10.8 (jul. de 1999), págs. 726-733. DOI: [10.1088/0957-0233/10/8/307](https://doi.org/10.1088/0957-0233/10/8/307).
- [176] BM Crosland, MR Johnson y KA Thomson. “Analysis of uncertainties in instantaneous soot volume fraction measurements using two-dimensional, auto-compensating, laser-induced incandescence (2D-AC-LII)”. En: *Applied Physics B* 102 (2011), págs. 173-183.
- [177] Global Technology Network of WLPGA (GLOTEC). *LPG Fuel Quality Standards, Issues & Good Practices*. Developed with contributions from WLPGA members and external contributors. Abr. de 2019.
- [178] R. M. Green et al. “The Autoignition of Isobutane in a Knocking Spark Ignition Engine”. En: *SAE Transactions* 96 (1987), págs. 212-230. ISSN: 0096736X. URL: <http://www.jstor.org/stable/44470837> (visitado 29-07-2025).

- 
- [179] Xiaoyang Lei et al. “A comparative study on the autoignition characteristics of cyclopropane and propane at high temperatures”. En: *Combustion and Flame* 237 (2022), pág. 111881.
- [180] Miles A Burnett y Margaret S Wooldridge. “An experimental investigation of flame and autoignition behavior of propane”. En: *Combustion and Flame* 224 (2021), págs. 24-32.
- [181] Emil O. Åkesson y Kyle J. Daun. “Parameter selection methods for axisymmetric flame tomography through Tikhonov regularization”. En: *Appl. Opt.* 47.3 (ene. de 2008), págs. 407-416. DOI: [10.1364/AO.47.000407](https://doi.org/10.1364/AO.47.000407).
- [182] F Escudero et al. “Unified behavior of soot production and radiative heat transfer in ethylene, propane and butane axisymmetric laminar diffusion flames at different oxygen indices”. En: *Fuel* 183 (2016), págs. 668-679.
- [183] Amanda Garcia et al. “Effect of hydrogen addition on soot maturity and volume fraction of ethylene non-premixed flames under different oxygen indices”. En: *Proceedings of the Combustion Institute* 40.1 (2024), pág. 105539. ISSN: 1540-7489. DOI: [10.1016/j.proci.2024.105539](https://doi.org/10.1016/j.proci.2024.105539).
- [184] Juan J. Cruz et al. “Sooting propensity and maturity of gasoline/anisole blends in a laminar coflow diffusion flame”. En: *Fuel* 345 (2023), pág. 128091. ISSN: 0016-2361. DOI: [10.1016/j.fuel.2023.128091](https://doi.org/10.1016/j.fuel.2023.128091).
- [185] M Leschowski et al. “Combination of LII and extinction measurements for determination of soot volume fraction and estimation of soot maturity in non-premixed laminar flames”. En: *Applied Physics B* 119 (2015), págs. 685-696.
- [186] Felipe Escudero et al. “Effect of maturity on soot volume fraction measurements using the AC-LII technique in a laminar coflow ethylene diffusion flame”. En: *Proceedings*

- 
- of the Combustion Institute* 39.1 (2023), págs. 1505-1514. ISSN: 1540-7489. DOI: [10.1016/j.proci.2022.10.013](https://doi.org/10.1016/j.proci.2022.10.013).
- [187] Mijail Littin et al. “Understanding soot production in a Jet A-1 laminar coflow non-premixed flame”. En: *Proceedings of the Combustion Institute* 40.1-4 (2024). Cited by: 0. DOI: [10.1016/j.proci.2024.105534](https://doi.org/10.1016/j.proci.2024.105534).
- [188] A Bescond et al. “Soot optical properties determined by analyzing extinction spectra in the visible near-UV: Toward an optical speciation according to constituents and structure”. En: *Journal of Aerosol Science* 101 (2016), págs. 118-132.
- [189] Tim S Totton et al. “Modelling the internal structure of nascent soot particles”. En: *Combustion and Flame* 157.5 (2010), págs. 909-914.
- [190] GH Markstein y John De Ris. “Radiant emission and absorption by laminar ethylene and propylene diffusion flames”. En: *Symposium (International) on Combustion*. Vol. 20. Elsevier. 1985, págs. 1637-1646.
- [191] H Gohari Darabkhani et al. “Impact of co-flow air on buoyant diffusion flames flicker”. En: *Energy conversion and management* 52.8-9 (2011), págs. 2996-3003.

# Índice alfabético

- adiabática, 8, 9, 86, 88, 90, 109, 138, 188
- cambio climático, 5, 11, 12, 20, 81
- CCS, 5, 35, 36, 41, 42, 44
- Chile, 2, 4, 7, 11, 13, 51, 53–56, 58–62, 64, 75, 76, 79, 81, 82, 130–132, 190
- combustible, 2–9, 11–14, 18–23, 25, 29–31, 37, 39–41, 43, 45–48, 50, 53, 55–57, 59–62, 66, 73–75, 78, 79, 82, 83, 86–91, 93–98, 100, 102, 103, 108, 109, 121, 127–130, 132–140, 143, 144, 148, 153–167, 170, 173, 178, 181–190
- combustión, 5–8, 12, 13, 15, 29, 35, 37, 39, 43, 44, 55, 67, 86–94, 96, 98, 99, 101–103, 121, 124, 132–134, 136, 137, 146, 148–151, 153, 156, 165–170, 173, 174, 177, 178, 181–187, 189, 190
- contamina, 6, 7, 9, 12, 13, 15, 34, 45, 47, 67, 73, 75, 77, 152, 165, 168, 181, 184, 186
- Diagrama ternario, 98, 99, 143, 145, 149, 151, 153
- diésel, 7, 20, 29, 55, 56
- dióxido de carbono, 2, 18, 19, 22, 26, 46, 48, 62, 80, 99, 107, 151
- DME, 18, 20, 23–25, 27–29
- e-GL, 4, 6–16, 75, 77, 78, 86, 89–91, 106–111, 127–140, 143–170, 173, 175–179, 181–190
- economía, 2, 22, 58, 63, 191
- efecto invernadero, 2, 15, 81, 86, 100
- electrolizador, 21, 31–35, 49, 50, 60, 62
- emisión, 13, 41, 43, 45, 92, 100, 109, 111, 112, 124, 154–158, 163–165, 170, 172, 173, 181, 190
- energía, 2–5, 9, 11, 18, 19, 22, 33, 35, 41, 42, 44, 49, 50, 53–61, 63, 64, 73, 78, 82, 84, 87–89, 91, 93, 94, 101, 121, 129, 134, 140, 148, 156, 161, 168, 169, 173, 181, 183, 184, 189
- entalpía, 87, 88, 133, 134, 153, 154
- estabilidad, 8, 9, 12–15, 26, 32, 75, 107, 109, 124, 143, 145, 146, 162, 163, 166–168, 184, 189

- extinción, 109, 111, 112, 117, 124,  
155–158, 170
- Fischer–Tropsch, 18, 23, 25
- fracción de volumen, 8, 12, 14, 15, 119,  
158, 160, 165
- gasolina, 4–7, 20, 27, 29, 30, 62, 86, 100
- GLP, 4–6, 10, 11, 13–15, 27, 30, 65–69, 71,  
74–77, 79, 89, 90, 107, 127, 129,  
131, 132, 148, 153, 154, 188–190
- hidrocarburo, 4, 25, 27, 29, 30, 46, 65–67,  
73, 74, 80, 98, 102, 103, 116, 129,  
153, 154
- hidrógeno, 2–5, 11, 18, 20, 21, 26, 27, 29,  
31–35, 42, 46–48, 50–64, 82–85,  
91, 107, 116, 117
- hollín, 2, 6–9, 12–15, 109, 111, 112,  
115–119, 124, 155–173, 175–179,  
181–187, 189, 190
- inflamabilidad, 8, 9, 12, 13, 15, 90, 91,  
94–97, 145–150, 153–155, 189
- infraestructura, 5, 11, 30, 58, 63, 83, 136,  
167, 188
- innovación, 7, 190
- intercambiabilidad, 8, 12, 13, 86–89,  
134–138, 147, 153
- laminar, 8–10, 12–15, 91, 93, 96, 108, 109,  
132, 143–145, 166, 171
- llamas de difusión, 7, 109, 173
- madurez, 30, 33, 34, 111, 116, 118, 119,  
159, 160, 166, 175, 177
- metanol, 5, 6, 18, 20, 23–28, 42, 43, 50, 62
- MtG, 5, 6, 30
- norma, 4, 5, 7–9, 11–15, 38, 50, 65–69, 71,  
73–80, 82, 84, 127–132, 162, 188,  
190
- oxidante, 93, 108, 144, 167, 172, 173, 175,  
178, 181, 182, 184–186, 189
- Poder calorífico, 87
- poder calorífico, 5, 21, 45, 86, 87, 89, 129,  
134–136, 147, 188
- PtX, 18, 20–23, 26, 29, 30
- radiación, 8, 9, 12, 14, 15, 53, 56, 109,  
111, 118–121, 124, 159–162, 165,  
167, 170, 173, 175, 181–184, 186,  
187, 189
- regulación, 68, 76, 78, 81–83
- renovable, 2–8, 11, 13, 15, 18–21, 27, 30,  
49, 53–56, 59, 61, 63, 64, 166, 167,  
188–190

- seguridad, 8, 9, 11, 13, 50, 56, 67–69, 71,  
 73–76, 79, 82–84, 86, 90, 96, 97,  
 107, 127, 138, 143, 145–147, 149,  
 153–155
- simulación, 8, 13, 102, 105, 132–134, 138,  
 140, 145, 153
- sintético, 6, 7, 11, 18–21, 29–31, 47, 50,  
 61, 62, 82, 127, 129, 140, 166
- sostenible, 6–8, 11, 12, 14–16, 26, 55, 79,  
 129, 140, 154, 155, 168, 190
- SynGas, 20, 21, 30, 41, 42, 46–48
- tecnología, 18, 20–24, 26, 30–33, 35–37,  
 39, 44, 50, 53, 56, 57, 61, 78, 83,  
 92, 168, 190
- temperatura, 6, 8, 9, 12, 21–23, 25, 26, 29,  
 30, 34, 38, 42, 46–48, 57, 86,  
 88–91, 94, 97, 101–103, 105, 109,  
 111, 115, 117, 119, 133, 134,  
 138–140, 143, 153, 156–160, 163,  
 164, 166, 167, 171–176, 182,  
 184–189
- tiempo de retardo de ignición, 94
- transición energética, 2, 12, 14, 51, 155,  
 168, 188, 190
- TRL, 5, 30, 31
- velocidad de llama, 93, 96, 133, 143–145

