

UNIVERSIDAD TÉCNICA FEDERICO SANTA MARÍA  
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MECÁNICA  
VALPARAÍSO – CHILE



“INVESTIGACIÓN NUMÉRICO-  
EXPERIMENTAL DE LA COMBUSTIÓN DE  
METANO-AMONIACO EN UN REACTOR  
DE MEDIO POROSO DE FLUJO  
RECÍPROCO”

LUIS ALEJANDRO BARASSI CABRERA

TESIS DE GRADO PARA OPTAR AL TÍTULO DE INGENIERO CIVIL  
MECÁNICO Y EL GRADO DE MAGISTER EN CIENCIAS DE LA  
INGENIERÍA MECÁNICA

PROFESOR GUÍA:

DR. MARIO TOLEDO T.

PROFESOR CO-GUÍA:

DR. ANDRÉS ARRIAGADA R.

PROF. CORREFERENTE INTERNO:

DR. (C) CLAUDIO MUÑOZ H.

PROF. CORREFERENTE EXTERNO:

DR. VALERI BUBNOVICH

NOVIEMBRE – 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:** Investigación numérico-experimental de la combustión de metano-amoniaco en un reactor de medio poroso de flujo recíproco

**Nombre del candidato(a):** Luis Alejandro Barassi Cabrera

**Carrera / Grado:** Ingeniería Civil Mecánica y Magister en ciencias de la Ingeniería Mecánica

**Campus:** Casa Central Valparaíso **Departamento:** Ingeniería Mecánica

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

Yo, Mario Toledo Torres, 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 (marcar una opción)

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 (**marcar una opción**):

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:** 10/11/2025

**Firma:**

**Estudiante o Candidato(a):**

**Fecha:** 10/11/2025

**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.*

TITULO DE LA TESIS: “Investigación numérico-experimental de la combustión de metano-  
amoniaco en un reactor de medio poroso de flujo recíproco”

AUTOR: Luis Alejandro Barassi Cabrera

TRABAJO DE TESIS, presentado en cumplimiento parcial de los requisitos para el Título de  
Ingeniero Civil Mecánico y el Grado de Magíster en Ciencias de la Ingeniería Mecánica de la  
Universidad Técnica Federico Santa María.

Dr. Mario Toledo T. ....

Dr. Andrés Arriagada R. ....

Dr. (C) Claudio Muñoz H. ....

Dr. Valeri Bubnovich .....

Valparaíso, Chile. Noviembre de 2025

## Agradecimientos

*Para mi familia, quienes fueron un pilar fundamental en cada momento. A mis padres María y Luis, quienes por tantos años de esfuerzo y perseverancia me ayudaron a ser una mejor persona, incentivar-me a crecer y perseguir mis sueños, siempre un paso a la vez. A mi hermana Carolina, quien ha sido mi contención emocional y me ha aconsejado en los momentos buenos y no tan buenos, siempre con una sonrisa y esperanza. A mi tía Inés, quien ha sido parte de mi desarrollo académico, siempre confiando en mis capacidades y alentándome a seguir adelante con mucho cariño. A mi pareja Tatiana, quien estuvo presente desde mis años académicos más complicados, siendo un apoyo fundamental y una gran compañera de aventuras.*

*A mi increíble grupo de amigos que pude conocer en la universidad, cada uno de ellos aportando momentos inolvidables a mi vida, estando presentes en días interminables de estudio, como también para salir y reírnos. A los apoyos académicos tanto del Laboratorio de Termofluidos como del Laboratorio de energías renovables, el grupo de investigación termoquímica sostenible, a la empresa QUEMPIN, a Osvaldo Leiva, a José Duque y a mi profesor guía y co-guía, quienes nunca se opusieron a prestar ayuda o conocimientos, por ello estoy profundamente agradecido.*

*Para cada uno de los que aportó desde el primer día o que fue apareciendo en el camino, sin duda aportaron de la mejor manera en mi desarrollo para ser un mejor profesional y persona.*

*Gracias.*

# Nomenclatura

## Parámetros y abreviaciones

a	Permeabilidad	[m <sup>2</sup> ]
c	Calor específico	[J/(kg K)]
C <sub>2</sub>	Resistencia inercial	[m <sup>-1</sup> ]
D	Coefficiente de difusión másica	[m <sup>2</sup> /s]
D <sub>p</sub>	Diámetro de poro	[m]
h	Entalpía molar	[J/mol]
k	Conductividad térmica	[W/(m K)]
p	Presión	[Pa]
R	Constante universal de los gases	[J/(mol K)]
T	Temperatura	[K]
t	Tiempo	[s]
u	Velocidad	[m/s]
V <sub>a,e</sub>	Volumen de aire estequiométrico	[m <sup>3</sup> /kg]
W	Peso molecular	[kg/mol]
x	Fracción molar	
Y	Fracción másica de especies	
z	Coordenada axial	[m]
BESS	Battery Energy Storage System	
CEN	Coordinador Eléctrico Nacional	
GEI	Gases de Efecto Invernadero	
IEA	International Energy Agency	
MPI	Medio Poroso Inerte	

## Símbolos griegos

$\varepsilon$	Porosidad	
$\varphi$	Relación de equivalencia	
$\rho$	Densidad	[kg/m <sup>3</sup> ]
$\bar{\tau}$	Tensor de esfuerzos	
$\omega$	Densidad de poro	[PPI]
$\dot{\omega}$	Tasa de producción molar	

## Subíndices

0	Inicial
eff	Efectivo
g	Gas
ig	Ignición
i	Especie i
sc	Semiciclo

# Resumen

En el marco del proyecto de Fomento de la Vinculación Internacional (FOVI) denominado “Tecnologías Termoquímicas para el Futuro (T2F): Red interdisciplinaria de investigación, desarrollo e innovación para acelerar el proceso de descarbonización”, se realiza una investigación utilizando una metodología de tipo numérica y experimental de la combustión en mezcla metano/amoniaco utilizando un reactor de flujo recíproco con medios porosos en su interior. Para ello, en primera instancia se realiza una revisión del estado del arte en donde se profundiza los procesos de combustión, reactores de flujo recíproco, mecanismos cinéticos de combustión y medios porosos inertes. Donde hasta la fecha, no se encuentra en la literatura un estudio similar en el que se trabaje numérica o experimentalmente con este tipo de combustibles para reactores de flujo recíproco. El estudio cobra relevancia debido al creciente protagonismo que está teniendo el amoniaco ( $\text{NH}_3$ ) como combustible debido a su carbono neutralidad en el proceso de combustión, por lo que al utilizarlo en mezcla con otros combustibles que son ampliamente utilizados en la industria, como lo es el metano ( $\text{CH}_4$ ), reduce las emisiones de gases de efecto invernadero. Además, la utilización de un reactor de flujo recíproco con medios porosos inertes, a diferencia de los quemadores tradicionales, permiten aprovechar la recuperación de calor de los gases de salida obteniendo mayores eficiencias y una combustión superadiabática.

En este trabajo se estudia la distribución de temperatura a lo largo del reactor y las emisiones gaseosas de monóxido de carbono (CO), dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ), óxidos de nitrógeno ( $\text{NO}_x$ ), hidrógeno ( $\text{H}_2$ ) y amoniaco ( $\text{NH}_3$ ) frente a la variación de la relación de equivalencia ( $\phi$ ) y fracción molar de amoniaco en mezcla ( $x_{\text{NH}_3}$ ). Para la metodología experimental se utiliza un banco de pruebas con un quemador de flujo recíproco de 305 mm de longitud y 60 mm de diámetro interno con espuma cerámica de zirconia ( $\text{ZrO}_2$ ) y carburo de silicio (SiC) como medio poroso en el interior (83% porosidad) y 30 segundos de cambio recíproco. Se poseen 9 puntos equidistantes para la toma de temperatura a lo largo del reactor, mientras que para la medición de emisiones se utilizan analizadores de gases de combustión y de amoniaco. En cuanto a lo numérico, se utiliza el software comercial ANSYS® fluent representando el fenómeno mediante una simulación unidimensional, de tipo transiente con una cinética reducida de 45 especies y 419 reacciones.

Los resultados demuestran que el modelo computacional predice de manera aceptable los perfiles térmicos y emisiones para mezclas pobres en combustible ( $\phi < 1.0$ ), pero que presenta mayores desviaciones para mezclas ricas ( $\phi > 1.0$ ). Se obtiene que la temperatura máxima resulta de 1791K para la configuración de  $\phi = 1.0$  y  $x_{\text{NH}_3} = 0.2$ . Para mezclas pobres el aumento de amoniaco en mezcla produce un aumento en la temperatura máxima local y que decae levemente para  $x_{\text{NH}_3} = 0.4$  al llegar a  $\phi = 1.0$ . Para este mismo rango de equivalencia, disminuye tanto el CO como el  $\text{CO}_2$ , alrededor de un 50% para ambos en el caso de  $x_{\text{NH}_3} = 0.4$ . Para  $x_{\text{NH}_3} = 0.4$  y  $\phi = 0.9$  se obtiene las mayores emisiones de  $\text{NO}_x$ , alcanzando los 1028 ppm. Además, se obtienen en todo este rango, valores menores a 200 ppm de amoniaco no quemado. Para los casos de mezcla rica en combustible, se obtienen mayores temperaturas utilizando  $x_{\text{NH}_3} = 0.2$ , mientras que con  $x_{\text{NH}_3} = 0.4$  decae la temperatura por debajo de la utilización de metano puro. Para este rango, se favorece la producción de CO y  $\text{H}_2$ , obteniendo valores máximos de 7000 ppm con  $x_{\text{NH}_3} = 0$  y de 3400 ppm al utilizar  $x_{\text{NH}_3} = 0.4$ , respectivamente, ambos para  $\phi = 1.2$ . En cuanto al amoniaco no quemado, se obtienen valores máximos cercanos a los 1000 ppm con  $x_{\text{NH}_3} = 0.4$ . Se realiza el análisis para  $\phi = 1.0$  adicionando hasta  $x_{\text{NH}_3} = 1.0$ , donde se concluye que el punto de operación que maximiza la temperatura y minimiza las emisiones es para  $\phi = 1.0$  con  $x_{\text{NH}_3} = 0.4$ . Además, al realizar el aumento de amoniaco mezcla, se percibe un menor sonido de operación en contraste al utilizar metano puro. Es por ello por lo que es factible la utilización de amoniaco como combustible, tanto en mezclas pobres para generación de calor y para mezclas ricas para producción de gas de síntesis e hidrógeno. Este estudio aporta resultados sobre el comportamiento de mezclas metano-amoniaco en un reactor de flujo recíproco con medios porosos inertes, estableciendo bases que permiten orientar futuras investigaciones y aplicaciones en el desarrollo de sistemas de combustión más eficientes y sostenibles.

**Palabras Claves:** Amoniaco, combustión en medios porosos, metano, reactor de flujo recíproco, simulación numérica.

# Abstract

Within the framework of the International Collaboration Promotion Project entitled “Thermochemical Technologies for the Future (T2F): Interdisciplinary research, development, and innovation network to accelerate the decarbonization process”, research is being conducted using both numerical and experimental methodologies on methane/ammonia combustion in a reciprocating-flow reactor with porous media inside. To this end, an initial review of the state of the art was carried out, focusing on combustion processes, reciprocating-flow reactors, combustion kinetic mechanisms, and inert porous media. To date, no similar study has been found in the literature that addresses this type of fuel in reciprocating-flow reactors, either numerically or experimentally. The study gains relevance due to the growing role of ammonia ( $\text{NH}_3$ ) as a fuel, owing to its carbon neutrality in the combustion process. When used in combination with other fuels widely employed in industry, such as methane ( $\text{CH}_4$ ), it helps reduce greenhouse gas emissions. Furthermore, the use of a reciprocating-flow reactor with inert porous media, unlike traditional burners, enables heat recovery from exhaust gases, resulting in higher efficiencies and superadiabatic combustion.

This work investigates the temperature distribution along the reactor and the gaseous emissions of carbon monoxide ( $\text{CO}$ ), carbon dioxide ( $\text{CO}_2$ ), nitrogen oxides ( $\text{NO}_x$ ), hydrogen ( $\text{H}_2$ ), and ammonia ( $\text{NH}_3$ ) as a function of the equivalence ratio ( $\phi$ ) and the ammonia molar fraction in the mixture ( $x_{\text{NH}_3}$ ). For experimental methodology, a test bench was employed with a reciprocating-flow burner of 305 mm length and 60 mm internal diameter, containing ceramic zirconia ( $\text{ZrO}_2$ ) and silicon carbide ( $\text{SiC}$ ) foam as porous media (83% porosity) with a switching period of 30 seconds. Nine equidistance points were used to measure temperature along the reactor, while gas analyzers for combustion gases and ammonia were used for emission measurements. For the numerical methodology, the commercial software ANSYS® Fluent was applied, representing the phenomenon through a one-dimensional transient simulation with a reduced kinetic mechanism of 45 species and 419 reactions.

The results demonstrate that the computational model adequately predicts the thermal profiles and emissions for fuel-lean mixtures ( $\phi < 1.0$ ) but shows greater deviations for fuel-rich mixtures ( $\phi > 1.0$ ). The maximum temperature reaches 1791 K for the configuration  $\phi = 1.0$  and  $x_{\text{NH}_3} = 0.2$ . For lean mixtures, increasing the ammonia fraction leads to a rise in the local maximum temperature, which slightly decreases for  $x_{\text{NH}_3} = 0.4$  when  $\phi = 1.0$  is reached. Within this same equivalence ratio range, both  $\text{CO}$  and  $\text{CO}_2$  decrease by approximately 50% in the case of  $x_{\text{NH}_3} = 0.4$ . For  $x_{\text{NH}_3} = 0.4$  and  $\phi = 0.9$ , the highest  $\text{NO}_x$  emissions are obtained, reaching 1028 ppm. Moreover, throughout this range, unburned ammonia remains below 200 ppm. For fuel-rich mixtures, higher temperatures are obtained using  $x_{\text{NH}_3} = 0.2$ , while for  $x_{\text{NH}_3} = 0.4$ , the temperature decreases below that of pure methane combustion. In this range, the production of  $\text{CO}$  and  $\text{H}_2$  is favored, reaching maximum values of 7000 ppm with  $x_{\text{NH}_3} = 0$  and 3400 ppm with  $x_{\text{NH}_3} = 0.4$ , respectively, both for  $\phi = 1.2$ . Regarding unburned ammonia, peak values close to 1000 ppm are obtained for  $x_{\text{NH}_3} = 0.4$ . An additional analysis was carried out for  $\phi = 1.0$  by increasing  $x_{\text{NH}_3}$  up to 1.0, from which it is concluded that the operating point maximizing temperature and minimizing emissions corresponds to  $\phi = 1.0$  with  $x_{\text{NH}_3} = 0.4$ . Furthermore, when increasing the ammonia fraction in the mixture, a noticeable reduction in operational noise was observed compared to pure methane combustion. Therefore, the use of ammonia as a fuel is feasible, both in lean mixtures for heat generation and in rich mixtures for syngas and hydrogen production. This study provides insights into the behavior of methane–ammonia mixtures in a reciprocal-flow reactor with inert porous media, establishing a foundation for future research and applications in the development of more efficient and sustainable combustion systems.

**Keywords:** Ammonia, combustion in porous media, methane, numerical simulation, reciprocating flow reactor.

## Índice de contenidos

<b>1</b>	<b>Introducción y objetivos</b> .....	<b>12</b>
<b>1.1</b>	<b>Objetivo general</b> .....	<b>14</b>
<b>1.2</b>	<b>Objetivos específicos</b> .....	<b>14</b>
<b>2</b>	<b>Marco teórico</b> .....	<b>15</b>
<b>2.1</b>	<b>Combustión en mezcla metano-amoniaco</b> .....	<b>15</b>
2.1.1	Propiedades termofísicas y químicas de los gases .....	16
<b>2.2</b>	<b>Cinética química de la combustión metano-amoniaco</b> .....	<b>16</b>
2.2.1	Cinética de reacción metano-amoniaco .....	17
<b>2.3</b>	<b>Combustión en medios porosos inertes</b> .....	<b>18</b>
2.3.1	Fundamentos y teoría.....	18
2.3.1.1	Condiciones de operación estables .....	19
2.3.1.2	Parámetros operacionales .....	20
2.3.1.3	Principales zonas de combustión .....	21
2.3.2	Descripción fisicoquímica del medio poroso .....	21
2.3.2.1	Principales materiales y formas .....	21
2.3.2.2	Sistemas de transferencia de calor .....	22
2.3.2.3	Exceso de entalpía .....	23
2.3.3	Combustión utilizando amoniaco en medios porosos .....	23
2.3.4	Mecanismos cinéticos y rutas de reacción en mezclas con amoniaco .....	26
2.3.5	Reactor de flujo recíproco .....	26
<b>3</b>	<b>Desarrollo experimental</b> .....	<b>28</b>
<b>3.1</b>	<b>Diseño del reactor de flujo recíproco</b> .....	<b>28</b>
<b>3.2</b>	<b>Setup experimental</b> .....	<b>30</b>
<b>3.3</b>	<b>Pruebas experimentales</b> .....	<b>31</b>
3.3.1	Medidas de protección y elementos de seguridad .....	32
3.3.2	Metodología para puesta en marcha .....	32
<b>4</b>	<b>Simulación computacional</b> .....	<b>34</b>
<b>4.1</b>	<b>Ecuaciones gobernantes</b> .....	<b>34</b>
4.1.1	Condiciones de frontera.....	35
<b>4.2</b>	<b>Simulación utilizando software</b> .....	<b>35</b>
4.2.1	Problema físico.....	35
4.2.2	Estudio de malla y paso temporal .....	36
4.2.3	Mecanismo cinético.....	37
4.2.4	Parámetros utilizados.....	38
<b>5</b>	<b>Análisis de resultados y discusión</b> .....	<b>39</b>

<b>5.1</b>	<b>Perfil térmico y contraste numérico-experimental .....</b>	<b>39</b>
<b>5.2</b>	<b>Influencia de la relación de equivalencia y el porcentaje de amoniaco en mezcla en la temperatura máxima.....</b>	<b>40</b>
<b>5.3</b>	<b>Influencia del amoniaco en mezcla con metano en los perfiles de temperatura.....</b>	<b>41</b>
<b>5.4</b>	<b>Influencia de la relación de equivalencia en los perfiles de temperatura .....</b>	<b>42</b>
<b>5.5</b>	<b>Influencia del amoniaco en mezcla y la relación de equivalencia en las emisiones.....</b>	<b>44</b>
5.5.1	Emisiones de CO .....	44
5.5.2	Emisiones de CO <sub>2</sub> .....	44
5.5.3	Emisiones de H <sub>2</sub> .....	45
5.5.4	Emisiones de NO <sub>x</sub> .....	46
5.5.5	Emisiones de NH <sub>3</sub> .....	47
<b>5.6</b>	<b>Influencia en la temperatura máxima y emisiones de NH<sub>3</sub> frente a un mayor porcentaje de amoniaco en mezcla .....</b>	<b>48</b>
<b>5.7</b>	<b>Influencia de un mayor porcentaje de amoniaco en el sonido durante la ignición y la combustión .....</b>	<b>48</b>
<b>6</b>	<b>Conclusiones .....</b>	<b>50</b>
<b>7</b>	<b>Referencias.....</b>	<b>52</b>
<b>8</b>	<b>Anexos .....</b>	<b>60</b>
<b>A.1</b>	<b>Plano Cilindro central.....</b>	<b>60</b>
<b>A.2</b>	<b>Plano Geometría ingreso de combustible radial (dona).....</b>	<b>61</b>
<b>A.3</b>	<b>Plano Tubo con rosca exterior .....</b>	<b>62</b>
<b>A.4</b>	<b>Plano Extremos.....</b>	<b>63</b>
<b>A.5</b>	<b>Plano Difusor inicial .....</b>	<b>64</b>
<b>A.6</b>	<b>Plano Difusor central.....</b>	<b>65</b>

## Índice de figuras

Figura 1: Porcentajes estimados de GEI antropogénico global, International Energy Agency (IEA) [2].	12
Figura 2: Principales sectores de aplicación del amoniaco 2015 [9].	13
Figura 3: Posibles rutas al 2030 para la exportación de hidrógeno [13].	13
Figura 4: Esquema general proceso de combustión en MPI. Adaptado de [40].	18
Figura 5: Datos experimentales temperatura ( $T_c$ ) y velocidad ( $u$ ) vs relación de equivalencia [51].	19
Figura 6: Zonas de combustión en reactor MPI [15].	21
Figura 7: Formas más comunes en MPI. a) Esferas, b) Espuma, c) Honeycomb (panel).	22
Figura 8: Mecanismos de transferencia de calor en combustión utilizando MPI [55].	23
Figura 9: Recirculación utilizando MPI [52].	23
Figura 10: Dirección de propagación zona de combustión [66].	27
Figura 11: Configuración experimental Reactor flujo recíproco con MPI [67].	27
Figura 12: Vistas reactor de flujo recíproco anterior.	28
Figura 13: Vista frontal reactor de flujo recíproco. (1) Cilindro central, (2) Geometrías circulares de inyección de combustible (dona), (3) Tubos con rosca, (4) Extremos, (5) Difusor inicial, (6) Difusor central y (7) Varillas.	29
Figura 14: Vista en corte con representación MPI en su interior.	29
Figura 15: Espumas cerámicas. A) Zirconia 10 PPI, B) Carburo de silicio 40 PPI.	30
Figura 16: Setup experimental Reactor de Flujo Recíproco (elaboración propia).	30
Figura 17: Setup experimental en banco de pruebas.	31
Figura 18: Configuración de flujos en operación. Caso AB (izquierda), Caso BA (derecha).	33
Figura 19: Representación de geometría e indicación de secciones.	36
Figura 20: Perfiles de temperatura para diferentes tamaños de celdas.	36
Figura 21: Perfiles de temperatura para diferentes pasos de tiempo.	37
Figura 22: Contraste numérico-experimental para $\phi = 0.9$ y $x_{\text{NH}_3} = 0.2$ .	39
Figura 23: Temperaturas máximas bajo la influencia de la relación de equivalencia y el porcentaje de amoniaco en mezcla.	41
Figura 24: Perfiles térmicos numéricos bajo la influencia del porcentaje de amoniaco en mezcla para distintas relaciones de equivalencia. (A) $\phi = 0.8$ , (B) $\phi = 1.0$ , (C) $\phi = 1.1$ , (D) $\phi = 1.2$ .	42
Figura 25: Perfiles térmicos numéricos bajo la influencia de la relación de equivalencia para distintas fracciones de amoniaco en mezcla. (A) $x_{\text{NH}_3} = 0$ , (B) $x_{\text{NH}_3} = 0.2$ , (C) $x_{\text{NH}_3} = 0.4$ .	43
Figura 26: Influencia de $\phi$ y $x_{\text{NH}_3}$ en emisiones de CO.	44
Figura 27: Influencia de $\phi$ y $x_{\text{NH}_3}$ en emisiones de CO <sub>2</sub> .	45
Figura 28: Influencia de $\phi$ y $x_{\text{NH}_3}$ en emisiones de H <sub>2</sub> .	46
Figura 29: Influencia de $\phi$ y $x_{\text{NH}_3}$ en emisiones de NO <sub>x</sub> .	47
Figura 30: Influencia de $\phi$ y $x_{\text{NH}_3}$ en emisiones de NH <sub>3</sub> .	47
Figura 31: Influencia de $x_{\text{NH}_3}$ en la temperatura máxima y emisiones de NH <sub>3</sub> para $\phi = 1.0$ .	48
Figura A.1 Plano Cilindro central.	60
Figura A.2 Plano Dona.	61
Figura A.3 Plano Tubo con rosca.	62
Figura A.4 Plano Extremos.	63
Figura A.5 Plano Difusor inicial.	64
Figura A.6 Plano Difusor central.	65

## Índice de tablas

Tabla 1: Propiedades físicas y químicas del metano y amoniaco [39].....	16
Tabla 2: Resumen mecanismos de reacción metano-amoniaco en la literatura. ....	18
Tabla 3: Propiedades de los materiales más utilizados como MPI [54].....	22
Tabla 4: Flujos utilizados en pruebas experimentales y potencia alcanzada.....	32
Tabla 5: Parámetros utilizados en simulación. ....	38
Tabla 6: Temperaturas máximas en Kelvin mediante método experimental (Exp), numérico (Num) y error asociado.....	40

# 1 Introducción y objetivos

Desde la firma del Tratado de París en 2015 [1], los países han presenciado un compromiso global para combatir el cambio climático. Este acuerdo, estableció metas ambiciosas con respecto a limitar el aumento de la temperatura global, lo que ha llevado a una transformación significativa en la forma en la que se aborda la generación y consumo de energía. En particular, la transición energética hacia fuentes más sostenibles y limpias se ha convertido en una prioridad, con el objetivo de reducir emisiones de gases de efecto invernadero (GEI) y mitigar los efectos del calentamiento global. A medida que se busca cumplir con dichos objetivos, el desarrollo de las energías renovables se ha visto impulsado como una solución clave para así enfrentar los desafíos de la sociedad contemporánea. De hecho, la explotación de la energía renovable está en aumento a nivel mundial, impulsada no solo por las obligaciones legislativas y los compromisos ambientales, sino también por la necesidad de diversificar las fuentes de energía y mejorar la resiliencia ante crisis energéticas. El sector energético, que representa alrededor del 90% de las emisiones de dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ) [2], se encuentra en el centro de estos esfuerzos debido a su histórica dependencia de combustibles fósiles como el carbón, el petróleo y el gas natural (Figura 1).

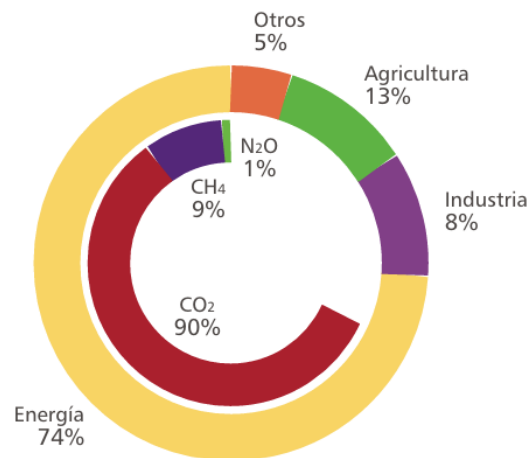


Figura 1: Porcentajes estimados de GEI antropogénico global, International Energy Agency (IEA) [2].

Sin embargo, aún existen una serie de aplicaciones donde la energía renovable no es capaz de suplir ciertos periodos de demanda debido a sus limitantes, por lo que es necesario recurrir a sistemas de almacenamiento de energía. Hasta la fecha, se han desarrollado distintos enfoques como el mecánico, eléctrico, térmico y químico para almacenar energía eléctrica. Dentro de las soluciones se destaca las Battery Energy Storage System (BESS) o las celdas redox [3]. Además, se ha visto fuertemente impulsado el hidrógeno verde ( $\text{H}_2\text{V}$ ) como vector energético, el cual es producido a partir de energía eléctrica renovable y agua. El hidrógeno verde se posiciona no solo como un combustible limpio, sino también como base para la producción de otros derivados como lo es el amoníaco ( $\text{NH}_3$ ) que también contribuyen como combustibles hacia la descarbonización. El amoníaco de igual forma que el hidrógeno se puede obtener a partir de combustibles fósiles, biomasa o cualquier fuente renovable, donde el exceso de suministro se puede convertir en una forma de energía no eléctrica [4]. De hecho, se busca que el amoníaco sea un método de almacenamiento y transporte de hidrógeno debido principalmente a su menor costo por unidad de energía almacenada, mayor capacidad de producción, manipulación y distribución [5].

También, posee el potencial de ser un combustible alternativo ya que su combustión completa solo produce nitrógeno ( $\text{N}_2$ ) y vapor de agua ( $\text{H}_2\text{O}$ ) [6-7]. Sin embargo, su aplicación como combustible

único es limitada en cuando a ignición y velocidad de combustión, es por ello por lo que en mezcla con otros combustibles comunes como carbón, éter dimetílico y metano contribuye a mejorar sus características de combustión [8].

Una de las ventajas de la utilización de amoniaco es debido a la ya existente infraestructura establecida que permite su producción, transporte, almacenamiento y distribución a gran escala. Históricamente, el amoníaco ha sido ampliamente utilizado en la industria química, especialmente en la agricultura y fertilizantes (Figura 2), lo que ha resultado en un sistema logístico robusto y global que incluye plantas de producción, redes de transporte por ferrocarril, carretera y marítimo, así como terminales de almacenamiento en todo el mundo. Esta infraestructura existente no solo reduce significativamente los costos asociados con la adopción del amoníaco como combustible, sino que también facilita una transición más rápida y menos disruptiva hacia su uso en aplicaciones energéticas.

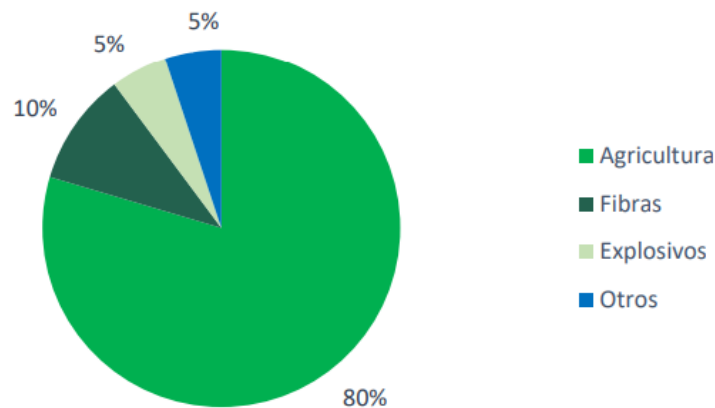


Figura 2: Principales sectores de aplicación del amoniaco 2015 [9].

Chile por su parte, ha crecido significativamente en el uso de energías renovables en conjunto con el progresivo retiro de las fuentes térmicas como lo son centrales a carbón, gas natural o petróleo. Para el primer trimestre de 2024 el Coordinador Eléctrico Nacional (CEN) publicó las cifras que reflejan que la generación eléctrica a base de energías renovables no convencionales alcanzó un 41% del total

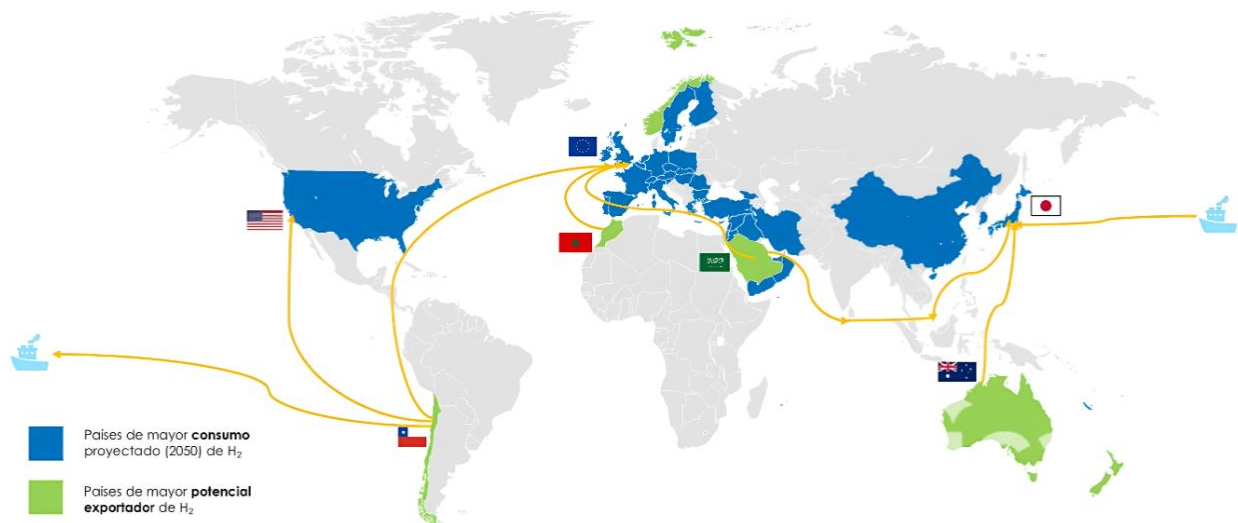


Figura 3: Posibles rutas al 2030 para la exportación de hidrógeno [13].

de la energía producida en el país [10], dejando en evidencia que se seguirá en aumento hasta equiparar la mayor parte de la generación de energía. En 2021 se publicó la Ley N°21.305 sobre Eficiencia Energética [11], donde un hito relevante es la declaración del hidrógeno como combustible, entregando ciertas atribuciones al Ministerio de Energía para proseguir con normas específicas en cuando a su uso y distribución. Lo anterior cobra suma relevancia debido a que se proyecta a Chile como un claro exportador de hidrógeno al mundo, tal y como se presenta en la Figura 3. Además, Chile se prevé como uno de los países con el menor costo de producción de hidrógeno a nivel mundial según International Energy Agency (IEA), con un costo menor a 1.6 USD/kgH<sub>2</sub> al 2030 [12].

Debido a que en Chile aún existen industrias fuertemente dependientes de combustibles fósiles, es que se hace énfasis en continuar con el desarrollo tecnológico e investigación de maquinaria térmica (motores a combustión, quemadores industriales, etc.) para la inyección progresiva de combustibles limpios como lo es el hidrógeno o el amoníaco, capaces de reducir las emisiones de CO<sub>2</sub> al ambiente y generar procesos más eficientes. El proceso de combustión más habitual es por llama libre, pero a lo largo de los años se ha investigado la tecnología de Medios Porosos Inertes (MPI), en la cual se agrega un sólido por donde la llama se desenvuelve, permitiendo una transferencia de calor más efectiva desde los productos hacia los reactantes, generando un fenómeno conocido como “exceso de entalpía”, siendo esta teoría desarrollada por Weinberg en 1971 [14]. Este efecto no solo mejora la eficiencia térmica del proceso, sino que también extiende los límites de inflamabilidad y permite la estabilización de la llama bajo condiciones pobres o ricas en combustible [15]. Particularmente en la combustión de mezclas con metano-amoniaco, la presencia de medios porosos ha demostrado ser clave para mantener una llama estable, incluso en configuraciones de premezcla pobre o con alta fracción de amoníaco [16]. Así, la integración de medios porosos inertes no solo permite el uso de combustibles alternativos como el amoníaco, sino que también abre nuevas posibilidades para la optimización de quemadores industriales con menores emisiones y mayor adaptabilidad operativa, constituyéndose como un componente central en la transición energética hacia procesos más limpios y controlados.

Con lo expuesto en este capítulo, es que la presente investigación se centra en el estudio de la combustión en mezcla de metano-amoniaco, en conjunto con MPI utilizando un reactor de flujo recíproco (tema que se abordará más adelante), donde hasta la fecha no se posee ningún estudio de forma numérica ni experimental, lo que resulta un tema con un gran potencial investigativo siguiendo el lineamiento de la transición energética.

## 1.1 Objetivo general

En el marco del proyecto de Fomento de la Vinculación Internacional (FOVI) denominado “Tecnologías Termoquímicas para el Futuro (T2F): Red interdisciplinaria de investigación, desarrollo e innovación para acelerar el proceso de descarbonización”, se propone realizar una investigación numérico-experimental de la combustión completa y parcial en mezcla metano-amoniaco en un reactor de flujo recíproco con medio poroso inerte.

## 1.2 Objetivos específicos

1. Definir el estado del arte de la combustión de mezclas metano-amoniaco y de las cinéticas de reacción en reactores con medios porosos inertes.
2. Desarrollar pruebas en un Setup experimental del reactor de flujo recíproco que permita medir el perfil de temperatura en el reactor y emisiones (CO, CO<sub>2</sub>, NO<sub>x</sub>, H<sub>2</sub> y NH<sub>3</sub>).
3. Simular computacionalmente el proceso de combustión metano-amoniaco en un reactor de flujo recíproco con medio poroso inerte con el software ANSYS fluent.
4. Analizar comparativamente los resultados numéricos y experimentales de la investigación frente a la variación de parámetros.

## 2 Marco teórico

### 2.1 Combustión en mezcla metano-amoniaco

El amoniaco ( $\text{NH}_3$ ) como combustible único presenta desventajas debido a su acotado rango de inflamabilidad (16-25%) [17], baja velocidad de combustión laminar [5], y altas emisiones de óxidos nitrosos ( $\text{NO}_x$ ) [18]. Sin embargo, se han realizado estudios [19] donde la adición de vapor de agua a la combustión amoniaco-aire, genera que la reactividad se incremente notablemente a medida que aumenta la temperatura, acelerando el proceso de oxidación y facilitando la conversión de  $\text{NO}$  a otras especies que contienen hidrógeno como el  $\text{HNO}$ , lo que potencialmente reduce las emisiones de  $\text{NO}_x$ . En cuanto a la adición de amoniaco en mezcla con otros combustibles fósiles se observa una mejora en la eficiencia de combustión de hasta un 10% y una disminución de emisiones de  $\text{CO}_2$  entre un 18-28% en la combustión dual con gas natural, por ejemplo [20-25]. Por su parte, combustibles como el etanol o el dimetileter proporcionan un aumento en la velocidad de llama del amoniaco, por ejemplo, con una adición del 25% de etanol, se duplica la velocidad de llama laminar [26-27]. Además, el amoniaco se estudia como combustible para diversas aplicaciones como motores de combustión, turbinas a gas, calderas, celdas de combustible, entre otros [28-34].

Si bien la adición de amoniaco en mezcla reduce las emisiones de  $\text{CO}_2$ , tiende a aumentar las emisiones de  $\text{NO}_x$ , siendo este el foco de algunos estudios para analizar la configuración adecuada de parámetros para la disminución de estos. Ariemma et al. [35] realizó un estudio de la estabilidad de llama y emisiones de  $\text{NO}_x$  bajo distintos porcentajes de concentración de amoniaco en mezcla con metano y relaciones estequiométricas. Se observó que la adición de amoniaco en concentraciones menores al 50% mostraban una tendencia de estabilidad en la llama y eran menos propensas a apagarse. En cuanto a las emisiones de  $\text{NO}_x$  se encontraron máximos para valores entre el 25-50% de amoniaco, independiente de la relación estequiométrica ( $\varphi$ ) escogida. Para las emisiones de metano no quemado, se detectaron para valores de  $\varphi > 1$  y mezclas de amoniaco entre 25-50%. Siguiendo por la misma línea de investigación, Wang et al. [36] realizó un estudio experimental similar en un quemador de llama en torbellino atmosférico, frente a la comparativa en dos estrategias de inyección, la primera en premezcla amoniaco-metano y la segunda la generación de una llama dual con inyección de amoniaco como llama piloto y metano como llama de torbellino exterior. En cuanto a la estabilidad de llama, la configuración de llama dual presentaba una estructura más compacta e intensa en comparación a la de premezcla. A su vez, la de llama dual presentó una reducción tanto de  $\text{NO}_x$  como de monóxido de carbono ( $\text{CO}$ ) en comparación a la de premezcla, resultando además una eficiencia de combustión cercana al 100% para valores de  $\varphi > 0.6$ .

En el estudio realizado por Wang et al. [37], de cómo afecta el tiempo de residencia en las emisiones de la combustión metano-amoniaco en un quemador de torbellino, se observó que para una configuración de  $\varphi = 0.9$  y fracción molar de amoniaco  $x_{\text{NH}_3} = 0.4$  en la entrada, que al aumentar el tiempo de residencia ya sea mediante el incremento de la longitud de la cámara o del número de torbellinos, disminuían las concentraciones de  $\text{NO}$ , pasando de 2680 ppm a tan solo 31 ppm, sin comprometer de ninguna manera la estabilidad de la llama. Además, las configuraciones con tiempos de residencia más extensos mostraron reducciones significativas en las emisiones de  $\text{NO}_x$  en configuraciones con  $x_{\text{NH}_3} > 60$ . Tal y como se presentó previamente, el amoniaco se prevé como un vector energético capaz de transportar hidrógeno, y es que el estudio de Yamashita et al. [38] demuestra que en un aumento en el  $x_{\text{NH}_3}$  promueve las emisiones de hidrógeno en condiciones ricas, donde justamente se ven beneficios en rangos de  $\varphi$  entre 0.95-1.2.

En base al resumen bibliográfico presentado en esta sección es que se destaca al amoniaco como combustible utilizado en mezclas ya que con ello se ven mejoras en la estabilidad de llama en conjunto con la disminución de emisiones de CO<sub>2</sub>. Además, es importante destacar la misión de seguir con el desarrollo de implementaciones al proceso de combustión que permitan un menor porcentaje de emisiones de NO<sub>x</sub> producto del aumento en las concentraciones de amoniaco.

### 2.1.1 Propiedades termofísicas y químicas de los gases

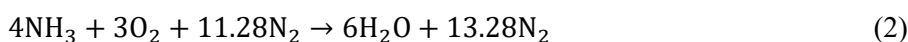
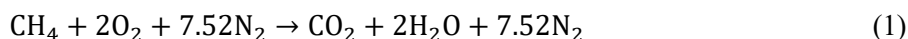
En la Tabla 1 se presentan las principales propiedades a destacar para el metano y el amoniaco como combustibles. En primer lugar, se observa que el amoniaco posee un poder calorífico inferior respecto del metano, lo que implica que requiere una mayor energía de ignición. Sin embargo, al ser utilizado en mezcla, el calor liberado por el metano contribuye a reducir la energía de activación de la combustión del amoniaco, favoreciendo su encendido. Asimismo, el amoniaco presenta una temperatura de llama adiabática menor que la del metano, lo que se traduce en una menor liberación de calor durante la combustión. A pesar de estas limitaciones, el amoniaco posee ventajas relevantes como lo es ser un combustible carbono-neutral, con un límite de inflamabilidad más amplio, lo que lo lleva a ser más flexible en términos de concentración de combustión. Si bien ambos presenten temperaturas de autoignición similares, la diferencia de densidad y comportamiento de ebullición influye en su manejo y transporte en aplicaciones industriales. En base a lo anterior, es que la utilización de estos combustibles en mezcla resulta conveniente, ya que el metano aporta con estabilidad a la mezcla debido a la alta reactividad y velocidad de llama y el amoniaco por su parte, es beneficioso para poder mitigar el CO<sub>2</sub> y CO producido.

Tabla 1: Propiedades físicas y químicas del metano y amoniaco [39].

Propiedad	Metano (CH <sub>4</sub> )	Amoniaco (NH <sub>3</sub> )
Densidad, g/L	0.716	0.771
Poder calorífico inferior, MJ/kg	50	18.6
Temperatura crítica de ebullición, °C	-161	-33.4
Temperatura de llama adiabática, °C	1950	1800
Límite de inflamabilidad, φ	0.5-1.7	0.6-1.4
Velocidad de combustión laminar, cm/s	37	7
Temperatura mínima de autoignición, °C	630	650

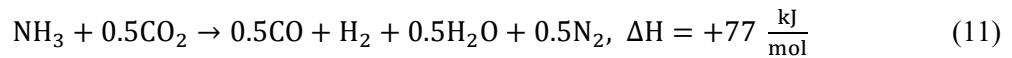
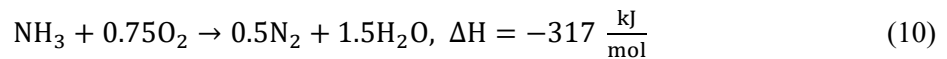
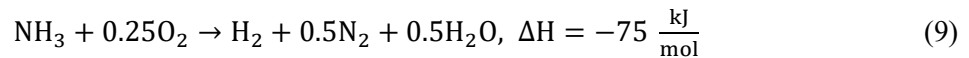
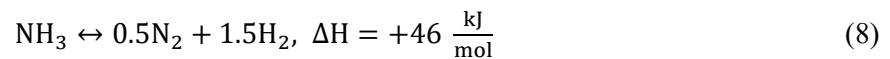
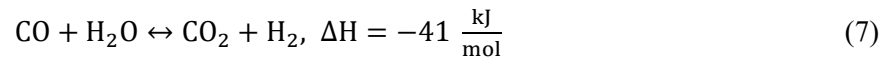
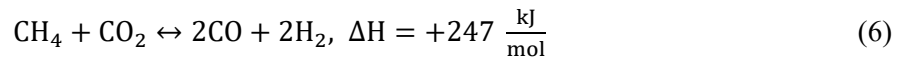
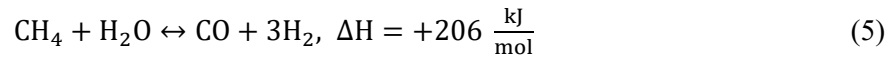
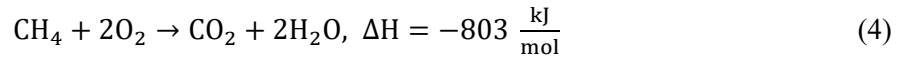
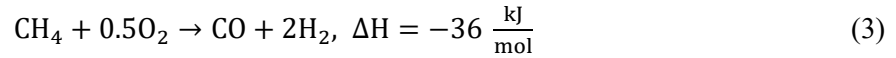
## 2.2 Cinética química de la combustión metano-amoniaco

El metano (CH<sub>4</sub>) es uno de los combustibles con mayor eficiencia energética en comparación con el resto de los combustibles fósiles, lo que lo lleva a generar más energía por unidad de combustible. Tanto el metano como el amoniaco en presencia de oxígeno/aire liberan energía en forma de calor a través de una reacción exotérmica. Se presentan a continuación las reacciones de combustión estequiométricas de un paso para las mezclas combustible-aire en su forma estequiométrica global tanto para el metano como para el amoniaco.



Se aprecia que la combustión completa de metano es la que presenta como subproducto el CO<sub>2</sub> en conjunto con vapor de agua, mientras que la combustión de amoniaco también genera vapor de agua, pero además un incremento de N<sub>2</sub>. A continuación, se presentan en las siguientes ecuaciones (3-11) las principales reacciones para el metano y el amoniaco. En la combustión en mezcla de estos combustibles,

la relación de equivalencia ( $\phi$ ) posee un rol importante ya que es el parámetro que define la relación de aire-combustible entrante (se verá más en detalle en el apartado 2.3.1.2). Cuando aumenta la relación de equivalencia ( $\phi > 1$ ), el carácter endotérmico cobra relevancia por lo que la temperatura de llama disminuye, la energía de ignición requerida es mayor y la velocidad de llama se reduce. En cambio, con mezclas más pobres en amoníaco o cercanas a  $\phi \approx 1$ , predomina el efecto exotérmico del metano, lo que promueve una combustión más estable y temperaturas adiabáticas más altas [40].



## 2.2.1 Cinética de reacción metano-amoniaco

La termodinámica permite predecir si una reacción será espontánea o no lo será, según los factores termodinámicos que interactúen como puede ser la entalpía, entropía y la energía libre. Sin embargo, no da ninguna información acerca de la rapidez con la que se produce el cambio físico. La cinética de reacción es la que determina si una reacción es lenta o rápida ya que estudia los factores como la temperatura, presión o presencia de catalizadores que son los que determinarán la velocidad y la serie de etapas en las que se desenvuelve la reacción cuando los reactantes van desapareciendo gradualmente, mientras que los productos surgen.

En la literatura existen estudios numéricos de la combustión metano-amoniaco, en las cuales se utilizan distintos modelos para lograr obtener una aproximación de la cinética química del proceso [8, 41-43]. En cada uno de ellos se utiliza una cantidad determinada de celdas, número de especies y reacciones, lo cual mientras mayor sea el número de reacciones y especies, más aproximado a la realidad será. Sin embargo, esto implica un gran costo computacional, por lo que se tienden a utilizar un número de especies y reacciones más limitadas. Algunos de los modelos cinéticos utilizados en combustión de amoniaco son Tian Mech [44] y Mendiara [45]. Además, uno de los modelos estudiados y comparados con los mencionados previamente, es el de Okafor et al. [43], el cual combina elementos de GRI Mech 3.0 [46] con el modelo de Tian Mech, optimizando las reacciones críticas relacionadas con la oxidación de amoniaco. El modelo utiliza 59 especies y 356 reacciones. En el estudio de Okafor se detalla que el modelo propuesto predice con mayor precisión las velocidades de quema laminar en mezclas con altas concentraciones de amoniaco en comparación con otros modelos como el de Tian o el Mendiara Mech.

En la Tabla 2 se muestran a detalle cada uno de los mecanismos cinéticos mencionados.

Tabla 2: Resumen mecanismos de reacción metano-amoniaco en la literatura.

Nombre del mecanismo	Cinética de reacción
Tian Mech [44]	84 especies y 804 reacciones
Mendiara [45]	97 especies y 779 reacciones
Okafor [43]	59 especies y 356 reacciones

## 2.3 Combustión en medios porosos inertes

### 2.3.1 Fundamentos y teoría

A lo largo de los años se ha utilizado la combustión convencional de llama libre en diversas aplicaciones como calefacción, procesos industriales y generación de energía. En este tipo de procesos, la combustión se encuentra localizada en una región con un frente de llama bien definido. Sin embargo, ocurre que este tipo de sistema tiene ciertas desventajas como lo es la fuerte dependencia del combustible utilizado, la inestabilidad en ciertas condiciones de flujo y limitada capacidad de ajuste de potencia. Además, se generan elevadas emisiones contaminantes dependiendo del combustible utilizado ( $\text{CO}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{NO}_x$ ) debido a las altas temperaturas de operación y la dificultad para controlar las zonas de combustión. Debido a que los combustibles gaseosos poseen baja conductividad térmica, se pueden mejorar las propiedades de los sistemas con la adición de materiales sólidos que posean una excelente conductividad. Por tal motivo es que nace la necesidad de adicionar medios porosos, una tecnología capaz de almacenar la llama en una matriz sólida altamente conductiva, lo que permite mayor transferencia de calor y estabilidad de llama [47,48]. Este tipo de sistema se conoce también como combustión “sin llama” debido a que la mezcla aire combustible ingresa al sistema a través del medio poroso y se quema al interior de ellas, generando múltiples llamas a nivel de poro (Figura 4). Esto trae consigo además beneficios con respecto a la posibilidad de operar en un rango más amplio de relaciones de equivalencia sin comprometer directamente la estabilidad de llama, como también trabajar con cualquier tipo de combustible. Además, contribuyen a una mejora en la disminución de emisiones y temperatura, permitiendo así, un mayor control y aumento de eficiencia [49].

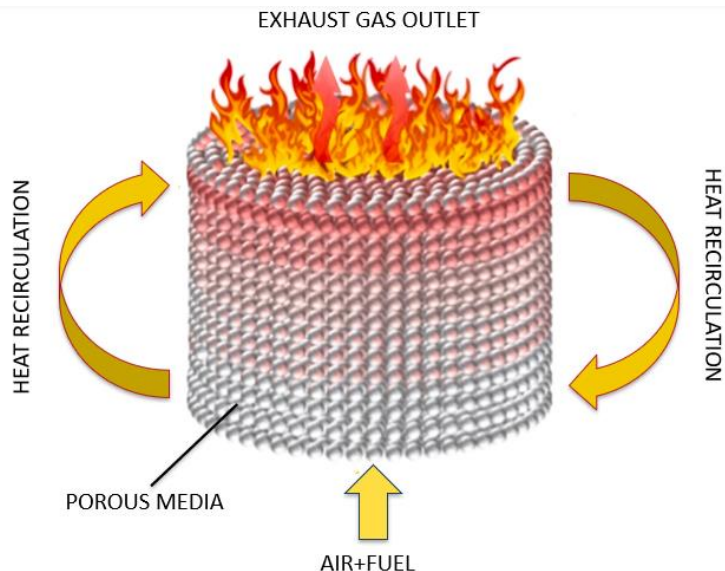


Figura 4: Esquema general proceso de combustión en MPI. Adaptado de [40].

### 2.3.1.1 Condiciones de operación estables

Para que pueda generarse la llama dentro del medio poroso y a su vez logre propagarse a través de este, se debe cumplir que el número de Peclet modificado (Ecuación 12) sea mayor o igual a 65 ( $Pe \geq 65$ ), con ello la llama logra propagarse en la zona de combustión, de lo contrario, con un  $Pe < 65$  la llama no puede propagarse y se extingue [50]. La ecuación del número de Peclet modificado está compuesta por  $S_L$  que es la velocidad de llama laminar,  $d_m$  que es el diámetro de la cavidad porosa equivalente,  $c_p$  el calor específico de la mezcla,  $\rho$  la densidad de la mezcla y  $k$  la conductividad térmica de la mezcla.

$$Pe = \frac{S_L d_m c_p \rho}{k} \quad (12)$$

Además, se deben adecuar los parámetros de entrada de la mezcla para la cual genere que la velocidad del frente de combustión sea cero, generando así la permanencia del frente de llama en la zona porosa y no se mueva aguas abajo o aguas arriba. En el Figura 5 se muestra la típica curva de velocidad del frente de llama en función de la relación de equivalencia para la mezcla metano-aire [51], en donde se aprecian zonas de relación de equivalencia óptima tanto para mezclas pobres ( $\varphi \approx 0.45$ ) como mezclas ricas ( $\varphi \approx 1.5$ ), en las cuales la velocidad del frente de combustión es aproximadamente 0.

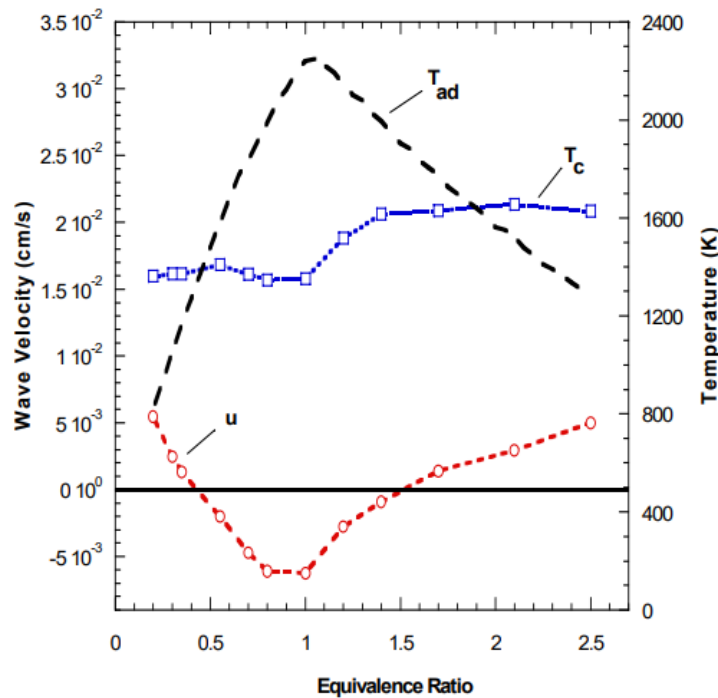


Figura 5: Datos experimentales temperatura ( $T_c$ ) y velocidad ( $u$ ) vs relación de equivalencia [51].

En cuanto a los modos de combustión en medios porosos de manera experimental, existen los siguientes:

- a) **Frente estable:** Para esta configuración, se adecuan los parámetros operacionales de tal manera que el frente llama se estabilice en una zona específica dentro del reactor.

- b) **Frente en movimiento:** En este caso, el frente de llama se comporta al igual que una onda y se propaga a través del medio poroso. La dirección de propagación puede darse hacia abajo o hacia arriba. Dentro de los parámetros que determinan la velocidad del frente de combustión están: relación de equivalencia, temperatura, presión, tipo de combustible, propiedades termofísicas y químicas del medio poroso.

No siempre se puede optar a tener una combustión estable y hay dos operaciones indeseadas que se presentan en la combustión. La primera de ellas se conoce como **apagado de llama** (blowout), esto ocurre en mezclas pobres (deficiencia de combustible) o altos valores de potencia. Es causado por la incapacidad de autosostener la combustión por la baja transferencia de calor y masa durante el proceso. El otro fenómeno que se presenta es el **retroceso de llama** (flashback) en el cual la llama retrocede hacia arriba debido a que la velocidad de este es mayor que la velocidad del flujo de la mezcla entrante, provocando así, que la zona de reacción se desplace en sentido contrario al flujo [52].

### 2.3.1.2 Parámetros operacionales

Los principales parámetros que se consideran para la combustión en medios porosos son los siguientes:

- **Volumen de aire estequiométrico ( $V_{a,e}$ ):** Corresponde al volumen de aire normalizado necesario para quemar 1 kg de combustible con una combustión estequiométrica. En la Ecuación 13 se presentan los parámetros a relacionar para su cálculo, donde  $x_i$  representa la fracción másica de carbono (C), hidrógeno (H), azufre (S) y oxígeno (O).

$$V_{a,e} = \frac{22.4}{0.21} \left( \frac{x_C}{12.01} + \frac{x_H}{4.032} + \frac{x_S}{32.06} - \frac{x_O}{32} \right) \text{ [Nm}^3\text{]} \quad (13)$$

- **Relación de aire ( $\lambda$ ):** Ratio entre el volumen de aire real utilizado en la combustión ( $V_a$ ) y el volumen de aire estequiométrico ( $V_{a,e}$ ).

$$\lambda = \frac{V_a}{V_{a,e}} \text{ [-]} \quad (14)$$

- **Relación de equivalencia ( $\varphi$ ):** Corresponde al ratio entre la unidad y la relación de aire ( $\lambda$ ). Para una reacción estequiométrica su valor es de  $\varphi=1$ . Para una relación de equivalencia  $\varphi<1$  indica una combustión pobre (exceso de aire) y para  $\varphi>1$  indica combustión rica (deficiencia de aire).

$$\varphi = \frac{1}{\lambda} \text{ [-]} \quad (15)$$

- **Velocidad de filtración premezcla ( $u$ ):** Corresponde a la velocidad a la cual la mezcla aire-combustible circula a través del medio poroso. Su cálculo presentado en la Ecuación 16 relaciona la velocidad de la premezcla en la entrada ( $v$ ) y la porosidad relativa del medio poroso utilizado ( $\varepsilon$ ).

$$u = \frac{v}{\varepsilon} \text{ [cm/s]} \quad (16)$$

Donde la porosidad ( $\varepsilon$ ) se presenta en la Ecuación 17, siendo  $V_g$  el volumen de gas y  $V_T$  el volumen total de la superficie, esto en el contexto al utilizar reactores:

$$\varepsilon = \frac{V_g}{V_T} \quad (17)$$

- **Velocidad del frente de llama ( $v_f$ ):** Representa la velocidad de propagación con la que se mueve el frente de combustión dentro del medio poroso. En caso de que el frente se mueva aguas abajo (mismo sentido que el flujo) se considera positivo y si se mueve aguas arriba (en contra del flujo) se considera negativo. Los valores típicos para la velocidad del frente de llama están en el rango entre  $10^{-4}$  y  $10^{-3}$  cm/s [51].

### 2.3.1.3 Principales zonas de combustión

Existen tres zonas bien definidas que se identifican al interior del medio poroso (Figura 6). La primera de ellas se conoce como **Zona de precalentamiento** en la cual es donde se realiza la premezcla de aire-combustible. En esta zona de manera estratégica se localizan materiales con menor diámetro de poro, asegurando así un número de Peclet menor al crítico con el fin de evitar un retroceso de llama. La segunda zona es la **Zona de combustión**, la cual está ubicada de manera continua a la primera zona aguas abajo en la cual se produce la combustión dentro de la matriz porosa. En esta zona se adecuan un diámetro mayor de poro logrando un número de Peclet mayor al crítico y con ello, se obtiene una gran liberación de energía. Finalmente, está la **Zona de postcombustión** en la cual los gases producto de la combustión atraviesan la última zona hacia el exterior. Estos gases calientes transfieren calor al medio poroso generando recirculación de calor.

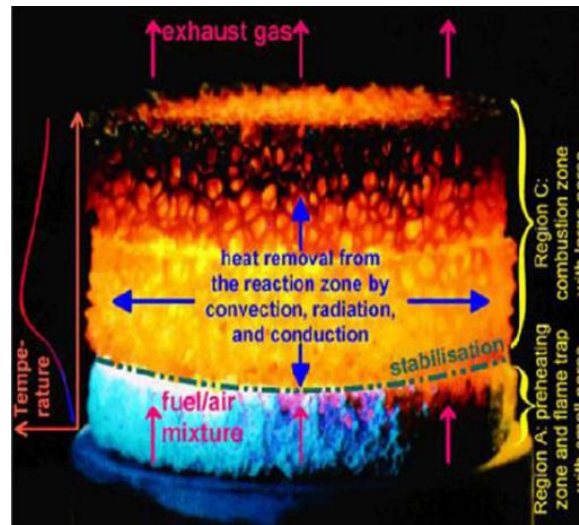


Figura 6: Zonas de combustión en reactor MPI [15].

## 2.3.2 Descripción fisicoquímica del medio poroso

### 2.3.2.1 Principales materiales y formas

El material del medio poroso debe poseer las características físicas necesarias para transferir calor y soportar las elevadas temperaturas en el proceso de combustión. Además de ello, se busca que el material posea resistencia al choque térmico, alta emisividad y que sea inerte a la reacción química. Dentro de los materiales más utilizados se encuentran las fibras de alúmina ( $Al_2O_3$ ), zirconio ( $ZrO_2$ ) y carburo de Silicio (SiC), donde sus principales propiedades se presentan en la Tabla 3. Además del material, la forma del medio poroso es super relevante. Actualmente, las formas más utilizadas son las esferas y las espumas cerámicas como se verá más adelante en la sección 2.3.3, pero también se utilizan

los Honeycomb como soportes para reactivos catalíticos en sistemas de control de emisiones, debido a su diseño cerámico que maximiza el área de contacto entre catalizador y contaminantes, beneficiando que sean transformados en sustancias menos nocivas [53]. En la Figura 7 se aprecian algunos de las formas mencionadas.

Tabla 3: Propiedades de los materiales más utilizados como MPI [54].

Propiedad	Unidad	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	SiC	ZrO <sub>2</sub>
Temperatura máxima en aire	°C	1900	1600	1800
Coefficiente de expansión térmica $\alpha$ , (20 – 1000 °C)	10 <sup>-6</sup> K <sup>-1</sup>	8	4-5	10-13
Conductividad térmica $\lambda$ , (20 °C)	W/m K	20-30	80-150	2-5
Conductividad térmica $\lambda$ , (1000 °C)	W/m K	5-6	20-50	2-4
Resistencia al estrés térmico, R	K	100	230	230
Calor específico	J/kg K	0.9-1	0.7-0.8	0.5-0.6
Emisividad (2000 K)	-	0.28	0.9	0.31

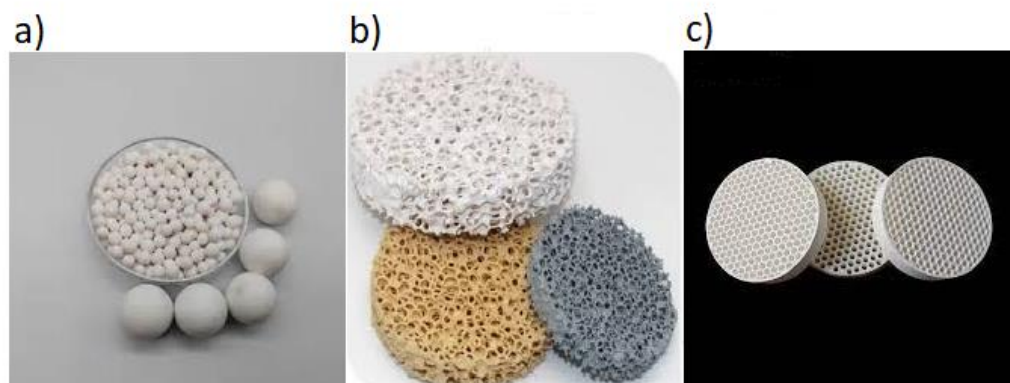


Figura 7: Formas más comunes en MPI. a) Esferas, b) Espuma, c) Honeycomb (panel).

### 2.3.2.2 Sistemas de transferencia de calor

Como se mencionó en secciones anteriores, la incorporación de medios porosos inertes en sistemas de combustión mejora significativamente los mecanismos de transferencia térmica, al añadir la conducción como vía adicional de transporte de energía, complementando los procesos de radiación y convección ya presentes. El frente de llama producido por la quema de los reactivos libera una cantidad de energía, la cual es absorbida por el medio poroso mediante conducción. Este calor, se transfiere por radiación y convección a los reactivos generando un precalentamiento de la mezcla entrante, aumentando su temperatura y generando un exceso de entalpía.

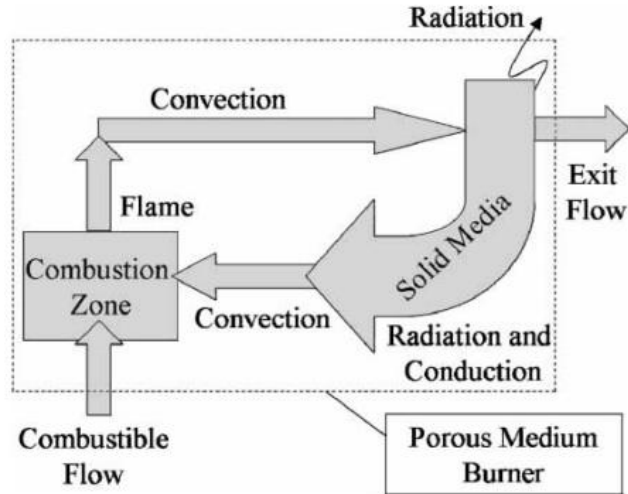


Figura 8: Mecanismos de transferencia de calor en combustión utilizando MPI [55].

### 2.3.2.3 Exceso de entalpía

Teoría desarrollada por Weinberg en 1971 [14], que consiste en que los productos generados en la combustión se reutilizan para precalentar los reactivos, provocando así, un aumento de entalpía en la zona de reacción. Esto resulta en un aumento de la temperatura de combustión por sobre la temperatura adiabática, obteniendo beneficios como el aumento en la eficiencia, mejor estabilidad de llama, extensión de los límites de inflamabilidad y reducción en el consumo de combustible [15, 56-58]. En la Figura 9 se representa la comparativa entre un sistema con medios porosos (línea continua) y sin medios porosos (línea discontinua), en la cual se refleja que la utilización de un medio poroso en el proceso de combustión genera un exceso de entalpía en la zona de combustión.

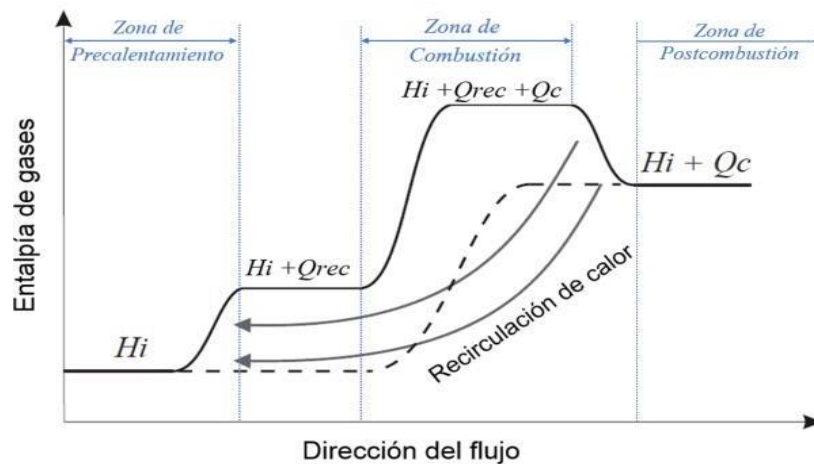


Figura 9: Recirculación utilizando MPI [52].

### 2.3.3 Combustión utilizando amoníaco en medios porosos

A lo largo de los años se ha estudiado el amoníaco como combustible adicionando la tecnología de medios porosos debido a que esta última hace posible que la llama de amoníaco se estabilice y se posea menores emisiones. Vignat et al. [59] realizó un estudio experimental de combustión amoníaco-

aire con diferentes configuraciones de medio poroso dentro de un reactor. El primero con dos etapas de espuma cerámica utilizando carburo de silicio (SiC) y zirconio-alúmina estabilizada con itrio (YZA), el segundo solo cubrió una zona con espuma al igual que para la última configuración. En el estudio se destaca que el quemador de dos etapas mostró una reducción del 40% en las emisiones de  $\text{NO}_x$  y un 65% de las emisiones de amoníaco no quemado. Además, el punto de optimización donde se lograron las emisiones más bajas de  $\text{NO}_x$  (28 ppm) y amoníaco no quemado (149 ppm) fue con un  $\varphi=1.2$  en la zona primaria y  $\varphi=1.0$  en la zona global. Siguiendo la misma línea de investigación, pero esta vez de forma numérica, Lv et al. [60] trabajaron en un reactor también de dos secciones de medio poroso utilizando los mismos materiales que [59], en la cual se estudió la influencia del precalentamiento de los reactantes en la extensión de los límites de extinción de llama en la combustión amoníaco-aire para mezclas pobres. En el estudio se utilizaron 1000K como temperatura de precalentamiento y diferentes tasas de flujo másico, con un rango de  $\varphi$  entre 0.08 a 1. Bajo estos parámetros es que se obtuvieron resultados que muestran que el precalentamiento desde los 400K hasta los 1000K extendió el límite desde  $\varphi=0.54$  hasta  $\varphi=0.08$ . También, se observó que el aumento de la temperatura del gas de entrada en 100K provocaba una mejor estabilidad de la combustión causado por una oxidación más rápida del amoníaco. El flujo másico resultaba un parámetro importante a considerar, debido a que con un aumento de 0.1 a 0.3  $\text{kg/m}^2\text{s}$  el límite de auto sustentación de la combustión fue relativamente más amplio sin la necesidad del precalentamiento.

Como se ha mencionado con anterioridad, uno de los combustibles a ser participe en el futuro es el hidrógeno debido a que proporciona una mejora en la estabilización de la llama, es por ello por lo que diversos autores han realizado estudios con respecto a la mezcla de amoníaco-hidrógeno para realizar análisis de estabilidad de llama y emisiones. Vignat et al. [61-62] trabajaron con el mismo quemador de dos etapas mencionado en [59], pero esta vez con mezcla amoníaco-hidrógeno y en conjunto con una simulación computacional. En el estudio variaron los porcentajes de hidrógeno (0-15-30%) y una relación de equivalencia entre 0.6 y 1.4, logrando obtener resultados para mezclas pobres como ricas. Se observó que con la adición de 30% de hidrógeno, se mejoró significativamente la estabilidad de llama en comparación cuando se utilizó únicamente amoníaco, donde el límite de extinción pobre se extendió hasta  $\varphi=0.53$ . En cuanto a las emisiones, para  $\varphi=0.8$  se alcanzó un pico de NO cercano a 4500 ppm ( $\%H_2=30$ ), mientras que las concentraciones de  $\text{NH}_3$  no quemado aumentaban considerablemente a medida que se acercaban a  $\varphi=1$ . Para condiciones ricas ( $\varphi=1.3$ ) se redujeron las emisiones de NO, pero se alcanzaron concentraciones de amoníaco no quemado cercano a las 20.000 ppm debido a la menor temperatura de llama. Bajo la misma línea investigativa, Chen et al. [63] a través de un desarrollo experimental y numérico, estudiaron la influencia del porcentaje de hidrógeno en la temperatura alcanzada, donde se observó que a medida que se aumentaba la proporción de hidrógeno en mezcla, la temperatura máxima alcanzada aumentaba, por ejemplo, para una adición en 10% de hidrógeno en comparación a utilizar solo amoníaco, la temperatura máxima aumentó en un 5.5%, alcanzando un pico de 1903 K para un  $\varphi=1$ . Sin embargo, cuando la relación de equivalencia aumentó a 1.2, la temperatura máxima disminuyó a 1780 K, lo que da para concluir que la combustión en condiciones ricas disminuyó su eficiencia. En cuanto a las emisiones, se observó un aumento de NO con la adición de hidrógeno debido a la mayor temperatura de combustión alcanzada, obteniendo un aumento del 35% en condiciones pobres ( $\varphi=0.9$ ) al adicionarse 10% de  $\text{H}_2$ .

En cuanto a la investigación de la combustión utilizando mezcla de metano-amoníaco junto a la tecnología de medios porosos es que se destacan diversos artículos investigativos relacionados. El estudio de Dai et al. [40] realizaron un estudio experimental donde el medio poroso estaba conformado tanto por pellets de Zirconia ( $\text{ZrO}_2$ ) y espuma cerámica de Alúmina ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ). Dentro de las pruebas se utilizaron diferentes configuraciones en mezcla amoníaco-metano hasta un 35% de amoníaco y un rango de  $\varphi$  entre 0.6 y 1.4. Las condiciones de operación del flujo de entrada fueron entre 14 y 22 cm/s y se utilizaron 10 termocuplas distribuidos a lo largo del quemador. En cuanto a los resultados, se obtuvo que la adición de amoníaco provocó un desplazamiento de la llama aguas abajo, especialmente en la espuma cerámica, aumentando la velocidad de propagación y reduciendo el tiempo de precalentamiento.

Lo anterior, debido a la menor energía de activación y menor poder calorífico del amoniaco comparado con el metano. Se registró una tendencia al aumento de temperatura en mezclas pobres y una disminución en mezclas ricas. En cuanto a las emisiones, se obtuvo que para mezclas ricas la combustión parcial promovió la formación de  $H_2$  y  $CO$  como gas de síntesis con una eficiencia del 53.55%. La producción de hidrógeno aumentó con el incremento en proporción de amoniaco, alcanzando un 9.60% en fracción molar de  $H_2$  para un  $\%NH_3 = 20$ , un  $\varphi = 1.4$  y una velocidad de 14 cm/s. La producción de  $CO$  aumentó con la adición de amoniaco, mientras que se obtuvo una relación inversa con el  $CO_2$ , disminuyendo casi un 26% con un  $\varphi = 1.4$ .

Otro estudio realizado por Rocha et al. [41] utilizaron un reactor con dos secciones de poros diferentes, la parte inferior con porosidad de 40 PPI (pores per inch) y en la superior con 10 PPI, esto con el objetivo de estabilizar la llama en la zona intermedia del quemador. Dentro de los parámetros se utilizó un  $\varphi$  constante de 0.8 y un rango de concentración de amoniaco entre 30-80%. En cuanto a resultados, el rango de temperatura adiabática de la mezcla estuvo entre 1634 y 1698 °C, disminuyendo a medida que aumentaba la concentración de amoniaco. En cuanto a las emisiones, se mostró un pico de  $NO_x$  cuando la fracción molar de  $NH_3$  fue de 0.5. Este estudio también realizó una comparativa con respecto modelos computacionales, los cuales predijeron de manera similar los patrones observados experimentalmente. Sin embargo, en algunos casos sobreestimaron las concentraciones de  $NO_x$ , con predicciones de hasta siete veces los valores obtenidos realmente. De igual manera, los mecanismos cinéticos no presentaban como productos amoniaco no quemado, cuando en realidad a medida que aumentaba la concentración de amoniaco en mezcla, estos tendían a aumentar. Finalmente, se obtuvieron bajas concentraciones de  $CO$  (15-25 ppm), lo cual implica una combustión casi completa del metano.

Wang et al. [64] realizó un estudio similar en el cual también utilizaron dos medios porosos con diferentes porosidades, en la zona inferior de 40 PPI y en la superior de 15 PPI, ambas de carburo de silicio (SiC). Dentro de los parámetros utilizados en la mezcla metano-amoniaco se varió el metano en fracción ( $w$ ) entre 0-0.5, donde además el rango de equivalencia estuvo entre 0.5 y 1.3. Las temperaturas máximas alcanzadas se obtuvieron en la interfase de la espuma cerámica, donde al utilizar  $w=0.5$ , se obtuvo 1042°C en el lado derecho y 908°C en el izquierdo, indicando que la llama poseía cierta inclinación durante su propagación. Se observó que para fracciones de metano más bajas (0.1-0.3) la llama se estabilizaba en la interfase, obteniendo una velocidad de propagación de 0.041 cm/s para  $w=0.1$ . Las emisiones de  $NO$  alcanzaron valores de hasta 6816 ppm en condiciones pobres con  $w=0.1$ , pero con un aumento en la fracción de metano, las emisiones de  $NO$  disminuyeron significativamente con  $\varphi > 0.9$ . En cuanto a las emisiones de  $CO$  no superaron los 42 ppm en todos los casos, lo cual indica una combustión casi completa del metano. Para este estudio, el rango óptimo de estabilidad y emisiones se presentó con un rango de  $w$  entre 0.1-0.3 con un rango de equivalencia entre 0.5-0.9.

Otro estudio fue el realizado por Tolouei et al. [42], en el cual desarrollaron una simulación CFD en ANSYS® fluent analizando la comparativa entre la combustión metano-aire y metano-amoniaco-aire, donde además se agregó una configuración con y sin medio poroso. El medio poroso para este caso fue carburo de silicio (SiC) y una densidad de 10 PPI. Como parámetros se varió la fracción molar de amoniaco entre 0.1 y 0.9, junto con relaciones de equivalencia entre 0.8 y 1. Para el modelo se utilizó el algoritmo Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations (SIMPLE). Como principales resultados se obtuvo que la temperatura en la pared del quemador disminuyó cerca del 3.5% con la adición de amoniaco en comparación a la mezcla solo utilizando metano y que al agregar medios porosos el valor de la temperatura aumentó un 5.9% en comparación a no utilizarlos. Con la adición de amoniaco en 0.9 como fracción másica se redujeron en un 75% las emisiones de  $CO_2$ , pero las emisiones de  $NO_x$  aumentaron. La utilización de medio poroso se vio reflejada en una disminución del 10% de emisiones de  $NO_x$  frente a no utilizarlos. Sin embargo, el aumento de la porosidad no tuvo efecto significativo en la reducción adicional de  $NO_x$ .

En base a la revisión bibliográfica presentada es que en el presente desarrollo investigativo tiene un enfoque ligado a la combustión en mezcla metano-amoniaco con la utilización de medios porosos inertes, los cuales complementan a la disminución de emisiones y generan mayor estabilidad de llama para ciertas configuraciones de mezcla.

### 2.3.4 Mecanismos cinéticos y rutas de reacción en mezclas con amoniaco

El estudio detallado de los mecanismos cinéticos y las rutas de reacción en mezclas utilizando combustibles alternativos, como el amoniaco, resulta de vital importancia para comprender y predecir el comportamiento de los sistemas de combustión actuales. A diferencia de combustibles convencionales, la incorporación de amoniaco introduce nuevas familias de reacciones y especies intermedias, como  $\text{NH-NH}_2$ ,  $\text{HNO}$ ,  $\text{HCN}$  y  $\text{NNH}$ , que complejizan el proceso y modifican la formación de contaminantes como  $\text{NO}_x$ ,  $\text{CO}$  y  $\text{N}_2\text{O}$ . Estos compuestos no solo intervienen en la eficiencia térmica del sistema, sino que también determinan su impacto ambiental, por lo que el entendimiento de rutas de generación y consumo es fundamental en la búsqueda de tecnologías de combustión más limpias.

En el estudio previamente mencionado de Vignat et al. [61], a través de diagramas de rutas elementales, los autores muestran que la conversión de nitrógeno sigue tres trayectorias. La primera, por formación directa de  $\text{N}_2$ , la segunda por vía intermedia  $\text{N}_2\text{H}_2$ - $\text{NNH}$  y la tercera por rutas de contaminantes que involucran a  $\text{NO}$  y  $\text{N}_2\text{O}$  por ser intermediarios. Se observa que en condiciones cercanas a  $\phi=0.8$ , la ruta de contaminantes predomina, representando un 72% del flujo elemental de  $\text{N}$ , lo que explica la alta producción de  $\text{NO}$  bajo estas condiciones. En cambio, para mezclas ricas cercanas a  $\phi=1.3$ , la influencia de esta ruta decae al 37%, mientras que la vía  $\text{N}_2\text{H}_2$  predomina, con hasta un 32% del flujo. Por su parte, en el estudio de Singh et al. [65], se concluye que la formación de  $\text{NO}$  en mezclas  $\text{CH}_4/\text{NH}_3$  está fuertemente condicionada por la aparición de especies intermedias como  $\text{HNO}$ ,  $\text{NH}$  y  $\text{NH}_2$ . Esto ocurre porque al momento de adicionar  $\text{NH}_3$  en la mezcla, la oxidación inicial progresa a través de abstracciones de  $\text{H}_2$  que generan  $\text{NH}_2$  y posteriormente  $\text{NH}$ , lo que abre nuevas rutas hacia  $\text{HNO}$ . La acumulación de  $\text{HNO}$  es determinante, ya que su rápida descomposición mediante reacciones como  $\text{HNO} + \text{H} \rightarrow \text{NO} + \text{H}_2$  se convierte en el principal canal de producción de  $\text{NO}$ . Además, en el estudio también se concluye que el radical  $\text{HCO}$  es el principal responsable de la formación de  $\text{CO}$ . Esto se debe a que la oxidación de metano avanza a través de la formación de formaldehído ( $\text{CH}_2\text{O}$ ), el cual reacciona con radicales  $\text{H}$  y  $\text{OH}$  para producir  $\text{HCO}$ , y posteriormente este se transforma en  $\text{CO}$  mediante distintas rutas. De esta forma, aunque otras especies como  $\text{CH}$  o  $\text{CH}_2$  participan en la cadena, es la ruta formaldehído la que concentra la mayor parte del flujo químico.

### 2.3.5 Reactor de flujo recíproco

La configuración de un reactor de flujo recíproco junto a la utilización de medios porosos posee un enfoque del tipo transiente debido a que la zona de propagación del frente de combustión es controlada y posee una dirección de propagación que depende del ingreso de los reactantes al reactor (Figura 10). En este tipo de reactor se realiza un ciclo alternante de cambios de dirección entre las entradas y salidas de productos produciendo que, al momento de la entrada de los reactantes al medio poroso, estos se enfrentan a una temperatura elevada debido a la transferencia de calor de los gases de escape que abandonan el reactor, generando un precalentamiento de la mezcla entrante. Debido a ello, parte de la energía que normalmente se perdería en los gases de escape, es retenida y absorbida por conducción y radiación por la región porosa ubicada aguas arriba del frente de llama, por lo que esta onda de calor viaja a contraflujo de la premezcla entrante al reactor generando este precalentamiento. La configuración de diseño más utilizada en este tipo de reactores se puede apreciar en la Figura 11, donde se evidencia la utilización de válvulas que permitan la entrada de los reactantes y posterior salida de los gases de combustión.

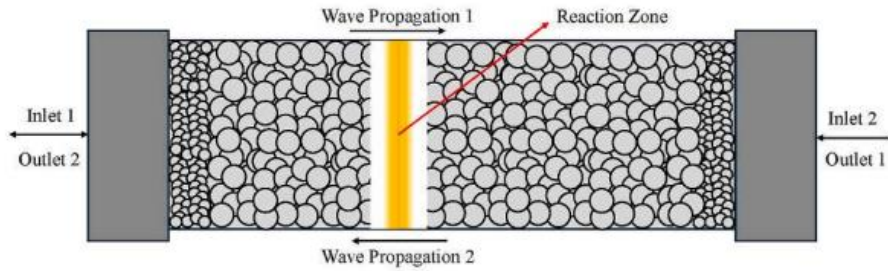


Figura 10: Dirección de propagación zona de combustión [66].

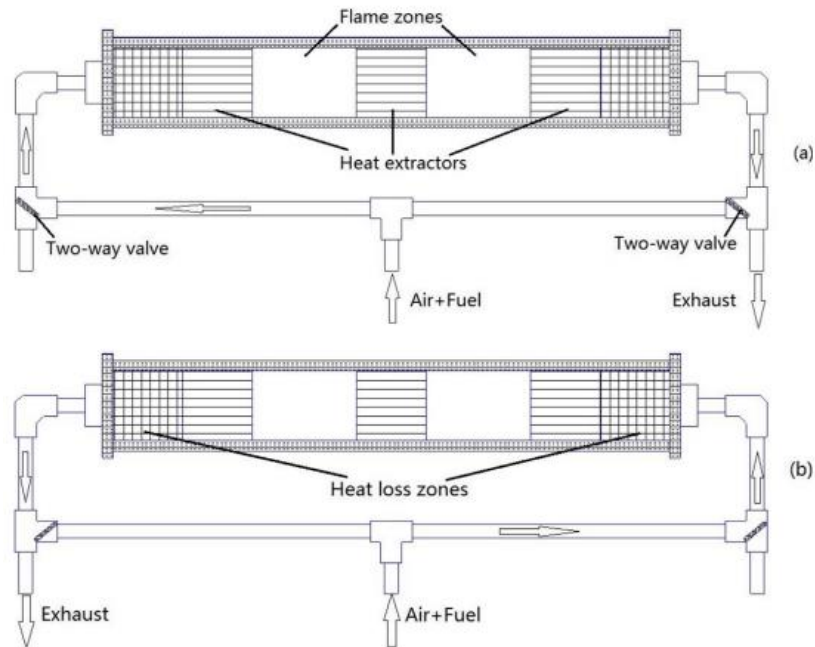


Figura 11: Configuración experimental Reactor flujo recíproco con MPI [67].

En la literatura se han evidenciado diversos estudios tanto numéricos como experimentales en cuanto a la utilización de un reactor de flujo recíproco o también llamado a contraflujo [68-71], en los cuales se menciona una mejora significativa en cuanto a la estabilidad de la combustión, permitiendo así, un control más preciso de la temperatura dentro del medio poroso. Además, debido al aumento en la eficiencia producto de la recirculación de calor, se evidenció una extensión aun mayor de los límites de inflamabilidad, permitiendo así, combustionar mezclas ultra pobres.

Uno de los parámetros operacionales más relevantes en reactores de flujo recíproco es el tiempo de cambio recíproco ( $t_{sc}$ ), ya que determina el comportamiento térmico del sistema a lo largo del reactor y las emisiones. Estudios han evidenciado que este tipo de reactores con la utilización de medios porosos, y bajos tiempos de ciclos recíprocos incrementa la eficiencia de la combustión superadiabática, minimizando las pérdidas térmicas y favorecer la recirculación de calor dentro del medio poroso, permitiendo operar mezclas ultra pobres y bajas emisiones [72,73].

## 3 Desarrollo experimental

### 3.1 Diseño del reactor de flujo recíproco

Para el diseño del reactor de flujo recíproco es que se tomaron en cuenta todos los riesgos asociados al trabajar con amoniaco en base al estudio realizado de la literatura enfocado en el desarrollo experimental del uso de la mezcla metano-amoniaco en combustión con medios porosos. Además, se ha hecho una revisión de las memorias/tesis de estudiantes [74-79] que realizaron su investigación experimental con el reactor de flujo recíproco que se encontraba disponible en el Laboratorio de Termofluidos de la universidad (Figura 12) y con ello, para el diseño se tomaron en consideración las oportunidades de mejora planteadas en las memorias para el nuevo diseño del reactor de flujo recíproco.



Figura 12: Vistas reactor de flujo recíproco anterior.

El material utilizado para el nuevo reactor es de acero inoxidable AISI 304. Además, en comparación al diseño anterior, el nuevo reactor posee dos geometrías de ingreso de combustible de tipo radial (donas) y no tres, lo que permite obtener una geometría simétrica. También, previamente se podía realizar una toma de temperatura en 7 puntos a lo largo del reactor, ahora está la posibilidad tomar datos de la distribución de temperatura en 9 secciones equidistantes a lo largo del reactor, lo que permite una medición más exacta del perfil térmico.

En la Figura 13 se aprecia el diseño de la geometría del nuevo reactor, el cual posee un cilindro central de 305 mm de largo, un diámetro exterior de 70 mm e interior de 60 mm. A este cilindro se le realizaron 3 perforaciones de 23 mm para luego soldar los tubos roscados y un total de 9 perforaciones pasantes (8 laterales y 1 en la parte superior) de 6 mm cada una y equidistantes entre sí a 35 mm para la inserción de las varillas cerámicas para el registro de la temperatura a través de las termocuplas. Mediante el tubo roscado central es por donde se realizará el precalentamiento de la zona para que, al momento del ingreso del combustible, este pueda combustionar y no se produzca el fenómeno de blowout. Posee 2 geometrías de ingreso radial de combustible (donas) para los casos de no-premezcla, los cuales tienen una cámara interior capaz de almacenar el combustible (gaseoso) y se realizaron 6 perforaciones de 3 mm de forma radial, permitiendo el ingreso del gas al medio poroso de forma homogénea. Estas “donas” están soldadas al cilindro central. Se poseen 2 piezas llamadas “Extremos” que están soldadas al cilindro central en sus extremos. Estas piezas poseen 8 perforaciones radiales para pernos M8 y un agujero pasante en la parte superior de 11 mm con hilos de  $\frac{1}{4}$  - 18 NPT el cual junto con los tubos roscados de los extremos cumplen el objetivo de evacuar los gases calientes productos de la combustión. Hay 2 piezas denominadas “Difusor inicial”, las cuales poseen 8 perforaciones para

pernos M8 y un agujero de 3/4" con hilos de 1/2 - 14 NPT para el ingreso de la mezcla aire-combustible para los casos de premezcla.

Hay 2 piezas llamadas "Difusor central", las cuales además de las 8 perforaciones para los pernos M8, cuenta con 8 perforaciones de 3 mm de diámetro a 14.75 mm del centro, las cuales tienen por objetivo que la mezcla que entra por la pieza "Difusor inicial", ingrese de manera homogénea al medio poroso. Una vez que se tenga tanto los tubos con rosca, las donas y los extremos soldados al cilindro central, es que mediante pernos M8 se unen las piezas de "Difusor inicial", "Difusor central" y "Extremos", completando la geometría total del reactor. Se utilizaron 9 varillas cerámicas de alúmina de 0.219 pulgadas de diámetro con 6 orificios en su interior de 0.050 pulgadas cada uno y 200 mm de longitud. Para la medición de la temperatura, se utilizaron termocuplas tipo S de 0.5 mm de diámetro, las cuales se introducen a través de uno de los orificios de las varillas cerámicas para medir la temperatura dentro del reactor en los 9 puntos equidistantes.

En la Figura 14 se aprecia una vista en corte que muestra el interior del reactor, el cual posee el medio poroso. Para la zona porosa, se utilizó en la zona central espuma cerámica de Zirconia ( $ZrO_2$ ) de 50 mm de diámetro, 25 mm de espesor y 10 pores per inch (PPI). En los extremos, se utilizó espuma cerámica de carburo de silicio (SiC) de 50 mm de diámetro, 27.5 mm de espesor y 40 PPI, esto como medida de protección para evitar que el frente de combustión se devuelva hacia los extremos del reactor. En la Figura 15 se presentan las espumas cerámicas descritas previamente. Para aislar el reactor, se utilizó fibra de cerámica de 9 mm de espesor para la zona interior y 30 mm de espesor para la zona exterior.

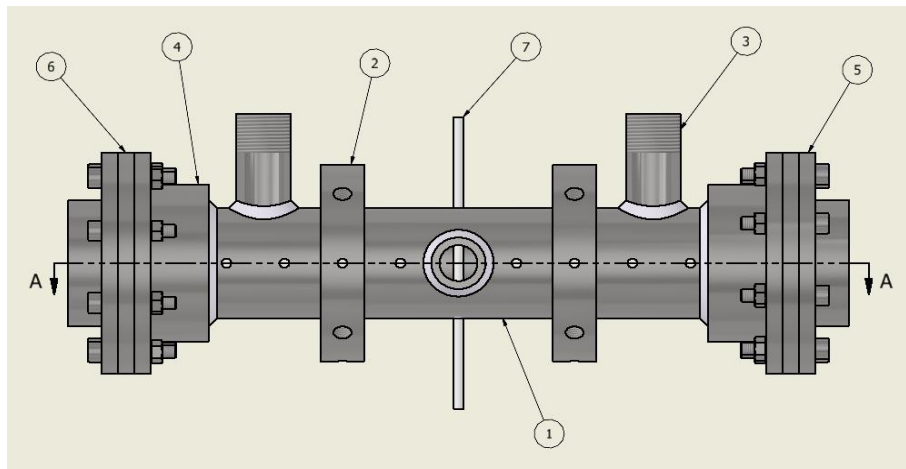


Figura 13: Vista frontal reactor de flujo recíproco. (1) Cilindro central, (2) Geometrías circulares de inyección de combustible (dona), (3) Tubos con rosca, (4) Extremos, (5) Difusor inicial, (6) Difusor central y (7) Varillas.

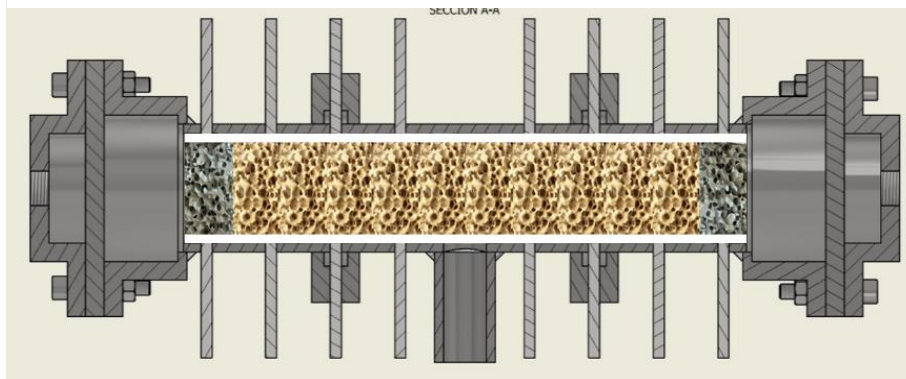


Figura 14: Vista en corte con representación MPI en su interior.

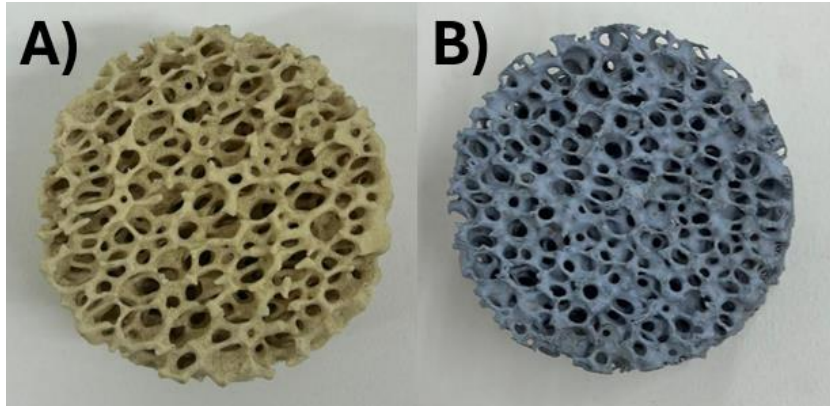


Figura 15: Espumas cerámicas. A) Zirconia 10 PPI, B) Carburo de silicio 40 PPI.

### 3.2 Setup experimental

Las pruebas experimentales se realizaron en el Laboratorio de Amoniaco de la Universidad Técnica Federico Santa María (sede José Miguel Carrera, Viña del Mar). Al interior de este laboratorio de encuentran campanas herméticas con una cámara interior de dimensiones 500 mm de ancho, 1100 mm de largo y 700 mm de alto, dentro de las cuales es donde se realizan las pruebas experimentales. Para las líneas por donde fluye el combustible y el aire se utilizó acero inoxidable 3/8", misma medida para las válvulas tipo T y de paso en cada extremo del reactor. Se poseen controladores de flujo especializados para amoniaco (marca AALBORG modelo GFC47 y rango de 0-60 L/min), metano (marca AALBORG modelo DPC17 y rango de 0-20 L/min) y aire (marca AALBORG modelo DPC57 y rango de 0-250 L/min).

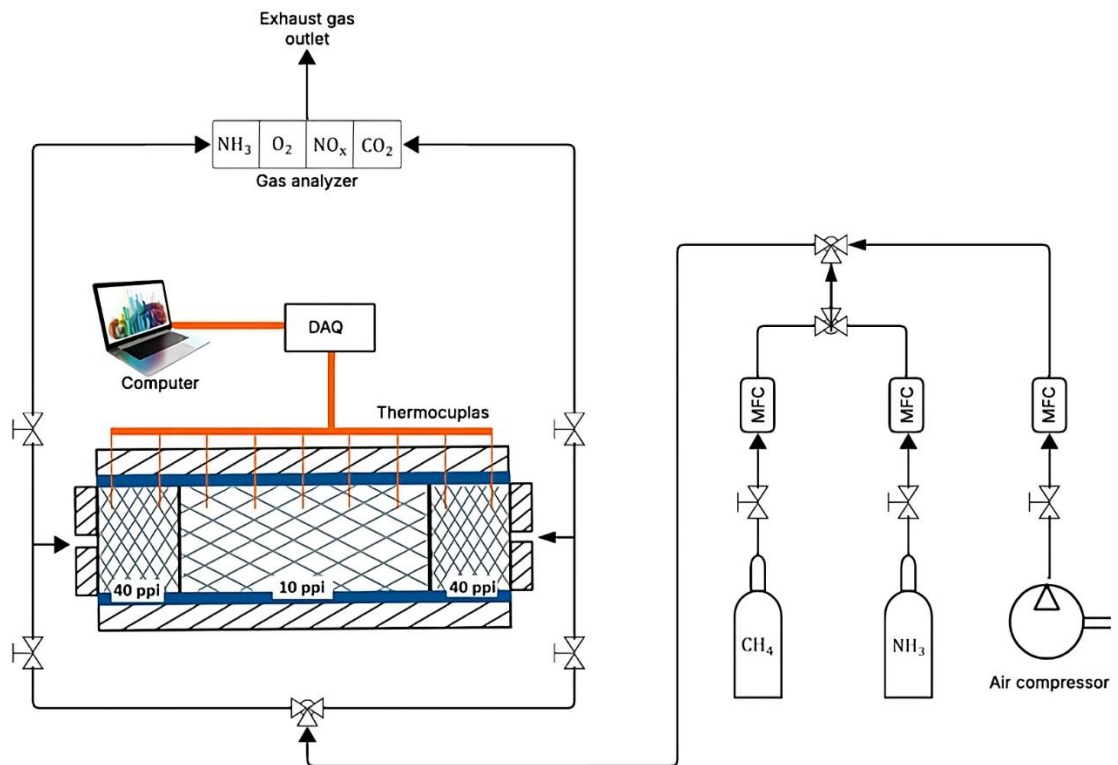


Figura 16: Setup experimental Reactor de Flujo Recíproco (elaboración propia).

En cuanto a la adquisición de datos provenientes de las termocuplas, es que estas últimas se disponen en un adquisidor de datos (DAQ) para este ser conectado a un computador y guardar los datos registrados. Para la toma de datos proveniente de los gases de combustión emitidos durante las pruebas, se tienen dos analizadores de gases de amoníaco modelo SKY2000 con un rango de medición de 0 a 100 ppm, donde uno de ellos se posiciona dentro de la campana y el segundo fuera de esta, los cuales se utilizan por razones de seguridad. Para la toma de datos de amoníaco no quemado, se utiliza un analizador de gases modelo SKY6000, el cual cuenta con un rango de medición de 0 a 5000 ppm. Para el resto de los gases ( $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{NO}_x$  y  $\text{H}_2$ ) se utiliza el analizador TESTO350. En la Figura 16 se aprecia un esquema general del Setup experimental y en la Figura 17 cómo se ve el reactor con todas las conexiones dentro de la campana, además de la numeración de las termocuplas que va desde la 1 hasta la 9 de izquierda a derecha, respectivamente.

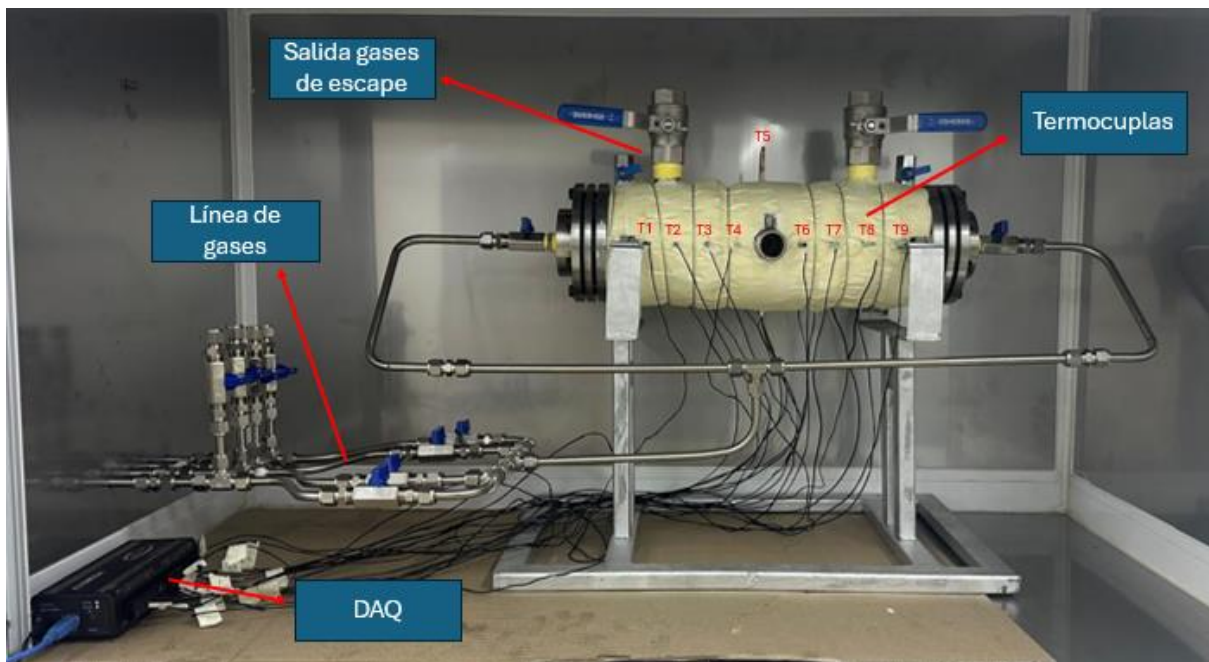


Figura 17: Setup experimental en banco de pruebas.

### 3.3 Pruebas experimentales

En las pruebas experimentales realizadas, se varió la relación de equivalencia ( $\varphi$ ) entre 0.8 a 1.2 y la fracción molar de amoníaco en mezcla ( $x_{\text{NH}_3}$ ), donde se utilizó 0, 0.2 y 0.4. Todas las pruebas fueron realizadas con premezcla, se mantuvo la velocidad de entrada al reactor de 20 cm/s y se utilizó un tiempo de cambio recíproco de 30 segundos. En la Tabla 4 se aprecian cada uno de los caudales utilizados en litros por minuto (lpm) para cada una de las pruebas para obtener la relación de equivalencia y los porcentajes de amoníaco-metano correspondientes. La potencia ( $P_T$ ) en kW fue calculada en base a la Ecuación 18, donde  $i$  representa el gas (amoníaco y metano para este caso),  $Q_i$  el flujo del gas en litros por minuto (lpm),  $\text{PCI}_i$  el poder calorífico inferior del gas en kJ/kg y  $\rho_i$  la densidad de referencia del gas en  $\text{kg/m}^3$ :

$$P_T = \sum_i \frac{Q_i \text{PCI}_i \rho_i}{60000} \quad (18)$$

Tabla 4: Flujos utilizados en pruebas experimentales y potencia alcanzada.

$\phi$	%NH <sub>3</sub>	%CH <sub>4</sub>	Q NH <sub>3</sub> (lpm)	Q CH <sub>4</sub> (lpm)	Q aire (lpm)	Potencia (kW)
0.8	0	100	0	2.63	32.28	1.46
0.8	20	80	0.59	2.38	30.94	1.45
0.8	40	60	1.37	2.05	30.49	1.44
0.9	0	100	0	2.93	30.98	1.63
0.9	20	80	0.66	2.65	30.61	1.62
0.9	40	60	1.52	2.28	30.12	1.60
1.0	0	100	0	3.23	30.69	1.80
1.0	20	80	0.73	2.91	30.28	1.78
1.0	40	60	1.67	2.50	29.74	1.76
1.1	0	100	0	3.51	30.40	1.96
1.1	20	80	0.79	3.16	29.96	1.93
1.1	40	60	1.81	2.72	29.38	1.91
1.2	0	100	0	3.79	30.12	2.11
1.2	20	80	0.85	3.41	29.64	2.09
1.2	40	60	1.95	2.93	29.03	2.06

### 3.3.1 Medidas de protección y elementos de seguridad

Debido a que se trabajó con amoníaco, se tomaron las siguientes medidas de protección asociadas:

- Se posee botón de emergencia para detección automática del ingreso de gas (metano-amoniaco).
- Uso de trajes con mascarillas especializados para trabajar en un ambiente con amoniaco.
- Zapatos de seguridad.
- Válvulas de cierre de paso del gas.
- Extintor de incendios.

### 3.3.2 Metodología para puesta en marcha

Para poder dar comienzo a cada una de las pruebas, se siguió la siguiente metodología para la puesta en marcha:

1. Instalar el reactor junto a su base dentro de la campana manteniendo un espacio adecuado para su funcionamiento.
2. Asegurarse que cada equipo utilizado posea la batería cargada al máximo para evitar interrupciones por falta de batería.
3. Verificar que las termocupas estén dispuestas de manera correcta en el adquisidor de datos.
4. Conectar a la alimentación eléctrica el compresor, controladores de flujo, adquisidor de datos, entre otros.
5. Encender extractor de gases al máximo caudal de trabajo posible.
6. Encender controladores de flujo, definiendo caudal de metano-aire tal que se cumpla una relación de equivalencia cercana a 1.4 y una velocidad de entrada de 14 cm/s.
7. Mediante un soplete, el cual se introduce en la zona central del reactor es que se eleva la temperatura en el interior hasta que la termocupa central (T5) marque alrededor de 600 °C.
8. Una vez se haya alcanzado la temperatura, abrir el paso de alimentación de metano con la relación de equivalencia de 1.4 y sin retirar el soplete, esperar a que se alcance la temperatura de ignición.
9. Cuando la temperatura comience a aumentar progresivamente, esperar a la estabilización del

- frente de combustión, retirar el soplete e introducir un cilindro de greda en zona de precalentamiento.
10. Una vez hecho, realizar los cambios de flujos en los controladores para los porcentajes en mezcla de gases de entrada y relación de equivalencia deseada para trabajar con metano y amoníaco en mezcla, ya que en la totalidad de las pruebas se trabaja con metano-aire o metano-amoniaco-aire.
  11. Al estar trabajando con un reactor de flujo recíproco, el cual permite alternar de forma cíclica la entrada de combustible con la salida de gases, existen dos casos (AB y BA) que van alternando cada un cierto tiempo determinado previamente establecido, donde el frente de combustión avanza en el mismo sentido en el cual ingresa el combustible. Estos cambios se deben realizar mediante la habilitación o cierre del paso de combustible y aire mediante válvulas.
  12. Para el caso AB (ingreso de combustible de izquierda a derecha) se deben abrir las válvulas v6 y v9, manteniendo v7 y v8 cerradas. Para el caso BA (ingreso de combustible de derecha a izquierda) se deben abrir las válvulas v7 y v8, manteniendo v6 y v9 cerradas. Para una mejor comprensión del funcionamiento, ver Figura 18.
  13. En caso de que se apague de manera no prevista, detener la operación y el paso de los gases.
  14. Una vez terminada la prueba con los cambios recíprocos correspondientes, detener el paso de gases al reactor y esperar a que la temperatura descienda hasta la temperatura ambiente.

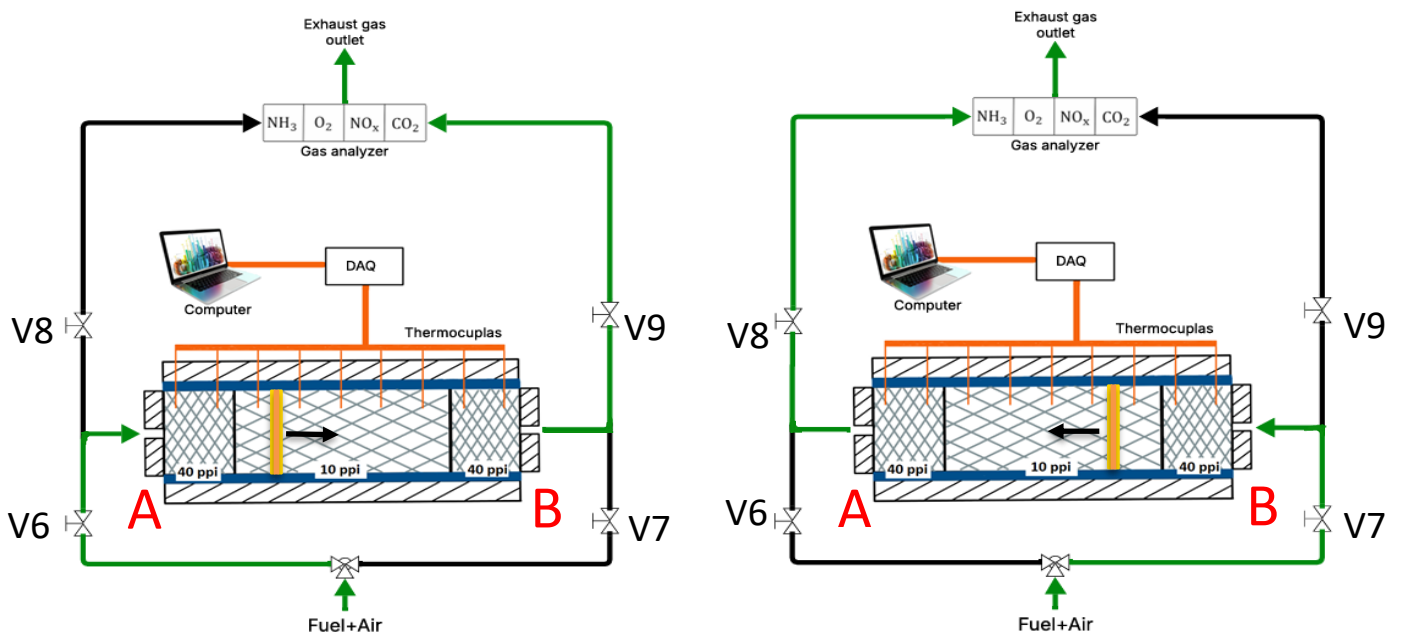


Figura 18: Configuración de flujos en operación. Caso AB (izquierda), Caso BA (derecha).

## 4 Simulación computacional

A continuación, se presenta el desarrollo computacional para simular la situación física del proceso de combustión en un reactor de flujo recíproco con medios porosos en su interior. Se presentará la metodología empleada, en conjunto con el software utilizado.

### 4.1 Ecuaciones gobernantes

Para desarrollar un modelo computacional acorde a la realidad física del problema, es que se consideraron las siguientes suposiciones:

1. Reactantes y productos son considerados como gas ideal incompresible.
2. El flujo al interior del medio poroso se considera como laminar.
3. Para la transferencia de calor entre el gas y el sólido se considera como equilibrio térmico.
4. El medio poroso se considera uniforme, homogéneo e inerte. Además, se asume constante y propiedades termofísicas isotrópicas.
5. Se considera adiabático.
6. Se desprecia el cambio de porosidad en los extremos, únicamente se trabaja con la zona porosa central.

A partir de las suposiciones mencionadas, es que derivan las siguientes ecuaciones gobernantes para el desarrollo del modelo matemático [65]:

#### a) Ecuación de continuidad:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon\rho_g) + \frac{\partial}{\partial z}(\varepsilon\rho_g u) = 0 \quad (19)$$

Donde  $\varepsilon$  representa la porosidad,  $\rho_g$  la densidad de la mezcla gaseosa y  $u$  la velocidad.

#### b) Ecuación de energía:

$$\frac{\partial}{\partial t}(c_g\rho_g T) + \frac{\partial}{\partial z}(\varepsilon c_g\rho_g u T) = \frac{\partial}{\partial z}(\varepsilon(k_g + c_g\rho_g D_t) \frac{\partial T}{\partial z} - (\varepsilon \sum_i h_i \rho_g Y_i (V_i)) + \varepsilon(\bar{\tau}u)) + \varepsilon\dot{Q}_{ch} \quad (20)$$

Donde  $T$  es la temperatura,  $k_g$  la conductividad térmica,  $D_t$  el coeficiente de difusión,  $h_i$  es la entalpía,  $Y_i$  es la fracción másica de la especie  $i$ ,  $V_i$  es la velocidad de difusión de la especie  $i$ ,  $\bar{\tau}$  el tensor de esfuerzos y  $\dot{Q}_{ch}$  el calor liberado por la reacción química.

#### c) Ecuación de conservación de especies:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon\rho_g Y_i) + \frac{\partial}{\partial z}(\varepsilon\rho_g u Y_i) = -\frac{\partial}{\partial z}(\varepsilon\rho_g Y_i V_i) + \varepsilon\omega_i W_i \quad (21)$$

Donde  $\omega_i$  y  $W_i$  son la producción molar y peso molecular, respectivamente.

Se utilizan las siguientes expresiones para el cálculo del inverso de la permeabilidad ( $1/a$ ) y el coeficiente de inercia ( $C_2$ ) [80]:

$$\frac{1}{a} = \frac{150(1-\varepsilon)^2}{D_p^2 \varepsilon^3} [\text{m}^{-2}] \quad (22)$$

$$C_2 = \frac{3.5(1-\varepsilon)}{D_p \varepsilon^3} \text{ [m}^{-1}\text{]} \quad (23)$$

Para el cálculo de la difusividad efectiva ( $D_{\text{eff}}$ ) se utiliza lo visto en el estudio de Arriagada et al. [81]:

$$D_{\text{eff}} = \frac{\varepsilon}{\tau} \frac{1-x_i}{\sum \frac{1}{D_{ij}}} \text{ [m}^2\text{s}^{-1}\text{]} \quad (24)$$

Donde  $D_{ij}$  es la difusividad binaria para el par  $i,j$ , que se expresa como:

$$D_{ij} = \frac{0.010137T^{1.75}}{\rho W^{0.5}(\dot{V}_i^{1/3} + \dot{V}_j^{1/3})^2} \quad (25)$$

Y  $\dot{V}_{i,j}$  representa el volumen de difusión de la especie  $i,j$ .

El diámetro de poro ( $D_p$ ) puede ser expresado usando la relación propuesta por Fu et al. [82]:

$$D_p = \frac{\sqrt{\frac{4\varepsilon}{\pi}}}{20 \times 2.54\omega} \text{ [m]} \quad (26)$$

### 4.1.1 Condiciones de frontera

Se establecen las siguientes condiciones de frontera:

**A la entrada ( $x = 0$ ):**

$$T = T_0 \quad ; \quad u = u_0 \quad ; \quad Y = Y_{i,0} \quad (27)$$

**A la salida ( $x = L$ ):**

$$\frac{\partial Y_i}{\partial z} = 0 \quad ; \quad \frac{\partial T}{\partial z} = 0 \quad (28)$$

Los subíndices 0 corresponden a los valores de entrada para temperatura, velocidad y especies. Como la entrada y salida está periódicamente alternando, se cambian los valores en cada ciclo.

## 4.2 Simulación utilizando software

### 4.2.1 Problema físico

Para el desarrollo de la simulación computacional, es que se utiliza el software comercial ANSYS® Fluent 2024R2, en el cual se trabaja con un modelo unidimensional. La geometría y las distancias se aprecian en la Figura 19. Como se está trabajando con un reactor de flujo recíproco, las secciones de los extremos equivalen tanto a la entrada y a la salida, es por ello por lo que se define de esa forma. Además, para poder generar el alternado del flujo en la entrada y salida cada cierto tiempo, es que se utilizó una User-Defined Function (UDF), que es un código en C++ en el cual se programó que cada 30 segundos intercambie la entrada y la salida, manteniendo la misma velocidad y temperatura del flujo entrante a la zona porosa. Tal y como se debe de realizar un aumento de la temperatura en la zona central del quemador en la parte experimental para alcanzar la temperatura de ignición de la mezcla

entrante y se produzca la combustión, en ANSYS lo que se realizó es que en las celdas centrales de la geometría en el tiempo  $t=0$  s se mantuvo una temperatura de ignición de 850K para así, generar la combustión. Para el resto de la geometría se mantiene en 300K (Figura 19). Debido a la simplificación de que el medio poroso a modelar es únicamente el que se encuentra en la zona central del reactor (Zirconia) y el más predominante el todo su largo, se utilizan los siguientes parámetros para su utilización: densidad ( $\rho$ ) de  $5890 \text{ kg/m}^3$ , conductividad térmica ( $k$ ) de  $4.7 \text{ W/(m K)}$  y calor específico ( $c$ )  $455 \text{ J/(kg K)}$  [83].

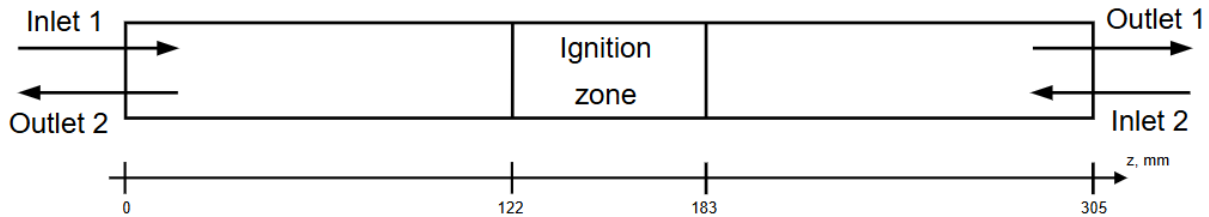


Figura 19: Representación de geometría e indicación de secciones.

## 4.2.2 Estudio de malla y paso temporal

Para escoger un tamaño de celda adecuado para la simulación, es que se optó por analizar 3 casos de estudio y analizar su convergencia respectiva. Para ello, es que se decidió utilizar el caso de  $\phi=1.0$  y  $x_{\text{NH}_3} = 0.2$  para un tamaño de celda de  $0.05 \times 0.05 \text{ mm}$ ,  $0.5 \times 0.5 \text{ mm}$  y  $0.75 \times 0.75 \text{ mm}$ . En la Figura 20 se observa el resultado de este estudio donde se puede apreciar que los perfiles de temperatura para un tamaño de celda de  $0.05 \times 0.05 \text{ mm}$  y  $0.5 \times 0.5 \text{ mm}$  mantienen una distribución y convergencia bastante similar. Es por ello, que se utiliza el tamaño de celda de  $0.5 \times 0.5 \text{ mm}$ , el cual a diferencia de  $0.05 \times 0.05 \text{ mm}$  presenta un tiempo de cómputo menor, debido a la menor cantidad de celdas en la geometría.

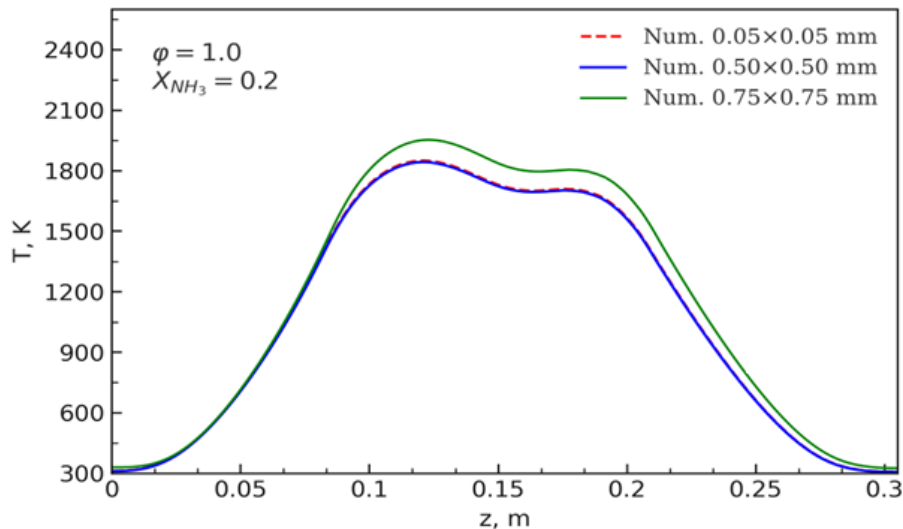


Figura 20: Perfiles de temperatura para diferentes tamaños de celdas.

Se realiza de forma similar para escoger un paso de tiempo, donde se utiliza  $1e-4$ ,  $1e-6$  y  $1e-8$ . El resultado de ello se presenta en la Figura 21, en la cual se observa que los perfiles térmicos son bastante similares entre sí en los extremos, pero que para un paso de tiempo de  $1e-6$  y  $1e-8$  convergen en la zona central a valores cercanos a los 1600K. Por lo tanto, para optimizar recursos computacionales

es que se opta con la utilización de un paso temporal de  $1e-6$ .

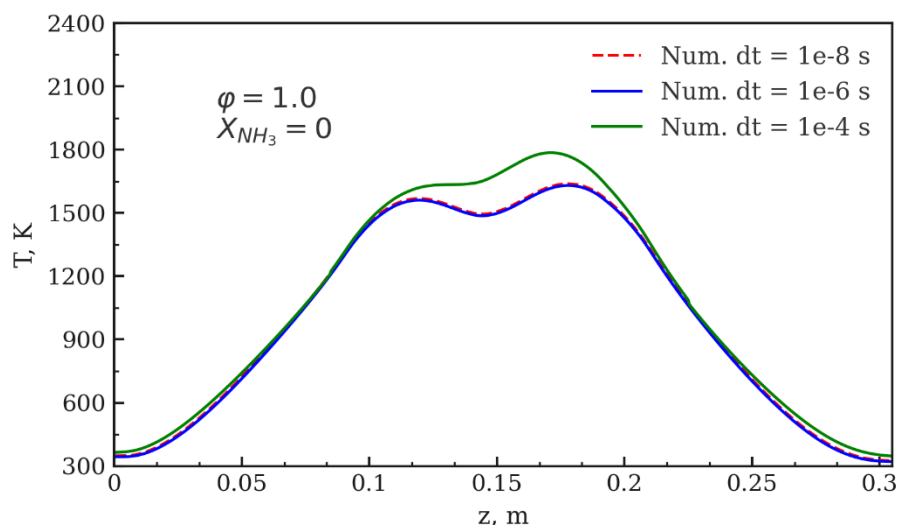


Figura 21: Perfiles de temperatura para diferentes pasos de tiempo.

### 4.2.3 Mecanismo cinético

En un principio se intentó trabajar con un paquete de datos CHEMKIN de 159 especies y 2459 reacciones [84,85], el cual si bien era un modelo bastante detallado y preciso que generaba mayor robustez a la simulación, provocaba limitaciones debido al costo computacional, ya que como se está trabajando con un reactor de flujo recíproco se debe considerar una simulación transiente y alternar la entrada con la salida en el ingreso de flujo por lo que al agregar una cinética detallada, los tiempos de cálculo eran considerablemente altos. Es por ello, que se optó por reducir la cinética de reacción mediante una herramienta que desarrolla mecanismos esqueletales a partir de mecanismos complejos, para lo cual se utilizó la herramienta desarrollada en el trabajo de Cazeret et al. [86], logrando reducir la cinética para mezclas de  $NH_3-CH_4$ , obteniendo un total de 45 especies y 419 reacciones, la cual se utilizó para el desarrollo de este trabajo.

La cinética global (159 especies y 2459 reacciones) considera un amplio espectro de familias químicas y rutas elementales, dentro de las cuales se incluyen tanto las reacciones de oxidación del carbono como las de formación y transformación de especies nitrogenadas. En la versión reducida (45 especies y 419 reacciones) estas rutas se mantienen precisamente para conservar la precisión en las predicciones dentro del rango de operación estudiado. En particular, se preservan las cadenas de oxidación de metano y especies  $C_1 - C_2$  ( $CH_4/CH_3/CH_2/CH_2O/CO/CO_2$ ), la química de NO térmico asociada al mecanismo de Zeldovich ( $N+O_2$ ,  $N+OH$ ,  $NO+O$ ) y las rutas de oxidación de  $NH_3$  a  $NO_x$  a través de radicales intermedios ( $NH_3 \rightarrow NH_2 \rightarrow NH \rightarrow N/NNH \rightarrow NO/NO_2/N_2O$ ), incluyendo ramificaciones por especies como  $HNCO/NCO$ ,  $H_2CN$ ,  $CH_2NH$  y radicales  $CN/NCN$ . Asimismo, se mantienen los procesos de interconversión entre  $NO-NO_2-N_2O$ , como también las reacciones de reducción de NO vía especies  $N-H$ , y la química peroxi mínima ( $HO_2/H_2O_2$ ,  $CH_3O_2/CH_3O_2H$ ) necesaria para garantizar estabilidad de la combustión. De esta forma, la reducción conserva las rutas dominantes que controlan la formación de productos principales ( $CO_2$ ,  $H_2O$ ,  $H_2$ ) y contaminantes críticos ( $NO_x$ ), asegurando representatividad frente al mecanismo completo con un menor costo computacional.

## 4.2.4 Parámetros utilizados

Para el flujo entrante al reactor se definieron parámetros de velocidad, temperatura y presión acordes a las condiciones propias de laboratorio para así realizar una comparativa del modelo computacional con los resultados experimentales. Es por ello, que se escoge una velocidad de entrada constante de 20 cm/s, 300 K de temperatura y 101 kPa para la presión (1 bar). Estos parámetros son ampliamente utilizados en investigaciones tanto numéricas como experimentales, tal y como se observó en estudios vistos en el estado del arte. Se utiliza un modelo laminar debido a que se trabaja con bajas velocidades y diámetros. Se selecciona SIMPLE como el acoplamiento presión-velocidad por ser estable y robusto, donde también es bien utilizado en investigaciones numéricas para combustión en medios porosos [42]. Además, se optó por el modelo de radiación Rosseland [87], ya que es recomendable su utilización cuando el medio es ópticamente denso, es decir, cuando los fotones emitidos poseen trayectorias muy cortas debido a una alta interacción con el material. En este caso, el transporte radiativo se puede aproximar de forma difusiva, lo que permite una simplificación en los cálculos sin perder precisión. Al estar trabajando con un reactor con medios porosos cerámicos, donde la porosidad es alta ( $\epsilon=0.83$ ) y la estructura interna genera múltiples colisiones y absorciones de radiación, cumple con esta condición de medio ópticamente denso. Este modelo presenta un coste computacional menor que, por ejemplo, usar el modelo P1, el cual amplía la aproximación realizada por Rosseland al resolver el primer momento de la ecuación de transporte radiativo, lo que permite aplicarlo también en medios intermedios y geometrías más complejas [88], aunque sin representar con exactitud efectos de direccionalidad o sombreado. Monte Carlo por su parte, se diferencia de ambos al no depender de suposiciones, ya que simula de manera estadística la trayectoria de cada fotón, ofreciendo la mayor precisión posible causando un costo computacional más elevado [89]. A continuación, se presenta un resumen de los parámetros utilizados en la simulación computacional en el software comercial ANSYS® fluent 2024R2.

Tabla 5: Parámetros utilizados en simulación.

Parámetros de simulación	Método	Condición
Entrada	Velocidad [cm/s]	20
	Temperatura [K]	300
	Viscosidad	Laminar
	Presión atmosférica [kPa]	101
	Combustión	Species Transport
Interior	Temperatura de ignición [K]	850
Pared	Condición de pared	No deslizamiento
Reacción	Finite-Rate: 45 especies y 419 reacciones	
Discretización	Second order upwind	
	Convergencia	$10^{-5}$ para todo.
Acoplamiento presión-velocidad	SIMPLE	
Modelo de radiación	Rosseland	
Zona porosa	Porosidad [-]	0.83
	Diámetro de poro [mm]	2.05
	Modelo térmico	Equilibrio

## 5 Análisis de resultados y discusión

Como ya se mencionó previamente, para el desarrollo tanto numérico como experimental se llevaron a cabo las mismas condiciones de operación típicas de un reactor de flujo recíproco empleando tiempos de cambio cíclico de  $t_{sc} = 30$  segundos hasta lograr un estado pseudo-estacionario, momento en el cual las variaciones de temperatura entre ciclos sucesivos se redujeron de manera significativa, estabilizando así el comportamiento global del sistema. Para la totalidad de los casos se alcanzó este estado en aproximadamente 20 ciclos. Es a partir de este estado pseudo-estacionario en el cual se realiza la comparativa entre los resultados numéricos y experimentales [90]. El error térmico experimental se calcula en base a tres repeticiones y el error en la medición de gases se obtuvo a partir de las oscilaciones en el tiempo al momento de la medición.

### 5.1 Perfil térmico y contraste numérico-experimental

En la Figura 22 se presenta un contraste numérico-experimental en el cual la curva representa el perfil de temperatura alcanzado para el caso  $\phi = 0.9$  y  $x_{NH_3} = 0.2$  mediante el modelo computacional y los cuadrados representan los valores de temperatura en esas distancias provenientes de las termocuplas obtenidas de forma experimental. Se obtiene que la curva numérica predice el comportamiento del perfil térmico de buena manera [91], con dos peaks bien marcados en la zona central, donde los datos experimentales son cercanos en el centro, pero más dispersos en los extremos, notando que existe un aumento de temperatura en esas zonas producto de los gases de escape que benefician el precalentamiento de las zonas de ingreso de combustible [71]. En la forma experimental, los peaks de temperatura se obtienen (en especial el izquierdo) un poco más a la izquierda, lo cual es completamente normal ya que el frente puede estabilizarse en diferentes zonas a lo largo del medio poroso, por lo que es de esperarse que se obtengan estas variaciones. Las temperaturas máximas alcanzadas resultan de 1464K y 1522K para la metodología experimental y numérica, respectivamente, con una diferencia menor a 100K, por lo que el modelo matemático presenta una buena predicción. Debido a esto, la simulación predice de manera satisfactoria la forma general del perfil, validando el modelo en términos de tendencia y localización de las zonas de máxima temperatura. Además, se observa que la adición de amoníaco no impide el desarrollo de un régimen estable en condiciones levemente pobres.

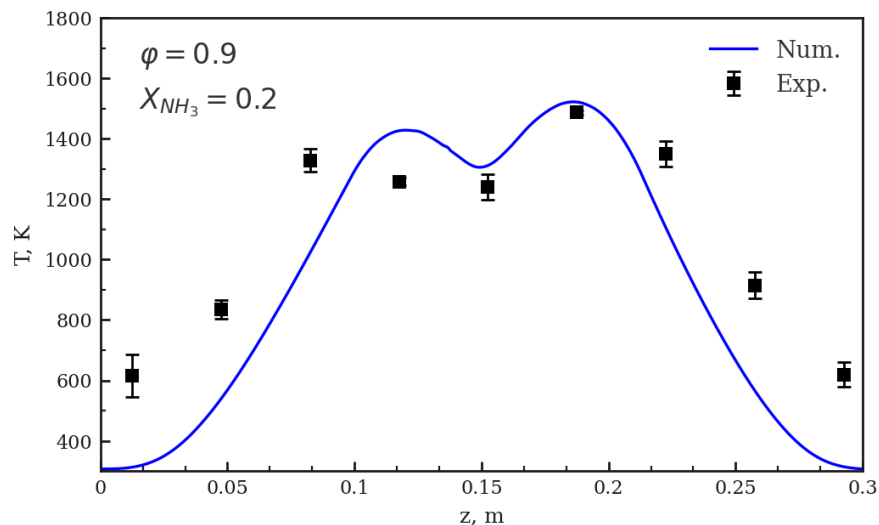


Figura 22: Contraste numérico-experimental para  $\phi = 0.9$  y  $x_{NH_3} = 0.2$ .

## 5.2 Influencia de la relación de equivalencia y el porcentaje de amoniaco en mezcla en la temperatura máxima

En la Tabla 6 se presenta una comparativa de las temperaturas alcanzadas tanto por el modelo computacional y experimental frente a la variación de la relación de equivalencia y el porcentaje de amoniaco en mezcla. Se observa de manera general que las temperaturas alcanzadas de forma numérica son cercanas a los valores experimentales, obteniendo porcentajes de error menores o igual al 10%, donde casi para la totalidad de los casos es menor al 6%, a excepción de algunas mezclas ricas en combustible. Esto se debe al uso del modelo radiativo Rosseland, ya que la liberación de calor está parcialmente limitada por difusión y por la disponibilidad de oxígeno, lo que favorece la formación de CO, H<sub>2</sub> y NH<sub>3</sub>. Bajo estas condiciones, el modelo de Rosseland tiende a subestimar las pérdidas de energía [87]. En cuanto al máximo de temperatura alcanzada, se obtiene cercano al rango estequiométrico para la totalidad de los casos. También, para las mezclas sin la adición de amoniaco ( $x_{\text{NH}_3} = 0$ ) se alcanzan valores cercanos a 1600K [92]. La temperatura máxima alcanzada mediante el modelo computacional fue de 1859K que corresponde a una relación de equivalencia de  $\phi = 1.0$  y  $x_{\text{NH}_3} = 0.4$ , mientras que para la parte experimental fue de 1791K para el caso de  $\phi = 1.0$  y  $x_{\text{NH}_3} = 0.2$ . Esta diferencia es esperable ya que con proporciones de  $x_{\text{NH}_3} = 0.2$  y  $x_{\text{NH}_3} = 0.4$  para  $\phi = 1.0$  es donde se alcanzan los máximos de temperatura [35]. Además, se evidencia que al utilizar un reactor de este estilo para mezclas con amoniaco en conjunto con medios porosos, se alcanzan temperaturas más altas en comparación a reactores lineales que utilizan medios porosos [40], debido a la gran acumulación de calor residual que se retiene en el reactor.

Tabla 6: Temperaturas máximas en Kelvin mediante método experimental (Exp), numérico (Num) y error asociado.

$\phi$ \ $x_{\text{NH}_3}$	0			0.2			0.4		
	Exp	Num	Error	Exp	Num	Error	Exp	Num	Error
0.8	1334	1401	5.0%	1435	1493	4.0%	1488	1516	1.9%
0.9	1361	1433	5.3%	1464	1522	4.0%	1687	1742	3.3%
1.0	1595	1630	2.2%	1791	1843	2.9%	1757	1859	5.8%
1.1	1465	1481	1.1%	1653	1743	5.5%	1456	1499	2.9%
1.2	1426	1444	1.3%	1519	1671	10.0%	1428	1304	8.7%

En base a los mismos datos de la Tabla 6, es que se presenta la Figura 23 en la cual se observan las curvas numéricas y datos experimentales para mejor visualización y análisis. El modelo matemático tiende a sobreestimar las temperaturas, generando discrepancias del orden de los 100 a 200K, siendo aceptables en base a que se está trabajando con un modelo unidimensional y equilibrio térmico. Esto último, es lo predominante en la causa de esta sobrestimación, ya que se iguala la temperatura del gas con la del sólido y en el experimento la temperatura que predomina al momento de la medición es más cercana a la del sólido, por lo cual, es de esperar que se obtengan temperaturas numéricas superiores a las medidas de manera experimental.

Se observa además, que la adición de amoniaco en mezcla para  $x_{\text{NH}_3} = 0.2$  supera en todo el rango de  $\phi$  en cuanto a temperatura en comparación a utilizar solo metano ( $x_{\text{NH}_3} = 0$ ), superando casi por 200K la temperatura máxima alcanzada. Sin embargo, no se presenta la misma tendencia para  $x_{\text{NH}_3} = 0.4$ , ya que para  $\phi < 1$  se observan mayores temperaturas en comparación con las otras dos mezclas, pero para  $\phi > 1$  se obtienen temperaturas más bajas, incluso por debajo en los casos donde se utiliza solo metano. El poder calorífico del amoniaco (18.6 MJ/kg) es menor si se compara con el del metano (50

MJ/kg), y se requiere de una energía de ignición más alta. Sin embargo, el calor liberado por la combustión de metano provoca la reducción de la energía de activación del amoníaco, promoviendo la combustión conjunta de metano-amoníaco, alcanzando una mayor temperatura en mezclas pobres al utilizar mayor fracción molar de amoníaco en mezcla [40, 93]. Para condiciones ricas en combustible, se reduce la temperatura de combustión debido a la menor cantidad de calor liberado por el amoníaco en un ambiente con menor cantidad de oxígeno, prevaleciendo reacciones endotérmicas del tipo  $\text{NH}_3 + \text{H} \rightarrow \text{NH}_2 + \text{H}_2$  y  $\text{NH}_3 + \text{OH} \rightarrow \text{HN}_2 + \text{H}_2\text{O}$  [34]. Esto predomina al utilizar mayor porcentaje de amoníaco en mezcla ( $x_{\text{NH}_3} = 0.4$ ), por lo que se observa una disminución notoria de la temperatura. Las tendencias reafirman que en los rangos cercanos al estequiométrico se alcanza un aumento significativo de la temperatura frente a la adición de amoníaco en mezcla, potenciando la estabilidad térmica en el reactor.

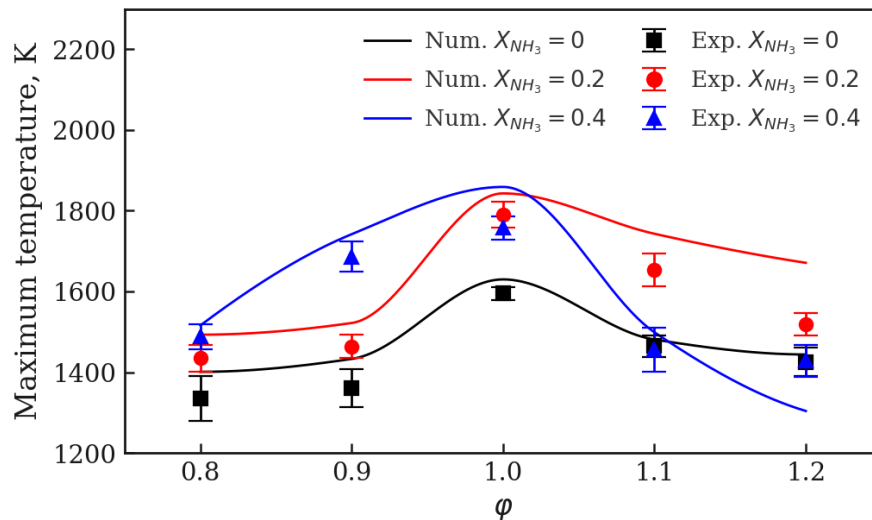


Figura 23: Temperaturas máximas bajo la influencia de la relación de equivalencia y el porcentaje de amoníaco en mezcla.

### 5.3 Influencia del amoníaco en mezcla con metano en los perfiles de temperatura

En la Figura 24 se muestran los perfiles de temperatura a lo largo del reactor para diferentes relaciones de equivalencia ( $\phi = 0.8, 1.0, 1.1$  y  $1.2$ ) evidenciando las diferencias de los perfiles a medida que aumenta la fracción molar de amoníaco en mezcla ( $x_{\text{NH}_3} = 0, 0.2$  y  $0.4$ ). Se puede notar, que en condiciones pobres de combustible ( $\phi = 0.8$ ), la adición de amoníaco produce un incremento moderado tanto en la forma del perfil como en la temperatura máxima. Mientras que la mezcla sin amoníaco alcanza valores cercanos a los 1400K y con la adición en fracción molar de 0.2 y 0.4 aumenta hasta los 1493K y 1516K, con una diferencia aproximada de tan solo 100K, lo que sugiere un aporte leve en temperatura, pero que favorece el sostenimiento de la combustión. Para la condición estequiométrica por su parte ( $\phi = 1.0$ ), la presencia de amoníaco en mezcla beneficia en gran medida la obtención de un perfil térmico con mayores temperaturas localizadas en la zona central del medio poroso. Al utilizar solo metano se alcanzan temperaturas cercanas a los 1600K, pero a medida que aumenta la fracción molar de amoníaco, se alcanzan temperaturas por sobre los 1800K, tanto para  $x_{\text{NH}_3} = 0.2$  y  $x_{\text{NH}_3} = 0.4$ , siendo muy cercanos estos valores entre sí, como ya se había mencionado previamente con la comparativa de otros estudios. Esto está fuertemente ligado a que en el rango estequiométrico, se genera la oxidación completa, liberando el máximo poder calorífico disponible en la mezcla. Además, cuando

hay suficiente oxígeno disponible, se forman y mantienen radicales oxidantes como el OH y el HO<sub>2</sub>, los cuales aceleran la oxidación provocando un incremento de la temperatura local [94].

Por otro lado, para mezclas ricas en combustible ( $\phi = 1.1$  y  $1.2$ ) se evidencia que con  $x_{\text{NH}_3} = 0.2$  sigue siendo predominante en temperatura por sobre la utilización de metano-aire, pero es cuando se proporciona mayor cantidad en fracción molar ( $x_{\text{NH}_3} = 0.4$ ), donde se produce una disminución considerable de la temperatura, alcanzando valores cercanos e incluso inferiores a la utilización pura de metano, lo que indica una combustión menos eficiente. Esto se debe no solo porque el amoníaco aporta menor poder calorífico que el metano, sino que también tanto el amoníaco y el metano en particular sufren oxidaciones parciales como  $\text{NH}_3 + \text{OH} \rightarrow \text{NH}_2 + \text{H}_2\text{O}$  y  $\text{CH}_4 + \text{CO}_2 \rightarrow 2\text{CO} + 2\text{H}_2$ , las cuales son rutas endotérmicas, por lo que parte del calor generado en la combustión es absorbido en lugar de liberarlo [40]. En cuanto a la forma de los perfiles, la mayoría presenta el comportamiento típico, a excepción de algunos, donde se denota un frente de combustión más estable en zonas levemente alejadas del centro, como es el caso de  $\phi = 0.8$  con  $x_{\text{NH}_3} = 0.4$ , lo cual indica al igual que en la parte experimental, que el frente de combustión puede moverse y alejarse de las zonas más esperadas.

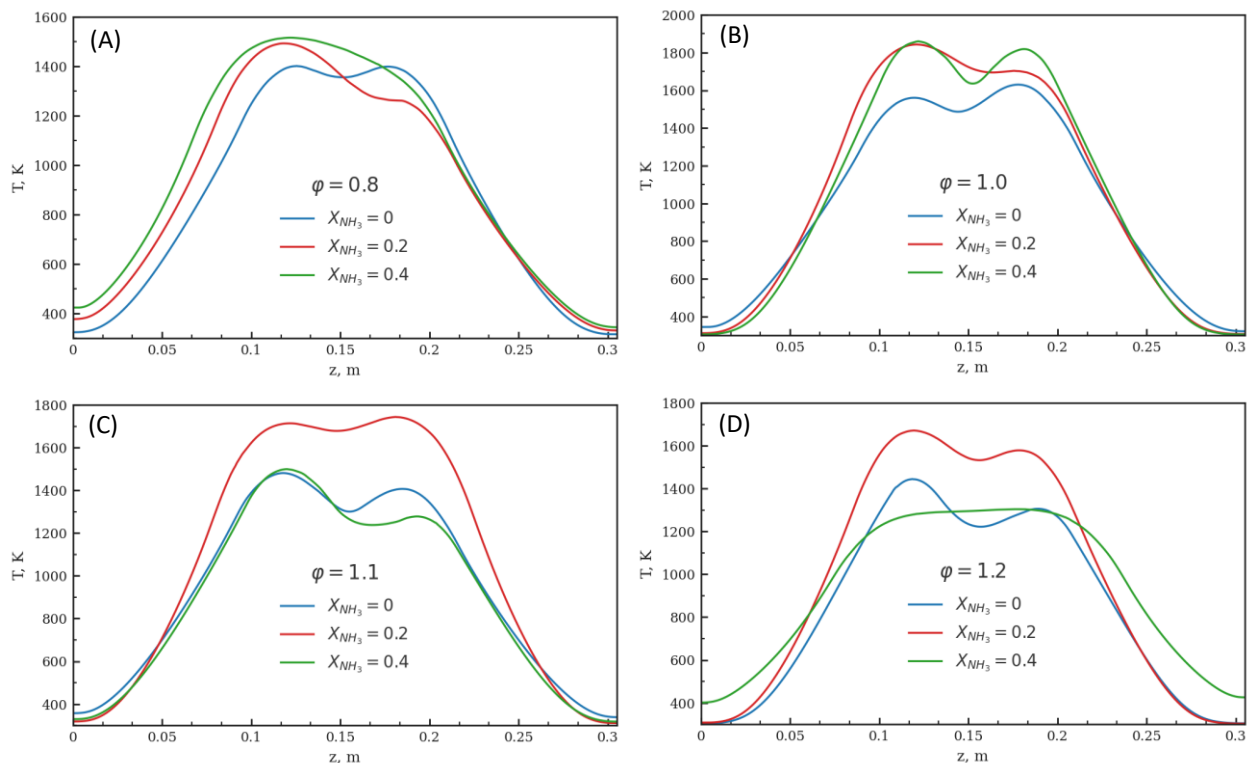


Figura 24: Perfiles térmicos numéricos bajo la influencia del porcentaje de amoníaco en mezcla para distintas relaciones de equivalencia. (A)  $\phi=0.8$ , (B)  $\phi=1.0$ , (C)  $\phi=1.1$ , (D)  $\phi=1.2$ .

## 5.4 Influencia de la relación de equivalencia en los perfiles de temperatura

La Figura 25 presenta los perfiles de temperatura para distintas relaciones de equivalencia ( $\phi = 0.8-1.2$ ) considerando tres composiciones de combustible: (A)  $x_{\text{NH}_3} = 0$ , (B)  $x_{\text{NH}_3} = 0.2$  y (C)  $x_{\text{NH}_3} = 0.4$ . En el caso de  $x_{\text{NH}_3} = 0$ , en base a los perfiles se observa que la temperatura máxima se alcanza en condiciones estequiométricas ( $\phi = 1.0$ ), con valores cercanos a 1600 K. A medida que se aleja del rango

estequiométrico tanto para mezclas pobres como ricas en combustible, la temperatura disminuye progresivamente hasta llegar por sobre los 1400K aproximadamente, siendo un comportamiento similar para cada uno de ellos. Frente a la adición de 20% de amoníaco en mezcla ( $x_{NH_3} = 0.2$ ), también se alcanza la temperatura máxima en  $\phi=1.0$  con valores superiores a 1800K. Para este caso, las mezclas ricas ( $\phi=1.1$  y  $\phi=1.2$ ) alcanzan valores superiores que para mezclas pobres ( $\phi=0.8$  y  $\phi=0.9$ ), presentando diferencias de 100 a 200K entre ellas. A su vez, se tiene como tendencia que primero aumenta la temperatura a medida que se incrementa  $\phi$  y luego disminuye con la continuidad del aumento de este. Cuando  $\phi < 1$ , ocurre la reacción de oxidación completa, debido al exceso de oxígeno, aumentando la temperatura con el aumento en la concentración de combustible. Para  $\phi > 1$  se produce oxidación parcial, ya que en esta zona el metano residual reacciona con el  $CO_2$  para producir  $CO$  y  $H_2$ , absorbiendo una gran parte del calor de combustión, causando una menor temperatura [35].

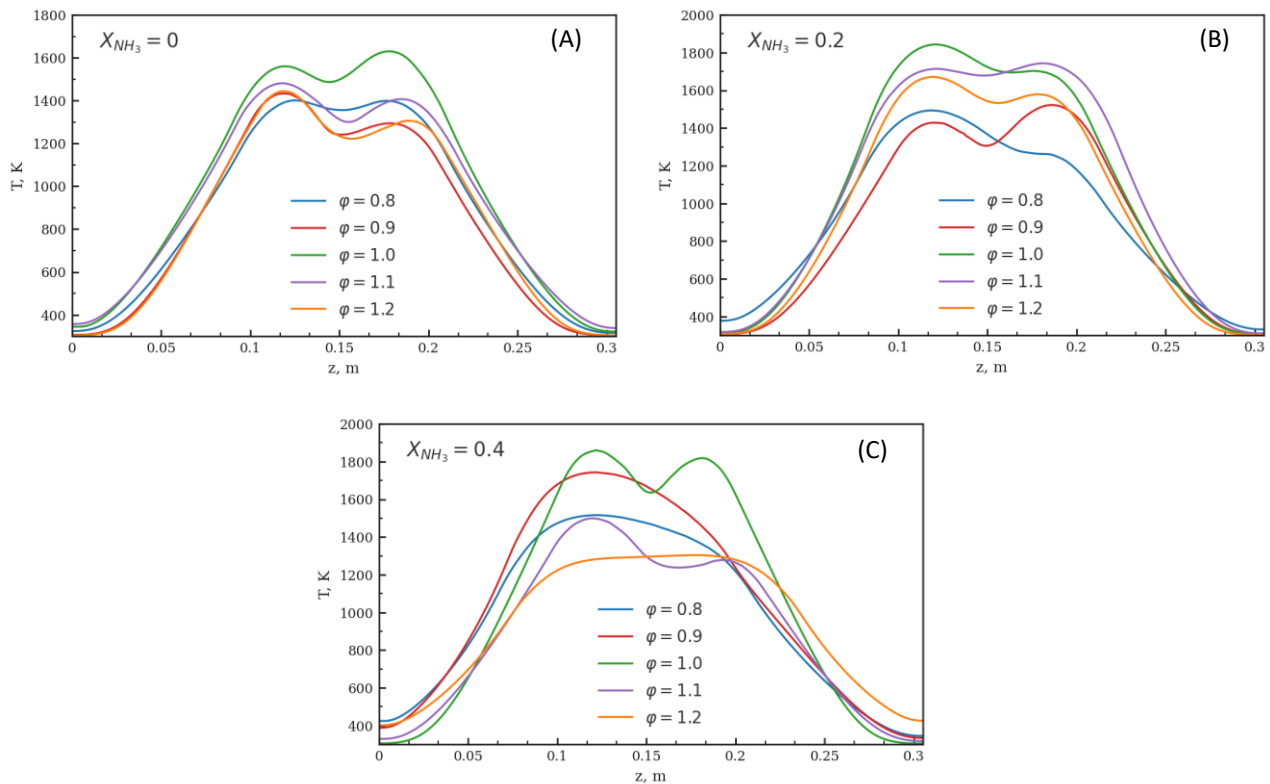


Figura 25: Perfiles térmicos numéricos bajo la influencia de la relación de equivalencia para distintas fracciones de amoníaco en mezcla. (A)  $x_{NH_3}=0$ , (B)  $x_{NH_3}=0.2$ , (C)  $x_{NH_3}=0.4$ .

En cuanto a la forma de los perfiles, además de presentar temperaturas superiores en comparación a solo utilizar metano, se observa un ligero ensanchamiento de los perfiles térmicos. Esto se atribuye principalmente a la cinética más lenta del amoníaco [92], que prolonga la reacción en zonas más alejadas del núcleo de combustión, generando una distribución más amplia del calor. Para el caso de  $x_{NH_3} = 0.4$ , nuevamente se presenta la mayor temperatura para  $\phi=1.0$ . Sin embargo, contrario a lo que ocurre para el caso de  $x_{NH_3} = 0.2$ , se obtienen mayores temperaturas al combustionar mezclas pobres en combustible versus mezclas ricas en combustibles, donde se puede apreciar una caída significativa en la temperatura para  $\phi=1.2$ , con perfiles que llegan a ser más homogéneos en la zona central, pero con valores máximos inferiores a los observados en  $x_{NH_3}=0$  y  $x_{NH_3}=0.2$ . Esto confirma que, aunque el amoníaco puede contribuir al aumento de la reactividad y la estabilidad térmica en condiciones pobres o estequiométricas, su presencia en altas proporciones limita la eficiencia en condiciones ricas. Finalmente, en cuanto a la forma del perfil térmico, la tendencia de ensanchamiento se intensifica en

comparación al caso anterior, mostrando algunos peaks únicos desplazados de la zona central levemente para mezclas pobres en combustible, con formas menos simétricas y una mayor dispersión térmica

## 5.5 Influencia del amoniaco en mezcla y la relación de equivalencia en las emisiones

### 5.5.1 Emisiones de CO

En la Figura 26 se presentan las emisiones de CO normalizadas al 15% de oxígeno en base seca, en función de los parámetros variados en el estudio que son la relación de equivalencia y la fracción molar de amoniaco en mezcla. Se observa un contraste numérico-experimental acorde a las tendencias del modelo matemático y ordenes de magnitud propiamente alcanzadas por ambas metodologías. Las emisiones de CO resultan de manera ascendente en cuanto a los valores de relación de equivalencia, siendo valores muy bajos previos a la relación estequiométrica ( $\phi=1.0$ ). En cambio, sobre  $\phi=1.0$ , para todos los casos hay un aumento de CO progresivo, donde por ejemplo, para el caso sin presencia de amoniaco en mezcla ( $x_{NH_3} = 0$ ), los valores escalan rápidamente desde  $\phi=1.0$  con aproximadamente 2400 ppm a  $\phi=1.1$  por sobre los 7500 ppm. Además, es precisamente para este caso donde se obtienen los mayores índices de emisiones de CO en todo el rango de equivalencia, con un máximo de 7510 ppm para  $\phi=1.1$  debido a la mayor presencia de carbono en mezcla, favoreciendo la formación de CO. Sin embargo, a medida que se adiciona un mayor porcentaje de amoniaco en mezcla, disminuye el total de carbono (menor porcentaje de  $CH_4$ ), permitiendo obtener menores emisiones de CO. Es por ello por lo que para  $x_{NH_3} = 0.2$  y  $0.4$ , los niveles de CO disminuyen, obteniendo emisiones máximas de 6193 y 5509 ppm, respectivamente.

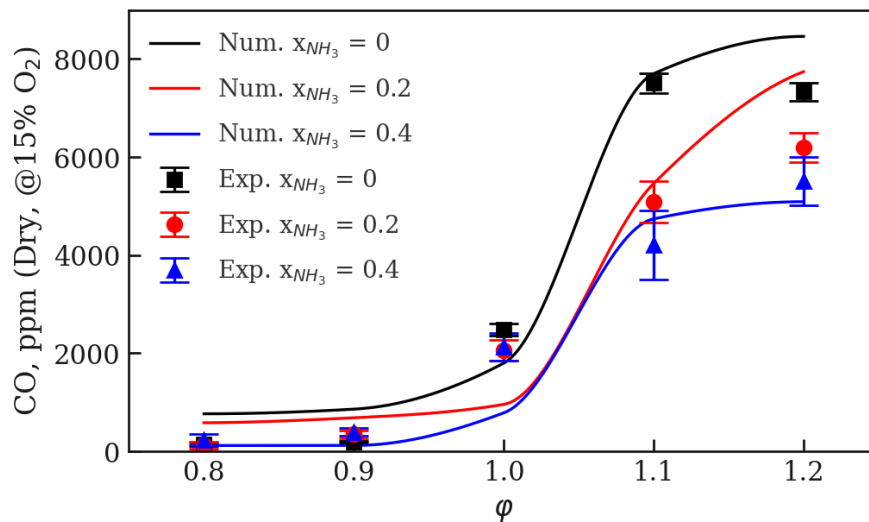


Figura 26: Influencia de  $\phi$  y  $x_{NH_3}$  en emisiones de CO.

### 5.5.2 Emisiones de CO<sub>2</sub>

Analizando las emisiones de CO<sub>2</sub>, en la Figura 27 se aprecia que las tendencias del modelo matemático poseen una leve desviación en comparación a los datos experimentales, siendo más evidentes para el caso de  $x_{NH_3} = 0.4$  en la zona rica en combustible, donde el modelo subestima las emisiones parcialmente. A pesar de ello, tanto la simulación como los datos experimentales reflejan de

manera consistente que la adición de amoníaco conduce a una disminución en las emisiones de  $\text{CO}_2$ , confirmando el potencial de esta estrategia para la reducción de gases de efecto invernadero en procesos de combustión. Para el rango de  $\phi < 1.0$ , se observa una tendencia al incremento de  $\text{CO}_2$  al aumentar la concentración de metano. Para  $\phi > 1.0$  se obtiene una oxidación parcial debido a la baja concentración de oxígeno en la mezcla, donde el metano residual reacciona con especies intermedias permitiendo la producción de  $\text{CO}$  y  $\text{H}_2$ .

En cuanto al perfil, se obtiene un máximo para los 3 casos de adición de amoníaco en mezcla, el cual se obtiene para  $\phi = 1.0$ , donde luego de alcanzar ese máximo valor decae en mezclas ricas. Esto es debido a que en el rango estequiométrico es donde se produce la oxidación más completa del carbono presente en el metano, generando una mayor fracción másica de  $\text{CO}_2$ . Es por ello, por lo que en zonas de menor oxígeno, favorece la producción de  $\text{CO}$  y especies intermedias, reduciendo la proporción de  $\text{CO}_2$ . La influencia de la adición de amoníaco es clara y es que, al igual que para el caso de  $\text{CO}$ , a medida que se aumenta el porcentaje de amoníaco en mezcla (para los casos de estudio), se producen menores emisiones de  $\text{CO}_2$  en todo el rango de equivalencia, donde se obtienen en promedio reducciones del 20% utilizando  $x_{\text{NH}_3} = 0.2$  y un 46% utilizando  $x_{\text{NH}_3} = 0.4$ . Esto se explica ya que al sustituir parte del metano por amoníaco, este último es libre de carbono, lo que reduce el de  $\text{CO}_2$  emitido.

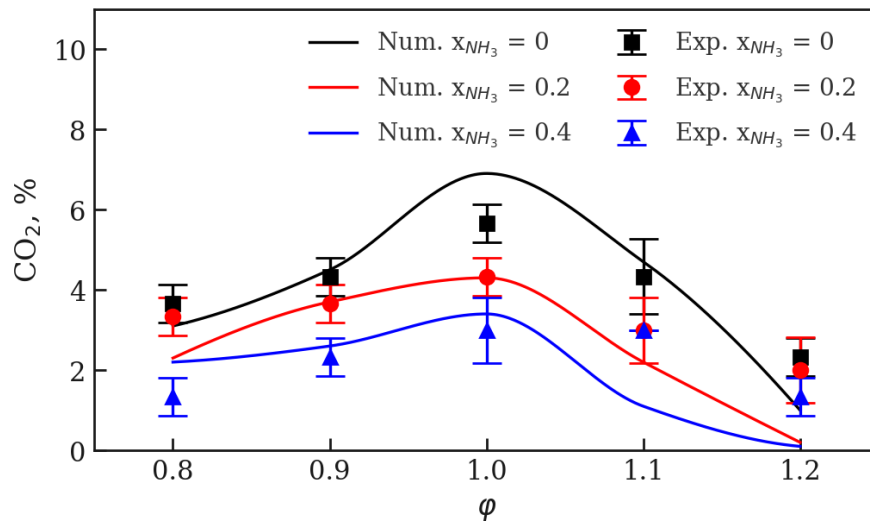


Figura 27: Influencia de  $\phi$  y  $x_{\text{NH}_3}$  en emisiones de  $\text{CO}_2$ .

### 5.5.3 Emisiones de $\text{H}_2$

El hidrógeno ( $\text{H}_2$ ) por su parte, cobra relevancia al estar utilizando amoníaco como combustible, ya que el hidrógeno es un subproducto para mezclas ricas, beneficiando aún más su producción en comparación a solo utilizar metano. En la Figura 28 se observa el comportamiento ascendente de emisiones de  $\text{H}_2$  frente a la relación de equivalencia para los 3 casos de estudio al utilizar amoníaco en mezcla, donde en su totalidad se observa que para  $\phi = 1.2$  es el caso de máxima emisión y despreciable para las zonas pobres en combustible. Para el caso sin amoníaco ( $x_{\text{NH}_3} = 0$ ), se observa un aumento progresivo alcanzando valores cercanos a 2000 ppm. Ahora bien, es cuando se comienza la adición de amoníaco en mezcla donde las tendencias son ligeramente mayores en comparación al caso de metano puro, siendo el caso de  $x_{\text{NH}_3} = 0.2$  valores máximos superiores a 2500 ppm y para  $x_{\text{NH}_3} = 0.4$  por sobre los 3400 ppm. El modelo matemático predice de buena manera las tendencias frente a la comparativa de las diferentes mezclas y el aumento progresivo luego de la condición estequiométrica, donde para el valor máximo obtenido de manera experimental es para  $x_{\text{NH}_3} = 0.4$  y  $\phi = 1.2$  que resulta de

3432 ppm. Fue el caso de  $x_{\text{NH}_3} = 0.2$  donde la curva se ajustó mejor a los casos de estudio frente al contraste numérico-experimental. Aun así, se logran ordenes de magnitud aceptables, ya que se está trabajando con una cinética reducida.

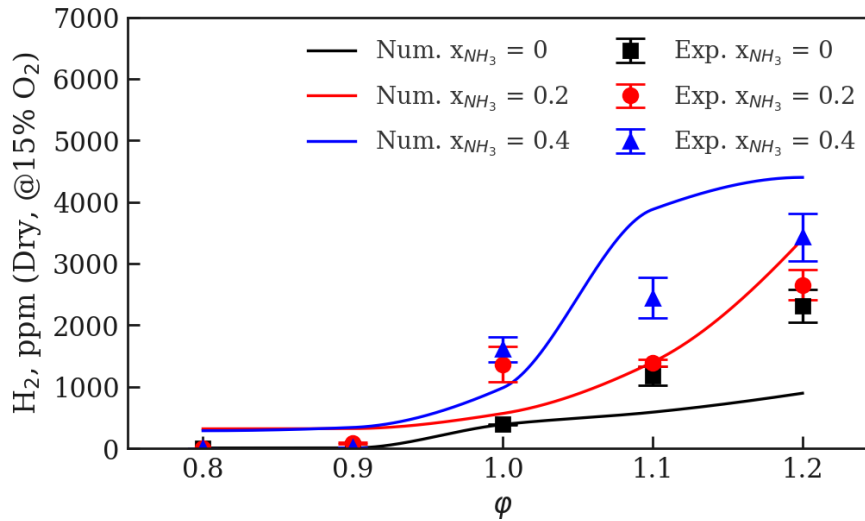


Figura 28: Influencia de  $\phi$  y  $x_{\text{NH}_3}$  en emisiones de  $\text{H}_2$ .

### 5.5.4 Emisiones de $\text{NO}_x$

Como se pudo observar previamente, la adición de amoníaco en mezcla con metano, permite reducir las emisiones de  $\text{CO}$  y  $\text{CO}_2$ , donde también se beneficia la producción de  $\text{H}_2$ . Sin embargo, al utilizar amoníaco en mezcla, este produce lo que se puede observar en la Figura 29, que es el aumento de los  $\text{NO}_x$ . Para mezclas sin adición de amoníaco, se observa que tanto la curva, como los valores experimentales, son muy bajos, del orden de los 10 ppm. Sin embargo, esta tendencia aumenta al utilizar cada vez más porcentaje de amoníaco, donde tanto de forma numérica como experimental, se alcanza el máximo valor cercano a la zona estequiométrica, levemente desplazado hacia la izquierda [35, 59], lo cual se explica debido a que es una zona favorecida con mayor disponibilidad de  $\text{O}_2$  para la generación principalmente de  $\text{NO}$  y buena reactividad, teniendo una caída considerable para mezclas ricas en combustible. Al tener solo metano como combustible, la producción de  $\text{NO}_x$  se debe principalmente al  $\text{NO}$  térmico, que se forma debido a las altas temperaturas ( $<1500$  °C), el cual es potenciado por el  $\text{N}_2$  del aire. Al momento de tener más porcentaje de amoníaco en mezcla, esto cambia ya que se posee mayor presencia de nitrógeno debido al amoníaco ( $\text{NH}_3$ ). Es por ello por lo que se observa que a medida que se aumenta el porcentaje de amoníaco, aumentan las emisiones de  $\text{NO}_x$ . En cuanto a la comparativa con el modelo matemático, este tiende a sobreestimar los valores de  $\text{NO}_x$  para el caso de  $x_{\text{NH}_3} = 0.4$  y subestimar para  $x_{\text{NH}_3} = 0.2$ , pero se mantiene una buena tendencia a lo largo de la relación de equivalencia para este último. Los valores experimentales máximos de  $\text{NO}_x$  fueron de 945 ppm y 1028 ppm, para  $x_{\text{NH}_3} = 0.2$  y  $x_{\text{NH}_3} = 0.4$ , respectivamente.

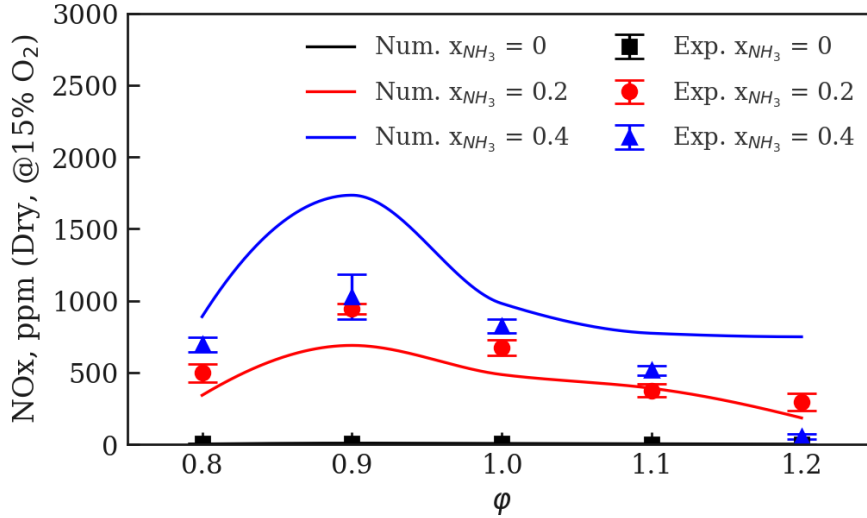


Figura 29: Influencia de  $\phi$  y  $x_{NH_3}$  en emisiones de NOx.

### 5.5.5 Emisiones de $NH_3$

En la Figura 30 se presentan las emisiones de  $NH_3$ , lo que equivale al amoníaco no quemado en la combustión. Para los casos de estudio relevantes en esta figura, los cuales son los que poseen adición de amoníaco en mezcla ( $x_{NH_3} = 0.2$  y  $x_{NH_3} = 0.4$ ), se presenta que previo a la relación estequiométrica ( $\phi = 1.0$ ), se obtienen niveles de emisiones menores a 200 ppm, con lo cual se concluye que hubo una correcta oxidación por parte del amoníaco en ese rango. Ahora bien, al momento de combustionar mezclas ricas en combustible, es donde se presentan mayores emisiones, lo cual se puede apreciar tanto de manera experimental como numérica, donde crece de forma pronunciada desde  $\phi = 1.0$  a  $\phi = 1.1$  y luego aumenta aún más en  $\phi = 1.2$ . Esto es debido a que en este régimen deficiente de  $O_2$ , la oxidación de  $NH_3$  compite con la de  $CH_4$ , quedando incompleta, por lo que parte del amoníaco atraviesa el reactor sin reaccionar.

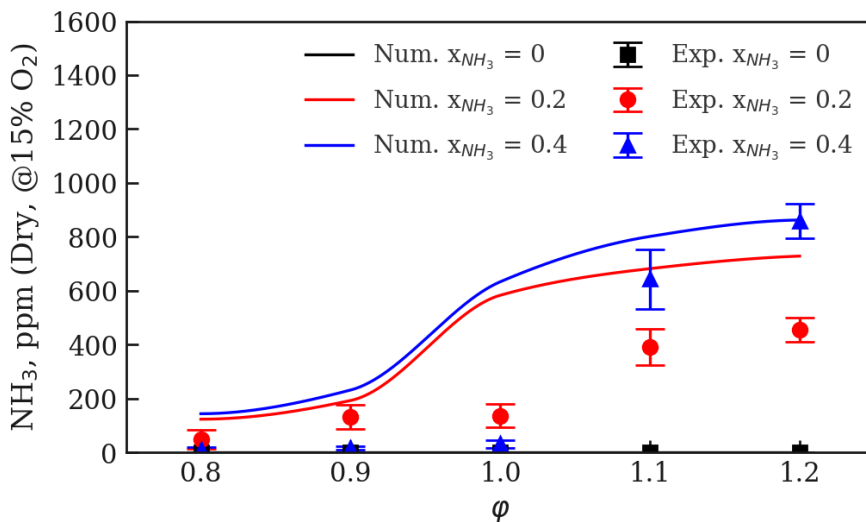


Figura 30: Influencia de  $\phi$  y  $x_{NH_3}$  en emisiones de  $NH_3$ .

Para esta condición además, se promueven reacciones de reburning (por ejemplo,  $\text{NO} \rightarrow \text{N}_2$ ), lo que produce una reducción de los  $\text{NO}_x$ , pero se contrarresta con la conversión total de  $\text{NH}_3$ . Para ambos casos, el mayor valor de  $\text{NH}_3$  no quemado se obtiene en  $\phi=1.2$ , donde para  $x_{\text{NH}_3}=0.2$  resulta de 456 ppm y para  $x_{\text{NH}_3}=0.4$  resulta de 859 ppm. El modelo matemático, tiende a subestimar los valores, pero mantiene la tendencia de aumento en régimen rico de combustible. Además, debido a que los resultados muestran que para  $\phi=1.0$  se alcanzan niveles de emisiones mínimas, se puede utilizar este punto como punto de operación ya que previamente se abordó que en este punto tanto con  $x_{\text{NH}_3}=0.2$  y  $x_{\text{NH}_3}=0.4$  se obtenían las mayores temperaturas.

## 5.6 Influencia en la temperatura máxima y emisiones de $\text{NH}_3$ frente a un mayor porcentaje de amoníaco en mezcla

Para concluir con la investigación, se realizaron pruebas experimentales para  $\phi=1.0$  con la adición progresiva de amoníaco en mezcla de hasta un 100% ( $x_{\text{NH}_3}=1.0$ ). A partir de ello, en la Figura 31 se presenta la influencia de añadir más fracción molar de amoníaco en mezcla y cómo influye en la temperatura máxima y emisiones. Cabe destacar que se realizó para  $\phi=1.0$  ya que eran los puntos donde se obtenía la mayor temperatura, por lo cual, se quería obtener el punto de operación con la menor cantidad de emisiones y que maximizara la temperatura. Se puede apreciar en la figura, que para  $x_{\text{NH}_3}=0.2$ ,  $x_{\text{NH}_3}=0.4$  y  $x_{\text{NH}_3}=1.0$  se obtienen máximos de temperatura cercanos a los 1800K. Sin embargo, el que posee menor emisiones de  $\text{NH}_3$  no quemado es para  $x_{\text{NH}_3}=0.4$ , punto en el cual también se obtenían en general menos emisiones.

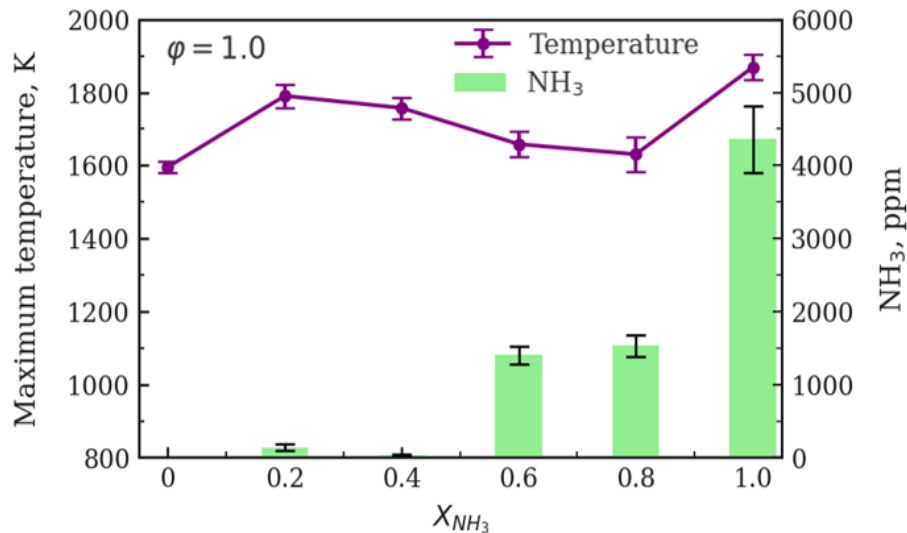


Figura 31: Influencia de  $x_{\text{NH}_3}$  en la temperatura máxima y emisiones de  $\text{NH}_3$  para  $\phi=1.0$ .

## 5.7 Influencia de un mayor porcentaje de amoníaco en el sonido durante la ignición y la combustión

Durante las pruebas experimentales se percibe un proceso más ruidoso al momento de realizar la ignición en los cambios recíprocos y el desarrollo de la combustión cuando se utilizaba solo metano. Sin embargo, en los casos donde se aumenta la fracción molar de amoníaco en mezcla, el proceso tiende a ser más silencioso, pese a que se produce la ignición y el desarrollo de la combustión de manera normal y estable. Este comportamiento se explica debido a diversos factores relacionados al uso del amoníaco

como combustible, como por ejemplo, que al aumentar el contenido de amoniaco en mezcla, se reduce la velocidad de combustión y la liberación rápida de energía [95], lo que disminuye los cambios bruscos de presión, provocando una disminución del sonido audible tanto en la ignición como durante el desarrollo de la combustión.

## 6 Conclusiones

En el presente trabajo donde el principal enfoque fue desarrollar una metodología de tipo numérica y experimental para conocer y analizar el comportamiento térmico y químico de la combustión en un reactor de flujo recíproco con medios porosos inertes utilizando la inserción del amoniaco como combustible en mezcla con metano, se colaboró en el diseño, construcción y montaje de un reactor de flujo recíproco en conjunto de la implementación de este mismo en un banco de pruebas, el cual se realizó en un ambiente de trabajo controlado y estrictamente regulado para trabajar con amoniaco de manera segura. En paralelo, se trabajó en un Setup numérico en el software comercial ANSYS® fluent, con un modelo unidimensional y una cinética reducida de 45 especies y 419 reacciones, esto último con el fin de no solo realizar un análisis térmico, sino que también de emisiones. Para todos los casos de estudio, se presentó un régimen estable de operación, obteniendo un comportamiento pseudo-estacionario aproximadamente con 20 ciclos, donde el tiempo de cambio recíproco fue de 30 segundos.

En base a los resultados presentados anteriormente, se puede realizar una validación del modelo computacional que predice valores de temperatura y emisiones de manera aceptable para mezclas pobres en combustible, pero que para mezclas ricas se poseen mayores desviaciones. Se observa en mezclas pobres ( $\phi < 1.0$ ) que el aumento de la fracción de amoniaco en mezcla produce un aumento en la temperatura máxima local de los perfiles térmicos, y que se ve levemente disminuida al llegar a  $\phi = 1.0$ , siendo para esta relación de equivalencia en los casos experimentales con  $x_{\text{NH}_3} = 0.2$  y  $x_{\text{NH}_3} = 0.4$ , los que se obtenían las mayores temperaturas (1791K y 1757K, respectivamente). En cuanto a las emisiones en este rango de equivalencia, para CO y CO<sub>2</sub> se observan disminuciones del 50% y 52% al utilizar  $x_{\text{NH}_3} = 0.4$ . Debido al aumento del amoniaco en mezcla, para  $\phi = 0.9$  se observan las mayores emisiones de NO<sub>x</sub>, aumentando desde los 9 ppm para  $x_{\text{NH}_3} = 0$ , hasta los 1028 ppm para el caso con  $x_{\text{NH}_3} = 0.4$ . En cuanto a las emisiones de amoniaco no quemado, para todo este rango se ven emisiones menores a 200 ppm al utilizar  $x_{\text{NH}_3} = 0.2$  y  $x_{\text{NH}_3} = 0.4$ . Ahora bien, para el caso de mezclas ricas en combustible ( $\phi > 1.0$ ), se obtienen mayores temperaturas con respecto al metano puro al utilizar  $x_{\text{NH}_3} = 0.2$ , pero decae la temperatura incluso por debajo de los valores de metano puro con  $x_{\text{NH}_3} = 0.4$ . En cuanto a las emisiones en este rango, se ve favorecida la producción de gas de síntesis y H<sub>2</sub>, donde para CO si bien se ve reducida la producción debido al aumento de amoniaco en mezcla, se obtienen valores en el rango de 5000 a 7000 ppm. Lo contrario ocurre para H<sub>2</sub>, ya que a medida que aumenta la fracción molar de amoniaco, se tiende ligeramente al aumento en la producción de hidrógeno, donde se obtienen valores entre 1600 a 3400 ppm. Para este rango, se ven disminuciones de los NO<sub>x</sub> por debajo de los 1000 ppm al utilizar  $x_{\text{NH}_3} = 0.4$ , y disminuciones de CO<sub>2</sub> de hasta un 37% en promedio bajo el mismo porcentaje de amoniaco en mezcla. En cuanto al amoniaco no quemado, se alcanzan casi los 1000 ppm para  $x_{\text{NH}_3} = 0.4$ , siendo el valor más alto para este rango, en contraste al resto de casos de estudio.

Al utilizar mayor porcentaje de amoniaco en mezcla para  $\phi = 1.0$  hasta  $x_{\text{NH}_3} = 1.0$ , se obtiene un aumento progresivo de las emisiones de amoniaco no quemado, obteniendo que el caso donde se maximiza la temperatura y minimizan las emisiones es el caso de  $\phi = 1.0$  y  $x_{\text{NH}_3} = 0.4$ . Además, se percibe menor sonido al momento de producirse la ignición y el desarrollo operacional del reactor a medida que se transitaba hacia un mayor porcentaje de amoniaco en mezcla. Se puede concluir que es factible y viable la utilización del amoniaco como combustible frente al actuar de una transición progresiva hacia la mitigación de combustibles fósiles. Para mezclas pobres se combustiona de forma eficaz y para mezclas ricas se transita hacia la oxidación parcial que permite la generación de gas de síntesis e hidrógeno, permitiendo aplicaciones tanto de generación de calor como de producción de H<sub>2</sub> y CO.

Para la continuidad investigativa utilizando el reactor presente en este estudio, se recomienda la utilización de válvulas solenoide para automatizar el proceso de cambio de sentido en el reactor y sea más seguro y preciso. Se sugiere continuar con pruebas con mayor porcentaje de amoniaco en mezcla

para un rango más amplio de relación de equivalencia, como también la adición de hidrógeno en premezcla y analizar su comportamiento térmico y de emisiones. Además, se sugiere la implementación de un lavado de gases, el cual permita la disminución de amoníaco no quemado. Debido a la geometría del reactor para su uso de inyección en forma radial, se recomienda su utilización para inyección de aire o combustible de forma radial, de esa manera encontrar puntos óptimos de operación que minimicen las emisiones de CO, CO<sub>2</sub>, NH<sub>3</sub> y NO<sub>x</sub>.

## 7 Referencias

- [1] UNFCCC, El Acuerdo de París y las Contribuciones Determinadas a Nivel Nacional (NDC), Convención Marco de las Naciones Unidas sobre el Cambio Climático (2024). <https://unfccc.int/es/acerca-de-las-ndc/el-acuerdo-de-paris>.
- [2] International Energy Agency (IEA), CO2 Emissions From Fuel Combustion Highlights 2018, 2018.
- [3] Chen H, Cong TN, Yang W, Tan C, Li Y, Ding Y. Progress in electrical energy storage system: a critical review. *Prog Nat Sci* 2009;19:291–312. <https://doi.org/10.1016/j.pnsc.2008.07.014>.
- [4] J.O. Gil Posada, A.H. Abdalla, C.I. Osegale, P.J. Hall, Multiple regression analysis in the development of NiFe cells as energy storage solutions for intermittent power sources such as wind or solar, *International Journal of Hydrogen Energy* 41 (2016) 16330-16337. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.04.165>.
- [5] A. Valera-Medina, H. Xiao, M. Owen-Jones, W.I.F. David, P.J. Bowen, Ammonia for power, *Prog Energy Combust Sci* 69 (2018) 63–102. <https://doi.org/10.1016/j.pecs.2018.07.001>.
- [6] T. Cai, A. Tang, C. Li, Experimental and kinetic analyses on the flame dynamics and stabilization of ammonia/hydrogen-air mixtures in a micro-planar combustor, *Chemical Engineering Journal* 477 (2023) 147038. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2023.147038>.
- [7] D. Li, W. Sun, Y. Chen, Z. Luo, Minimum ignition energy theoretical model for flammable gas based on flame propagation layer by layer, *Journal of Loss Prevention in the Process Industries* 83 (2023) 105086. <https://doi.org/10.1016/j.jlp.2023.105086>.
- [8] J. Sun, N. Zhao, H. Zheng, A comprehensive review of ammonia combustion: Fundamental characteristics, chemical kinetics, and applications in energy systems, *Fuel* 394 (2025) 135135. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2025.135135>.
- [9] A. Ahmed, R. Nikdalila, C. Quentin, S. Shahriar, K. Jung H. y A. Abul K., Ammonia fed fuel cells: a comprehensive review, *Renewable and suitable energy reviews*, vol. 60, pp. 822- 835, 2016. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2016.01.120>.
- [10] Ministerio de energía, ERNC y otro récord: generación eléctrica en base a este tipo de energía llegó al 41% en lo que va de 2024, <https://energia.gob.cl/noticias/nacional/ernc-y-otro-record-generacion-electrica-en-base-este-tipo-de-energia-llego-al-41-en-lo-que-va-de-2024>
- [11] Ministerio de Energía, Ley y Plan de Eficiencia Energética, <https://Energia.Gob.Cl/Ley-y-Plan-de-Eficiencia-Energetica> (2021).
- [12] IEA, The future of hydrogen: Seizing today's opportunities. 2019. [https://iea.blob.core.windows.net/assets/9e3a3493-b9a6-4b7d-b499-7ca48e357561/The\\_Future\\_of\\_Hydrogen.pdf](https://iea.blob.core.windows.net/assets/9e3a3493-b9a6-4b7d-b499-7ca48e357561/The_Future_of_Hydrogen.pdf)
- [13] Hinicio, Contexto latinoamericano del hidrógeno verde para su desarrollo y aplicación, 2021.
- [14] F.J. Weinberg, Combustion Temperatures: The Future?, *Nature* 233 (1971) 239–241.

<https://doi.org/10.1038/233239a0>.

- [15] M.A. Mujeebu, M.Z. Abdullah, M.Z.A. Bakar, A.A. Mohamad, R.M.N. Muhad, M.K. Abdullah, Combustion in porous media and its applications - A comprehensive survey, *J Environ Manage* 90 (2009) 2287–2312. <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2008.10.009>.
- [16] L. Li, R. Zhang, Y. Zhang, H. Zhang, Burning ammonia with methane blending in an air-staged porous media burner, *Fuel* 387 (2025) 134385. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2025.134385>.
- [17] A. Hayakawa, T. Goto, R. Mimoto, Y. Arakawa, T. Kudo, H. Kobayashi, Laminar burning velocity and Markstein length of ammonia/air premixed flames at various pressures, *Fuel* 159 (2015) 98–106. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2015.06.070>.
- [18] K. Bayramoğlu, A. Bahlekeh, K. Masera, Numerical investigation of the hydrogen, ammonia and methane fuel blends on the combustion emissions and performance, *International Journal of Hydrogen Energy* 48 (2023) 39586–39598. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2023.06.079>.
- [19] Q. Zhang, Z. Zhou, S. Shan, X. Cai, W. Yang, Chemical effect of water addition on the ammonia combustion reaction, *Thermal Science and Engineering Progress* 32 (2022) 101318. <https://doi.org/10.1016/j.tsep.2022.101318>.
- [20] F. Qian, S. Zhang, J. Wang, N. Zhu, X. Bao, H. Yang, X. Xu, W.A. Alshahrani, M.H. Helal, Z. Guo, Ammonia energy fraction effect on the combustion and reduced NOX emission of ammonia/diesel dual fuel, *Environmental Research* 261 (2024) 119530. <https://doi.org/10.1016/j.envres.2024.119530>.
- [21] D.W. Kim, K. Park, G.H. Lee, K.M. Kim, J.M. Lee, J. Hwang, Experimental investigation of combustion characteristics of ammonia with sub-bituminous coal in a pilot circulating fluidized bed combustor, *Fuel* 378 (2024) 132880. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2024.132880>.
- [22] J.S. Cardoso, V. Silva, J.A.M. Chavando, D. Eusébio, M.J. Hall, Numerical modelling of the coal phase-out through ammonia and biomass co-firing in a pilot-scale fluidized bed reactor, *Fuel Communications* 10 (2022) 100055. <https://doi.org/10.1016/j.jfueco.2022.100055>.
- [23] X. Wu, Y. Feng, Y. Gao, C. Xia, Y. Zhu, M. Shreka, P. Ming, Numerical simulation of lean premixed combustion characteristics and emissions of natural gas-ammonia dual-fuel marine engine with the pre-chamber ignition system, *Fuel* 343 (2023) 127990. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2023.127990>.
- [24] S. Oh, C. Park, S. Kim, Y. Kim, Y. Choi, C. Kim, Natural gas–ammonia dual-fuel combustion in spark-ignited engine with various air–fuel ratios and split ratios of ammonia under part load condition, *Fuel* 290 (2021) 120095. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.120095>.
- [25] G. Zhu, W. Sun, H. Zhang, L. Guo, Y. Yan, S. Lin, W. Zeng, M. Jiang, C. Yu, Optical diagnostic study of ammonia-kerosene dual-fuel engine combustion process, *International Journal of Hydrogen Energy* 81 (2024) 110–126. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2024.07.256>.
- [26] P. Ronan, P. Brequigny, C. Mounaim-Rousselle, G. Dayma, F. Halter, Laminar flame speed of ethanol/ammonia blends—An experimental and kinetic study, *Fuel*

- Communications 10 (2022) 100052. <https://doi.org/10.1016/j.jfueco.2022.100052>.
- [27] K.P. Shrestha, B.R. Giri, A.M. Elbaz, G. Issayev, W.L. Roberts, L. Seidel, F. Mauss, A. Farooq, A detailed chemical insights into the kinetics of diethyl ether enhancing ammonia combustion and the importance of NO<sub>x</sub> recycling mechanism, *Fuel Communications* 10 (2022) 100051. <https://doi.org/10.1016/j.jfueco.2022.100051>.
- [28] K. Uddeen, Q. Tang, H. Shi, J. Turner, Performance and emission analysis of ammonia-ethanol and ammonia-methane dual-fuel combustion in a spark-ignition engine: An optical study, *Fuel* 358 (2024) 130296. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2023.130296>.
- [29] S. Zhang, Q. Tang, H. Liu, R. Yang, M. Yao, Numerical investigation and optimization of the ammonia/diesel dual fuel engine combustion under high ammonia substitution ratio, *Journal of the Energy Institute* 117 (2024) 101797. <https://doi.org/10.1016/j.joei.2024.101797>.
- [30] A. Valera-Medina, M.O. Viguera-Zuniga, H. Shi, S. Mashruk, M. Alnajideen, A. Alnasif, J. Davies, Y. Wang, X. Zhu, W. Yang, Y.B. Cheng, Ammonia combustion in furnaces: A review, *International Journal of Hydrogen Energy* 49 (2024) 1597–1618. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2023.10.241>.
- [31] M. Bastani, S. Tabejamaat, H. Ashini, Numerical and experimental study of combustion and emission characteristics of ammonia/methane fuel mixture in micro gas turbine combustor, *International Journal of Hydrogen Energy* 49 (2024) 1399–1415. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2023.09.319>.
- [32] E. Baniyadi, I. Dincer, Energy and exergy analyses of a combined ammonia-fed solid oxide fuel cell system for vehicular applications, *International Journal of Hydrogen Energy* 36 (2011) 11128–11136. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2011.04.234>.
- [33] Q. Ma, R. Peng, Y. Lin, J. Gao, G. Meng, A high-performance ammonia-fueled solid oxide fuel cell, *Journal of Power Sources* 161 (2006) 95–98. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2006.04.099>.
- [34] A.M. Elbaz, S. Wang, T.F. Guiberti, W.L. Roberts, Review on the recent advances on ammonia combustion from the fundamentals to the applications, *Fuel Communications* 10 (2022) 100053. <https://doi.org/10.1016/j.jfueco.2022.100053>.
- [35] G.B. Ariemma, G. Sorrentino, R. Ragucci, M. de Joannon, P. Sabia, Ammonia-methane combustion: Stability and NO<sub>x</sub> emissions, *Combustion and Flame* 241 (2022) 112071. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2022.112071>.
- [36] S. Wang, C.T. Chong, T. Xie, V. Józsa, J.-H. Ng, Ammonia/methane dual-fuel injection and Co-firing strategy in a swirl flame combustor for pollutant emissions control, *Energy* 281 (2023) 128221. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2023.128221>.
- [37] G. Wang, T.F. Guiberti, S. Cardona, C.A. Jimenez, W.L. Roberts, Effects of residence time on the NO<sub>x</sub> emissions of premixed ammonia-methane-air swirling flames at elevated pressure, *Proceedings of the Combustion Institute* 39 (2023) 4277–4288. <https://doi.org/10.1016/j.proci.2022.07.141>.
- [38] H. Yamashita, A. Hayakawa, E.C. Okafor, S. Colson, K.D.K.A. Somarathne, T. Tsujimura, S. Ito, M. Uchida, T. Kudo, H. Kobayashi, Optimum primary equivalence ratio for rich-lean two-stage combustion of non-premixed ammonia/methane/air and ammonia/hydrogen/air flames in a swirling flow, *Fuel* 368 (2024) 131598.

- <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2024.131598>.
- [39] L. Kang, W. Pan, J. Zhang, W. Wang, C. Tang, A review on ammonia blends combustion for industrial applications, *Fuel* 332 (2023) 126150. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2022.126150>.
- [40] H. Dai, X. Gao, C. Liu, H. Dai, L. Zhang, Lean-rich combustion characteristics of methane and ammonia in the combined porous structures for carbon reduction and alternative fuel development, *Science of the Total Environment* 938 (2024) 173375. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2024.173375>.
- [41] R.C. Rocha, C.F. Ramos, M. Costa, X.S. Bai, Combustion of NH<sub>3</sub>-CH<sub>4</sub>-air and NH<sub>3</sub>-H<sub>2</sub>-air mixtures in a porous burner: Experiments and kinetic modeling, *Energy & Fuels* 33 (2019) 12767–12780. <https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.9b02948>.
- [42] A. Tolouei, A. Gharehghani, Numerical investigation of premixed methane-ammonia combustion in a mesoscale porous combustor, *Fuel* 366 (2024) 131427. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2024.131427>.
- [43] E.C. Okafor, Y. Naito, S. Colson, A. Ichikawa, T. Kudo, A. Hayakawa, H. Kobayashi, Experimental and numerical study of the laminar burning velocity of CH<sub>4</sub>-NH<sub>3</sub>-air premixed flames, *Combustion and Flame* 187 (2018) 185–198. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2017.09.002>.
- [44] Z. Tian, Y. Li, L. Zhang, P. Glarborg, F. Qi, An experimental and kinetic modeling study of premixed NH<sub>3</sub>/CH<sub>4</sub>/O<sub>2</sub>/Ar flames at low pressure, *Combustion and Flame* 156 (2009) 1413–1426. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2009.03.005>.
- [45] T. Mendiara, P. Glarborg, Ammonia chemistry in oxy-fuel combustion of methane, *Combustion and Flame* 156 (2009) 1937–1949. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2009.07.006>.
- [46] G.P. Smith, D.M. Golden, M. Frenklach, N.W. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldenberg, et al., GRI Mech 3.0. Gas Research Institute, disponible en <[http://www.me.berkeley.edu/gri\\_mech/](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/)>
- [47] M.A. Mujeebu, M.Z. Abdullah, M.Z.A. Bakar, A.A. Mohamad, M.K. Abdullah, Applications of porous media combustion technology - A review, *Appl Energy* 86 (2009) 1365–1375. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2009.01.017>.
- [48] D. Trimis, F. Durst, Combustion in a porous medium-advances and applications, *Combustion Science and Technology* 121 (1996) 153–168. <https://doi.org/10.1080/00102209608935592>.
- [49] M.A. Mujeebu, M.Z. Abdullah, A.A. Mohamad, M.Z.A. Bakar, Trends in modeling of porous media combustion, *Prog Energy Combust Sci* 36 (2010) 627–650. <https://doi.org/10.1016/j.pecs.2010.02.002>.
- [50] A. Banerjee, D. Paul, Developments and applications of porous medium combustion: A recent review, *Energy* 221 (2021) 119868. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2021.119868>.
- [51] M. Toledo, V. Bubnovich, A. Saveliev, L. Kennedy, Comparative study of lean and rich filtration combustion of methane/air, ethane/air, and propane/air mixtures, *Proceedings of the 4th WSEAS International Conference on Heat Transfer, Thermal Engineering and Environment* (2006) 146–152.

- [52] C. Arrieta. Análisis teórico y experimental de la combustión en mezclas CH<sub>4</sub>-Syngas en un quemador de medio poroso inerte. 2017.
- [53] Y. Wang, C. Ge, L. Zhan, C. Li, W. Qiao, L. Ling, MnO<sub>x</sub>-CeO<sub>2</sub>/Activated Carbon Honeycomb Catalyst for Selective Catalytic Reduction of NO with NH<sub>3</sub> at Low Temperatures, *Industrial & Engineering Chemistry Research* 51 (2012) 11667–11673. <https://doi.org/10.1021/ie300555f>.
- [54] Z. Al-Hamamre, A. Al-Zoubi. The use of inert porous media based reactors for hydrogen production, *Int J Hydrogen Energy* 35 (2010) 1971–1986. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2009.11.079>.
- [55] M.M. Kamal, A.A. Mohamad, Combustion in porous media, *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part A: Journal of Power and Energy* 220 (2006) 487–508. <https://doi.org/10.1243/09576509JPE169>.
- [56] M.-P. Lai, W.-H. Lai, R.-F. Horng, Dry autothermal reforming from biomass derived gas under excess enthalpy with porous medium, *Journal of Power Sources* 217 (2012) 407–416. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2012.06.009>.
- [57] D.K. Lee, D.-S. Noh, Experimental and theoretical study of excess enthalpy flames stabilized in a radial multi-channel as a model cylindrical porous medium burner, *Combustion and Flame* 170 (2016) 79–90. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2016.05.010>.
- [58] Z. Song, B. Lin, Numerical simulation of excess-enthalpy combustion flame propagation of coal mine methane in ceramic foam, *Mining Science and Technology* 20 (2010) 248–253. [https://doi.org/10.1016/S1674-5264\(09\)60192-7](https://doi.org/10.1016/S1674-5264(09)60192-7).
- [59] G. Vignat, T. Zirwes, É. Boigné, M. Ihme, Experimental demonstration of a two-stage porous media burner for low-emission ammonia combustion, *Proceedings of the Combustion Institute* 40 (2024) 105491. <https://doi.org/10.1016/j.proci.2024.105491>.
- [60] J. Lv, J. Shi, J. Li, M. Mao, X. Kong, Effect of preheating on extending lean extinction limit of ammonia/air combustion in a two-section porous burner, *Journal of the Energy Institute* 116 (2024) 101708. <https://doi.org/10.1016/j.joei.2024.101708>.
- [61] G. Vignat, T. Zirwes, E.R. Toro, K. Younes, E. Boigné, P. Muhunthan, L. Simitz, D. Trimis, M. Ihme, Experimental and numerical investigation of flame stabilization and pollutant formation in matrix stabilized ammonia-hydrogen combustion, *Combustion and Flame* 250 (2023) 112642. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2023.112642>.
- [62] G. Vignat, B. Akoush, E.R. Toro, E. Boigné, M. Ihme, Combustion of lean ammonia-hydrogen fuel blends in a porous media burner, *Proceedings of the Combustion Institute* 39 (2023) 4195–4204. <https://doi.org/10.1016/j.proci.2022.07.054>.
- [63] D. Chen, J. Li, X. Li, L. Deng, Z. He, H. Huang, N. Kobayashi, Study on combustion characteristics of hydrogen addition on ammonia flame at a porous burner, *Energy* 263 (2023) 125613. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2022.125613>.
- [64] G. Wang, L. Huang, H. Tu, H. Zhou, X. Chen, J. Xu, Stable lean co-combustion of ammonia/methane with air in a porous burner, *Applied Thermal Engineering* 248 (2024) 123092. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2024.123092>.
- [65] A.S. Singh, Y. Vijrumbana, V.M. Reddy, Experimental and computational (Chemical

- Kinetic + CFD) analyses of Self-Recuperative annular tubular porous burner for  $\text{NH}_3/\text{CH}_4$ -air Non-Premixed combustion, *Chemical Engineering Journal* 481 (2024) 148439. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2023.148439>.
- [66] M. Fierro, A. Arriagada, H. Araneda, J. Rosas, G. Subiabre, E. Salgansky, M. Toledo, Experimental investigation of steam and carbon dioxide influence on methane filtration combustion in a reversal flow porous media reactor, *International Journal of Hydrogen Energy* 82 (2024) 134–142. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2024.07.363>.
- [67] Z. Yao, A.V. Saveliev, High efficiency high temperature heat extraction from porous media reciprocal flow burner: Time-averaged model, *Applied Thermal Engineering* 143 (2018) 614–620. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2018.07.144>.
- [68] M. Fierro, P. Requena, E. Salgansky, M. Toledo, Experimental investigation of reverse flow porous medium reactor with premixed and non-premixed flames, *Chemical Engineering Journal* 425 (2021) 130178. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2021.130178>.
- [69] E.A. Salgansky, A.Yu. Zaichenko, D.N. Podlesniy, M.V. Salganskaya, M.V. Tsvetkov, A.V. Chub, Gasification of oil shale dust in a counterflow moving bed filtration combustion reactor, *International Journal of Hydrogen Energy* 45 (2020) 17270–17275. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.04.177>.
- [70] L. Henríquez-Vargas, M. Valeria, V. Bubnovich, Numerical study of lean combustibility limits extension in a reciprocal flow porous media burner for ethanol/air mixtures, *International Journal of Hydrogen Energy* 89 (2015) 1155–1163. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2015.05.115>.
- [71] A. Banerjee, A. V. Saveliev, High temperature heat extraction from counterflow porous burner, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 127 <https://doi.org/10.1016/j.ijheat.2018.08.027>.
- [72] J. Zhang, Z. Lei, J. Li, B. Chen, Simulation of a Reverse Flow Reactor for the Catalytic Combustion of Lean Methane Emissions, *Chinese Journal of Chemical Engineering* 22 (2014) 843–853. <https://doi.org/10.1016/j.cjche.2014.06.005>.
- [73] Y.S. Jeong, S.M. Lee, N.K. Kim, J.W. Hwang, J.O. Chae, A Study on Combustion Characteristics of Superadiabatic Combustor in Porous Media, *KSME International Journal* 12 (1998) 680–687. <https://doi.org/10.1007/BF02945728>
- [74] P. Requena, Diseño, construcción e implementación de un reactor de flujo recíproco de medio poroso inerte para la producción de hidrógeno y monóxido de carbono, Universidad Técnica Federico Santa María, 2017.
- [75] C. Ibarra, Diseño e implementación de un reactor poroso de flujo recíproco para generación de gas de síntesis, Universidad Técnica Federico Santa María, 2015.
- [76] G. Subiabre, Diseño e implementación de un reactor de medio poroso inerte de flujo recíproco con suministro separado de aire y combustible, Universidad Técnica Federico Santa María, 2016.
- [77] F. Castillo, Análisis experimental del uso de vapor de agua en un reactor de flujo recíproco con suministro de aire y combustible para la generación de gas de síntesis, Universidad Técnica Federico Santa María, 2017.
- [78] H. Araneda, Optimización de la operación de un reactor de flujo recíproco de medio

- poroso con suministro de gas natural y adición de vapor de agua para la generación de hidrógeno, Universidad Técnica Federico Santa María, 2018.
- [79] P. Aranibar, Producción de hidrógeno y gas de síntesis a partir de la gasificación de carbón en un reactor de flujo recíproco, Universidad Técnica Federico Santa María, 2021.
- [80] Ansys Inc. ANSYS Fluent User's Guide. Ansys Inc., 2024. Release 2024R2.
- [81] A. Arriagada Romero, M. Toledo, R.E. Hayes, D. Pashchenko, P.A. Nikrityuk, Verification of a porous media model for the partial oxidation of a chemically reacting fixed-bed, *Fuel* 375 (2024) 132582. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2024.132582>.
- [82] X. Fu, R. Viskanta, J.P. Gore, Measurement and correlation of volumetric heat transfer coefficients of cellular ceramics, *Experimental Thermal and Fluid Science* 17 (1998) 285–293. [https://doi.org/10.1016/S0894-1777\(98\)10002-X](https://doi.org/10.1016/S0894-1777(98)10002-X).
- [83] Y. Wang, S. Cai, W. Yang, X.-y. Li, T. Wang, J. Wan, Combustion and thermal performance of a novel preheated miniature combustor with a flame holder and various porous medium materials, *Journal of the Energy Institute* 115 (2024) 101677. <https://doi.org/10.1016/j.joei.2024.101677>.
- [84] G. Bagheri, E. Ranzi, M. Pelucchi, A. Parente, A. Frassoldati, T. Faravelli, Comprehensive kinetic study of combustion technologies for low environmental impact: MILD and OXY-fuel combustion of methane, *Combustion and Flame* 212 (2020) 142–155. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2019.10.014>.
- [85] A. Kéromnès, W.K. Metcalfe, K.A. Heufer, N. Donohoe, A.K. Das, C.-J. Sung, J. Herzler, C. Naumann, P. Griebel, O. Mathieu, M.C. Krejci, E.L. Petersen, W.J. Pitz, H.J. Curran, An experimental and detailed chemical kinetic modeling study of hydrogen and syngas mixture oxidation at elevated pressures, *Combustion and Flame* 160 (2013) 995–1011. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2013.01.001>.
- [86] Q. Cazères, P. Pepiot, É. Riber, B. Cuenot, A fully automatic procedure for the analytical reduction of chemical kinetics mechanisms for Computational Fluid Dynamics applications, *Fuel* 303 (2021) 121247. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2021.121247>.
- [87] J.-R. Shi, M.-Z. Xie, H. Liu, H.-S. Liu, X.-S. Zhang, Y.-N. Xu, Two-dimensional numerical study of combustion and heat transfer in porous media combustor-heater, *Proceedings of the Combustion Institute* 33 (2011) 3309–3316. <https://doi.org/10.1016/j.proci.2010.07.026>.
- [88] G. Krishnamoorthy, A computationally efficient P1 radiation model for modern combustion systems utilizing pre-conditioned conjugate gradient methods, *Applied Thermal Engineering* 119 (2017) 197–206. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2017.03.055>.
- [89] E. Johnson, İ. Tarı, D. Baker, A Monte Carlo method to solve for radiative effective thermal conductivity for particle beds of various solid fractions and emissivities, *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer* 250 (2020) 107014. <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2020.107014>.
- [90] M.-Z. Xie, J.-R. Shi, Y.-B. Deng, H. Liu, L. Zhou, Y.-N. Xu, Experimental and numerical investigation on performance of a porous medium burner with reciprocating flow, *Fuel* 88 (2009) 206–213. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2008.07.020>.

- [91] V. Bubnovich, L. Henríquez, C. Díaz, M. Maiza, Diameter of alumina balls effect on stabilization operation region for a reciprocal flow burner, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 54 (2011) 2026–2033. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2010.12.026>.
- [92] W.M. Barcellos, L.C.E.O. Souza, A.V. Saveliev, L.A. Kennedy, Ultra-low-emission steam boiler constituted of reciprocal flow porous burner, *Experimental Thermal and Fluid Science* 35 (2011) 570–580. <https://doi.org/10.1016/j.expthermflusci.2010.11.007>.
- [93] C. Kurien, P.S. Varma, M. Mittal, Effect of ammonia energy fractions on combustion stability and engine characteristics of gaseous (ammonia/methane) fuelled spark ignition engine, *International Journal of Hydrogen Energy* 48 (2023) 1391–1400. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.10.032>.
- [94] P. Berwal, S. Kumar, B. Khandelwal, A comprehensive review on synthesis, chemical kinetics, and practical application of ammonia as future fuel for combustion, *Journal of the Energy Institute* 99 (2021) 273–298. <https://doi.org/10.1016/j.joei.2021.10.001>.
- [95] X. Han, Z. Wang, M. Costa, Z. Sun, Y. He, K. Cen, Experimental and kinetic modeling study of laminar burning velocities of  $\text{NH}_3/\text{air}$ ,  $\text{NH}_3/\text{H}_2/\text{air}$ ,  $\text{NH}_3/\text{CO}/\text{air}$  and  $\text{NH}_3/\text{CH}_4/\text{air}$  premixed flames, *Combustion and Flame* 206 (2019) 214–226. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2019.05.003>.

# 8 Anexos

## A.1 Plano Cilindro central

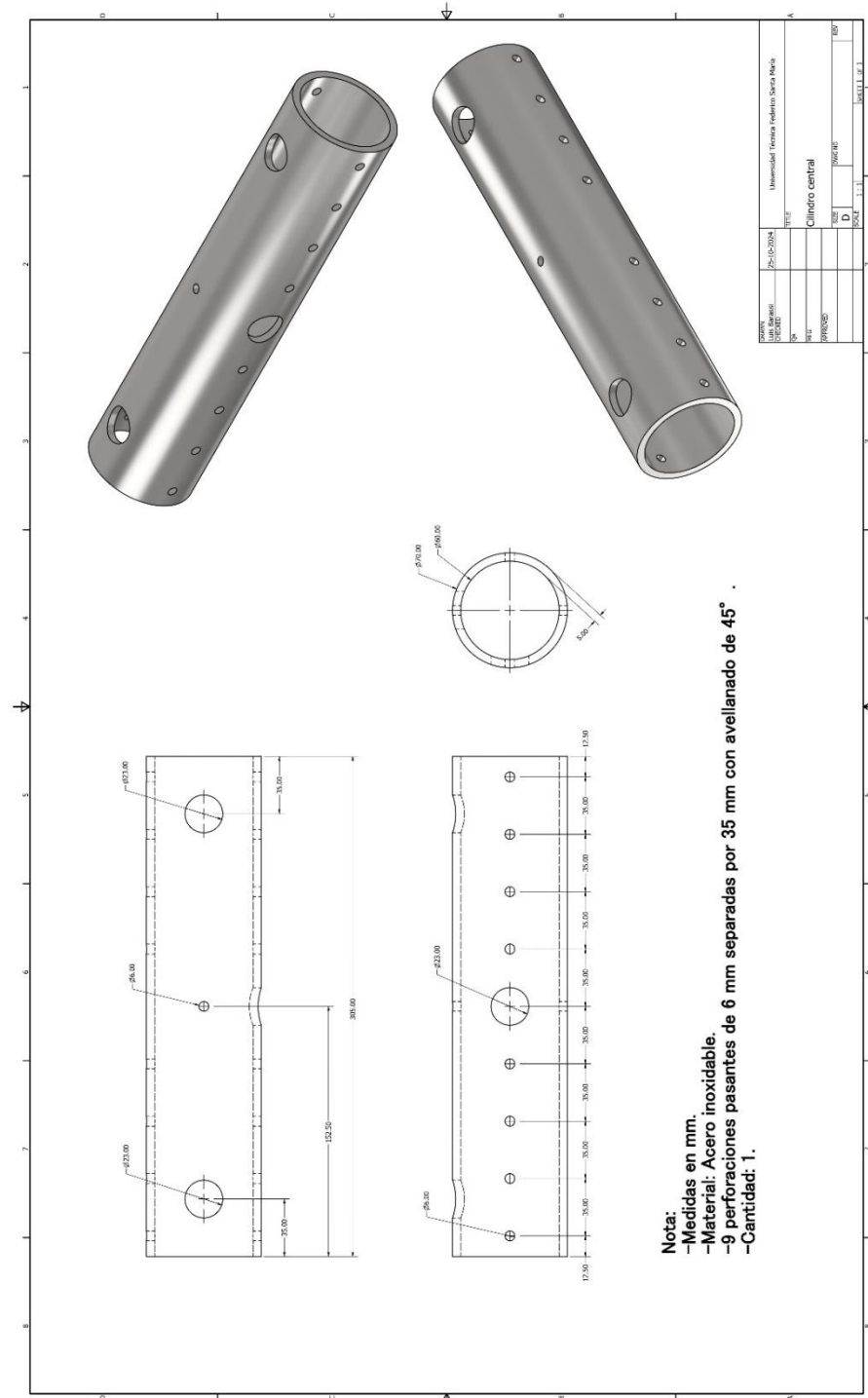


Figura A.1 Plano Cilindro central.

## A.2 Plano Geometría ingreso de combustible radial (dona)

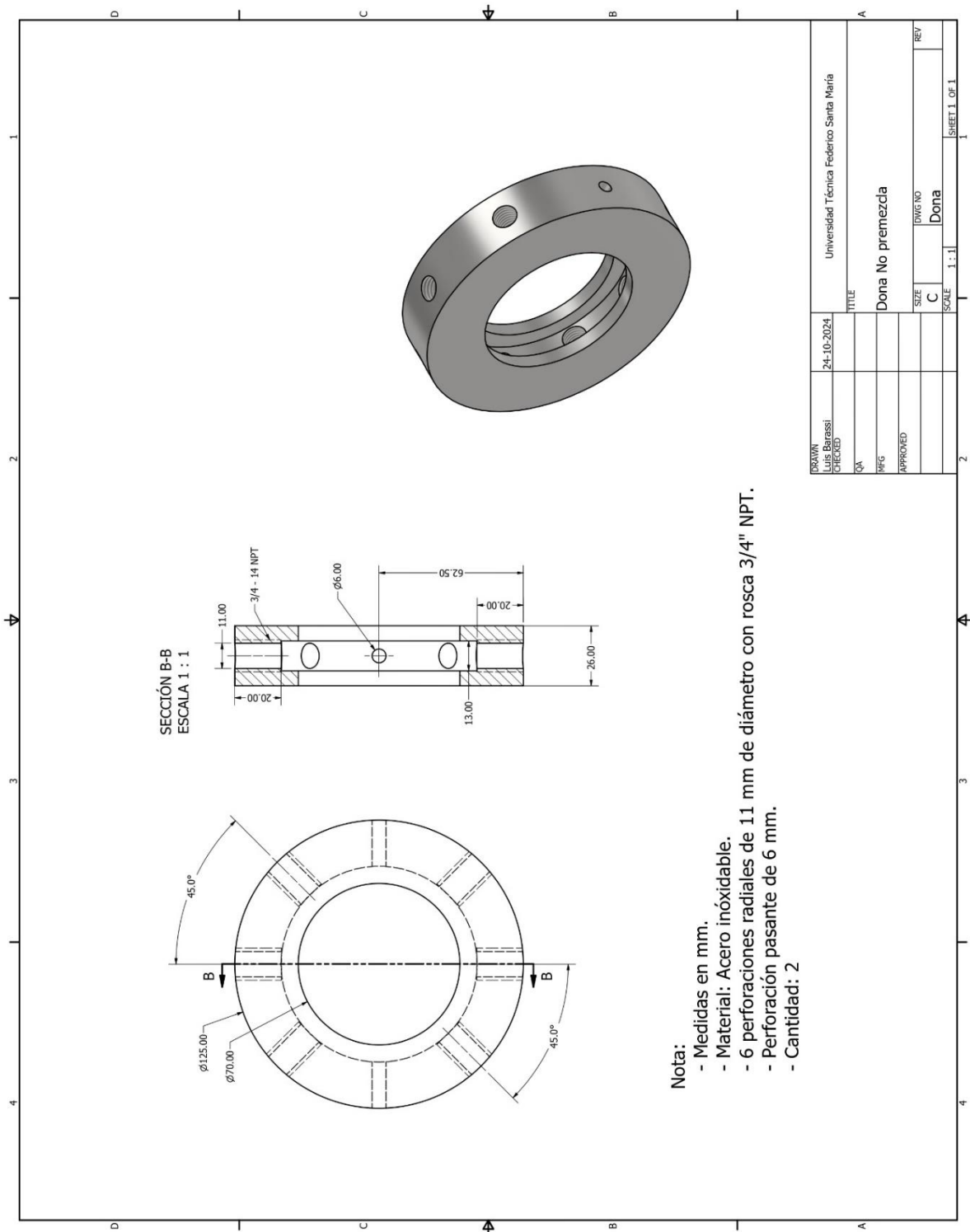


Figura A.2 Plano Dona.

### A.3 Plano Tubo con rosca exterior

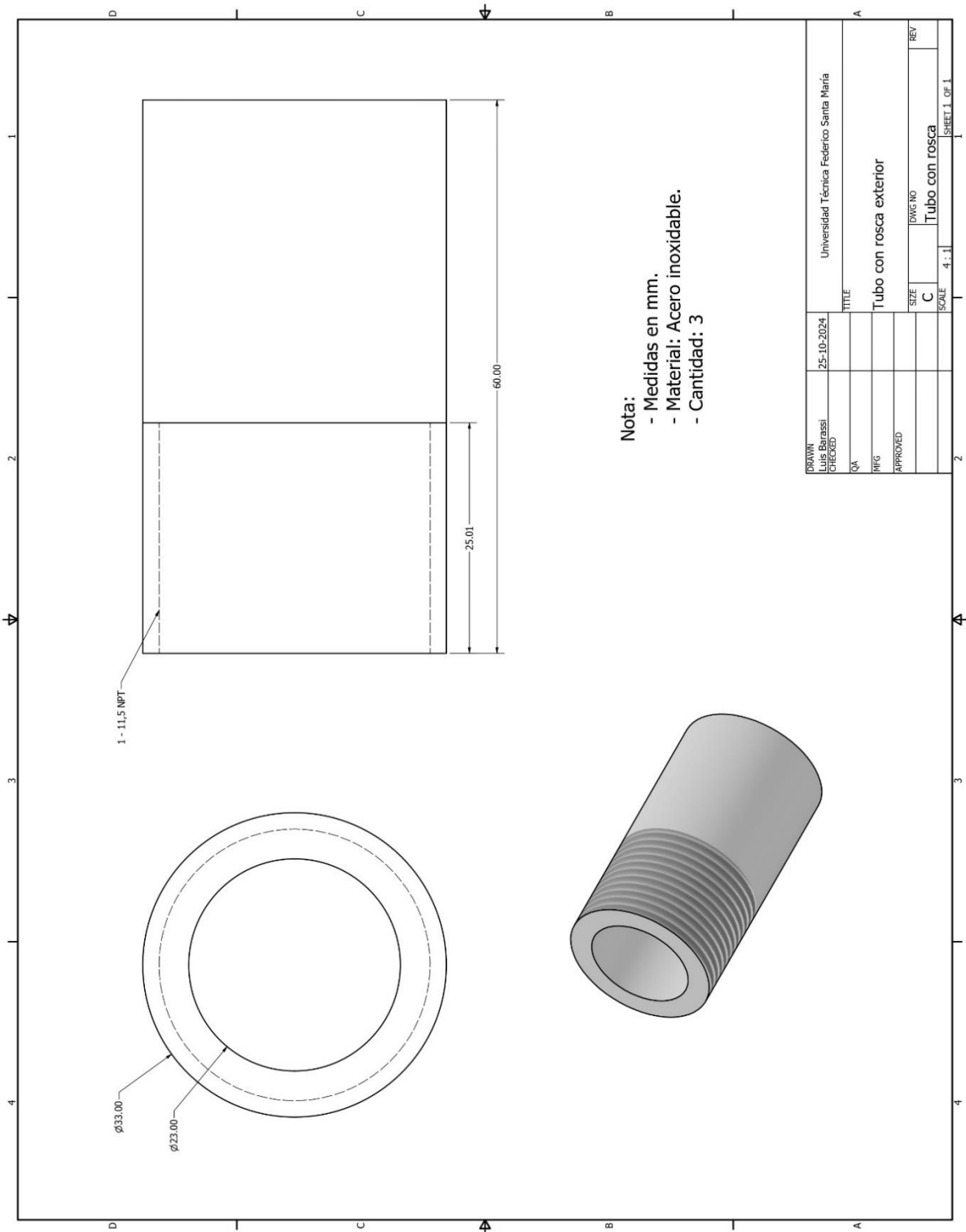


Figura A.3 Plano Tubo con rosca.

## A.4 Plano Extremos

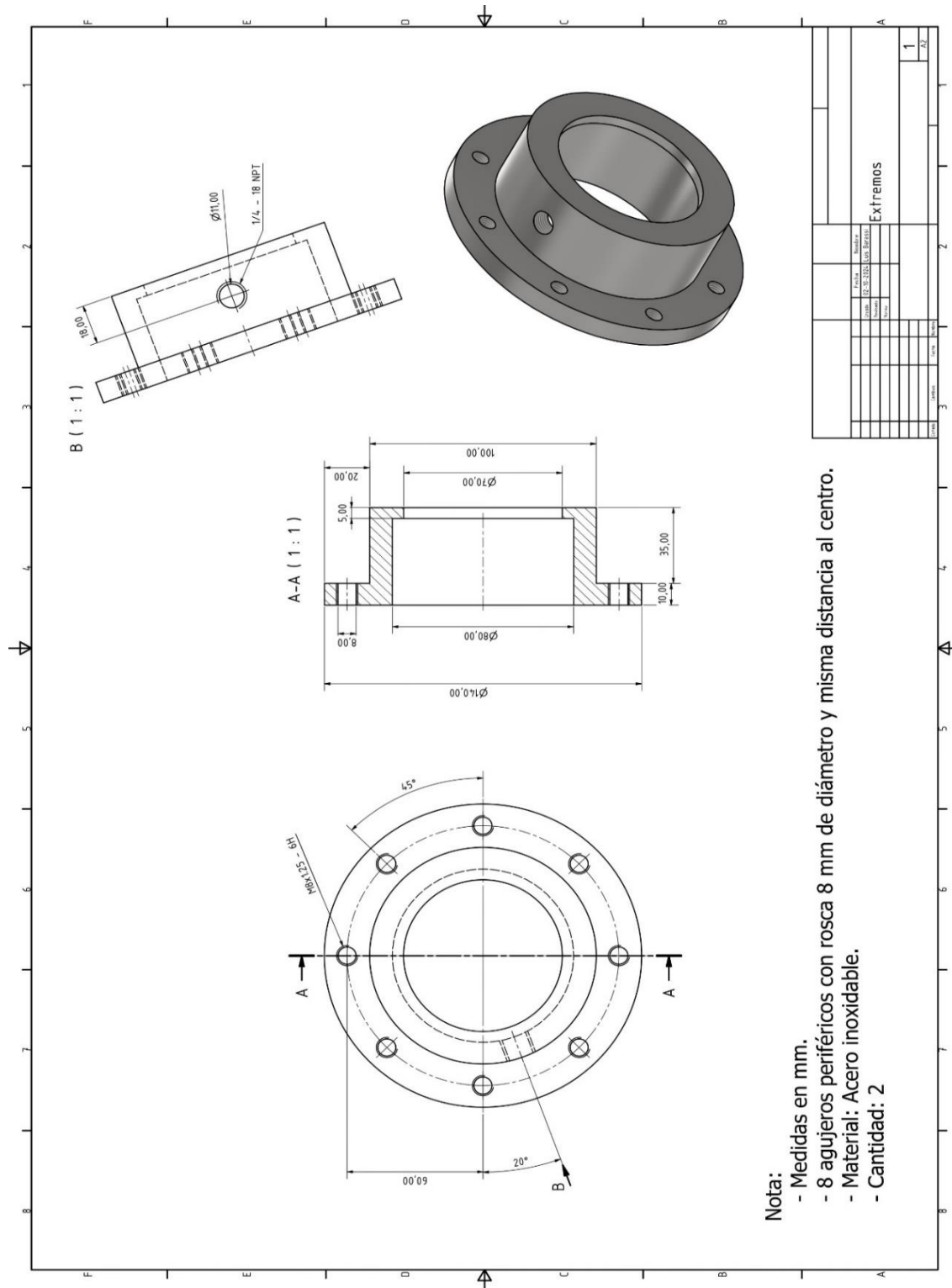


Figura A.4 Plano Extremos.



## A.6 Plano Difusor central

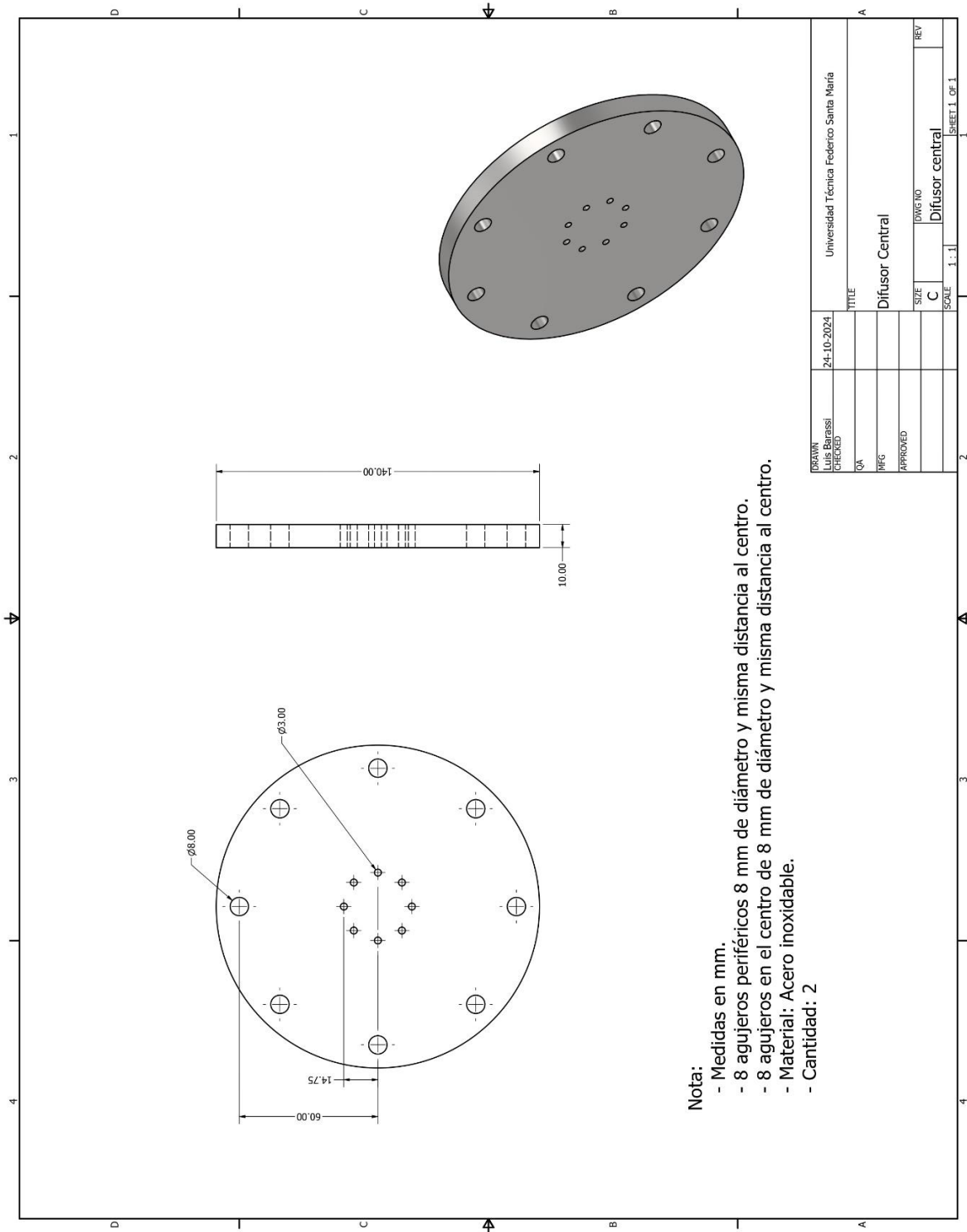


Figura A.6 Plano Difusor central.