

ESTUDIO NUMÉRICO DE LA COMBUSTIÓN DE MEZCLAS METANO-HIDRÓGENO EN UN REACTOR DE MEDIO POROSO DIVERGENTE

NUMERICAL STUDY OF THE COMBUSTION OF METHANE-HYDROGEN MIXTURES IN A DIVERGENT POROUS MEDIUM REACTOR

Claudio Munoz-Herrera, Olivier Skurtys and Mario Toledo

*Departamento de Ingeniería Mecánica, Universidad Técnica Federico Santa María, Av. España 1680,
Valparaíso, Chile, mario.toledo@usm.cl, <http://usm.cl>*

Keywords: Combustión, combustión en medios porosos, hidrógeno, metano.

Resumen. La crisis climática desarrollada a causa del uso indiscriminado de combustibles fósiles ha iniciado un proceso de transición energética. En este contexto, el hidrógeno (H_2) verde se perfila como un combustible para el futuro, por lo que es necesario desarrollar tecnologías que permitan introducirlo en la matriz energética, inicialmente mezclado con hidrocarburos como el metano (CH_4). Este trabajo busca estudiar el proceso de combustión de mezclas CH_4 - H_2 en un quemador de medio poroso inerte divergente a potencia constante y con frente de reacción estabilizado, mediante el uso de un modelo numérico validado con datos experimentales. Se presentan los campos de temperatura y emisiones obtenidas para adiciones de H_2 entre 0 y 30% en la mezcla combustible. Al aumentar la presencia de H_2 , se obtuvo una disminución en las temperaturas, debido a que se redujo la razón de equivalencia para estabilizar el frente de reacción. Además, las emisiones de óxidos de nitrógeno (NO_x) se redujeron al aumentar la presencia de H_2 , mientras que las emisiones de monóxido de carbono (CO) no mostraron una tendencia clara. El espesor del frente de reacción de obtenido para el H_2 fue 3 veces mayor al registrado para CH_4 . A su vez, no se apreciaron cambios en el espesor de reacción de CH_4 al añadir H_2 en la mezcla combustible.
Keywords: Combustion, porous media combustion, hydrogen, methane.

Abstract. The climate crisis caused by the indiscriminate use of fossil fuels has initiated a process of energy transition. In this context, green hydrogen (H_2) is emerging as a fuel for the future, so it is necessary to develop technologies to introduce it into the energy matrix, initially mixed with hydrocarbons such as methane (CH_4). This work aims to study the combustion process of CH_4 - H_2 mixtures in an inert porous medium divergent burner at constant power and with stabilized reaction front, by using a numerical model validated with experimental data. The temperature and emission fields obtained for H_2 additions between 0 and 30% in the fuel mixture are presented. By increasing the presence of H_2 , a decrease in temperatures was obtained, because the equivalence ratio was reduced to stabilize the reaction front. In addition, nitrogen oxides (NO_x) emissions decreased with increasing H_2 presence, while carbon monoxide (CO) emissions did not show a clear trend. The reaction front thickness obtained for H_2 was 3 times higher than that recorded for CH_4 . Additionally, no change in the reaction thickness of CH_4 was observed when H_2 was added to the fuel mixture.

1 INTRODUCCIÓN

El cambio climático es uno de los mayores desafíos a los que se enfrenta la humanidad actualmente. Por esto, se ha iniciado un proceso de transición energética que busca reducir la presencia de combustibles fósiles en la matriz energética mundial y dar paso al uso de combustibles verdes. Dentro de este tipo de combustibles destaca el hidrógeno (H_2) verde, el cual es obtenido mediante electrólisis del agua impulsada por energía renovable. Para dar inicio a este proceso de transición, diferentes estudios han propuesto utilizar gasoductos existentes para transportar mezclas gas natural (GN) - H_2 , proponiendo como máximo un 20% de H_2 en la mezcla combustible (Melaina et al., 2013), lo que ha dado inicio a pilotos de este tipo en Chile. Por esto, es necesario desarrollar tecnologías de combustión que permitan operar con combustibles ampliamente usados como el GN - principalmente metano (CH_4)- mezclados con H_2 .

Sin embargo, la combustión de H_2 presenta dificultades técnicas relacionadas a la estabilidad de la combustión y a la formación de óxidos de nitrógeno (NO_x), debido a su alta reactividad y a su alta temperatura de llama, respectivamente. Una tecnología de combustión que podría resolver estos desafíos corresponde a la tecnología de combustión en medio poroso inerte (MPI) (Ellzey et al., 2019). En este tipo de reactores, la combustión ocurre al interior de un sólido o lecho poroso, por ejemplo formado por esferas. Así, el calor liberado por la combustión es recirculado en el sólido, permitiendo obtener amplios rangos de estabilidad, menores tasas de emisión de contaminantes y mayores eficiencias. Para facilitar la estabilización del frente de reacción al interior del MPI, se han desarrollado técnicas como el uso de una sección transversal divergente, que permite equilibrar de forma dinámica la velocidad de llama local con la velocidad del flujo, que aumenta al reducirse el área transversal.

Hashemi and Hashemi (2017) estudiaron la estabilización de un frente de llama de metanoaire en un quemador cónico divergente de forma numérica. Mostraron que para una razón de equivalencia constante, el frente de llama se mueve aguas abajo al aumentar la velocidad de filtración, además determinaron que la modificación del ángulo de divergencia permite mejorar los rangos de estabilidad, siendo el óptimo cercano a 60° . Zangeneh and Alipoor (2021) estudiaron numéricamente la combustión de premezclas hidrógeno-aire en un quemador de MPI con una sección divergente, para diferentes ángulos de divergencia y potencias. Contrario a lo reportado por Hashemi and Hashemi (2017) concluyeron que el ángulo del cono no afecta los límites de blowout y flashback.

Es importante tener en cuenta que los procesos de combustión de H_2 e hidrocarburos tienen grandes diferencias asociadas a la alta difusividad másica del primero, por lo que ambas afirmaciones no necesariamente son contradictorias. Para intercambiar combustibles gaseosos en un equipo sin mayores dificultades se debe mantener el Índice de Wobbe (IW) del combustible dentro de un determinado rango. En el caso de mezclas GN- H_2 , se ha planteado que la máxima adición de H_2 que cumpla esta condición es cercana a un 14% (Zhao et al., 2019).

Esto resalta la importancia de investigar el proceso de combustión en MPI usando mezclas hidrocarburo- H_2 como combustible, generando conocimiento que permita desarrollar tecnologías para acelerar el proceso de descarbonización de la matriz energética global. El objetivo del presente trabajo es estudiar el proceso de combustión de mezclas $CH_4 - H_2$ en un reactor de MPI divergente con frente de reacción estabilizado a potencia constante de 4 kW con diferentes niveles de adición de H_2 , utilizando un modelo validado con datos experimentales.

2 METODOLOGÍA

2.1 Ecuaciones gobernantes

Para el modelo bidimensional propuesto, se consideran los siguientes supuestos: (1) El proceso de combustión es estacionario, dado que se desea estudiar un frente de reacción estabilizado; (2) El flujo es laminar; (3) Las propiedades del MPI no dependen de la temperatura y éste es inerte químicamente, isotrópico y homogéneo, pues está constituido por esferas de alúmina estables a alta temperatura, distribuidas de manera uniforme; (4) La radiación desde la fase sólida se puede aproximar usando una aproximación de difusión, debido a que el MPI es ópticamente grueso; (5) La fase gaseosa puede tratarse como una mezcla de gases ideales y no participa del intercambio radiativo, dado que el intercambio radiativo entre las superficies del MPI es predominante; (6) Los efectos Duffour y Soret pueden despreciarse. Estos supuestos permiten simplificar la resolución del modelo matemático sin dejar de capturar los fenómenos físicos más importantes del proceso de combustión. Así, se obtienen las ecuaciones de conservación que gobiernan el proceso de combustión.

Ecuación de continuidad:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\varepsilon \rho_g u_i) = 0 \quad (1)$$

donde ε corresponde a la porosidad del lecho, calculada según la ecuación (2) a partir del diámetro de esfera usado (d) y el diámetro del reactor (D), u_i corresponde a las componentes de la velocidad y ρ_g a la densidad del fluido.

$$\varepsilon = 0.4 + 0.05 \frac{d}{D} + 0.412 \left(\frac{d}{D} \right)^2 \quad (2)$$

Conservación de momentum:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\varepsilon \rho_g u_i u_j) = -\varepsilon \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial (\varepsilon \tau_{ij})}{\partial x_i} + S_j \quad (3)$$

donde S_i representa la caída de presión (p) debido a la presencia del MPI y se calcula de acuerdo con la ecuación (4). En ella, μ es la viscosidad dinámica del fluido y los coeficientes α y C_2 se calculan de acuerdo con el modelo de Ergun [Ergun \(1952\)](#), según el cual ambos coeficientes son función del diámetro de esfera y de la porosidad del lecho. Por su parte τ_{ij} corresponde al tensor de esfuerzos viscosos para un fluido newtoniano.

$$S_i = - \left(\frac{\mu}{\alpha} + C_2 \frac{1}{2} \rho_g (u_j u_j)^{1/2} \right) u_i \quad (4)$$

Transporte de especies:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\varepsilon \rho_g u_i Y_k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\varepsilon \rho_g D_{\underline{k},m} \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right) + \varepsilon \dot{\omega}_k \quad (5)$$

donde Y_k corresponde a la fracción másica de la especie k , y los índices subrayados indican que no hay sumatoria sobre ellos. $D_{\underline{k},m}$ es el coeficiente de difusión efectivo.

Conservación de energía para la fase gaseosa:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(u_i (c_p \rho T)_g \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\varepsilon \lambda_g \frac{\partial T_g}{\partial x_i} \right) - \varepsilon h_k \dot{\omega}_k + h_v (T_s - T_g) \quad (6)$$

donde $c_{p,g}$, λ_g y T_g corresponden al calor específico, la conductividad y temperatura de la fase gaseosa. Por su parte, T_s , ω_k y h_k corresponden a la temperatura del sólido, la tasa de producción de la especie k y su entalpía de formación, respectivamente. Por último, h_v es el coeficiente intersticial de transferencia de calor entre ambas fases, el cual se calcula a partir de una correlación para el número de Nusselt (Nie et al., 2011) y una expresión para la superficie del lecho empacado, obteniendo la ecuación (7).

$$h_v = \frac{6\lambda_f(1-\varepsilon)}{d} 0.052 \frac{(1-\varepsilon)^{0.14}}{\varepsilon} Re_d^{0.86} Pr^{1/3} \quad (7)$$

donde Re y Pr son el número de Reynolds basado en el diámetro de esfera y el número de Prandtl, respectivamente.

Conservación de energía para la fase sólida:

$$0 = \frac{\partial}{\partial x_i} \left((1-\varepsilon) \lambda_{s,ef} \frac{\partial T_s}{\partial x_i} \right) + h_v (T_g - T_s) \quad (8)$$

donde $\lambda_{s,ef}$ corresponde a la conductividad efectiva del MPI. Finalmente, se considera la ecuación de estado de gas ideal.

$$\rho_g = \frac{p\bar{W}}{R_U T_g} \quad (9)$$

donde \bar{W} y R_U son el peso molecular promedio de la mezcla y la constante universal de los gases, respectivamente.

2.2 Dominio y condiciones de borde

El problema considerado en este estudio es un reactor de MPI divergente basado en un prototipo usado para pruebas experimentales. Como se muestra en la Figura 1 (izquierda), el reactor a simular cuenta con una sección cilíndrica de entrada y luego una sección con un ángulo de 45° de divergencia. Todo el reactor (Zona I) cuenta con esferas de alúmina de 5.6 mm de diámetro, que actúan como MPI, en su interior. Además, en el dominio numérico se incluye un segundo sector que corresponde a la zona de descarga de los gases producto al ambiente (Zona II), en la que no existe presencia de MPI.

En la Figura 1 (derecha), se presentan las principales condiciones de borde consideradas en el modelo. En la entrada del reactor se considera flujo uniforme con velocidad U_0 , de una mezcla de gases con fracciones másicas y_i^0 , a temperatura y presión $T_g^0 = 300$ K y $P^0 = 1$ barg, respectivamente, mientras que para el sólido se considera intercambio radiativo de la alúmina con un cuerpo negro a 300 K.

Desde las paredes del reactor se consideran pérdidas de calor al ambiente a través de una capa de aislante de 1 cm para ambas fases, como se muestra en la Ecuación (10), donde T_w corresponde a la temperatura exterior de la pared, la cual se calcula considerando la resistencia térmica del aislante con un modelo 1D. n es la normal interior al reactor, y se considera $h_{ext} = 5$ W/m²K y $\epsilon_{ext} = 0.9$. Dado que el espesor de la pared del quemador es menor que el del aislante, se desprecia su efecto en la transferencia de calor al ambiente. Para el aislante se considera una densidad de 192 kg/m³, una conductividad térmica de 0.28 W/m K y un calor específico de 1070 J/kg K. Por su parte para la velocidad se considera no deslizamiento, y para la presión y las fracciones másicas de especies se consideran condiciones de Neumann nulas.

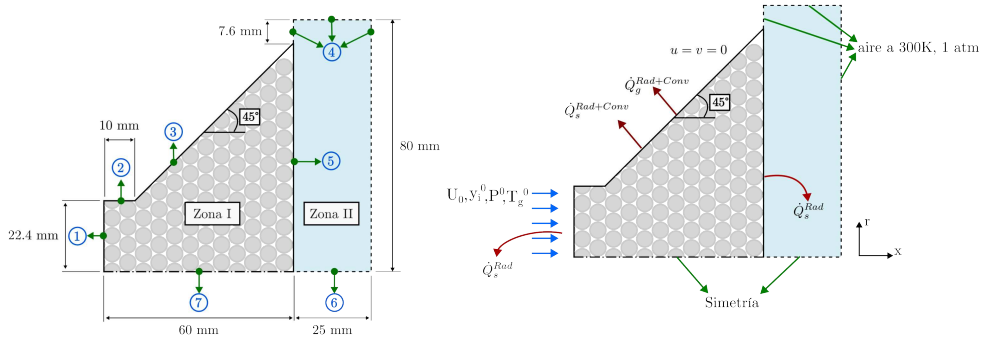


Figure 1: Geometría del reactor a simular (izquierda) y sus principales condiciones de borde (derecha).

$$\begin{aligned}
 -\varepsilon \frac{\partial T_g}{\partial n} &= h_{ext}(T_w - T_\infty) + \epsilon_{ext}\sigma(T_w^4 - T_\infty^4), \\
 -(1 - \varepsilon) \frac{\partial T_s}{\partial n} &= h_{ext}(T_w - T_\infty) + \epsilon_{ext}\sigma(T_w^4 - T_\infty^4).
 \end{aligned}
 \tag{10}$$

Se consideran condiciones de axisimetría en el eje del reactor y desde la superficie incandescente de éste se considera el intercambio radiativo con un cuerpo negro a $T_\infty = 300$ K. Por último, en las fronteras de la Zona II, con excepción del eje de simetría, se consideran abiertas al ambiente, a presión atmosférica.

2.3 Cinética química

Las reacciones químicas son tratadas con cinéticas de tasa finita según la teoría de Arrhenius modificada. El mecanismo de reacción considerado corresponde al Z45 (Zettervall et al., 2021). Este mecanismo considera 18 especies y 45 reacciones irreversibles, incluyendo terceros cuerpos y dependencia de presión. Dado que este mecanismo no considera formación de NO_x , éstos son obtenidos considerando el mecanismo de Zeldovich, los cuales son calculados en postprocesamiento de la solución convergida. Esta aproximación se basa en la baja concentración de NO_x obtenida en este tipo de quemadores, lo que permite estimar que los campos de concentración y temperatura no se verán mayormente afectados por su formación.

2.4 Propiedades termofísicas de la fase gaseosa

Se consideran propiedades termo-físicas dependientes de la temperatura para las diferentes especies presentes en la reacción. Estas son calculadas de acuerdo con la metodología Chemkin (ANSYS, 2015), a partir de parámetros entregados junto a la cinética GRI-Mech 3.0 (Smith et al., 1999). Las propiedades medias del flujo son calculadas bajo el supuesto de que la fase gaseosa es una mezcla de gases ideales.

2.5 Propiedades termofísicas del MPI

Se considera una conductividad efectiva del sólido (Bubnovich et al., 2007) compuesta por la conductividad térmica real del MPI y un término no lineal asociado a la difusión de calor por radiación como se muestra en la ecuación (11). En el primer término, el factor $\delta = 0.025$ reduce la conductividad térmica intrínseca del material debido a que las esferas sólo están en contacto en un número finito de puntos, mientras que, en el término no lineal, σ corresponde a la constante de Stefan-Boltzmann, y $\epsilon = 0.45$ es la emisividad de la alúmina. Las propiedades consideradas para el MPI se detallan en la Tabla 1.

$$\lambda_{s,ef} = \delta\lambda_s + \frac{32\sigma d \epsilon \epsilon}{9(1-\epsilon)} T_s^3 \quad (11)$$

Propiedad	Valor
Densidad, kg/m ³	3987
Calor específico, J/kg K	1300
Conductividad térmica, W/m K	30

Table 1: Propiedades consideradas para el MPI.

2.6 Método de solución

Las ecuaciones gobernantes son resueltas utilizando el método de volúmenes finitos con el programa Ansys Fluent. Los campos de presión y velocidad se acoplan utilizando el algoritmo PISO. El criterio de convergencia para los residuales de cada una de las ecuaciones se fija en 10^{-3} . Los términos convectivos son discretizados usando esquemas upwind de segundo orden y para los términos difusivos se usan esquemas centrados de segundo orden.

2.7 Análisis de independencia de malla

Se trabajó con una malla bidimensional estructurada. La cantidad de elementos a usar, se determinó mediante un estudio de independencia de malla, en que se compararon los resultados obtenidos para tres mallas: una de 10,066 elementos (Malla I), una de 18,530 elementos (Malla II) y una de 35,230 elementos (Malla III).

Se consideró un caso con una presencia de H₂ en el combustible (x_{H_2}) de 0% y una razón de equivalencia (ϕ) de 0.9. Los resultados obtenidos para las temperaturas de fase gaseosa y sólida se muestran en la Figura 2. Se aprecia que la Malla I, a pesar de predecir bien las temperaturas máximas y la forma de los perfiles térmicos, no es capaz de capturar correctamente la posición del frente de reacción. Finalmente, se decide trabajar con la Malla II, ya que tiene cerca de la mitad de elementos que la Malla III y los resultados obtenidos no difieren considerablemente entre ambas.

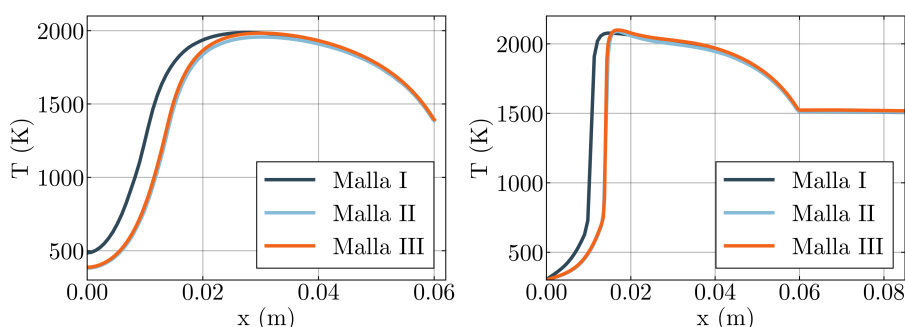


Figure 2: Perfiles de temperatura sobre el eje de simetría del reactor las 3 mallas estudiadas. Izquierda: para la fase sólida; Derecha: para la fase gaseosa.

3 RESULTADOS Y ANÁLISIS

3.1 Validación del modelo

El modelo desarrollado fue validado mediante la comparación con resultados obtenidos experimentalmente para fracciones de H_2 en la mezcla combustible de hasta 30% ($x_{H_2} + x_{CH_4} = 1$). Esto evidencia la alta flexibilidad de combustibles que pueden usar este tipo de quemadores, alcanzando adiciones mayores al máximo predicho por el IW ($x_{H_2} = 14\%$). La Figura 3 muestra la comparación para el caso de los perfiles de temperatura sobre el eje de simetría del reactor para uno de los casos mencionados. Se puede apreciar que el modelo considerado es capaz de reproducir de buena forma las temperaturas de la fase sólida, con un error máximo de 16%.

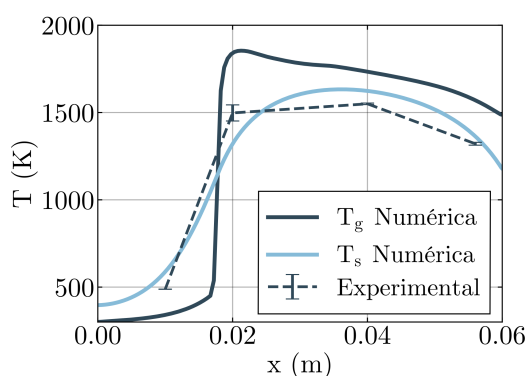


Figure 3: (Izquierda) Comparación numérico-experimental de las temperaturas a lo largo del eje de simetría para el caso $x_{H_2} = 0$ y $\phi = 0.7$ a 4 kW de potencia.

Por su parte, la Figura 4, muestra la comparación de las emisiones de contaminantes (CO y NO_x) medidas experimentalmente y predichas por el modelo. Los valores numéricos fueron corregidos llevándolos a base seca y al mismo porcentaje de oxígeno registrado en la medición experimental. En ambos casos se puede apreciar que las tendencias son capturadas de buena manera y se registran errores máximos cercanos a las 4 ppm. De esta manera, se considera validado el modelo desarrollado para la predicción de temperaturas y generación de contaminantes en el proceso de combustión de mezclas metano-hidrógeno.

3.2 Campos de temperatura

La Figura 5 muestra los campos de temperatura de la fase sólida obtenidos para los casos con $x_{H_2} = 0$ (izquierda) y $x_{H_2} = 0.3$ (derecha). En ambos casos se aprecia una distribución similar, sin embargo al añadir H_2 se registra una disminución en la temperatura. Cabe destacar que para obtener un frente de reacción estabilizado, manteniendo una potencia constante de 4

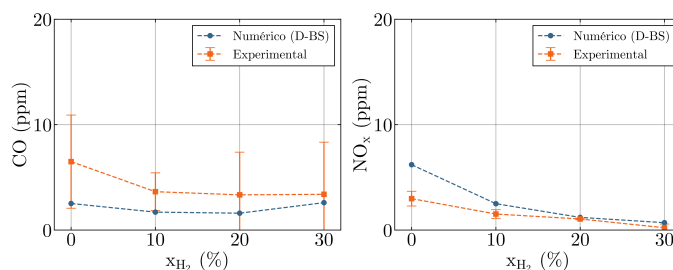


Figure 4: Comparación numérico-experimental de emisiones de CO (izquierda) y NO_x (derecha).

kW, se redujo gradualmente la razón de equivalencia a medida que se añadía H_2 a la mezcla combustible, yendo de $\phi = 0.7$ para $x_{H_2} = 0$, hasta $\phi = 0.6$ para $x_{H_2} = 0.3$, lo que puede explicar la reducción de temperatura. La zona cilíndrica de entrada se mantiene a cerca de 400 K y al inicio de la zona divergente se tiene un aumento de temperatura considerable por la interacción con el frente de reacción. En la base del cono, en la zona periférica, se aprecia una leve curvatura de las líneas de isoterma, lo que se debe a las pérdidas de calor hacia el ambiente. Se observa que en ambos casos mostrados las zonas de mayor temperatura se ubican en la zona media de la longitud del cono, sobre el eje de simetría. También en ambos casos se tiene que al avanzar por la pared del reactor, luego del frente de llama, la temperatura comienza a caer hasta cerca de 500 K en la salida. Esto se debe a que hay una mayor área de transferencia de calor con el ambiente y a un bajo flujo de gases producto hacia esa zona.

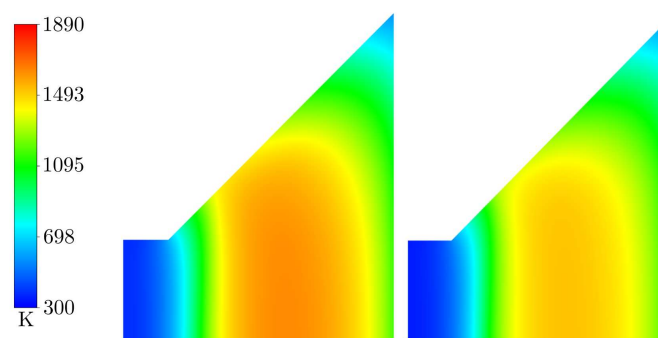


Figure 5: Campos de temperatura de la fase sólida para $x_{H_2} = 0$ (izquierda) y $x_{H_2} = 0.3$ (derecha).

La Figura 6 muestra los campos de temperatura de la fase gaseosa obtenidos para los casos con $x_{H_2} = 0$ (izquierda) y $x_{H_2} = 0.3$ (derecha). En primer lugar, se observa que al aumentar la presencia de H_2 de un 0 a un 30% en la mezcla combustible, la temperatura máxima se ve reducida de 1890 a 1746 K. Se aprecia que en ambos casos la distribución de temperaturas es muy similar y el frente de reacción es recto, levemente inclinado con respecto a la dirección radial. Analizando las curvas de isoterma, se puede determinar que la mayor temperatura se encuentra en la periferia del reactor. Al desplazarse por la pared del reactor, al igual que en el caso del sólido, la temperatura baja hasta cerca de los 400 K debido a la baja circulación de gases de combustión por la periferia de la cara incandescente.

3.3 Espesores de llama

Se define un espesor de frente de reacción $\delta^{(CH_4)}$ correspondiente a la distancia entre los puntos en que se tiene $0.99 y_{CH_4}^0$ y $0.01 y_{CH_4}^0$, donde $y_{CH_4}^0$ es la fracción másica de entrada de

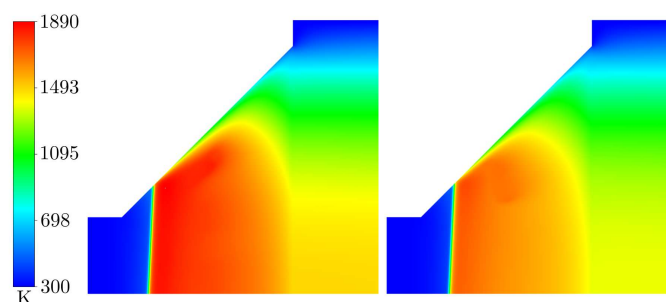


Figure 6: Campos de temperatura de la fase gaseosa para $x_{H_2} = 0$ (izquierda) y $x_{H_2} = 0.3$ (derecha).

metano. Un espesor homólogo se define para los casos en que se usa H_2 como combustible ($0.99 y_{H_2}^0 - 0.01 y_{H_2}^0$). Estos espesores son evaluados a lo largo de tres rectas paralelas al eje de simetría del reactor, ubicadas en (1) $r = 0$, (2) $r = 15$ mm, y (3) $r = 29$ mm. La Tabla 2 presenta los espesores $\delta^{(CH_4)}$ obtenidos a lo largo de estas tres rectas los casos con $x_{H_2} = 0$ y $x_{H_2} = 0.3$. Se aprecia que al añadir H_2 a la mezcla combustible no hay una tendencia clara en cuanto a la variación del espesor de frente de reacción, manteniéndose entre 1.5-2 mm. La Tabla 3 muestra la comparación de los espesores de reacción para CH_4 y H_2 para $x_{H_2} = 0.3$. Se aprecia que el espesor de reacción de H_2 es cerca de 3 veces superior que la del CH_4 de forma consistente en las 3 rectas. Esto se puede asociar a la mayor difusividad másica del H_2 , lo que genera una distancia mayor de oxidación, a pesar de ser altamente reactivo. Este comportamiento también valida el modelo desarrollado, pues evidencia que se capturan efectos importantes asociados a las propiedades termofísicas de las especies involucradas.

	$x_{H_2} = 0$	$x_{H_2} = 0.3$	Variación
$\delta_0^{(CH_4)}$	1.47	1.81	23%
$\delta_{15}^{(CH_4)}$	1.80	1.81	0.2%
$\delta_{29}^{(CH_4)}$	1.78	1.70	-5%

Table 2: Espesores de frente de reacción $\delta^{(CH_4)}$ para $x_{H_2} = 0$ y $x_{H_2} = 0.3$ operados a 4 kW de potencia.

	CH_4	H_2	Variación
δ_0	1.81	6.92	281%
δ_{15}	1.81	7.02	288%
δ_{29}	1.70	6.97	311%

Table 3: Espesores de frente de reacción $\delta^{(CH_4)}$ y $\delta^{(H_2)}$ para $x_{H_2} = 0.3$ operado a 4 kW de potencia.

3.4 Principales especies químicas

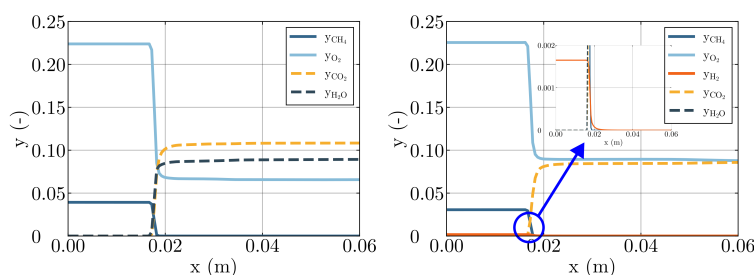


Figure 7: Fracción másica de especies principales sobre el eje de simetría del reactor para casos con $x_{H_2} = 0$ (izquierda) y con $x_{H_2} = 0.3$ (derecha), donde se añade un zoom del frente de reacción.

La Figura 7 muestra las fracciones másicas de las principales especies en el eje de simetría del reactor para los casos con $x_{H_2} = 0$ y $x_{H_2} = 0.3$. Se aprecia que el modelo resuelve la química de manera adecuada, pues reactantes como el CH_4 y el H_2 se consumen para dar paso a productos como el H_2O y el CO_2 . Como es de esperar, dado que se utilizaron mezclas pobres, existe una presencia de oxígeno residual luego del frente de reacción.

4 CONCLUSIONES

Se validó un modelo bidimensional para simular la combustión de mezclas $\text{CH}_4\text{-H}_2$ en un reactor de MPI divergente con hasta 30% de H_2 en la mezcla combustible. Se observó una reducción en las temperaturas al aumentar x_{H_2} , debido a la reducción en ϕ necesaria para lograr la estabilización. Se registraron alrededor de 6 ppm de CO en todas las condiciones estudiadas, sin una tendencia clara al variar x_{H_2} . En el caso de los NO_x , se registró una tendencia a la baja al aumentar x_{H_2} , volviéndose prácticamente indetectables para $x_{\text{H}_2} > 0.2$. Además, se observó que el frente de reacción corresponde a una recta, inclinada con respecto a la dirección radial. Se concluyó que el espesor de reacción del H_2 es 3 veces mayor al del CH_4 y que el espesor de reacción de este último no se ve afectado por la adición de H_2 a la mezcla combustible.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen a ANID por su apoyo a través del proyecto VIU22P0010, su Programa Beca Magíster Nacional/2022 – 22221716 y FONDAP/ 15110019 (SERC-Chile), y a la USM a través de su Programa de Becas Asistencia a Congresos N° 032/2023.

REFERENCES

- ANSYS. Chemkin theory manual 17.0 (15151), reaction design. 2015.
- Bubnovich V., Henríquez L., and Gnesdilov N. Numerical study of the effect of the diameter of alumina balls on flame stabilization in a porous-medium burner. *Numerical Heat Transfer; Part A: Applications*, 52:275–295, 2007. doi:10.1080/00397910601149942.
- Ellzey J.L., Belmont E.L., and Smith C.H. Heat recirculating reactors: Fundamental research and applications. 2019. doi:10.1016/j.pecs.2018.12.001.
- Ergun S. Fluid flow through packed columns. *Chemical engineering progress*, 48:89–94, 1952. doi:10.1021/ie50474a011.
- Hashemi S.M. and Hashemi S.A. Numerical investigation of the flame stabilization in a divergent porous media burner. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part A: Journal of Power and Energy*, 231:173–181, 2017. doi:10.1177/0957650916685912.
- Melaina M.W., Antonia O., and Penev M. Blending hydrogen into natural gas pipeline networks: A review of key issues. 2013.
- Nie X., Evitts R., Besant R., and Bolster J. A new technique to determine convection coefficients with flow through particle beds. *Journal of Heat Transfer*, 133, 2011. doi:10.1115/1.4002945.
- Smith G.P., Golden D.M., Frenklach M., Moriarty N.W., Eiteneer B., Goldenberg M., Bowman C.T., Hanson R.K., Song S., Gardiner J.W.C., Lissianski V.V., and Qin Z. Gri mech 3.0. 1999.
- Zangeneh V. and Alipoor A. Stability study of hydrogen-air flame in a conical porous burner. *Energy*, 215, 2021.
- Zettervall N., Fureby C., and Nilsson E.J.K. Evaluation of chemical kinetic mechanisms for methane combustion: A review from a cfd perspective. *Fuels*, 2:210–240, 2021. doi:10.3390/fuels2020013.
- Zhao Y., McDonell V., and Samuelsen S. Influence of hydrogen addition to pipeline natural gas on the combustion performance of a cooktop burner. *International Journal of Hydrogen Energy*, 44:12239–12253, 2019. ISSN 03603199. doi:10.1016/j.ijhydene.2019.03.100.