

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



"INVESTIGACIÓN EXPERIMENTAL DEL PROCESO DE
GASIFICACIÓN DE RESIDUOS PLÁSTICOS COMPUESTOS
DE PVC Y TETRA BRIK"

GIOVANNI JOEL COX DÍAZ

MEMORIA DE TITULACIÓN PARA OPTAR AL TÍTULO DE
INGENIERO CIVIL MECÁNICO MENCIÓN ENERGÍA

PROFESOR GUÍA: DR. ING. MARIO TOLEDO TORRES
PROFESOR CO-REFERENTE: RAFAEL MENA YANSSEN

DICIEMBRE - 2021

AGRADECIMIENTOS

En primer lugar, agradecer a mi familia, mis padres Cecilia y Juan Carlos por sus enseñanzas, por el esfuerzo de sacar adelante mi educación y acompañarme en los momentos buenos y malos de este largo camino. A mis abuelos M. Cecilia y Luis por ser los pilares de mi crianza y formación como persona, por inculcar en mí el esfuerzo y demostrarme que uno puede anteponerse a cualquier adversidad en la vida.

Agradecer a mi hijo Mateo y su repentina llegada a mi vida, por ser la principal fuente de motivación y el recurso energético inagotable que da fruto al esfuerzo inculcado en el presente trabajo y en todo lo que venga por delante. También a Belén, su madre, quien es pilar fundamental en su crianza y ha sido un apoyo constante para mí en todo este proceso. A Antonio y Monserrat por ser excelentes abuelos para mi hijo y por su voluntad de oro ante todo problema.

Al profesor Mario Toledo y a todo el equipo de investigación de combustión en MPI, por su calidad humana, disposición para enseñar y la buena voluntad presentada en todo este tiempo a pesar de las adversidades que se nos presentaron.

A mis amigos universitarios y de vida, Cristian, Allinson, Luciano, Enzo y todos... que estuvieron en las celebraciones y también en los momentos difíciles de este ciclo.

A todas las personas que conocí en este largo camino y que de una u otra forma se hicieron parte de mi paso por esta universidad...

¡GRACIAS!

DEDICATORIA

A quien, con poco, me enseñó lo que nadie me podía enseñar

A quien en cada mañana me acompañó con un desayuno

Y cada tarde me recibió con un abrazo y una sonrisa cálida

A quien, en la dificultad y la enfermedad, supo ganar la batalla más difícil

A quien es la persona que más admiro y el responsable de todo lo que soy

Por eso y por muchas cosas más...

Esto es por y para ti papito.

Luis Díaz Valverde.

RESUMEN

Con una producción cercana a los 360 millones de toneladas anuales, de las cuales sólo se recicla un 9% es claro que el gran volumen de desechos plásticos es un gran problema medioambiental. El presente trabajo busca dar un enfoque en la recuperación energética de estos residuos, utilizando la gasificación con el fin de generar gas de síntesis. Se plantea la situación de dos reactores de medios porosos en serie, el primero con una matriz híbrida medio poroso - residuo plástico y el segundo una matriz inerte en el que ingresa el gas producto del primer reactor, agregándole CH_4 en distintas proporciones.

Debido a la contingencia sanitaria este trabajo cambia su enfoque experimental a uno de modelación numérica. Para ello se utiliza el programa informático PREMIX, capaz de computar las especies y los perfiles de temperatura de llamas laminares dentro de un reactor. La versión utilizada da solución a la combustión en MPI mediante la resolución de sistemas de ecuaciones diferenciales mediante el método de diferencias finitas.

La etapa simulada se enfoca en el segundo reactor, tomando muestras representativas de gases producto de dos experiencias de gasificación documentadas, la primera a partir de biogás y polietileno de alta densidad (PEAD) y la segunda a partir de propano y polietileno (PE). Se consideran 2 concentraciones de gases producto de cada experiencia con lo que se tiene 4 combustibles modelos (C1.1, C1.2, C2.1 y C2.2) que en conjunto con distintas proporciones de CH_4 serán el gas combustible ingresado al segundo reactor de MPI haciendo variar además la relación de equivalencia desde mezclas pobres ($\phi = 0.4$) hasta mezclas ricas ($\phi=2.4$).

Como resultado se tienen los perfiles de temperaturas, velocidades y concentraciones de productos característicos del proceso. Los resultados más positivos se alcanzaron con el combustible modelo C2.1 con $\phi= 2.4$ y 75% CH_4 , obteniendo la mayor concentración de H_2 con 12,1%. Además, el mayor aumento de concentración de H_2 comparado con el combustible de entrada se alcanzó con el combustible modelo C1.1 con $\phi= 2.4$ y 75% CH_4 , teniendo un aumento del 10,34%.

Se concluye que el sistema de reactores en serie y la combustión en MPI de productos de gasificación es positiva en escenarios de combustión con mezclas ricas y con aportes elevados de CH_4 . El caso contrario en escenarios mezclas pobres y bajos aportes de CH_4 el gas de síntesis generado tiende a disminuir su calidad con respecto al combustible de entrada.

Palabras claves: Residuos plásticos, hidrógeno, gasificación, gas de síntesis, medios porosos.

ABSTRAC

With an annual production of nearly 360 million tons, from which only 9% is recycled, it is clear that the huge volume of plastic waste is a major environmental issue. The following paper seeks for an approach on the energetic recovery of these residues, by using gasification to generate synthesis gas. The situation of two porous media reactors in series is considered, the first with a plastic waste - half porous hybrid matrix, and the second with an inert matrix where the produced gas from the first reactor comes in, adding CH_4 in different proportions.

Due to the health contingency, this work changes its experimental approach to one of numerical modeling. For this purpose the software PREMIX is used, capable of calculating the species and temperature profiles of laminar flames inside a reactor. The used version solves the MPI combustion by solving the differential equation systems using the finite difference method.

The stage to be simulated focuses on the second reactor, produced gas representative samples are taken from two documented gasification experiences, the first from biogas and high density polyethylene (HDPE) and the second from propane and polyethylene (PE). Two concentrations of product gases are considered from each experience, with which we have four model fuels (C1.1, C1.2, C2.1 y C2.2) which in cooperation with different CH_4 proportions will be the gas fuel deposited to the second MPI reactor changing the equivalence relation from lean mixes ($\phi = 0.4$) to rich mixes ($\phi=2.4$).

As a result, the profiles of temperatures, speed and product concentration characteristics of the process are obtained. The most positive results were reached with the fuel model C2.1 with $\phi= 2.4$ and 75% CH_4 , obtaining the highest concentration of H_2 with 12,1%, besides the highest increase of H_2 concentration compared with the fuel input was reached with the fuel model C1.1 with 2.4 and 75% CH_4 , increasing 10,34%.

It is concluded that the series reactor system and the MPI combustion of gasification products is positive in combustion scenarios in rich mixes and with high CH_4 inputs. On the contrary in scenarios of lean mixes with low CH_4 inputs, the generated synthesis gas tends to decrease its quality with regards to the input fuel.

Key words: plastic residues, hydrogen, gasification, synthesis gas, porous media.

GLOSARIO

<i>Término</i>	<i>Definición</i>
<i>PET:</i>	Tereftalato de polietileno (polyethylene terephthalate)
<i>PEAD (HDPE):</i>	Polietileno de alta densidad (high density polyethylene)
<i>PVC:</i>	Policloruro de vinilo (polyvinylchloride)
<i>PEBD (LDPE):</i>	Polietileno de baja densidad (low density polyethylene)
<i>PP:</i>	Polipropileno (polypropylene)
<i>e^-:</i>	Electrón
<i>ΔH:</i>	Variación de entalpía
<i>SMR</i>	Steam Methane Reformer
<i>DMR</i>	Dry Methane Reformer
<i>OMR</i>	Partial Oxidation Methane Reforme
<i>WGR</i>	Water Gas Reaction
<i>WGSR</i>	Water Gas Shift Reaction
<i>FBR</i>	Fluidized Bed Reactor
<i>MPI</i>	Medio poroso inerte
<i>T_f:</i>	Temperatura final
<i>T_o:</i>	Temperatura inicial
<i>Q_c:</i>	Calor liberado por conversión
<i>Q_a:</i>	Calor añadido por precalentamiento de aire
<i>H_f:</i>	Entalpía del estado final
<i>H_o:</i>	Entalpía del estado inicial
<i>Pe:</i>	Número de Peclet
<i>S_l:</i>	Velocidad laminar de llama
<i>d_m:</i>	Diámetro del espacio hueco del medio poroso
<i>C_p:</i>	Calor específico
<i>ρ:</i>	Densidad
<i>k:</i>	Conductividad térmica
<i>ε:</i>	Porosidad
<i>V:</i>	Volumen
<i>ϕ:</i>	Relación de equivalencia
<i>n:</i>	Numero de moles
<i>u_f:</i>	Velocidad de filtración
<i>u_{gas}:</i>	Velocidad del gas de entrada
<i>q:</i>	Caudal
<i>A_{trans}:</i>	Área transversal
<i>k_f:</i>	Constante de Arrhenius
<i>E_A:</i>	Energía de activación
<i>M:</i>	Flujo másico
<i>$\dot{\omega}$:</i>	Velocidad de reacción
<i>W:</i>	Peso molecular
<i>Y:</i>	Fracción másica
<i>V:</i>	Velocidad de difusión
<i>u:</i>	Velocidad de frente de combustión

β :	Coefficiente de intercambio efectivo de calor con el exterior
\mathcal{V}_k :	Velocidad de difusión ordinaria
D_k :	Coefficiente de difusión promedio
\mathcal{W}_k :	Velocidad de difusión térmica
V_c :	Velocidad de corrección
CM	Combustible modelo
C1.1:	Combustible modelo 1.1
C1.2:	Combustible modelo 1.2
C2.1:	Combustible modelo 2.1
C2.2:	Combustible modelo 2.2
X_x :	Fracción molar de "x" elemento

Fórmula Química

Nombre

H_2 :	Hidrógeno molecular
O_2 :	Oxígeno molecular
CO_2 :	Dióxido de carbono
Cl:	Cloro
F:	Flúor
S:	Azufre
N_2 :	Nitrógeno molecular
CO:	Monóxido de carbono
CH_4 :	Metano
H_2O :	Agua
NO_x :	Óxidos nitrosos
C:	Carbono
Ni:	Níquel
Al_2O_3 :	Alúmina
ZrO_2 :	Zirconia
SiC	Carburo de Silicio
C_2H_2	Acetileno

Tabla de contenido

1. INTRODUCCIÓN	1
1.1. Motivación	1
1.1.1. Contexto Ambiental	2
1.1.2. Contexto sanitario	5
1.2. Objetivo general	6
1.3. Objetivos específicos.....	6
2. MARCO TEÓRICO.....	7
2.1. Plásticos y recuperación energética.....	7
2.1.1. Plásticos y su clasificación.....	7
2.1.2. Reciclaje Mecánico	9
2.1.3. Reciclaje químico.....	10
2.1.4. Comportamiento frente a la combustión	12
2.2. Hidrógeno como combustible	15
2.2.1. Métodos de obtención	18
2.2.2. Clasificación según sostenibilidad	22
2.3. Gasificación.....	23
2.3.1. Gas de síntesis	24
2.3.2. Reacciones involucradas	25
2.3.3. Gasificación del plástico	27
2.3.3.1. Mecanismo de gasificación	27
2.3.3.2. Tipos de reactor utilizados	29
2.4. Combustión en medios porosos.....	32
2.4.1. Proceso de combustión en medios porosos	34
2.4.2. Condiciones súper adiabáticas y exceso de entalpía	35
3. DISEÑO EXPERIMENTAL.....	38

3.1.	Contexto	38
3.2.	Diseño de sistema integrado.....	38
3.2.1.	Primer reactor.....	39
3.2.1.1.	Combustible modelo	39
3.2.2.	Reactor de medios porosos inerte.....	41
3.2.2.1.	Parámetros de variación y control.....	42
4.	DESARROLLO DEL MODELO.....	44
4.1.	Premix modificado	44
4.1.1.	Ecuaciones involucradas	45
4.1.2.	Desarrollo y discretización numérica	48
4.1.3.	Metodología e interpretación de archivos de salida	50
4.2.	Validación del modelo	53
4.3.	Simulación sensibilidad de componentes.....	57
4.3.1.	Adición de H_2	58
4.3.2.	Adición de CO	59
4.3.3.	Adición de CO_2	60
4.4.	Simulación con combustible modelo.	61
4.4.1.	Archivos de salida y consolidado de soluciones	61
5.	RESULTADOS OBTENIDOS EN SIMULACIÓN	63
5.1.	Temperatura	63
5.2.	Velocidad de propagación del frente.....	66
5.3.	Concentración de hidrógeno.....	68
5.4.	Concentraciones de monóxido de carbono.....	71
5.5.	Relación hidrógeno – monóxido de carbono.....	73
5.6.	Conversión de CO	75
5.7.	Conversión de hidrógeno	78
6.	ANÁLISIS DE LOS RESULTADOS.....	81

6.1. Análisis general.....	81
6.2. Concentraciones alcanzadas.....	82
7. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES.....	86
8. REFERENCIAS.....	88
ANEXOS.....	93
ANEXO 1:.....	93
Experiencia experimental previa.....	93
Método de operación.....	97
ANEXO 2.....	100
Concentraciones de entrada para simulación análisis de sensibilidad.....	100
Concentraciones gases productor análisis de sensibilidad.....	102
ANEXO 3:.....	111
Concentraciones de entrada para simulación con combustibles modelo.....	111
ANEXO 4.....	119
Combustible modelo 1.....	119
Combustible modelo 1.1.....	119
Combustible modelo 1.2.....	121
Combustible modelo 2.....	123
Combustible modelo 2.1.....	123
Combustible modelo 2.2.....	125

INDICE DE TABLAS

Tabla 1: Comparación agentes gasificantes [18].....	24
Tabla 2: Fracciones molares de gasificación de polietileno de alta densidad-biogás	40
Tabla 3: Fracciones molares para combustible modelo 1	40
Tabla 4: Fracciones molares de gasificación de polietileno-propano	41
Tabla 5: Fracciones molares para combustible modelo 2	41
Tabla 6: Propiedades térmicas de alúmina	42
Tabla 7: Concentraciones de entrada y salida, simulación C2.2, CH_4 al 75% $\phi = 2.4$	83
Tabla 8: Concentraciones de entrada y salida, simulación C1.1, CH_4 al 75% $\phi = 2.4$	83
Tabla 9: Aumento/disminución de concentración de H_2 , C 1.2	84x
Tabla 10: Aumento/disminución de concentración de H_2 , C 1.1	84
Tabla 11: Aumento/disminución de concentración de H_2 , C 2.1	84
Tabla 12: Aumento/disminución de concentración de H_2 , C 2.2	84
Tabla 13: Aumento/disminución de concentración de H_2 , C 1.2. Respecto a gas producto 1er reactor.....	85
Tabla 14: Aumento/disminución de concentración de H_2 , C 1.1. Respecto a gas producto 1er reactor.....	85
Tabla 15: Aumento/disminución de concentración de H_2 , C 2.2. Respecto a gas producto 1er reactor.....	85
Tabla 16: Aumento/disminución de concentración de H_2 , C 2.1. Respecto a gas producto 1er reactor.....	85

INDICE DE FIGURAS

Figura 1: Distribución de la producción de plástico según continentes	3
Figura 2: países con mayor cantidad de exportación e importación de plásticos [6]	4
Figura 3: Categorización en reciclaje de plásticos y usos posteriores. Fuente: SEREMI Metropolitana de medio ambiente (s.r). Recicables	8
Figura 4: Ciclo de reciclaje del plástico. Fuente: Plastic Europe	10
Figura 5: Distintas estructuras según comportamiento frente al calor	13
Figura 6: Esquema de producción de hidrógeno. Fuente: Asociación Chilena de hidrógeno, producción de hidrógeno.	19
Figura 7: Mecanismo de gasificación del plástico [16].....	28
Figura 8: Configuración reactor de lecho fluidizado.....	30
Figura 9: Funcionamiento y comparación reactor de lecho fluidizado y perforado.....	32
Figura 10: Medio poroso inerte (esferas) en proceso de combustión.....	33
Figura 11: Espumas cerámicas utilizadas como medio poroso.	33
Figura 12: Zonas establecidas en combustión en MPI. Fuente: Pablo Requena, memoria de titulación, 2017.....	35
Figura 13: Proceso de combustión con exceso de entalpía. Fuente: Revista "Tecnológicas" adaptado de Tanaka, 2001.	37
Figura 14: Reactores en serie de la situación modelada, Memoria de titulación 2021, Guillermo Mayne.....	39
Figura 15: Ventana de ejecución para simulación.....	51
Figura 16: Ventana premix.out con mensaje de salida de una correcta simulación.....	52
Figura 17: Matriz de soluciones entregada por premix, las columnas hacia la derecha presentan distintas concentraciones de compuestos, las filas hacia abajo mediciones en distintos puntos del simulador de reactor.	62
Figura 18: Controlador de flujo.....	94
Figura 19: Reactor de medios porosos utilizado en la experiencia	95
Figura 20: Esquema y distribución de termocuplas con conexión a data logger, Lorena Espinoza.	96
Figura 21: Sistema de toma de muestras	97

INDICE DE GRÁFICOS

Gráfico 1: Densidad energética por unidad de volumen [mj/l] y masa [mj/kg] del hidrógeno. Fuente: Energy Density, Wikipedia.	16
Gráfico 2: Temperatura de sólido - gas y velocidad de frente de llama, en combustión filtrada (MPI) simulado mediante premix.	54
Gráfico 3: Temperatura máxima en sólido (T_{sm}), Temperatura adiabática (T_{ad}) y Velocidad de frente (u) en “Chemical structures of methane-air filtration combustion waves for fuel-lean and fuel-rich conditions” [43].....	55
Gráfico 4: Fracciones molares de gases productos, experimentales y numéricos en “Chemical structures of methane-air filtration combustion waves for fuel-lean and fuel-rich conditions” [43]56	
Gráfico 5: Fracciones molares de gases producto en validación numérica de combustión filtrada de metano.....	56
Gráfico 6: Temperatura máxima del sólido para combustible modelo 1.1	63
Gráfico 7: Temperatura máxima del sólido para combustible modelo 1.2	64
Gráfico 8: Temperatura máxima del sólido para combustible modelo 2.1	64
Gráfico 9: Temperatura máxima del sólido para combustible modelo 2.2	65
Gráfico 10: Velocidad de propagación para combustible modelo 1.1	66
Gráfico 11: Velocidad de propagación para combustible modelo 1.2	66
Gráfico 12: Velocidad de propagación para combustible modelo 2.1	67
Gráfico 13: Velocidad de propagación para combustible modelo 2.2	67
Gráfico 14: Concentración de hidrógeno para combustible modelo 1.1	68
Gráfico 15: Concentración de hidrógeno para combustible modelo 1.2.....	69
Gráfico 16: Concentración de hidrógeno para combustible modelo 2.1	69
Gráfico 17: Concentración de hidrógeno para combustible modelo 2.2.....	70
Gráfico 18: Concentración de monóxido de carbono para combustible modelo 1.1	71
Gráfico 19: Concentración de monóxido de carbono para combustible modelo 1.2	71
Gráfico 20: Concentración de monóxido de carbono para combustible modelo 2.1	72
Gráfico 21: Concentración de monóxido de carbono para combustible modelo 2.2	72
Gráfico 22: Relación H_2/CO para combustible modelo 1.1	74
Gráfico 23: Relación H_2/CO para combustible modelo 1.2	74
Gráfico 24: Relación H_2/CO para combustible modelo 2.1	74
Gráfico 25: Relación H_2/CO para combustible modelo 2.2	75
Gráfico 26: Conversión de CO para combustible modelo 1.1	76

Gráfico 27: Conversión de CO para combustible modelo 1.2	76
Gráfico 28: Conversión de CO para combustible modelo 2.1	77
Gráfico 29: Conversión de CO para combustible modelo 2.2	77
Gráfico 30: Conversión de H_2 para combustible modelo 1.1	78
Gráfico 31: Conversión de H_2 para combustible modelo 1.2	79
Gráfico 32: Conversión de H_2 para combustible modelo 2.1	79
Gráfico 33: Conversión de H_2 para combustible modelo 2.2	80

1. INTRODUCCIÓN

1.1. MOTIVACIÓN

El manejo de residuos y desechos ha sido un problema al cual la sociedad y el mundo científico se han tenido que enfrentar constantemente a nivel mundial. Las cantidades de residuos de distintos tipos puede llegar incluso a miles de millones de toneladas en un año, así lo anuncia el portal BBC donde de acuerdo al grupo británico especializado Verisk Maplecroft, revela que a nivel mundial se producen más de 2.100 millones de toneladas de desechos y que sólo un 16% aproximadamente es reciclado [1]. Y las cifras sólo han ido empeorando, al pasar de los años la cantidad de residuos tanto de parte de la industria como de la comunidad han ido en aumento debido al sobreconsumo de ciertos tipos de bienes y servicios.

Hoy en día existen múltiples maneras de generar un buen manejo de residuos, para el caso de los residuos de tipo plástico el reciclaje mecánico es el que ha tomado una mayor importancia. Este se puede implementar de manera simple y se tienen resultados rápidos y eficientes, la desventaja de este método es que no puede ser aplicado al 100% de los residuos o desechos de plástico dado que muchos de estos residuos vienen con aditivos que dificultan el proceso o no son permitidos para el reciclaje mecánico. Debido a la gran cantidad de plástico sin reciclar es que día a día se investigan alternativas viables de cómo aprovechar estos residuos y una de las que actualmente generan gran interés es la utilización de residuos y desechos como vía de recuperación energética. Lo anterior suma más importancia al combinarse con el contexto mundial energético, donde se presenta un aumento constante de consumo de energía, de acuerdo con el Anuario Estadístico Mundial de Energía 2019 realizado por Enerdata es que el consumo mundial de electricidad a aumentado un 2.1% al 2018, uno de los mayores aumentos registrados a la fecha [2], se evidencia además que este aumento se ha sostenido en el tiempo con una ligera tendencia al incremento. Dentro del ámbito energético uno de los recursos energéticos que toman un auge importante en los últimos años es el hidrógeno, donde se utiliza como vector energético, combustible, celda de combustible, entre otros. No son desconocidos los avances y artículos que lo posicionan como el combustible del futuro. El irremediable agotamiento de los combustibles fósiles hace que sea imperativo buscar nuevas alternativas y el hidrógeno se posiciona como una de las más viables y limpias, pero su proceso de producción sigue siendo costoso monetariamente e implica el uso de combustibles fósiles. Frente a ello

también se buscan alternativas más viables a la hora de producir este valioso combustible o bien flexibilizar el uso que se le da al hidrógeno. Dentro de estos usos más importantes se presenta el formato de “syngas” un combustible al que se le dan múltiples usos y el cual puede obtenerse mediante reformado y gasificación de residuos de distinto tipo.

Todo lo anterior converge en una propuesta de memoria de título donde se pueden abarcar estos distintos temas que mantienen una estrecha relación entre sí. La gasificación de plástico para producción de syngas resulta ser atractivo y novedoso, con un campo con gran proyección investigativa y que logra despertar el interés.

1.1.1. CONTEXTO AMBIENTAL

El panorama nacional e internacional en cuanto a la contaminación de plástico va en aumento y tiende a ser alarmantes, en la feria K2019, una de las reuniones más importantes relacionadas al plástico y al caucho, Plastic Europe por medio de su informe Plastic the facts 2019 entregó datos que señalan una producción de 359 millones de toneladas de plásticos producidas en 2018 un 3.16% más que en el 2017 [3]. De acuerdo con un estudio publicado por Science Advange divulgado por National Geographic se estima que anualmente el 91% del plástico producido no se recicla, además, como dato histórico se calcula aproximadamente un total aproximado de 8300 millones de toneladas de plásticos producidos a lo largo de la historia, si bien una gran cantidad permanece activo como material útil, se estima que 6300 millones se ha convertido ya en desecho y de estos sólo se han reciclado un 9% mientras que la mayoría se encuentran en vertederos o deteriorándose en entornos naturales como basura [4,5]. Los mayores productores de plásticos se concentran en el continente asiático, seguido por Europa y las naciones al norte de américa como se puede apreciar en la Figura 1.

Distribution of global plastics production

China is the largest producer of plastics, followed by Europe and NAFTA.

World plastics* production: 348 million tonnes.

Source: PlasticsEurope Market Research Group (PEMRG) / Conversio Market & Strategy GmbH

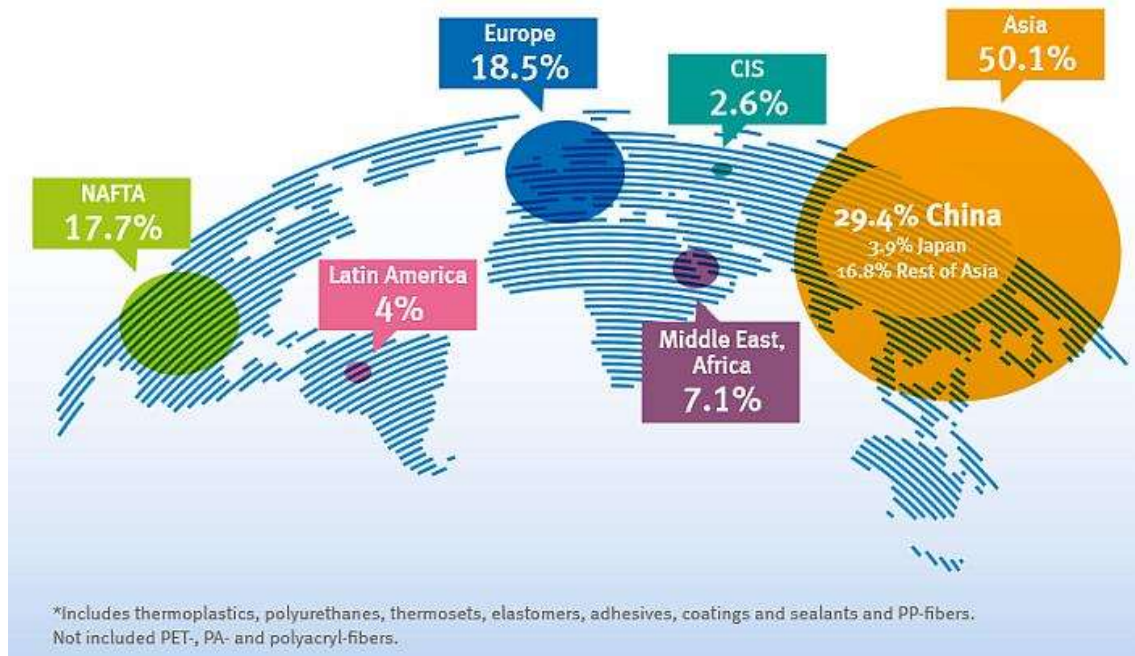


Figura 1: Distribución de la producción de plástico según continentes

Hay que hacer una diferenciación entre los productores, exportadores y consumidores, de acuerdo con la infografía realizada por Visual Capitalist de la Figura 2 la cual toma datos de The Guardian, se puede afirmar que los grandes exportadores también con grandes consumidores, pero el orden cambia. Siendo Estados Unidos, Japón, Alemania y el Reino Unido los mayores exportadores, ahora bien, los importadores terminan siendo países que en general son naciones de mucho consumo de materias para manufactura, estos son principalmente países sudasiáticos: Malasia, Tailandia, Vietnam y Hong Kong [6].

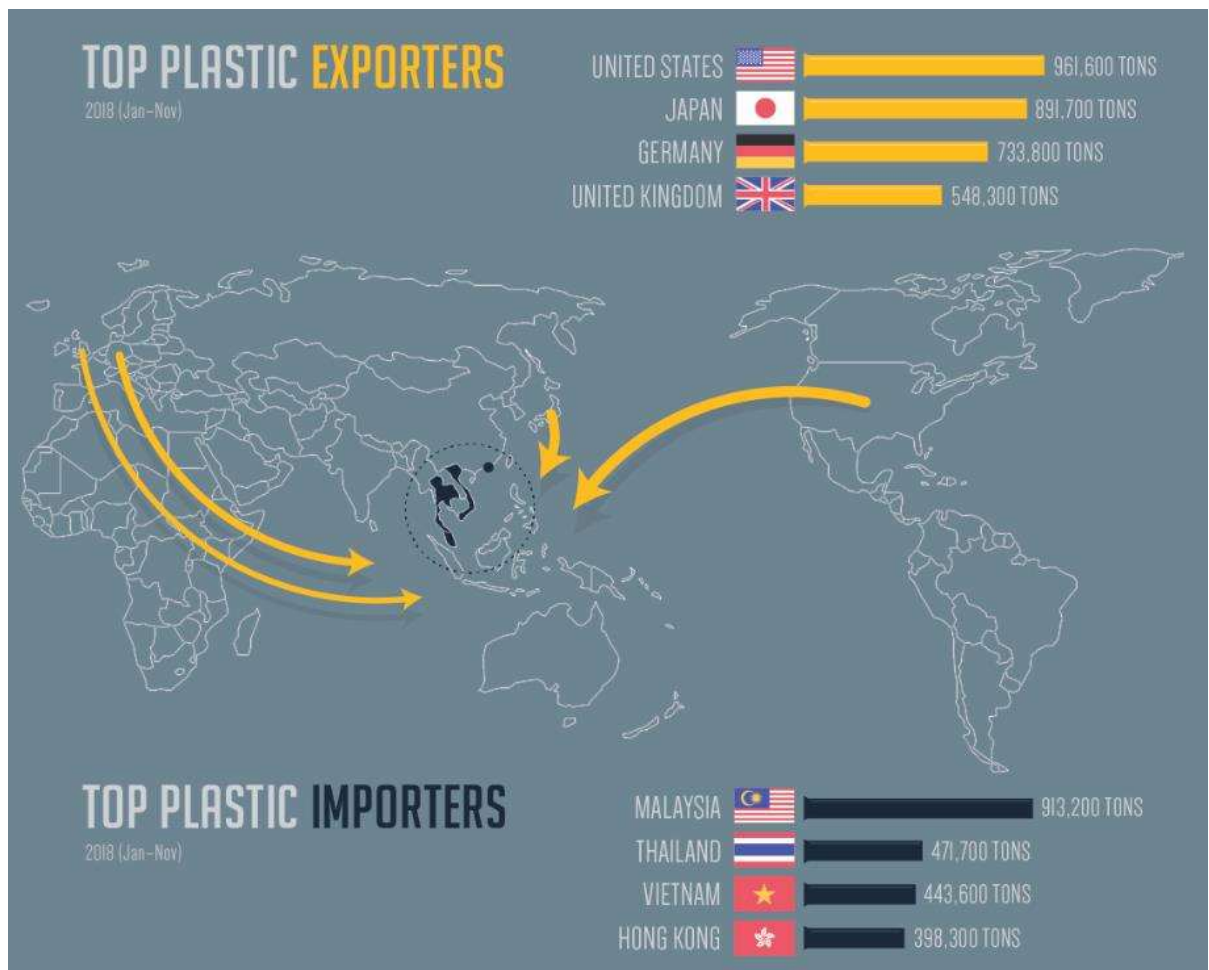


Figura 2: países con mayor cantidad de exportación e importación de plásticos [6]

El panorama nacional puede parecer menos gravitante que los países ya mencionados, si bien el país está lejos de ser un gran productor o consumidor de plástico a nivel mundial, se encuentra dentro de los mayores consumidores de plástico en Latinoamérica y uno de los que más basura genera. Después de México, Chile es el segundo país que más desechos genera por persona llegando a valores de 1.15 kg/día per cápita, donde gran porcentaje de este corresponde a plásticos [7]. En base a los altos índices de desechos presentados en el país es que en el 2016 se promulga ley REP, Gestión de residuo, responsabilidad extendida del productor o simplemente ley de reciclaje, donde para Junio del 2020 se publica el decreto que establece metas de recolección y valorización en la categoría “Envases y embalajes”.

En cuanto a los valores correspondientes a reciclaje dentro del país según la Asociación Gremial de Industrias del Plástico (ASIPLA), en Chile sólo se recicla un 8.5 % del consumo

aparente de plástico, el cual llega a 990 mil toneladas en el año, además la capacidad instalada para reciclaje de plásticos se concentra en Polietileno (PE), Polipropileno (PP) y Tereftalato de Polietileno (PET), centrándose en plantas de peletizado y molienda, esto también es replicado a escala mundial [8]. Nacionalmente el polietileno y el polipropileno lideran la producción de plástico nacional seguidos en menor medida por el tereftalato de polietileno y el pvc. Según señala la revista “Pacto Chileno de los plásticos” publicada por Fundación Chile y Plastic Pact en conjunto con el Ministerio del Medio Ambiente, el PVC presenta un bajo consumo en lo que refiere a envase y embalaje llegando a tan sólo un 2.1%, mientras que el Polietileno de alta y baja densidad junto con el tereftalato (PEAD, PABD, PET) se atribuyen más del 50 % de consumo [9].

1.1.2. CONTEXTO SANITARIO

Como bien es sabido existe un contexto sanitario especial el cual coincidió con el desarrollo de este trabajo de título. La emergencia sanitaria por Coronavirus y el estado de excepción implementado en nuestro país llevó a realizar cuarentenas obligatorias a esta y otras regiones, lo cual ocasionó que los laboratorios de la universidad cerraran. Esto obstaculizó el desarrollo experimental de este trabajo quedando postergado y sujeto a las condiciones sanitarias.

Frente a lo anterior y a pesar de la larga espera por un levantamiento de cuarentena, se tuvo que buscar una alternativa para poder llevar a cabo este tema sin tener variar en gran medida el tema principal de gasificación de plástico, por lo cual se optó por darle un enfoque numérico de modelación variando en cierta medida los residuos considerados.

De acuerdo con este cambio el tema principal de esta memoria queda como:

“Investigación y modelación numérica de la inyección de productos de gasificación de residuos plásticos en un reactor de medios porosos inertes”.

A continuación, el presente trabajo se regirá por el título ya mencionado dejando a un lado el título formal con el que fue inscrita esta memoria.

1.2. OBJETIVO GENERAL

En el marco del proyecto FIC-R BIP 40004872 denominado “Reducción de residuos sólidos en origen con recuperación energética: valorización distribuida, tecnología y desarrollo comunitario”, el presente trabajo tiene como objetivo general la obtención de gas de síntesis mediante la gasificación de residuos plásticos.

1.3. OBJETIVOS ESPECÍFICOS

De acuerdo con lo planteado como objetivo general es que se desglosan los siguientes objetivos específicos que le darán puntos clave para tratar en esta memoria:

- Analizar el estado del arte de las tecnologías de gasificación de residuos plásticos.
- Implementar el uso del software PREMIX para modelar numéricamente la inyección de productos de gasificación de plástico en un reactor de medios porosos inerte.
- Desarrollar simulaciones bajo distintas condiciones de operación, analizando la composición del gas de síntesis producido.
- Evaluar el método de gasificación más eficiente a partir de los resultados obtenidos.

2. MARCO TEÓRICO

2.1. PLÁSTICOS Y RECUPERACIÓN ENERGÉTICA

2.1.1. PLÁSTICOS Y SU CLASIFICACIÓN

Los plásticos son materiales constituidos por una gran variedad de compuestos sintéticos o semisintéticos y también orgánicos, generalmente son obtenidos mediante reacciones de polimerización a partir de derivados del petróleo y en menor medida de fuentes renovables con compuestos provenientes del almidón, celulosa, bacterias entre otros. En general son de fácil fabricación y con un costo muy bajo, esto en conjunto con su principal propiedad de ser maleables, lo hacen uno de los materiales más fabricados y utilizados en una gran variedad de aplicaciones a nivel mundial.

Se pueden clasificar de acuerdo con distintas características tales como:

- Monómero base: Naturales o Sintéticos
- Comportamiento frente al calor: Termoplástico o Termoestable
- Reacción de síntesis del polímero: Adición, condensación o formado por etapas
- Estructura molecular: Amorfos, semicristalinos, cristalizables, comodites, de ingeniería o específicos.

A los plásticos en general se les designan siglas según su nombre, que a su vez viene dado por los compuestos de este, los plásticos más conocidos y utilizados a nivel mundial son los siguientes:

- 1- Tereftalato de polietileno (PET):** Envases de bebestibles, también bandejas de repostería y envases de frutas.
- 2- Polietileno de alta densidad (PEAD – HDPE):** Se puede observar también en algunos envases de lácteos o jugos y en bolsas.
- 3- Policloruro de vinilo (PVC):** Es utilizado principalmente en construcción en cañerías e industrias de la electrónica y electricidad.
- 4- Polietileno de baja densidad (PEBD – LDPE):** Utilizado principalmente en bolsas de supermercado desechables.

- 5- **Polipropileno (PP):** Utilizado en envases de líquidos y alimentos, se le da uso en el sector de la medicina y la cocina.
- 6- **Poliestireno (PS):** Se utiliza como embalaje térmico (vasos, cajas, coolers), relleno, aislantes, utensilios desechables.



Figura 3: Categorización en reciclaje de plásticos y usos posteriores. Fuente: SEREMI Metropolitana de medio ambiente (s.r). Recicables

2.1.2. RECICLAJE MECÁNICO

En cuanto al proceso de reciclaje convencional del plástico este pasa por un proceso común para todos los tipos de plástico que luego dependiendo del tipo de plástico puede variar en los procesos intermedios/finales. El proceso es el siguiente:

- **Recogida:** Recolección de material reciclable desde puntos de reciclaje ya clasificados o de basura municipal común.
- **Clasificación del material:** Una vez recolectados estos deben ser clasificados de acuerdo a su componente principal entre los 6 tipos de plásticos reciclables o bien descartar los plásticos que no pueden ser reciclados.
- **Triturado:** Se tritura el material una vez clasificado para así lograr un tamaño de grano adecuado al tipo de procedimiento al que será sometido posteriormente.
- **Lavado:** Este proceso puede ser opcional y se busca limpiar de impurezas del material, así como también una separación densimétrica de este.
- **Centrifugado y secado:** Etapa final del proceso intermedio donde se busca extraer toda la humedad del material y extraer las últimas impurezas que pudiese contener.

Una vez aquí el material en forma de granza se puede vender como tal dado que es útil como materia prima para distintos procesos en los que se llega a un producto final tales como:

- **Extrusión:** Material se funde y homogeniza, para luego someter un flujo continuo a presión y hacerlo pasar a través de alguna matriz generando así diversas formas, hilos, pellets, tubos, láminas entre otros.
- **Inyección:** En este caso el material una vez fundido es inyectado dentro de un molde frío cerrado por medio de presión, el material adopta cualquier forma dependiendo del molde el cual tiene que ser retirado una vez enfriado.
- **Soplado:** Acá el material fundido se introduce en un molde y a continuación se le inyecta aire al interior de este, con este proceso se logra la obtención de piezas huecas tales como botellas, bidones o distintos tipos de envases, común mente se puede utilizar en combinación con los dos procesos anteriores de extrusión e inyección.

También se dan otro tipo de reciclajes mecánicos tales como compresión o calandrado pero que se utilizan en mucho menor porcentaje que los mencionados.

En general estos tipos de reciclajes son altamente utilizados para darle un nuevo uso a los residuos plásticos, pero se deja fuera de posibilidad darle un segundo uso para fines alimenticios debido a que no se permite la utilización de materiales reciclados ya que no se puede comprobar de manera completa su procedencia, pudiendo existir aditivos no deseados o contaminación cruzada en cualquiera de sus etapas.

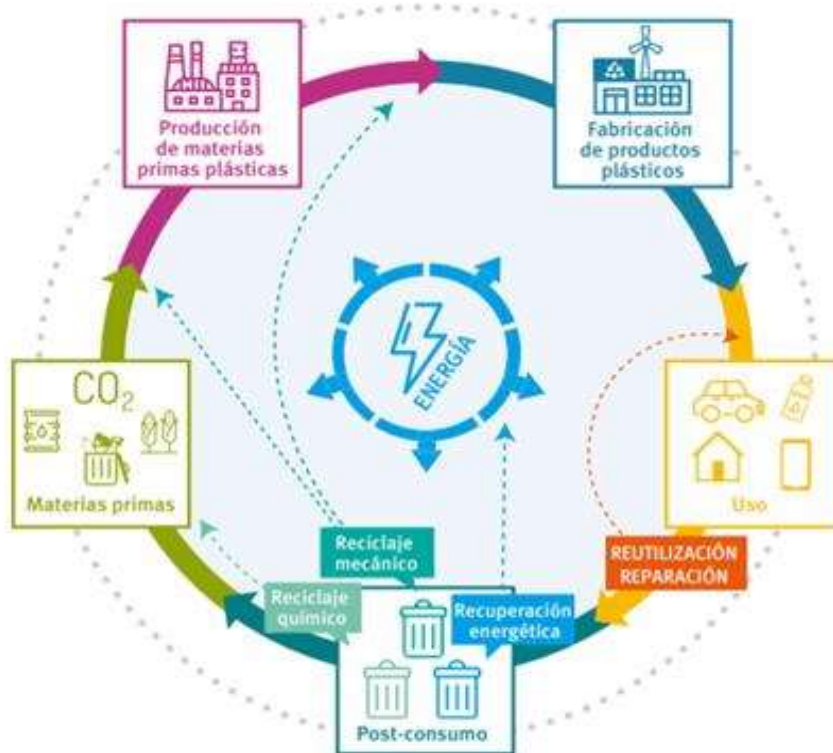


Figura 4: Ciclo de reciclaje del plástico. Fuente: Plastic Europe

2.1.3. RECICLAJE QUÍMICO

El reciclaje químico busca la reducción de los polímeros de plástico en sustancias más simples, estos pueden ser reducidos a monómeros para nuevamente hacerlos pasar por el proceso de polimerización o bien reducir las cadenas de polímeros y monómeros a cadenas muchos más simples generando así sustancias combustibles que puedan ser aprovechadas energéticamente. Esta es una alternativa que elimina algunas limitaciones del reciclaje mecánico como el volumen de reciclado, la necesidad de un material homogéneo o una de las más importantes

que es la capacidad de reciclar energéticamente residuos plásticos con estructuras más complejas o aditivos no permitidos en el reciclaje mecánico.

Existen diversos tipos de procesos de reciclaje químico donde se usan técnicas basadas en la despolimerización térmica mediante la adición de calor como lo es el caso de la hidrogenación, pirólisis y gasificación o la descomposición química de estas mediante la acción de solventes en el caso de la quimiólisis y metanólisis. Sus definiciones a continuación:

- **Quimiólisis:** Proceso químico que consiste en la aplicación de procesos solvolíticos como hidrólisis, glicólisis o alcoholólisis en la que los polímeros se reducen a monómeros básicos para una posterior repolimerización.
- **Metanólisis:** Proceso complejo que consiste en la aplicación de metanol al plástico y lo descompone en moléculas básicas, si bien los monómeros conseguidos no son lo suficientemente puros para utilizarlo nuevamente, estos pueden ser utilizados para la fabricación de resinas.
- **Hidrogenación:** En este caso los plásticos son tratados con hidrógeno y calor. Las cadenas poliméricas son rotas y convertidas en un petróleo sintético que puede ser utilizado en refinerías y plantas químicas.
- **Pirólisis:** Despolimerización térmica de los residuos plásticos mediante calentamiento al vacío, admite una alta gama de plásticos del que se puede obtener hidrocarburos líquidos o sólidos para un posterior procesamiento en refinería.
- **Gasificación:** Al igual que en la pirólisis se busca la degradación térmica del residuo, pero en este caso se utilizan niveles de oxígeno bajo el estequiométrico en conjunto con un agente gasificante, logrando obtener gas de síntesis.

Actualmente el reciclaje químico no está implementado a una gran escala comercial, aún se deben superar ciertos obstáculos tecnológicos para que este se convierta en algo no tan sólo ambientalmente atractivo, sino que además económicamente rentable.

La pirólisis y la gasificación han logrado llamar la atención en el sector de investigación debido a la gran versatilidad de aceptación en cuanto a materia prima y buenos resultados obtenidos, cabe destacar que la gasificación presenta muchas menos limitantes de operación que la pirólisis, si bien la eficiencia del proceso suele ser mayor en la pirólisis dado que se logran productos de mayor calidad, la gasificación toma cierta ventaja en lo que respecta la

industrialización del proceso, el cual puede ser adaptado de acuerdo al material gasificante, el agente y el reactor a utilizar.

2.1.4. COMPORTAMIENTO FRENTE A LA COMBUSTIÓN

La combustión de plásticos tiende a ser un tema complicado que ha causado controversia en el área ecológica. Cuando un plástico arde se presenta una reacción térmica de oxidación que reduce las cadenas carbonosas del polímero a monómeros o grupos de monómeros de bajo peso molecular, donde en condiciones normales de combustión se generarán CO_2 , agua y otros productos de combustión de menor peso molecular que el polímero, además de alquitrán y cenizas.

Se tendrán distintos comportamientos al calor dependiendo del tipo de plástico que sea

Termoplásticos: Se presentan de manera sólida a temperatura ambiente, pero reblandecen a altas temperaturas y adoptan comportamientos fluidos antes de descomponerse. Su estructura está conformada por cadenas de uniones débiles que se rompen fácilmente frente al calor y se reincorporan nuevamente al enfriarlo. Ejemplo de estos son la mayoría de los plásticos utilizado normalmente (PE, PEAD, PEBD, PVC, PP, PS)

Termoestables: Estos son calentados una sola vez para darles forma, luego de eso las moléculas se enlazan permanentemente con fuertes enlaces covalentes generando una red tridimensional, lo que los hace infusibles e insolubles, frente temperaturas muy altas se presentan frágiles y pueden romperse. Algunos de estos son la baquelita (resinas fenólicas), melamina y el poliéster.

Elastómeros: Estos polímeros presentan un comportamiento elástico, gracias a la disposición de sus macromoléculas le permito tolerar grandes deformaciones con aplicaciones de fuerza y luego volver a su forma original. Estos se degradan a temperaturas mayores que los termoplásticos. Ejemplos de esto son el poliuretano, la goma natural, distintos tipos de adhesivos, el caucho, entre otros.

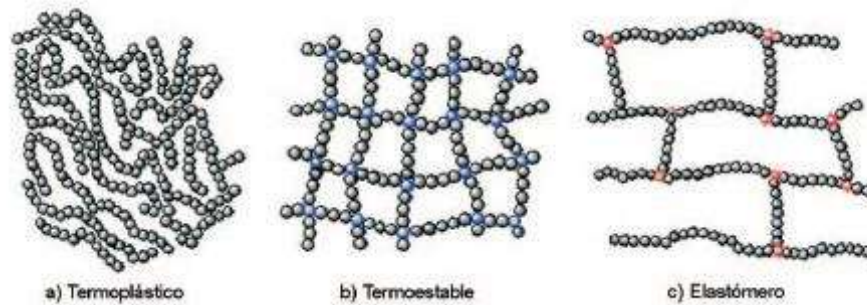


Figura 5: Distintas estructuras según comportamiento frente al calor

Frente a estas estructuras el proceso de combustión del plástico procede en etapas comunes:

Calentamiento: Termoplásticos y elastómeros comenzarán etapa de ablandamiento hasta que queden de manera fluida, en cuanto a los termoestables estos mantendrán su estructura sólida quebrándose y consumiéndose.

Descomposición: Una vez roto los enlaces más débiles se determina el proceso de degradación subsecuente:

- Descomposición Térmica: Se pueden producir distintos tipos de descomposición de cadenas; escisión de los extremos de las cadenas, escisión aleatoria, rotura de cadenas, entrecruzamientos, etc. En esta etapa se consumen también catalizadores e iniciadores presentes en algunos polímeros. También se comienzan a liberar los contaminantes introducidos en su vida útil.
- Descomposición Oxidativa: En presencia de oxígeno la degradación de los polímeros se genera de manera más rápida, dada las reacciones aceleradas entre el oxígeno y radicales de átomos centrales de carbono. Estas interacciones resultan en la acumulación de radicales alquilo dando mayores niveles de productos de escisión y entrecruzamiento. A demás aparecen radicales centrados en el oxígeno dando lugar a reacciones que no se dan en una atmosfera inerte.

Ignición: La ignición se produce una vez se juntan los gases procedentes de la reacción entre polímero y el oxígeno de tal forma que se alcance el límite inferior de ignición. En este punto si existe llama se producirá la ignición, en caso contrario si la temperatura es lo suficientemente alta se producirá la autoignición. Los puntos de ignición (Flash ignition temperature) y

autoginición (Self-ignition temperature) dependerán de múltiples variables como la disponibilidad de oxígeno, temperatura y naturaleza físico-química del polímero.

Propagación de llama: La propagación de esta se producirá siempre y cuando la energía liberada por las reacciones exotérmicas de la combustión sea mayor a la energía necesaria para llevar a cabo las reacciones endotérmicas de pirólisis, el principal parámetro que influye en la propagación de llama es el calor de combustión, el cual en el plástico es bastante alto del orden de los 20-40 [KJ/Kg][10].

Dependiendo del tipo de polímero y de las condiciones de combustión se liberan distintos tipos de productos donde algunos de ellos pueden ser contaminantes, si bien en el caso de recuperación energética se buscan las condiciones adecuadas para disminuir en gran cantidad dichos contaminantes, muchos de estos se encontrarán siempre presente. Se pueden clasificar en:

- Residuos sólidos o cenizas

Denominadas cenizas de fondo que representan alrededor del 75-90% del total. Son las de mayor tamaño y generalmente se componen por óxidos, metales pesados de baja volatilidad y materia carbonosa residual. Generalmente se encuentran sinterizadas y no presentan mayor problema.

El otro porcentaje de cenizas lo completan las cenizas volantes, estas provienen del sistema de eliminación de partículas vía seca o semi-seca tras haber sido arrastrada por los gases. Estas tienen un gran porcentaje de materia carbonosa lo que propicia una mayor adsorción de metales pesados volátiles, de productos tóxicos de combustión incompleta y de otros metales catalizadores presentes. Este tipo de cenizas deben pasar por test de lixiviación para determinar su clasificación y posteriormente ser tratadas en caso de requerirlo.

- Emisiones contaminantes a la atmósfera

Partículas sólidas: Pueden ser cenizas volantes arrastradas por gases de combustión, condensación de compuestos metálicos volátiles o bien hollín residual. Las partículas mayores sirven de medio de transporte a otros contaminantes que se adhieren a la superficie. En cuanto a las partículas menores de tamaño menor a 10 μm (PM₁₀) son tóxicas por sí misma y penetran el sistema respiratorio [11].

Metales pesados: Muy tóxicos para el ser humano y el medio ambiente, muchos de los compuestos de estos metales pueden evaporarse a la temperatura en que trabajan hornos y reactores. En general los metales se encuentran como óxido, que son poco volátiles, pero la presencia de Cloro (Cl) y Azufre (S) puede modificar la volatilidad de estos [11].

Gases ácidos: Producido por la presencia de *Cl*, *F*, *N₂* y *S* en los residuos, tienen un efecto negativo para la atmósfera (lluvia ácida) y para la salud dado que son irritantes, por lo que su emisión está estrictamente limitada. También se encuentran los óxidos nitrosos (*NO_x*), estos se generan debido a la excesiva oxidación del nitrógeno orgánico presente en los residuos o bien como resultado de la oxidación del nitrógeno atmosférico a altas temperaturas (sobre 1200 [°C]) y altas concentraciones de oxígeno [11].

Productos de combustión incompleta: Estos productos también llamado pirolíticos se encuentran como macrocontaminantes o microcontaminantes dependiendo de la concentración que se tenga. En los primeros encontramos *CO*, hollín, residuos sin quemar. En cuanto a los microcontaminantes estos tienen una gran importancia medioambiental debido a su elevada toxicidad, se ha de tomar especial importancia con los compuestos aromáticos clorados, en especial con las dioxinas y los furanos los cuales pueden presentar una alta toxicidad incluso a bajas concentraciones [11].

En términos generales la producción de contaminantes mediante la combustión de residuos plásticos se encuentra directamente relacionado tanto a la composición del residuo como las condiciones de combustión. En los apartados posteriores se profundizará en los distintos reactores y condiciones de operación en la que los niveles de emisiones se ven fuertemente aplacadas

2.2. HIDRÓGENO COMO COMBUSTIBLE

El hidrógeno es el elemento más abundante, constituyendo casi tres cuartas partes de la masa del universo. Este se puede encontrar en toda la materia orgánica y en nuestro caso se encuentra en el agua la cual cubre el 70% de nuestro planeta. Es además el elemento más simple y liviano compuesto por un electrón y un protón.

El hidrogeno es considerado un vector energético dado que almacena energía que es generada por otros medios, esta energía puede ser entregada a celdas de combustibles y generar electricidad y calor o también puede ser quemado para hacer funcionar un motor de combustión. La utilización del hidrógeno como combustible supone muchas ventajas comparado con la utilización de hidrocarburos, la característica más notoria es su alto contenido energético, siendo el combustible con mayor densidad energética por unidad de masa con 142 [MJ/kg] como se puede apreciar en el Gráfico 1, pero volumétricamente sufre una gran baja, donde en condiciones de almacenamiento a 600 [bar] sólo alcanza los 5.6 [MJ/L] lejos de los 32 [MJ/L] de la gasolina por ejemplo, si bien el hidrógeno en estado líquido puede alcanzar los 10 [MJ/L] es poco viable debido al gran trabajo empleado en su enfriamiento y presurización.

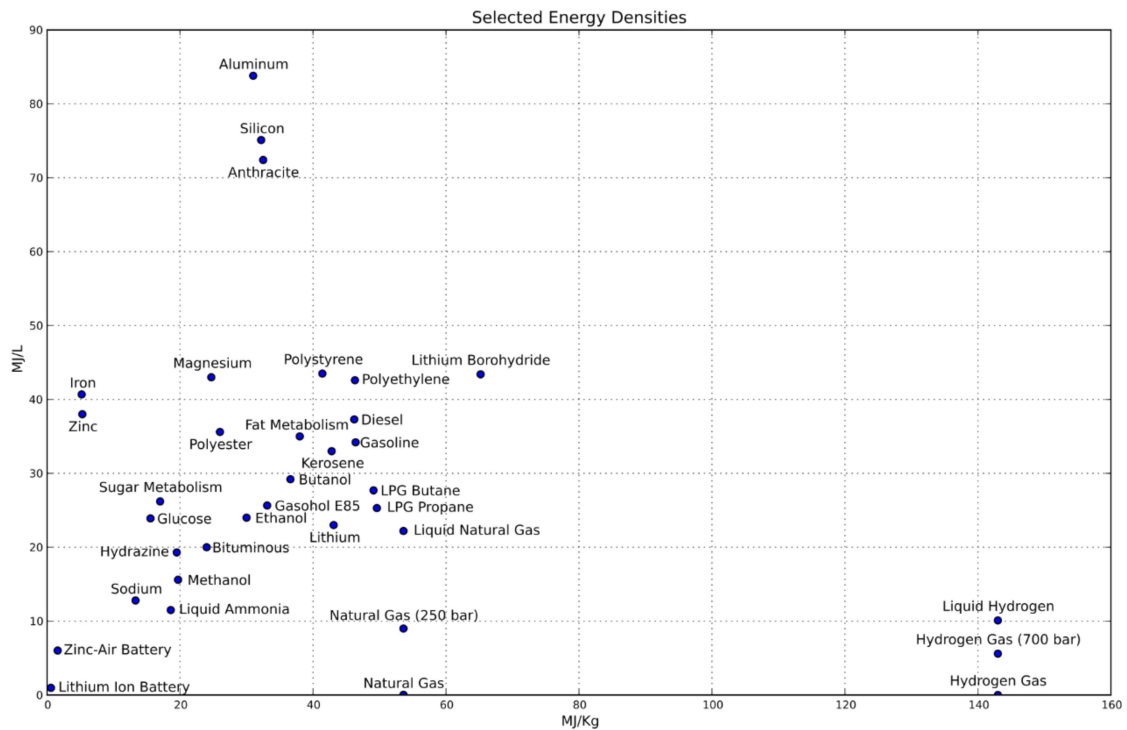
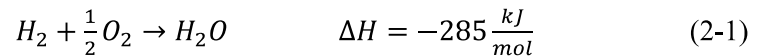


Gráfico 1: Densidad energética por unidad de volumen [MJ/l] y masa [MJ/Kg] del hidrógeno.
Fuente: Energy Density, Wikipedia.

Donde se genera la gran diferencia con otros combustibles es en la combustión del hidrógeno, dado que esta no produce subproductos nocivos para el medio ambiente, es un elemento no

tóxico en prácticamente todas sus presentaciones y usos, específicamente en una pila combustible sólo se obtiene energía y agua como productos.

La reacción que modela la combustión del hidrógeno se puede apreciar en la siguiente ecuación (2-1) donde se verifica la obtención de agua como producto y la naturaleza exotérmica de la reacción, esta también puede ser desglosada de la forma en que se observe la oxidación del hidrógeno (2-2) en el que se liberan electrones y la reducción del oxígeno (2-3) donde se captan electrones.



Debido a su combustión limpia es que se desprende su gran proyección como combustible del futuro, pero hay que tener en cuenta que al ser un vector energético y no un recurso energético es que debe existir una producción de hidrógeno, donde generalmente existe uso de combustibles fósiles.

Otra de sus características es su amplia gama de inflamabilidad, de 4.1% a 74.8 % y sube a un 94% en mezclas de hidrógeno-oxígeno en condiciones estándar, se destaca que si bien su temperatura de autoignición (558 °C) es relativamente alta, su energía de activación es considerablemente menor que en otros combustibles tales como la gasolina, metano o propano (0.02 MJ) esto lo deja en alta consideración para procesos de combustión [12]. Esta baja energía de activación también puede ser vista como un problema ya que lo convierte en un elemento combustible poco seguro para su uso y transporte.

Las principales desventajas del hidrógeno en estos usos recaen en que no es un recurso energético y su producción equivale a una alta inversión, en estado puro su precio es muy elevado y su producción conlleva altos costos energéticos que muchas veces asociado a combustibles convencionales para su obtención. Su almacenamiento no es sencillo y la tecnología necesaria para esto se encuentra en vías de desarrollo, se tienen que alcanzar grandes presiones para almacenarlo de manera óptima e implica el uso de tanques especiales, hay que considerar que el hidrógeno posee una gran permeabilidad y difusividad lo que hace que sea capaz de difundirse incluso a través de sólidos, esto conlleva a una pérdida de combustible

almacenado que se vierte a la atmosfera como también la fragilización de los materiales empleados para el contenedor, el acero por ejemplo [13].

En general pese a todas las ventajas que se tienen con el hidrógeno, los limitantes técnicos en su obtención, uso y transporte siguen estando en una etapa de desarrollo que no permiten usar todo su potencial. Es importante además el rol que cumple el hidrógeno no sólo como combustible puro si no también en otras aplicaciones como lo es en la industria química y en la refinación del petróleo, uno de los usos que se les da en ello es como gas de síntesis.

2.2.1. MÉTODOS DE OBTENCIÓN

A pesar de ser el elemento más abundante en nuestro planeta este no se encuentra de manera pura si no que se encuentra formando parte de compuestos químicos, tales como el agua o los hidrocarburos. Debido a esto es que el hidrógeno no es una fuente de energía primaria si no que necesita de un proceso de transformación para producirlo partiendo de distintas materias primas.

En la actualidad fuentes no renovables ocupan cerca del 96% de la base de la producción de hidrógeno mundial, mientras que el restante 4% vienen siendo fuentes renovables como el agua [14]. En general se plantean 3 tipos de procedimientos para la obtención de hidrógeno:

- Conversión Termoquímica
- Conversión Bioquímica
- Conversión Electroquímica

En la figura 6 se aprecian la energía primaria y secundaria aplicada de acuerdo con el proceso de conversión y los métodos que de estos se desprenden. Dentro de los métodos de obtención de hidrógeno a continuación se destacan los más importantes.

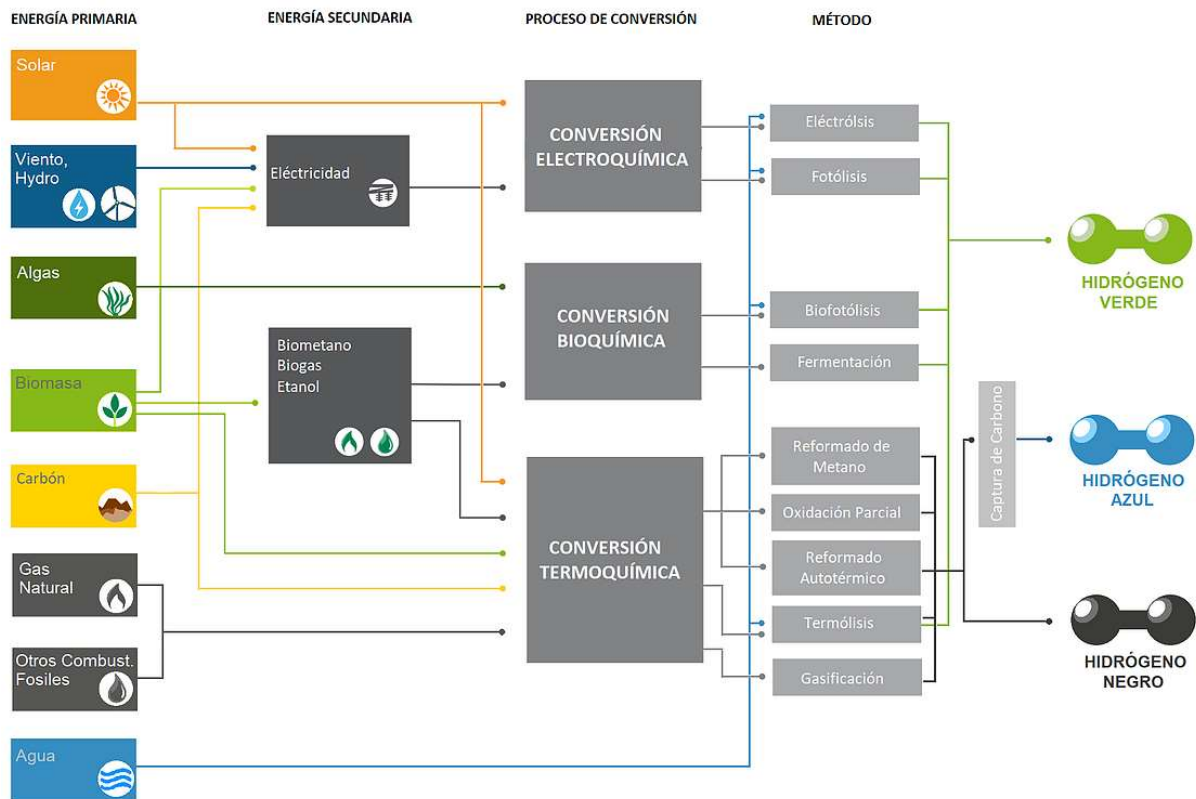
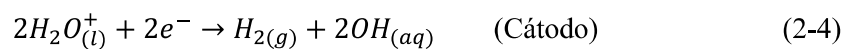
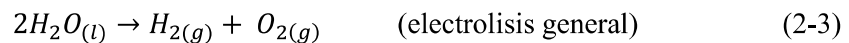


Figura 6: Esquema de producción de hidrógeno. Fuente: Asociación Chilena de hidrógeno, producción de hidrógeno.

Electrólisis

Hidrólisis del agua, separación de los átomos que la componen por medio de la electricidad. Es uno de los métodos más efectivos y puede ser de los más limpio para la producción de hidrógeno. En ella intervienen semirreacciones de los iones de agua, mediante los electrodos, ánodo y cátodo, se genera el movimiento de electrones, generándose hidrógeno en el cátodo mediante reacción de reducción (2-4) y oxígeno en el ánodo mediante una reacción de oxidación (2-5), para mejorar este proceso se suelen agregar sales para aumentar la velocidad de reacción.

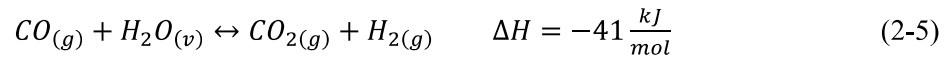


Reformado de Metano

- Reformado con vapor

El hidrógeno también puede ser extraído de los hidrocarburos a partir del reformado. El reformado catalítico de un hidrocarburo ligero como metano, bajo una atmosfera de vapor es la tecnología dominante en cuanto a producción de hidrógeno debido a su relación de costo eficiencia, conocido generalmente como reformado de metano con vapor o SMR por sus siglas en inglés.

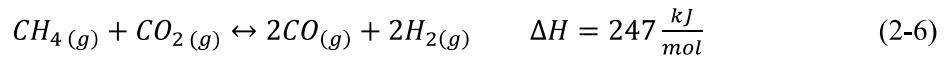
Proceso termoquímico que consiste en hacer reaccionar el CH_4 y vapor a una alta temperatura entre 800 – 900 [°C]. En este proceso ocurren dos reacciones importantes. La reacción de reformado (2-4) y una segunda reacción (2-5), esta es exotérmica y reacciona el CO producido en el reformado. Al finalizar se debe de realizar un proceso de separación donde se elimina el dióxido de carbono generado y se purifica el hidrógeno obtenido.



Cuando estas temperaturas se alcanzan con combustibles fósiles se convierte en el proceso de obtención de hidrógeno más económico del mercado. El calor generalmente es administrado quemando el exceso de CH_4 lo que se traduce en pequeñas pérdidas de producción de hidrógeno a pesar de eso se logran eficiencias del 70%. [15]. En este proceso se obtiene la mejor relación H_2/CO en el gas resultante, alcanzando una relación molar 3:1, que brinda el mejor rendimiento de hidrógeno, todo lo anterior lo convierte en el proceso preferido para producción a nivel industrial [16]

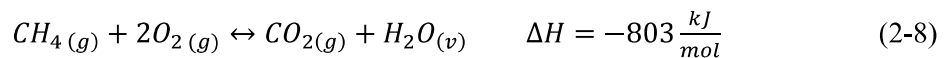
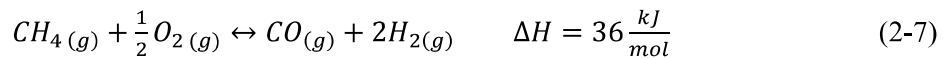
- Reformado seco

También existe el proceso de reformado en seco o DMR, donde no se usa vapor, este proceso tiene la ventaja de utilizar CH_4 y CO_2 como reactante de acuerdo con la reacción (2-6), pero requiere un alto costo energético dado que la reacción es altamente endotérmica, además se logra obtener sólo una relación H_2/CO 1:1, sin embargo, sigue siendo útil para procesos de producción de etanol y síntesis de Fischer-Tropsch. Este procedimiento se prefiere cuando el gas utilizado tiene altas concentraciones de CO_2 como es el caso del biogas [17]



- Oxidación parcial

Otro de los métodos de reformado utilizados es reformado por oxidación parcial (OMR), esta alternativa minimiza un poco el costo de producción que requiere el hidrógeno debido a la alta inversión energética que requieren los reformados secos y con vapor, debido a que en esta reacción intervienen reacciones exotérmicas. Se alcanzan relaciones de H_2/CO del orden 2:1 como dicta la reacción (2-7). También hay que controlar la existencia de oxígeno en la reacción dado que puede oxidar completamente al metano y resultar en dióxido de carbono y agua como se puede apreciar en la reacción (2-8)



Pirólisis

El proceso de pirólisis consiste en la descomposición de un combustible sólido (carbón o biomasa generalmente) mediante la adición de calor en un ambiente sin oxígeno. Los productos finales de este proceso dependen estrechamente de la naturaleza del combustible empleado, la temperatura y presión de operación y de los tiempos de residencia del material en la unidad. Dentro de la gama de productos que se pueden obtener se encuentran:

- Gases compuestos por hidrógeno, monóxido y dióxido de carbono e hidrocarburos
- Líquidos hidrocarbonados
- Residuos carbonosos como coque o alquitrán

Desde el punto de vista de la producción de hidrógeno interesa controlar la reacción para que se produzca un gas de síntesis que posteriormente pueda ser acondicionado mediante un proceso de purificación, buscando altas concentraciones de hidrógeno y monóxido de carbono sin la presencia de otros componentes. Si bien es una tecnología que ha sido usada hace bastante tiempo sigue sin ser una tecnología madura que mantiene aún distintas limitantes técnicas.

Gasificación

La gasificación consiste en una combustión en un ambiente pobre en oxígeno, en la que se obtiene monóxido y dióxido de carbono, hidrógeno y metano, en proporciones diversas según el material a gasificar y el agente gasificante utilizado. El oxígeno se limita generalmente entre un 10 y 50% del estequiométrico y la temperatura oscila entre 700 y 1500 [°C], este proceso se puede aplicar a diversos materiales tanto a la biomasa como el carbón y se encuentra en constante investigación para mejorar el proceso y utilizar materiales considerados como desechos.

La utilización de la gasificación de residuos plásticos son el tema principal de esta memoria y se profundizará y se explicará el proceso de gasificación en los apartados subsiguientes.

2.2.2. CLASIFICACIÓN SEGÚN SOSTENIBILIDAD

La producción de hidrógeno y su utilización como combustible ha apuntado a una dirección en la que la sociedad busca dejar atrás los combustibles fósiles. Si bien la utilización de este nuevo combustible reemplaza a lo que hoy son los combustibles que más contaminan, al ser el hidrógeno un vector energético este también tiene que ser pasar por un proceso de producción, generalmente estos procesos de producción son en base a combustibles fósiles como se explicó en el apartado anterior, es por ello que actualmente el hidrógeno producido se cataloga de tres maneras dependiendo de la procedencia que este tenga para así diferenciar su sostenibilidad, específicamente hacen alusión a la cantidad de CO_2 liberado en su proceso de producción, de acuerdo a esto se tienen tres tipos de hidrógenos:

Hidrógeno verde

Es el hidrógeno más limpio y sostenible, no deja ningún rastro de CO_2 directamente ni ningún tipo de emisión contaminante, tienen como orígenes combustibles no fósiles, como el biogás o biomasa y también del agua, en los procesos de producción intervienen solo fuentes de energía renovable ya sea eólica, hidráulica o solar, generalmente para producir electricidad o calor según el proceso. El proceso insignia del hidrógeno verde sería la electrólisis del agua, pero se vienen estudiando distintos procesos térmicos de emisión 0 en donde se utiliza el biogás o la biomasa.

Los procedimientos para lograr hidrógeno verde aún se encuentran en desarrollo para lograr tecnología competitiva técnica y económicamente, si bien se prevé un futuro prometedor, se estima que aún queda un largo camino por recorrer.

Hidrogeno azul

Es aquel hidrógeno en el que su proceso de producción genera emisiones, pero son capturadas y reutilizadas o almacenadas, es el hidrógeno de mayor proyección actual y se le está dando un uso considerable. Esta designación puede ser adquirida por casi cualquier proceso y fuente, pero es mayormente utilizado en los procesos de conversión de gas natural en las que su emisión de CO_2 no son tan elevadas.

Esta alternativa ha sido la de mayor proyección actualmente, pero sigue siendo económicamente poco atractiva debido al gran aumento de costos que implican los sistemas de captura de emisiones.

Hidrógeno Gris

Se le denomina así al hidrógeno proveniente de procesos de reformado, generalmente de gas natural, en los que no existe una captura de emisiones.

Hidrogeno negro o marrón.

Es el hidrógeno que proviene de procesos de combustión del carbón, es el que contiene mayores índices de emisiones contaminantes y viene siendo de los de más bajo costo. Se considera que la mayor parte del hidrógeno producido hasta la actualidad corresponde a este tipo de hidrógeno

2.3. GASIFICACIÓN

Es aquel proceso termoquímico en la que un material es transformado en syngas (gas de síntesis), esto ocurre mediante la adición de calor en conjunto con un agente gasificante, la reacción de combustión encargada de aportar calor al proceso se lleva a cabo con niveles de oxígeno bajo el estequiométrico para favorecer la generación de ciertos elementos.

El material para gasificar es gran responsable de la calidad del producto que se desee obtener, y el proceso brinda cierta flexibilidad en cuanto a la elección de este, pudiendo ser desde compuestos carbonosos hasta residuos lignocelulósicos, tales como residuos agrícolas o

forestales, también permite la utilización de residuos sólidos municipales (del inglés MSU “Municipal Solid Waste”), siempre y cuando estos tengan un contenido de humedad apropiado para el proceso (normalmente < 40%).

Otro factor importante es el agente gasificante utilizado, este puede ser capaz de mejorar en gran medida la calidad del gas producto, aumentando las cantidades de H_2 y CO . A continuación, un cuadro comparativo que representa los distintos agentes utilizados y sus principales diferencias que se manifiestan en el gas producto lo que influye directamente en la aplicación que este gas combustible tendrá.

Tabla 1: Comparación agentes gasificantes [18]

	Tipo de producto	Aplicación
Aire	De poder calorífico pobre, formación de N_2 .	Investigación, gas para motores de combustión interna, mezcla pobre para síntesis.
Oxígeno	Poder calorífico medio, previene formación de N_2	Gas de síntesis, combustible para industria.
Vapor de agua	Comúnmente en simultaneo con Aire u Oxígeno, poder calorífico medio-alto y altos valores de H_2 y CO .	Gas de síntesis para amoníaco, metanol, gasolinas, etc.

2.3.1. GAS DE SÍNTESIS

El gas de síntesis o “syngas” por sus siglas en inglés, es un gas combustible producido a partir de materiales ricos en carbono, este es compuesto principalmente por hidrógeno (H_2) y monóxido de carbono (CO), pudiendo contener también metano (CH_4), nitrógeno (N_2) o dióxido de carbono (CO_2) entre otros tipos de trasas. Este puede ser obtenido gasificación de distintos materiales carbonosos o bien de los distintos tipos de reformados de hidrocarburos siendo este último el proceso más utilizado a nivel industrial, mientras que la gasificación se encuentra orientada a procesos de recuperación de energía y tratamiento de biomasa o residuos.

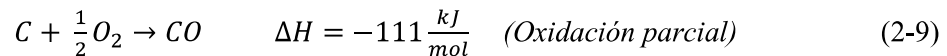
El nombre de este combustible recae principalmente en los usos que se le da, este es utilizado principalmente para la síntesis de distintos compuestos industriales, además de servir como combustible en ciertos escenarios. Dentro de los usos más importantes del syngas se tiene:

- Combustibles para motores de combustión interna o celdas combustible, generalmente se le da uso a gas de síntesis de baja calidad.
- Sucedáneo de combustibles fósiles en centrales eléctricas. Principalmente como sustituto del gas natural.
- Proceso productivo de metanol, se utiliza como sintetizador mediante un proceso catalítico mediante la reacción $CO + CO_2 + H_2 \rightarrow CH_3OH$.
- Proceso productivo de amoniaco, utilizado como sintetizador mediante la reacción de Haber-Bosh.
- Utilizado para obtener hidrocarburos líquidos mediante el proceso Fischer-Tropsch

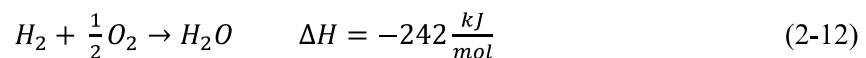
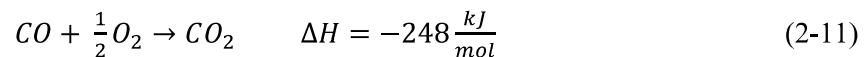
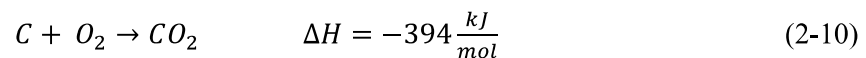
2.3.2. REACCIONES INVOLUCRADAS

Dentro del proceso de gasificación ocurren numerosas reacciones donde el carbono y los hidrocarburos reaccionan de distinta manera dependiendo tanto del agente gasificante como las condiciones físicas del proceso mismo, a continuación, algunas de ellas.

La oxidación parcial del carbono contenido en el material se produce mediante la oxidación térmica de este, esto en presencia de aire u oxígeno puro, desencadenando una reacción exotérmica (2-9).



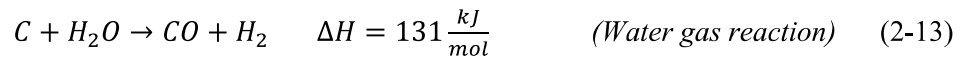
A pesar de darse condiciones de un ambiente pobre en oxígeno para priorizar la gasificación este puede reaccionar con el carbono mediante una reacción de oxidación completa (2-10) además el H_2 y el CO formado en etapas posteriores puede reaccionar con el oxígeno como muestran las reacciones (2-11) y (2-12) generando productos no deseados bajando la calidad del syngas pero aportando calor al proceso dado su carácter exotérmico.



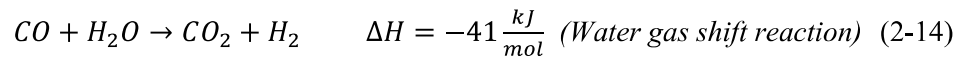
Este tipo de reacciones aportan calor al proceso ya que todas son exotérmicas y contrarresta la disipación energética producida por reacciones endotérmicas que se producen en otros

intervalos. El ajuste estequiométrico es fundamental para priorizar la gasificación y optimizar la producción de CO .

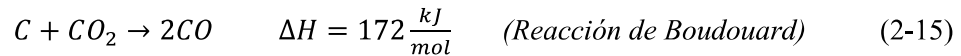
Ya en reacciones de intervalos posteriores se tiene el caso del uso de vapor de agua como agente gasificante, este permite aumentar la producción de H_2 , donde se produce la reacción (2-13).



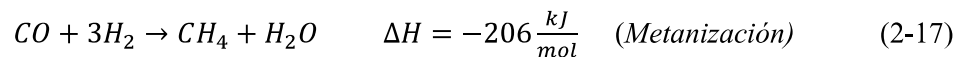
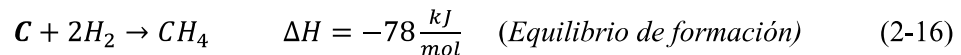
El vapor de agua puede también reaccionar con el CO producido generándose una segunda reacción (2-14) favoreciendo la formación de H_2 .



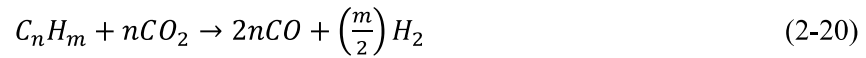
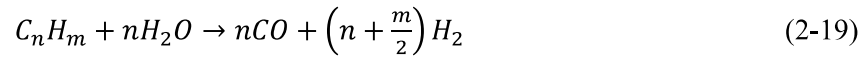
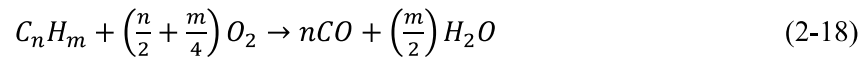
Cuando en el proceso de gasificación se produce CO_2 como subproducto este también reacciona con carbono mediante la “reacción de Boudouard” (2-15) aumentando la producción de CO .



En ciertas condiciones de presión y temperatura se pueden favorecer las reacciones de metanización (8) y (9). El metano como producto en la gasificación es deseable para uso como gas combustible, pero para efectos de priorizar la producción de H_2 , la producción de metano puede no ser lo óptimo. Aun así dentro de este proceso pueden ocurrir las siguientes reacciones.



En este contexto y dependiendo de los combustibles y materiales gasificantes se pueden dar ciertas reacciones de descomposición de los hidrocarburos (2-18) que repercute en la formación de CO , CO_2 , H_2O y H_2 . Además, los hidrocarburos ligeros y el alquitrán se involucran en reacciones de reformado, teniendo reformado con vapor de agua (2-19) y reformado seco con CO_2 (2-20), este tipo de reacciones normalmente son favorecida mediante el uso de catalizadores. También las reacciones de craqueo térmico (2-21) permiten la deshidrogenación de los alquitranes producidos.



Estas son sólo algunas de las más de 100 reacciones que se generan en el proceso de gasificación, el predominio de alguna de ellas dependerá de distintos factores como se han nombrado desde un principio, siendo los más importantes el tipo de material a gasificar, el uso de catalizadores, concentraciones de los distintos materiales, tipo de contacto con el reactor y la conformación de este mismo, además de los siempre factores físicos del procedimiento. Es por ello que el modelamiento de este tipo de procedimientos se torna complicado [19,20]

2.3.3. GASIFICACIÓN DEL PLÁSTICO

Cómo se explicaba anteriormente los plásticos se encuentran conformados por cadenas de polímeros de distinta índole y la gasificación juega el rol de un proceso de despolimerización térmica, en el que se busca romper las cadenas de polímeros hasta llegar a moléculas simples mediante la adición de calor con el fin de obtener H_2 y CO .

Las reacciones involucradas en el proceso de gasificación descritas en los apartados anteriores son generalizadas y también definen el proceso de gasificación de plásticos, pero estos toman un camino que puede diferenciarlos de otros procesos de gasificación convencional.

2.3.3.1. MECANISMO DE GASIFICACIÓN

La gasificación implica varios pasos y reacciones, en el caso de la gasificación convencional (principalmente basados en biomasa) el proceso se separa en etapas bien marcadas; secado, pirólisis, combustión y gasificación para el caso de los plásticos se abordan las mismas etapas, pero bien se puede especificar la parte de combustión como craqueo y reformado, si bien estos procesos tienden a presentar un orden, estos pueden darse de manera simultánea en especial los últimos dos.

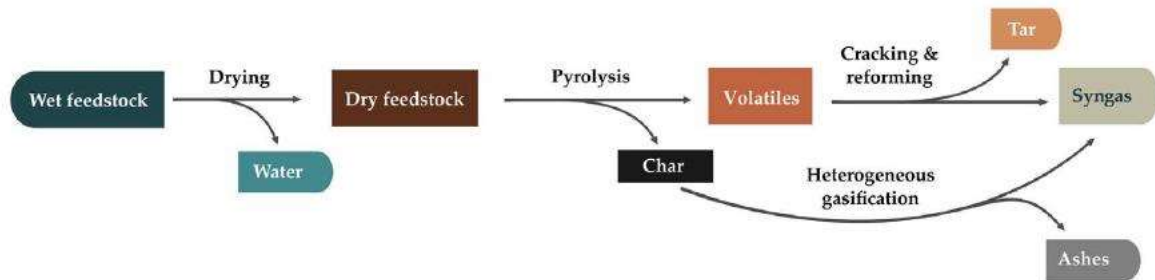


Figura 7: Mecanismo de gasificación del plástico [16]

El secado es el proceso donde se pierde la humedad del material, generalmente los plásticos presentan una humedad en su mayoría superficial, por lo cual este proceso se desarrolla de manera rápida y no juega un papel importante.

Luego al momento de dar comienzo el proceso de pirólisis se dan una serie de reacciones endotérmicas, es donde se producen la mayoría de los volátiles y donde se comienzan a generar los residuos carbonizados. Acá la naturaleza del plástico juega un rol fundamental, la baja conductividad térmica y el resultado pegajoso y viscoso producto de la adición de calor reducen la cinética de degradación térmica, para solucionar esto se necesita un medio que pueda aportar altas tasas de transferencias de calor para evitar la formación de aglomerados.

Ya en la fase gaseosa, continúa la degradación térmica mediante lo que se denomina el craqueo y reformado para el caso de las poliolefinas (LDPE, HDPE, PP, entre otros) se genera una división de estas, la cual se produce mediante escisión aleatoria lo que genera una buena distribución del producto. Si el proceso se realiza a altas temperaturas (sobre 800 [°C]) el proceso tiende a desplazarse hacia la escisión de las cadenas finales [21].

En lo que respecta al proceso final de gasificación ocurren reacciones químicas que tienen derecha relación con el gasificante utilizado, estequiometría y las temperaturas alcanzadas. Acá reacciona el H_2O y CO_2 una vez que ya han tenido lugar las reacciones de oxidación (2-9) – (2-12) esta aporta la energía necesaria para que se den a lugar las reacciones de reformado además de la reacción de Boudouard (2-15).

Es necesario que a este punto se alcancen altas temperaturas para poder generar una gasificación de los productos carbonizados que se han generado y además favorecer a las

reacciones cuya cinética es más lenta. El principal inconveniente de estas temperaturas es la restricción termodinámica en la reacción de WGSR (2-14). En el caso de la gasificación de plástico para mejorar la eficiencia de conversión se han utilizado catalizadores de reformado, principalmente basados en Niquel para el reformado de alquitrán y otros hidrocarburos, mejorando en gran medida la producción de H_2 . [22,23].

En general la gasificación de plásticos con aire como agente gasificante se obtiene un gas de síntesis con valores de poder calorífico que rondan los 6-8 $\frac{MJ}{m^3}$ [24, 25] sirviendo generalmente como combustible, mientras que al utilizar vapor de agua como gasificante se obtiene un gas libre de N_2 con lo que pueden llegar a un poder calorífico de 15 $\frac{MJ}{m^3}$ lo que son valores más cercanos a las aplicaciones de síntesis de sustancias químicas para la industria. [26]

2.3.3.2. TIPOS DE REACTOR UTILIZADOS

El equipo utilizado es de suma importancia para el proceso de gasificación, este aportará características fundamentales al desarrollo del proceso, propiedades tales como tiempo de residencia, temperaturas máximas, presión, control de flujo, entre otros.

A continuación, se presentarán los principales reactores utilizados para la gasificación de plásticos según la literatura estudiada, las ventajas que presentan como también sus limitantes.

- **Reactor de Lecho fluidizado:** FBR según sus siglas en inglés (Fluidized Bed Reactor), este reactor funciona haciendo circular un fluido a través de un material granular a altas velocidades, de manera que el sólido quede suspendido en esta cama fluidizada y así su comportamiento se asemeje al de un fluido mejorando el proceso. Para el caso de la gasificación de plástico se utilizan principalmente lechos fluidizados de tipo burbujeantes y circulantes, dentro de sus características más importantes es que tienen una alta tasa de transferencia de calor y masa, y niveles bajo de producción de alquitrán [27]. Dentro de sus desventajas se encuentran los altos costos de inversión que requieren, limitaciones de tamaño de partícula, tanto en lecho como en alimentación, problemas de desfluidización y arrastre de material sin reaccionar.

Los principales estudios realizados de gasificación de plástico han sido llevados a cabo en reactores de tipo burbujeantes y en general se tiene un alto grado de desarrollo tanto a nivel prototipo como a nivel de plantas operacionales [28,29]

Generalmente se utiliza aire como agente gasificante en estos reactores, si bien esto genera un gas combustible de menor calidad, resulta en muchas ventajas operativas, mejora el proceso autotérmico, disminuye la producción de alquitrán y se comportan de manera más estable ante un régimen de alimentación continua, permitiendo variaciones en la velocidad de alimentación [30].

Un proceso utilizado en estos tipos de reactores es la utilización de lecho fluidizado dual, donde el lecho es soplado con aire y vapor, y además se quema el carbón residual. Esta estrategia fue utilizada en el grupo de Hofbauer llevado a nivel de planta piloto con una alimentación de 15 [Kg/h], pero se presentaron varios problemas, bajo rendimiento del carbón y dificultad para poder mantener el equilibrio térmico entre la combustión y la gasificación [31].

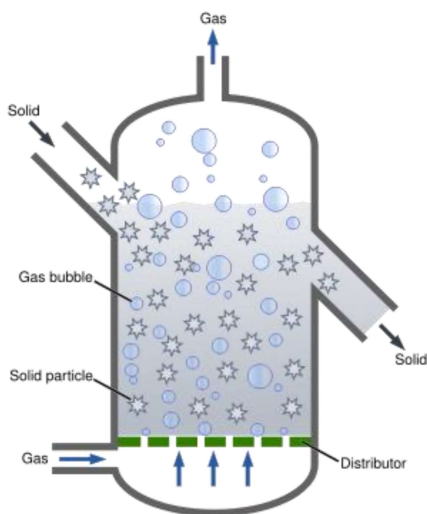


Figura 8: Configuración reactor de lecho fluidizado

- **Reactor de lecho fijo:** Este es el tipo de reactor más utilizado a nivel industrial de procesos, este se constituye principalmente por el cuerpo del reactor y un relleno compacto e inmóvil de sólidos, dispuesto de manera vertical generalmente, son de construcción sencilla debido a que normalmente carecen de piezas móviles para su

funcionamiento. Estos reactores son altamente utilizados en la gasificación de plástico debido a sus ventajas operativas, donde destacan su fácil diseño y operación, además de contar con una baja tasa de inversión necesaria. Mientras que sus limitantes se centran en admitir sólo equipos de pequeña escala, no operar en régimen continuo, baja tasa de transferencia de calor y un limitado contacto gas-sólido.

Alguno de los avances de gasificación de plástico en este tipo de reactores los presentó el equipo de Ahmed et al. Quienes han montado un reactor de lecho fijo de régimen discontinuo para la cogasificación de muestras de madera plástica y poliestireno [32], también se han llevado a cabo varias investigaciones donde se combinan distintos materiales plástico como material de alimentación y adhiriendo además catalizadores, como un reformado de Ni y Al_2O_3 [33], también el grupo de Li et al. Desarrollaron un equipo que lograba funcionar a régimen continuo para la gasificación con vapor de residuos sólidos municipales (RSU), entre otros alcances logrados mediante reactores de lecho fijo [34].

- **Reactor de lecho perforado:** Estos reactores, se usan en reemplazo de los de lecho fluidizado, aquí el gas es introducido a través de un orificio en la base plana ubicada en la parte inferior del reactor, lo que resulta en un movimiento cíclico del sólido dentro del lecho. Dentro del reactor se forman 3 sectores el anillo, el chorro o caño y la fuente, dentro del caño y la fuente las partículas tienden a comportarse de manera fluidizada mientras que para el sector del anillo se forma un lecho más compacto y de poco movimiento, para mejorar este efecto muchas veces la base está conformada por una sección cónica. En la figura 10 se pueden apreciar las diferencias de este mecanismo con el de lecho fluidizado, esta combinación de comportamientos mejora el efecto de fluidización, dado que mantienen las buenas características de transferencias de calor, transferencia de masa, buena mezcla de sólidos y un buen contacto con el gas, y al mismo tiempo se evita la des-fluidización debido a su gran circulación cíclica de sólidos y facilita el manejo de partículas irregulares [35], sus desventajas recaen en la corta residencia de los volátiles dentro del reactor. Inicialmente se utilizaba como materia prima exclusivamente el carbón, pero el proceso se ha extendido de forma de utilizar materias diversas tales como biomasa y residuos plásticos. Debido a estos

avances ahora es utilizado en gran medida en para procesos de pirólisis de biomasa [36].

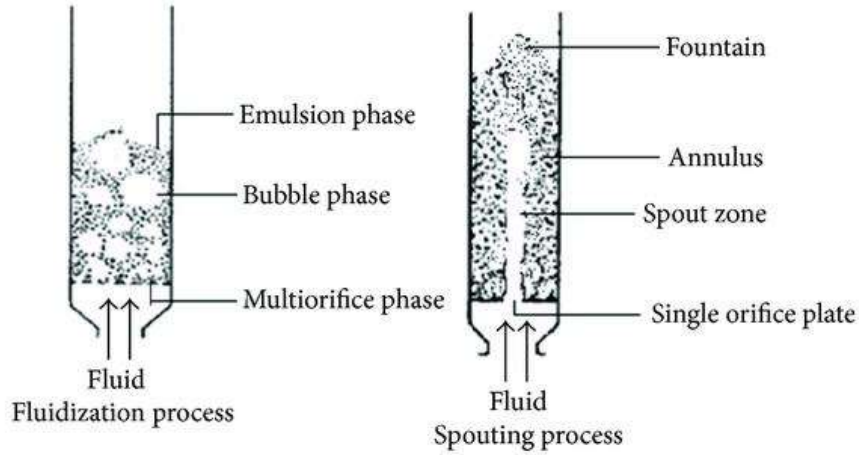


Figura 9: Funcionamiento y comparación reactor de lecho fluidizado y perforado

- **Reactor de plasma:** En este tipo de reactores se ioniza el gas para alcanzar el estado plasmático y se hacen reaccionar con los desechos en un medio oxidante, su principal ventaja son las altas temperaturas alcanzadas, que resulta en un rompimiento completo de los compuestos de alquitrán, además de mejorar en gran medida la eliminación de compuestos nocivos y tóxico, generando con ello un gas de alta calidad [37, 38]. Esta tecnología ha sido poco desarrollada en cuanto a la gasificación de plástico y sólo replicada a pequeña escala debido a su complejidad de ejecución y control.

2.4. COMBUSTIÓN EN MEDIOS POROSOS

La combustión en medios porosos o también denominada combustión filtrada es una tecnología de combustión en la que se hace circular una mezcla de gases reactivos, a través de una matriz porosa completa o parcialmente inerte, la cual es altamente conductora y radiativa con lo que se logran altas tasas de transferencia de calor a través de esta.



Figura 10: Medio poroso inerte (esferas) en proceso de combustión.

Esta matriz porosa tiene distintos tipos de presentación, una matriz de múltiples esferas en contacto unas con otras, sólidas o huecas, también en forma de espumas con distintos grados de porosidad. Debido a las características que se requieren para los procesos de combustión es que los cerámicos son idóneos para esta aplicación. Los más utilizados son Alúmina (Al_2O_3), Carburo de silicio (SiC) y Zirconia (ZrO_2).

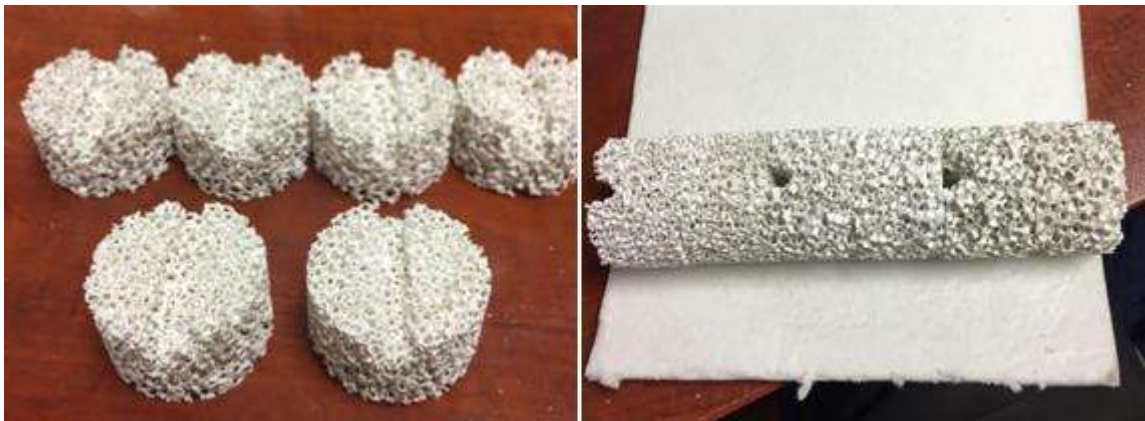


Figura 11: Espumas cerámicas utilizadas como medio poroso.

Esta tecnología se presenta como una combustión heterogénea donde se presenta un medio sólido como matriz porosa junto con una fase gaseosa en la que ocurre la reacción que genera una llama confinada, con todo lo anterior se busca eliminar las desventajas que se presentan en la combustión con llama libre presente en un proceso de combustión homogéneo, tales como

elevadas emisiones, grandes tamaños de quemadores, bajo rango de variación en potencia térmica, problemas de estabilidad de flama, poco rango de variación de relación de equivalencia, entre otros.

2.4.1. PROCESO DE COMBUSTIÓN EN MEDIOS POROSOS

La combustión en medios porosos inertes, MPI de ahora en adelante, ocurre dentro de los intersticios del material, donde se produce altas tasas de transferencia de calor entre la matriz sólida y los gases reactantes, este intercambio continuo permite que parte de la energía sea almacenada en el sólido poroso, este proceso de recuperación de calor es debido a que la extensa superficie interna del sólido hace más eficiente la transferencia de calor entre los reactantes combustibles y el medio sólido, además la dispersión del flujo de reactantes a través del medio aumenta la difusión efectiva y la transferencia de calor entre las 2 fases presentes [39].

Una vez que esté establecida la mezcla de reactantes dentro del reactor y se le de ignición se formará un frente de llama en la zona, que tiene la característica de ser un frente móvil, pudiendo desplazarse según las condiciones de operación. De acuerdo con lo anterior se pueden distinguir dos modos de operación:

- Estacionario: El desplazamiento del frente se mantiene inmóvil debido a la manifestación de dos efectos contrarios como lo son la tasa de inyección de combustible y la velocidad de propagación del frente.
- Transiente: Existe un desplazamiento del frente de llama, la velocidad de este dependerá tanto comportamiento cinético de las reacciones de combustión, las características térmicas del medio sólido y condicionado además por la velocidad de inyección de combustible. Lo anterior también determinará el sentido de este frente, aguas arriba o aguas abajo.

Se pueden distinguir claramente tres zonas una vez comienza el proceso de combustión dentro del MPI. La primera zona es la que se encuentra anterior al frente de llama donde los gases reactantes se mezclan y se precalientan aprovechando el calor brindado por el medio poroso. La segunda zona es una zona estrecha donde ocurre el frente de llama, aquí se desarrollan las reacciones químicas de combustión la que se mueve con el flujo de reactantes (aguas abajo) o en contra de ellos (aguas arribas), aquí se libera una gran cantidad de entalpía que es

aprovechada por el medio poroso y conducida a la primera zona de precalentamiento. La tercera zona es la que se encuentra posterior al frente y es donde se encuentran los gases de combustión, los cuales intercambian calor activamente con el MPI por convección. Estas zonas se pueden observar a continuación en la figura 13.

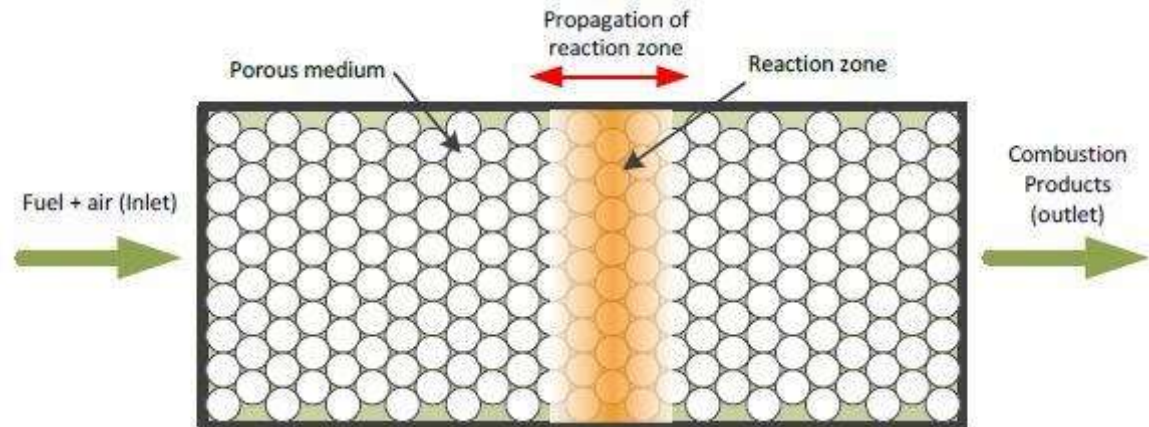


Figura 12: Zonas establecidas en combustión en MPI. Fuente: Pablo Requena, memoria de titulación, 2017.

El caso ideal en este tipo de procesos se da cuando se emplean condiciones operacionales de modo que el frente de llama se desplaza aguas abajo, mismo sentido que el flujo de reactantes, esto hará que los gases producidos por la zona de combustión fluyan a través del MPI aumentando la temperatura de este, permitiendo la recirculación de la entalpía sensible de los gases gracias a la convectividad que allí se produce. Al mismo tiempo el MPI moviliza esta energía aguas arriba gracias a su alta conductividad, es decir en el sentido contrario a la inyección de reactante lo que transferirá calor a la premezcla antes de que este entre a la zona de combustión y se produzca el precalentamiento, generando así un exceso de entalpía en la zona de reacción química junto con un aumento de temperatura en el frente de llama que puede superar la temperatura adiabática pudiendo así operar en régimen super adiabático.

2.4.2. CONDICIONES SÚPER ADIABÁTICAS Y EXCESO DE ENTALPÍA

El exceso de entalpía en la combustión describe la entalpía entregada por productos de combustión a los reactivos para incrementar su temperatura, consiguiendo efectos considerables en velocidades de combustión, límites de inflamabilidad y temperaturas de

llama, lo que produce un incremento en la eficiencia de la combustión y disminuciones en emisiones contaminantes incluso con combustibles de bajo poder calorífico [40]

La cantidad de energía entregada durante el proceso de combustión está dada por:

$$\int_{T_0}^{T_f} C_p dT = Q_c + Q_a = H_f - H_0 \quad (2-23)$$

Donde

T_f : Temperatura final

T_0 : Temperatura inicial

Q_c : Calor liberado por la conversión de energía química

Q_a : Calor sensible añadido por el precalentamiento del aire

H_f : Entalpía del estado final

H_0 : Entalpía del estado inicial

En sentido práctico con exceso de entalpía se logra una mayor T_f debido al Q_a añadido en el proceso de precalentamiento, generando así una mayor diferencia de entalpías de estado final.

En la figura 14 se grafica el concepto de recirculación de calor en una combustión con exceso de entalpía. Donde en la línea punteada se observa el proceso de combustión normal en condiciones adiabáticas, mientras que en línea continua se presenta la variación de entalpía con recuperación de calor gracias a un proceso de precalentamiento que se da en la combustión en MPI, permitiendo de esta forma un aumento de la entalpía consiguiendo condiciones super adiabáticas.

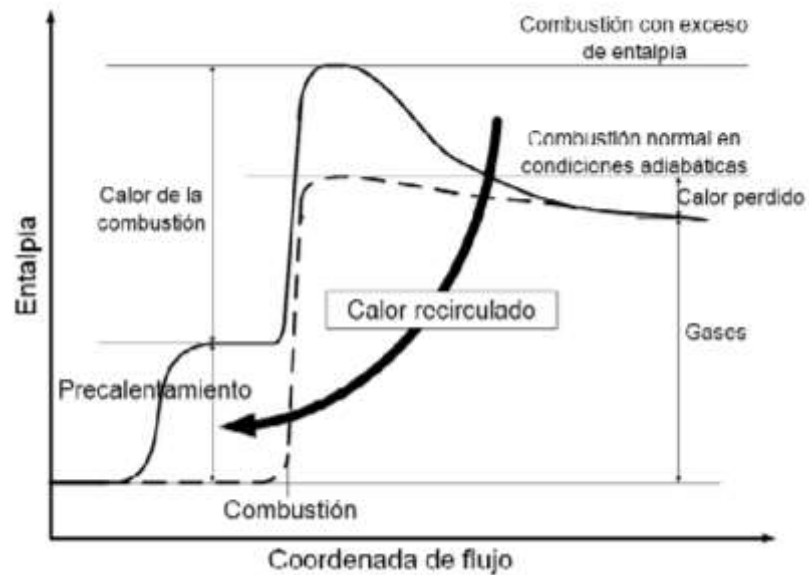


Figura 13: Proceso de combustión con exceso de entalpía. Fuente: Revista "Tecnológicas" adaptado de Tanaka, 2001.

El concepto super adiabático se refiere al desarrollo de un sistema en condiciones por sobre el límite adiabático. Un proceso adiabático se define como aquel sistema termodinámico que no intercambia calor con su entorno, es decir que no se manifiesta ningún flujo de energía térmica entre las fronteras del sistema. Este se da en un escenario específico (volumen o presión constante) y sin pérdidas de calor, donde toda la energía química liberada se transfiere a los gases productos, en este punto se alcanza una temperatura máxima teórica denominada temperatura de llama adiabática. Al trabajar con exceso de entalpía, el sistema logra alcanzar temperaturas mayores a la llama adiabática y se logran las condiciones de un régimen super adiabático.

3. DISEÑO EXPERIMENTAL

3.1. CONTEXTO

Cómo se mencionó al inicio de este trabajo, en un principio se busca comprobar experimentalmente el proceso de gasificación de PVC y Tetra brik. Pero debido a la pandemia acontecida en nuestro país es que los laboratorios de la Universidad se vieron en la obligación de cerrar y no se pudo llevar a cabo dicha experiencia, viendo modificado el tema inicial de este trabajo hacia un eje de modelación numérica.

A continuación, se plantea la situación física y el proceso de modelamiento numérico. Se debe mencionar que de igual forma se llevaron a cabo procedimientos experimentales con los que hubo un acercamiento al procedimiento de gasificación y al reactor MPI de los que se deja registro en el ANEXO 2.

3.2. DISEÑO DE SISTEMA INTEGRADO

En esta investigación se busca modelar la situación física de dos reactores conectados en serie. En el primero de ellos se produce una primera gasificación de residuos plásticos. Posterior a este reactor se encuentra un secador y separador de gases que cumple el rol de separar el gas producto, conservando los cuatro compuestos principales que caracterizarán a cada combustible. Luego del separador se acopla un segundo reactor el cual considera un reactor de medios porosos con una matriz inerte, este reactor utilizará los gases producto del primer reactor sumado a distintos aportes de CH_4 y realizará un segundo proceso de gasificación donde se analizará la posible mejora del proceso en conjunto y los niveles de producción de hidrógeno. El boceto que modela el sistema queda representado en la figura 14.

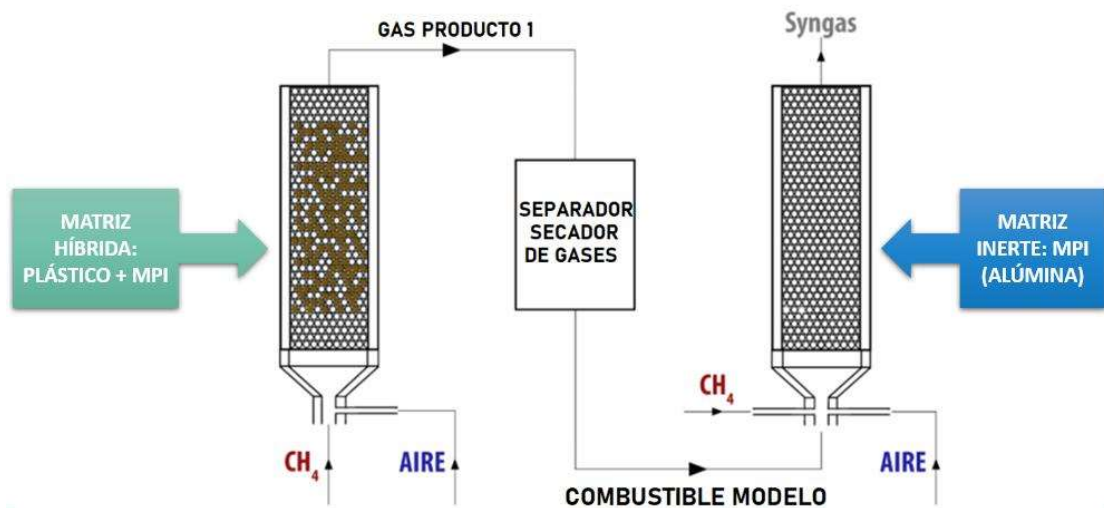


Figura 14: Reactores en serie de la situación modelada, Memoria de titulación 2021, Guillermo Mayne

3.2.1. PRIMER REACTOR

Para los casos estudiados en el primer reactor se produce el proceso de gasificación de los residuos plásticos, en específico en reactores de medios porosos con una matriz híbrida.

Aquí es donde se depositan los distintos residuos plásticos que serán gasificados, dichos procesos fueron ya documentados, se citaran distintas fuentes con el fin de aportar variación en lo que respecta a residuos utilizados, elementos como catalizadores, tipos de matriz y lo principal que es manejar distintos tipos de concentraciones de gases productos. Estos gases producto de distintas concentraciones serán los combustibles base con el cual se generarán las distintas simulaciones.

A continuación, se detallan la procedencia y las concentraciones de los “combustibles modelo” a utilizar.

3.2.1.1. COMBUSTIBLE MODELO

Para este caso se considerarán productos de gasificación de investigaciones previas de gasificación en reactores de medios porosos. En específico se tomarán dos memorias de titulación de ex alumnos de la Universidad Técnica Federico Santa María.

Se utilizarán 2 muestras de productos de cada experiencia teniendo así 4 tipos de combustibles modelo a utilizar.

“Modelación de un reactor para la producción de continua de gas de síntesis a partir de biogás y polietileno”. Hans Gonzalez P. 2014

En este caso se utiliza un reactor de medios porosos, que contiene espumas cerámicas de alúmina templada en zirconio con una porosidad cercana al 84%, en el que se realiza un proceso de gasificación aplicado a pellet de polietileno de alta densidad con aire como gasificante.

En este caso se considerarán dos relaciones equivalencias para la combustión híbrida teniendo las siguientes concentraciones en los gases productos medidos mediante cromatografía gaseosa:

Tabla 2: Fracciones molares de gasificación de polietileno de alta densidad-biogás

Relación de eq. ϕ	X_{H_2} [%]	X_{CO} [%]	X_{CO_2} [%]	X_{CH_4} [%]
0,8	6,56	8,96	13,80	2,00
1,6	11,73	14,00	16,00	0,50

El resto del gas producto lo comprenden generalmente el N_2 , restos de O_2 , H_2O en forma de humedad y distintas trazas y elementos no detectables. Para efectos de generar una simulación prolija, de manera conceptual este gas producto se somete a un secador y separador de gases a modo de dejar los 4 compuestos principales como se explicó anteriormente.

De acuerdo con lo anterior, se presenta como combustible modelo de la siguiente forma:

Tabla 3: Fracciones molares para combustible modelo 1

Relación de eq. ϕ	X_{H_2} [%]	X_{CO} [%]	X_{CO_2} [%]	X_{CH_4} [%]
0,8	20,95	28,61	44,05	6,39
1,6	27,78	33,15	37,89	1,18

El segundo estudio citado para la recopilación de gases productos es:

“Estudio teórico experimental de la combustión de polietileno-propano en medios porosos”. Philippe Gentillón M. 2012.

Para este estudio se utiliza nuevamente un reactor de medios porosos, en este caso se utilizan esferas de alúmina de 5,6 [mm] con el que se logra un 40% de porosidad, se agrega pellets de polietileno como material gasificante generando así una matriz porosa híbrida, se utiliza aire como agente gasificante y propano como gas combustible.

Se desarrolla el experimento utilizando una relación de equivalencia desde 1,0 hasta 1,7. Se tomarán dos puntos referenciales teniendo lo siguiente:

Tabla 4: Fracciones molares de gasificación de polietileno-propano

Relación de eq. ϕ	X_{H_2} [%]	X_{CO} [%]	X_{CO_2} [%]	X_{CH_4} [%]
1,2	5,02	7,74	3,69	1,33
1,6	12,21	17,21	4,82	1,85

Al igual que en el caso anterior se considerarán estas concentraciones como totales y se omite los gases inertes y trazas menores quedando:

Tabla 5: Fracciones molares para combustible modelo 2

Relación de eq. ϕ	X_{H_2} [%]	X_{CO} [%]	X_{CO_2} [%]	X_{CH_4} [%]
1,2	28,23	43,53	20,76	7,48
1,6	33,83	47,69	13,35	5,13

3.2.2. REACTOR DE MEDIOS POROSOS INERTE

El segundo reactor es un reactor de medios porosos inertes el cuál será simulado numéricamente, conceptualmente este se encontrará conectado directamente al reactor previo y se le inyectará metano y aire en la medida que se requiera para efectos de análisis que serán presentados más adelante.

El equipo utilizado para esta representación se basa en el reactor dispuesto en el Laboratorio de Termodinámica del Departamento de Ingeniería Mecánica de la Universidad Técnica Federico Santa Marí con el cual también se generó la experiencia experimental previa.

Este está compuesto por una matriz inerte de esferas de Alúmina (Al_2O_3) con un diámetro aproximado de 0,56 [cm] y una porosidad del 40%, las características térmicas de estas se pueden apreciar en la tabla 6.

Tabla 6: Propiedades térmicas de alúmina

Propiedad	Unidad	
Temperatura máxima en aire	°C	1900
Conductividad térmica a los 20 [°C]	$10^6 K^{-1}$	8
Conductividad Térmica a los 1000 [°C]	$Wm^{-1}K^{-1}$	20-30
Coefficiente de expansión térmica (20 - 1000) [°C]	$Wm^{-1}K^{-1}$	5-6
Resistencia al estrés térmico	K	100
Calor específico	$Jkg^{-1}K^{-1}$	0,9-1
Emisividad a los 2000 K	—	0,28

3.2.2.1. PARÁMETROS DE VARIACIÓN Y CONTROL

En este reactor se tendrán distintos parámetros de variación de los que dependerá el funcionamiento de la posterior modelación y el desarrollo del análisis, donde los principales son:

- Número de Peclet (Pe)

Número adimensional que representa la estabilización y la propagación de llama en un medio poroso

$$Pe = \frac{S_l d_m C_p \rho}{k} \quad (3-1)$$

Donde:

S_l = Velocidad laminar de llama

d_m = diametro del espacio hueco del material poroso

C_p = calor específico de la mezcla combustible

ρ = Densidad de la mezcla

k = Conductividad térmica de la mezcla

Se ha registrado un Pe crítico, $Pe_{crit} = 65$ con lo cual un Pe mayor al crítico indica una propagación de la llama, mientras que uno Pe menor al crítico implica la extinción de la llama. [42]

- Porosidad (ε)

Hace referencia al porcentaje de volumen de espacio vacío que existe en un volumen general, en este caso entre el reactor y las esferas de alúmina. El valor para este caso corresponde a una porosidad del 40%.

$$\varepsilon = \frac{V_{vacío}}{V_{total}} = \frac{V_{reactor} - V_{Alúmina}}{V_{reactor}} \quad (3-2)$$

- Relación de equivalencia (ϕ)

Es el cociente entre la relación combustible/oxidante real respecto a la relación combustible/oxidante estequiométrica. En este caso al utilizar aire como agente gasificante puede traducirse como la cantidad de aire estequiométrico con respecto al aire real utilizado en el proceso de combustión dentro del reactor.

$$\phi = \frac{\frac{n_{comb}}{n_{ox}}}{\frac{n_{comb}}{n_{ox,est}}} = \frac{V_{aire}}{V_{aire,est}} \approx \frac{1}{\lambda} \quad (3-3)$$

- Velocidad de filtración (u_f)

Es la relación entre la velocidad de entrada de la mezcla combustible y la porosidad del medio. A mayor velocidad de filtración se tendrá una mayor velocidad del frente de llama y viceversa.

$$u_f = \frac{u_{gas}}{\varepsilon} = \frac{q}{A_{trans}} \frac{1}{\varepsilon} \quad (3-4)$$

Donde:

$q =$ Caudal de entrada de mezcla combustible

$A_{trans} =$ Área transversal al caudal

- Velocidad de frente

Esta velocidad se calcula empíricamente mediante la observación del registro de temperaturas máximas registrado a lo largo del reactor, en base a la diferencia de tiempo transcurrido entre las temperaturas máximas.

La estabilización o propagación de la llama depende de parámetros como la velocidad de entrada del flujo de la mezcla, los coeficientes de transferencia de calor que se generen y las propiedades térmicas de la fase sólida. Estos parámetros también se relacionan estrechamente con el número de Peclet enunciado anteriormente.

4. DESARROLLO DEL MODELO

El desarrollo del modelo numérico de esta investigación está realizado por medio del programa PREMIX un programa informático desarrollado en base a un código de FORTRAN. Este busca computar las especies y los perfiles de temperatura de llamas laminares, estabilizadas en un estado laminar y que se propagan libremente. Para efectos de esta investigación se utiliza una versión modificada por Alexei Saveliev para dar solución a la combustión en medios porosos.

4.1. PREMIX MODIFICADO

Esta versión modificada de PREMIX es desarrollada en Intel Fortran Power Station 4.0 busca dar solución a una combustión en medios porosos inertes. Este consta de rutinas y subrutinas que dan solución a un sistema de ecuaciones diferenciales mediante el método de diferencias finitas. La mayor parte del análisis y desarrollo posterior se basa en el documento de R. J. Kee et al. "PREMIX: A Fortran Program for Modeling" 1998 [41] y las modificaciones posteriores realizadas por Alexei Saveliev.

La base de datos utilizada para la combustión se basa en el archivo de formato CHEMKIN, GRI-Mech 3.0 que consiste en un mecanismo optimizado para modelar la combustión de metano, contiene 325 reacciones elementales, junto con sus respectivos coeficientes de velocidad y parámetros termoquímicos para las 53 especies involucradas en ellas.

Los datos de entrada basados en este GRI-Mech para poder ser utilizados por PREMIX se almacenan en los siguientes archivos:

- ❖ `chemp.inp`: El cual contiene la base de dato de las reacciones (y sub-reacciones) químicas involucradas junto con toda la cinemática química de la combustión para un combustible en específico.
- ❖ `therm.dat`: Este archivo almacena los datos termoquímicos del proceso de combustión.

- ❖ tran.dat: Este contiene tiene los parámetros necesarios para calcular los coeficientes de transportes que se utilizan en el código, tales como viscosidad, conductividad, difusividad, entre otros.
- ❖ premix.inp: Es el último archivo de control de datos, en el cual se manejan las sentencias de orden junto con los parámetros de dimensión y composición volumétrica de reactantes.

Finalmente, los archivos convergen en la carpeta Premix_Self_Solid_2T y se da a ejecutar premix.exe, con lo cual se simula el proceso de combustión en medios porosos, lo hace de forma unidimensional, transiente y sin considerar el equilibrio térmico local entre el sólido y el gas. Los archivos de salida y resultados del proceso de modelación serán explicados en un apartado posterior.

Se destaca que en archivo chemp.inp se encuentran las constantes que interactúan en la formación y extinción de las especies químicas ocurridas en el proceso de combustión, estas constantes son las que conforman la ecuación de Arrhenius (4-1). Esta expresión demuestra la dependencia de la cinética de una reacción química respecto a la temperatura con que se lleva a cabo y rige en gran medida la cinética química de este modelo.

$$k_f = k_f(T) = AT^\alpha \exp\left(\frac{-E_A}{RT}\right) \quad (4-1)$$

Donde:

k_f = Constante de Arrhenius o velocidad específica de reacción

AT^α = Factor de frecuencia de las colisiones con A y α constantes empíricas

E_A = Energía de activación

4.1.1. ECUACIONES INVOLUCRADAS

Las ecuaciones que gobiernan este proceso consideran un proceso constante, isobárico, con una propagación de la llama quasi-unidimensional y se tienen las siguientes:

- Ecuación de continuidad

$$\frac{\partial(\dot{M})}{\partial x} = \frac{\partial(\epsilon\rho v)}{\partial x} = 0 \quad (4-2)$$

- Ecuación de energía fase gaseosa

$$\varepsilon C_p \rho_g v \frac{\partial T_g}{\partial x} = \varepsilon \frac{\partial}{\partial x} \left([k_g + (C_p \rho_g) D_{ax}] \frac{\partial T_g}{\partial x} \right) - \varepsilon \sum_k \dot{\omega}_k h_k W_k - \varepsilon \sum_k \rho_g Y_k V_k C_{p,k} \frac{\partial T_g}{\partial x} - h_v (T_g - T_s) \quad (4-3)$$

- Ecuación de energía fase sólida

$$-(1 - \varepsilon) C_p \rho_s u \frac{\partial T_s}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left([k_e + k_R] \frac{\partial T_s}{\partial x} \right) - \beta (T_s - T_0) - h_v (T_g - T_s) \quad (4-4)$$

- Ecuación de conservación de especies químicas

$$\rho_g v \frac{\partial Y_k}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho_g Y_k V_k) = \omega_k \dot{W}_k \quad (4-5)$$

- Ecuación de estado

$$\rho = \frac{p \bar{W}}{RT} \quad (4-6)$$

Donde

\dot{M} = flujo másico

ε = porosidad

ρ = densidad

$v = u_f$ = velocidad de filtración

C_p = calor específico a presión constante

$k_{g,e,R}$ = conductividad térmica del gas, efectiva y radiante

D_{ax} = coeficiente de dispersión en el eje x

$\dot{\omega}$ = velocidad de reacción

h = entalpía específica

W = peso molecular

Y = fracción másica

V = velocidad de difusión

u = velocidad frente de combustión

β = coeficiente de intercambio efectivo de calor con el exterior

Subíndice k = "k" especie

Subíndice $g = \text{gas}$

Subíndice $s = \text{sólido}$

Subíndice $0 = \text{condición inicial}$

Se asume que existe un equilibrio térmico al comienzo con lo que para estas ecuaciones se consideran las siguientes condiciones de borde:

En la entrada $x = 0$

$$T_g = T_s = T_0 \quad ; \quad Y = Y_{k,0} \quad (4-7)$$

En la salida $x = L$

$$\frac{\partial Y_k}{\partial x} = 0 \quad ; \quad T_g = T_s = T_0 \quad ; \quad \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{\beta(T-T_0)}{\varepsilon C_{p,g} \rho_g v - (1-\varepsilon) C_{p,s} \rho_s u} \quad (4-8)$$

Se ha de tener en cuenta las relaciones que dan forma a la velocidad de difusión (V) se compone de tres términos

$$V_k = \mathcal{V}_k + \mathcal{W}_k + V_c \quad (4-9)$$

A su vez la velocidad de difusión ordinaria \mathcal{V}_k se aproxima cómo:

$$\mathcal{V}_k = D_k \frac{1}{X_k} \frac{\partial X_k}{\partial x} \quad (4-10)$$

Donde X_k es fracción molar y D_k es coeficiente de difusión promedio, que es definido en función de términos de difusión binaria:

$$D_k = \frac{1-Y_k}{\sum_j^k \frac{X_j}{D_{ij}}} \quad (4-11)$$

Se tiene también la velocidad de difusión térmica \mathcal{W}_k incluida sólo para especies de bajo peso molecular tales como H, H_2 y He

$$\mathcal{W}_k = \frac{D_k \Theta_k}{X_k} \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial x} \quad (4-12)$$

Donde Θ_k es una relación de difusión térmica, donde el signo de este hará que las especies de menor peso molecular se transporten de regiones de temperatura baja a alta.

El último término V_c es la velocidad de corrección y se incluye para que las fracciones másicas sumen la unidad (o su equivalente $\sum_k Y_k V_k = 0$), esta formulación es recomendada por Coffe y Heimer [42] de acuerdo con su investigación en modelos de transporte en flamas de hidrógeno y metano.

4.1.2. DESARROLLO Y DISCRETIZACIÓN NUMÉRICA

Para resolver el sistema de ecuaciones que gobierna este sistema se utilizarán aproximaciones mediante diferencias finitas aplicadas a un sistema de ecuaciones algebraicas. Estas aproximaciones serán aplicadas en una malla no uniforme con puntos enumerados desde el borde frío “1” hasta el borde caliente “j”.

En el término convectivo el usuario tiene la elección de utilizar diferencias adelantadas (Eq 4-13) o diferencias centradas (Eq 4-14), aproximada por ambos tipos de diferencia la derivada de la temperatura para queda de la siguiente forma:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_j \approx \left(\frac{T_j - T_{j-1}}{x_j - x_{j-1}}\right) \quad (4-13)$$

$$\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_j \approx \left(\frac{h_{j-1}}{h_j(h_j+h_{j-1})}T_{j+1} + \frac{h_j-h_{j-1}}{h_j h_{j-1}}T_j - \frac{h_j}{h_{j-1}(h_j+h_{j-1})}T_{j-1}\right) \quad (4-14)$$

Donde $h_j = x_{j+1} - x_j$

Generalmente con la aproximación mediante diferencias adelantadas, se genera cierta dispersión cuando se utiliza una malla gruesa y esto tiende a extender la solución y hacer que la convergencia mediante método de Newton sea menos sensible a la estimación inicial. Sin embargo, en zonas de alto gradiente esta difusión se vuelve relativamente poco importante cuando la solución ya ha progresado a mallas más finas.

No obstante, para una malla dada, las aproximaciones por diferencias adelantadas son menos precisa que una centrada, por lo tanto, generalmente se escogen las diferencias centradas para que la solución converja sin problemas.

En el caso segunda derivada que contiene la ecuación de conservación de energía, el termino se aproxima utilizando diferencias adelantadas de la siguiente forma:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\gamma \frac{\partial T}{\partial x} \right) \approx \left(\frac{2}{x_{j+1} - x_{j-1}} \right) \left[\gamma_{j+1/2} \left(\frac{T_{j+1} - T_j}{x_{j+1} - x_j} \right) - \gamma_{j-1/2} \left(\frac{T_j - T_{j-1}}{x_j - x_{j-1}} \right) \right] \quad (4-15)$$

Donde $\gamma = [k_g + (c_p \rho_g) D_{ax}]$ y los coeficientes $j \pm 1/2$ evaluados utilizando el promedio de las variables dependientes entre los puntos de la malla.

El termino difusivo en la ecuación de conservación de especies se aproxima de manera similar a pesar de contener el termino de velocidad de difusión, para ello primero hay que aproximar la velocidad de difusión ordinaria (Eq. 4-10) y difusión térmica (Eq. 4-11), se ha de tener en cuenta que la fracción molar (X_k) de una especie puede ser 0, por lo que se evitan dificultades formando $Y_k \mathcal{V}_k$ y $Y_k \mathcal{W}_k$, esto queda de la forma:

$$(Y_k \mathcal{V}_k)_{j+\frac{1}{2}} = - \left(\frac{W_k D_{km}}{\bar{W}} \right)_{j+1/2} \left(\frac{X_{k,j+1} - X_{k,j}}{x_{j+1} - x_j} \right) \quad (4-16)$$

$$(Y_k \mathcal{W}_k)_{j+\frac{1}{2}} = - \left(\frac{W_k D_{km} \Theta_k}{\bar{W} T} \right)_{j+1/2} \left(\frac{T_{j+1} - T_j}{x_{j+1} - x_j} \right) \quad (4-17)$$

Una vez evaluadas las velocidades de difusión en los puntos medios de la malla, la velocidad de corrección se calcula a partir de la expresión completa de la siguiente manera:

$$V_c = - \sum_{k=1}^K Y_k (\mathcal{V}_k + \mathcal{W}_k) \quad (4-18)$$

Luego el término completo de difusión $V_k = \mathcal{V}_k + \mathcal{W}_k + V_c$ se evalúa de la forma:

$$\frac{\partial (\rho A Y_k V_k)}{\partial x} = \frac{(\rho A Y_k V_k)_{j+1/2} - (\rho A Y_k V_k)_{j-1/2}}{x_{j+1/2} - x_{j-1/2}} \quad (4-19)$$

4.1.3. METODOLOGÍA E INTERPRETACIÓN DE ARCHIVOS DE

SALIDA

Para ejecutar el programa que modelará el proceso se tiene que ingresar en la carpeta Premix_Self_Solid_2T y luego en la carpeta Files. Aquí se encontrarán los archivos de entrada e información, que contienen los datos termoquímicos y de transporte anteriormente señalados (chemp.inp, term.dat, tran.dat) una vez verificado que esta carpeta cuente con todas las bases de datos necesarias se pueda dar comienzo a la simulación, primero hay que dirigirse al archivo “premix.inp”.

Acá se encuentran distintos parámetros de variación de la simulación, donde dentro de los más importantes se encuentran:

- ❖ METHOD OPTIONS
 - ABSOLUTE TOLERANCE FOR THE NEWTON ITERATION
 - RELATIVE TOLERANCE FOR THE NEWTON ITERATION

Estos tienen que ver con la tolerancia absoluta y relativa para finalizar las iteraciones del método de Newton considerando cuando se ha dado con la convergencia.

- ❖ GRID PARAMETERS

Controlan las variables de la malla utilizada en el método de resolución, acá se puede variar el número de malla en distintas zonas de esta, inicio, centros y fines de intervalos, estimativos del espesor del frente, entre otros.

- ❖ FLAME DEFINITION

En esta sección se pueden abarcar distintas variables de flama como la presión o la velocidad del frente y también variables de simulación dentro del reactor tales como el flujo a través de este, pérdidas térmicas aproximadas, diámetros de las esferas del material inerte.

- ❖ REACTANTS

Este apartado corresponde a las fracciones molares de reactantes donde se pueden variar las concentraciones de las distintas especies de entrada en la reacción siempre y cuando estén contenidas en el GRI-Mech 3.0.

❖ ESTIMATED PRODUCTS – INTERMEDIATES

Estos parámetros aportan rapidez de convergencia mediante la estimación de productos.

A continuación, se enlistan los pasos a seguir para la correcta ejecución del programa y revisión de archivos de salida son:

- Una vez que se verifican todos los archivos se ejecuta Premix_Self_Solid_2T.mdp, se abrirá una ventana de Microsoft Developer Studio como se ve en la figura 15 y se da inicio a la simulación presionando Go (F5).

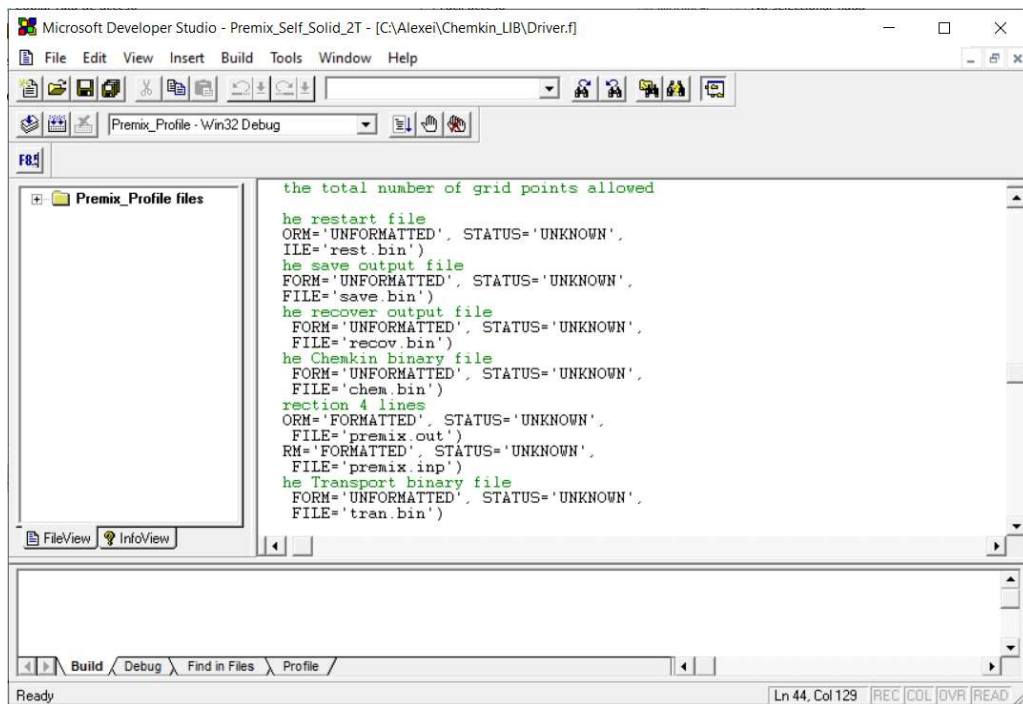


Figura 15: Ventana de ejecución para simulación

- Se abrirá una ventana de comandos de window, correspondiente a premix.exe este desarrollará los cálculos y aproximaciones hasta que el método converja.
- Una vez que el software haya terminado de iterar se procede a cerrar la ventana y dirigirse a la carpeta Files y se debe de haber generado el archivo “premix.out”. Este archivo corresponde a la solución numérica del perfil de temperaturas y productos de la reacción de la simulación.

- A continuación, se ha de verificar que la iteración haya convergido de manera correcta yendo al final del archivo premix.out donde se espera encontrar la sentencia “TWOPNT: SUCCESS. BOUNDARY VALUE PROBLEM SOLVED.” Cómo se observa en la figura 16.

```

TWOPNT: REFINE DID NOT PRODUCE A NEW MESH.
TWOPNT: TOTAL CPU TIME.
          1:18.4 MINUTES : SECONDS . FRACTION
TWOPNT: PERCENT OF TOTAL CPU TIME.
          GRID      GRID  ACTIVITY          EVENT
          POINTS   TOTAL TIMSTP NEWTON REFINE  FUNCTN JACOBN  SOLVE  OTHER
          246     100.0   .0  100.0   .0    10.6  88.7   .6    .1
TWOPNT: AVERAGE CPU TIME.
          GRID      AVERAGE SECONDS          NUMBER OF EVENTS
          POINTS   FUNCTN  JACOBN  SOLVE  FUNCTN  JACOBN  SOLVE
          246     .260   34.77   .015   32     2     31
TWOPNT: SUCCESS. BOUNDARY VALUE PROBLEM SOLVED.
  
```

Figura 16: Ventana premix.out con mensaje de salida de una correcta simulación.

- En caso contrario se podrán leer distintas sentencias de falla, correspondiendo generalmente a la no convergencia del resultado. Y se debe simular nuevamente utilizando parámetros distintos o bien haciendo variar el archivo save.bin explicado más adelante

Asumiendo que la simulación ha convergido a continuación se caracterizarán los archivos de salida y la función que cumplen.

- rest.bin: Entrega una solución binaria de la última simulación sirve de punto de partida para próximas iteraciones y así facilitar su convergencia.

- save.bin: Si bien no es un archivo de salida, se genera a partir de “rest.bin”. Para poder utilizar la solución generada por el “rest.bin” se debe renombrar el archivo como “save.bin” para que así sea reconocido por el software y comience a iterar desde el punto condicionado por el archivo.
- premix.out: Es el archivo primordial de salida, es aquel que entrega toda la información cuantificable y analizable. Consiste en un archivo de texto en el encontraremos múltiples recuadros con los distintos pasos de iteración que se realizaron hasta que la solución converja, por lo tanto, se debe de tomar en cuenta el último recuadro que serían las soluciones de las ecuaciones, en este se tienen los distintos valores alcanzados, donde los que contienen información necesaria para este trabajo son:
 - Ts: Temperatura del sólido
 - Tg: Temperatura del gas
 - USOL: Velocidad del frente
 - Concentraciones: Distintas concentraciones de cada uno de los productos de donde se tiene H_2 , O_2 , H_2O , C_nH_n , CO_2 , CO , NO_x y muchos productos más que generalmente son considerados como trazas.

Finalmente se copia y organiza la información útil de este archivo en una planilla Excel en donde se gráfica y analiza la información de temperatura y concentraciones.

4.2. VALIDACIÓN DEL MODELO

Para validar el modelo utilizado y verificar que los valores obtenidos se encuentran dentro del rango normal se realiza una medición que se busca alcanzar resultados ya validados de otra experiencia.

Para este caso se utilizará como referencia el paper de investigación científica “Chemical structures of methane-air filtration combustion waves for fuel-lean and fuel-rich conditions” [43].

A continuación, en el Gráfico 2 se presentan los resultados obtenidos para un proceso de combustión filtrada (combustión en medios porosos) de metano con una relación de

equivalencia de 0,2 a 2,6 simulados mediante el software PREMIX. Seguido de ello se muestra el gráfico 3 con los resultados de la investigación numérica-experimental del mismo proceso de combustión filtrada ya mencionado.

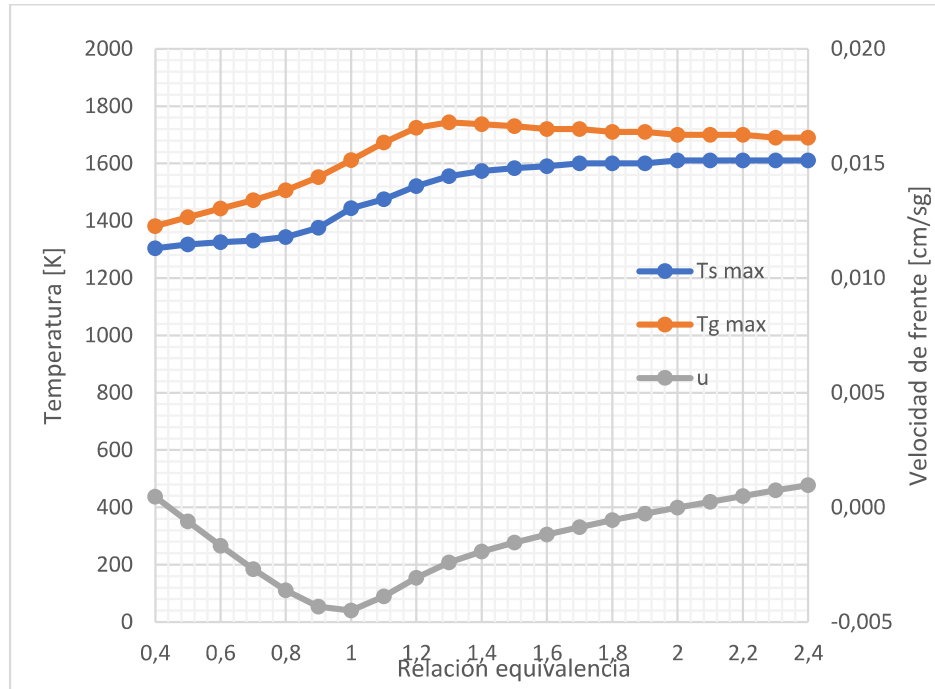


Gráfico 2: Temperatura de sólido - gas y velocidad de frente de llama, en combustión filtrada (MPI) simulado mediante premix.

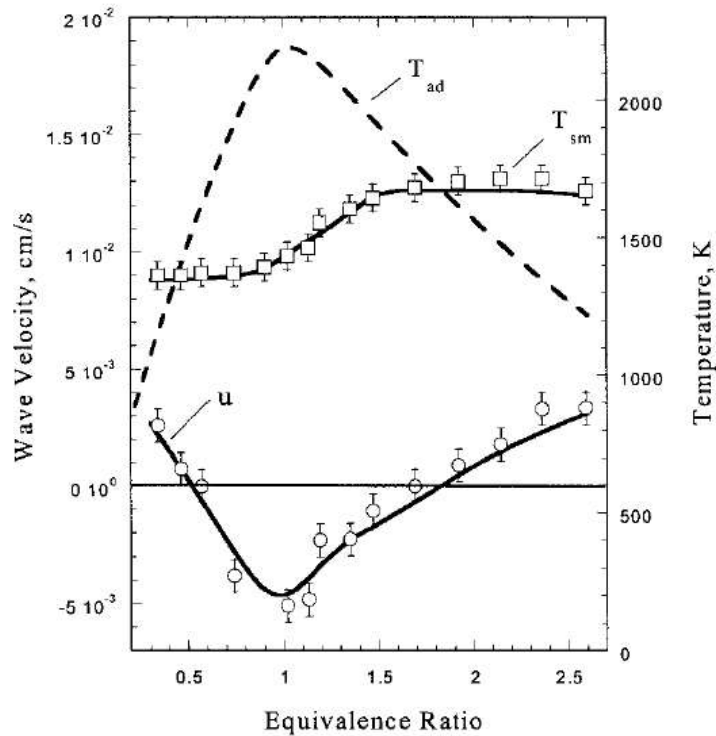


Gráfico 3: Temperatura máxima en sólido (T_{sm}), Temperatura adiabática (T_{ad}) y Velocidad de frente (u) en “Chemical structures of methane-air filtration combustion waves for fuel-lean and fuel-rich conditions” [43]

A simple vista se puede verificar que la tendencia de la temperatura máxima de los sólidos se comporta de manera similar, lo mismo ocurre en el caso de la velocidad del frente que cambia de sentido en relaciones de equivalencia casi idénticas.

En específico la máxima temperatura del sólido alcanzada en la simulación del trabajo propio se alcanza desde un $\phi = 2,0$ con 1610 [$^{\circ}\text{K}$] (con una leve baja hacia $\phi = 1,4 - 1,5$) manteniéndose casi invariante al final de las mediciones, para el caso de la investigación de referencia se logran alcanzar temperaturas cercanas a los 1700 [$^{\circ}\text{K}$] desde $\phi = 1,6$ de manera numérica y experimental, esto coincide además con el punto en donde la combustión pasa a un régimen súper adiabático estable.

Para el caso de los productos generados en este proceso se analizarán los 4 más importantes H_2 , CO , CO_2 y CH_4 teniendo lo siguiente.

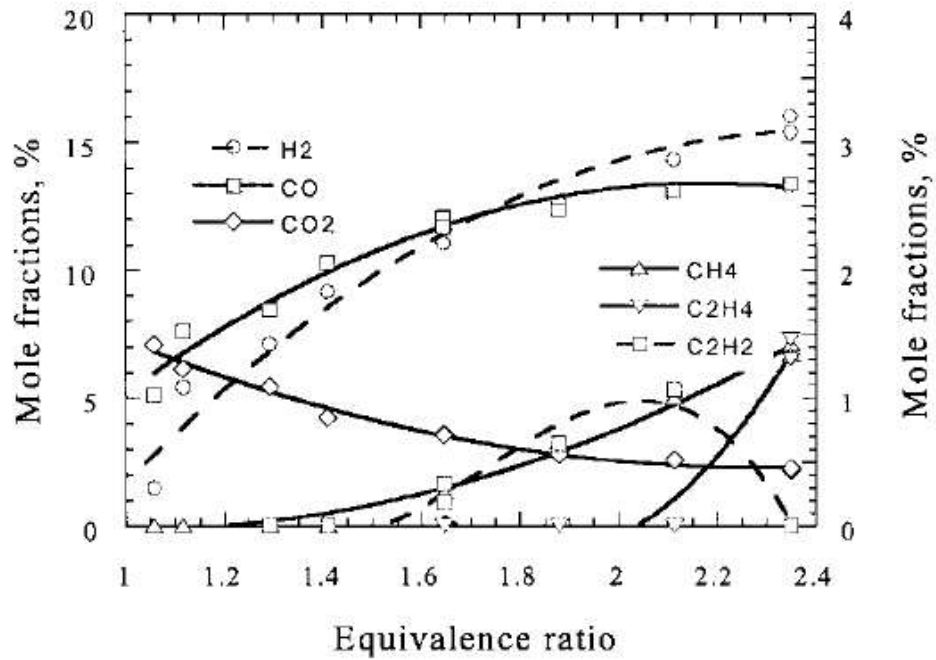


Gráfico 4: Fracciones molares de gases productos, experimentales y numéricos en "Chemical structures of methane-air filtration combustion waves for fuel-lean and fuel-rich conditions" [43]

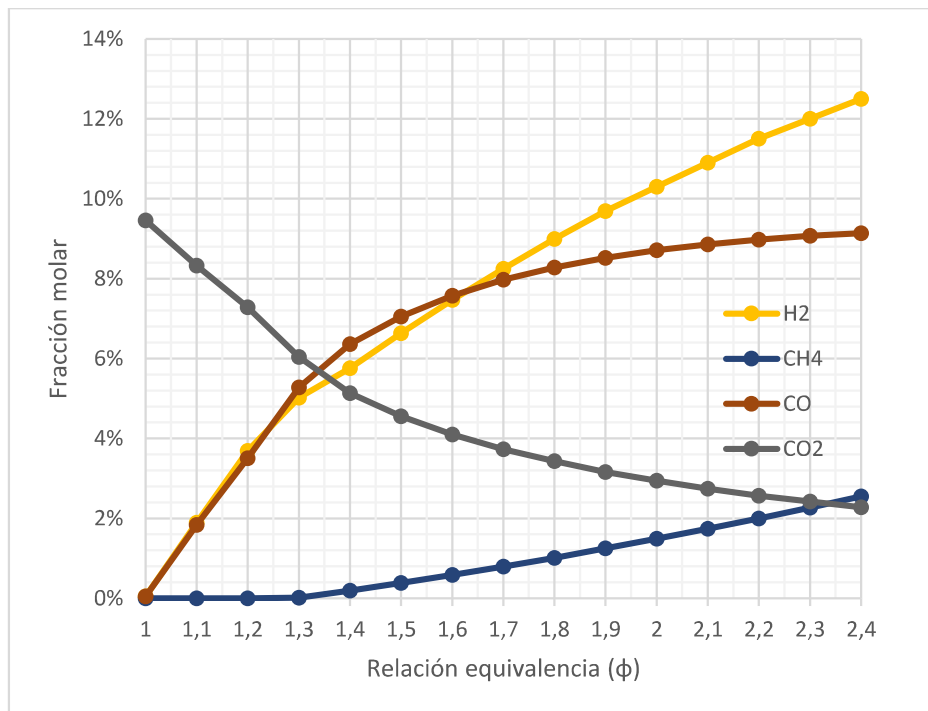


Gráfico 5: Fracciones molares de gases producto en validación numérica de combustión filtrada de metano

Nuevamente se aprecia que las tendencias en ambos gráficos son similares, en lo que respecta a la curva de H_2 la tendencia se mantiene similar, pero se presenta un desplazamiento del 2% - 3% a lo largo de ella encontrando valores mayores en la investigación citada. Para el caso del CO este desplazamiento de curva es un poco mayor generando diferencias del 4% aproximadamente, para estas dos curvas y se mantiene la intersección entre los ϕ 1,6 y 1,7.

El CH_4 en ambos casos parte con un porcentaje nulo, no pudiendo apreciarse de manera clara el seguimiento de este en la fuente citada, mientras que para la simulación propia se mantiene nula para luego ascender de manera lineal hasta el 2% un valor cercano al que se alcanza en la simulación citada la cual tiende a acercarse al 2% desde abajo.

Para el CO_2 existe una diferencia de casi 3% en un principio, mayor para la simulación propia, pero que en un final ambas convergen a un porcentaje similar rondando los 2-3%

En general los valores obtenidos por la simulación propia concuerdan en gran manera con los valores numéricos y experimentales que se presentan en la fuente citada, teniendo diferencias mínimas, donde la mayor diferencia se puede encontrar en la temperatura que no supera el 5% de diferencia en su punto máximo entre valores de simulación numérica y que para el caso de concentraciones de productos van de diferencias del 1 al 3%. Dichas diferencias pueden generarse por diferentes factores ya sea, configuraciones de la simulación como parámetros de entrada, condiciones de convergencia, formatos de malla, entre otros.

Debido a lo anterior es que se considerará el modelo utilizado y las mediciones obtenidas como válidas dentro de los parámetros establecidos de la misma fuente utilizada debido a la utilización del mismo software, PREMIX.

4.3. SIMULACIÓN SENSIBILIDAD DE COMPONENTES

Previa a la simulación numérica de combustibles modelo, se realiza un análisis de sensibilidad para ejemplificar y evaluar de qué manera afectan las distintas concentraciones de los componentes de los combustibles y que, en este caso, se encuentren presentes en productos de gasificación. En esta simulación se utiliza como gas combustible base metano CH_4 al cual se adiciona de manera gradual H_2 , CO o CO_2 partiendo desde 0 hasta un 90% en relación con el metano (sólo se alcanzó 80% para el caso del CO_2), haciendo variar paralelamente las relaciones de equivalencias desde $\phi = 1.1$ a $\phi = 2.7$.

Se realizan un total de 150 simulaciones (135 efectivas) haciendo variar las concentraciones de entrada de acuerdo con lo descrito anteriormente. Las fracciones molares utilizadas para los reactantes de cada simulación y los gráficos de resultados obtenidos de ella se adjuntan en el ANEXO 1.

4.3.1. ADICIÓN DE H_2

- Temperatura

La temperatura tiende a disminuir a medida que aumenta la concentración de H_2 , esta disminución se presenta de manera constante hasta con concentraciones de 70% de H_2 aproximadamente, una vez se sobrepasa esta concentración la disminución de temperatura tiende a ser más brusca. Las disminuciones rondan una baja de 200 – 300 °C lo que representa una baja del 11 al 19% dependiendo del ϕ .

- Concentraciones de productos de gasificación:

H_2 : La concentración de hidrógeno en el gas producto aumenta en todos sus puntos, excepto en la mezcla más cercana a la estequiométrica. En concentraciones previas menores al 50% el aumento específico de H_2 en el gas producto presenta un aumento cercano al 25% (aumentos de 2-3% en el producto total) mientras que para concentraciones cercanas al 80-90% de H_2 en el combustible hay aumentos de hasta el 100%, correspondientes a aumentos del 8% al 12% en el producto total dependiendo del ϕ .

CO : La concentración de monóxido disminuye fuertemente con un comportamiento constante en los distintos niveles de concentración llegando al final con bajas del 65-80% que representan bajas del 4-7% de concentraciones de CO en el producto total, para mezclas cercanas a la estequiométrica este valor disminuyen.

CO_2 : Para el dióxido de carbono las concentraciones tienen a ser más altas en mezclas cercanas a la estequiometría y por ende allí presentan una gran baja de concentración a medida que aumentan las concentraciones previas de H_2 , que disminuye del 8 al 2 % del total del producto correspondiente a un 67% específico.

- Otros Componente:

H_2O : La adición de H_2 presenta un claro aumento de agua en los productos bastante similar en todos sus rangos de concentraciones previas, presentando un aumento más pronunciado en concentraciones mayores a 80%.

C_2H_2 : El acetileno tiende a aparecer en productos de gasificación de mezclas ricas que pueden ser del orden del 1-2% del producto total, con el aumento de H_2 disminuye estas concentraciones de manera considerable.

4.3.2. ADICIÓN DE CO

- Temperatura

La adición de CO presenta menores disminuciones de temperatura que en la adición de H_2 , se presenta un comportamiento más uniforme, con bajas que sólo se logran apreciar concentraciones sobre el 70% en mezclas más ricas, presentado bajas mayores en mezclas cercanas a la estequiometría.

- Concentraciones de productos de gasificación:

H_2 : La concentración de hidrógeno disminuyen a medida que se aumenta la concentración previa de CO , si bien en un principio con concentraciones de 30% CO en la mezcla previa sólo disminuyen un 8-10% éstas bajas aumentan a un 70% cuando la concentración previa de CO llega a un 90% esta disminución acelerada se logra observar más claramente con concentraciones mayores a 50%, excepto para mezclas cercanas a la estequiometría donde se presenta poca variación.

CO : Aumento sostenido del CO en todos los rangos de concentraciones previas llegando a aumentos del 100-200% para mezclas ricas y poca variación en mezclas cercanas a la estequiometría.

CO_2 : Hay un aumento que se presenta lineal para concentraciones previas de CO menores al 40-50% dependiendo del ϕ , una vez se supera esta concentración previa los aumentos de CO_2 se vuelven considerables.

- Otros Componente:

H_2O : Hay una gran disminución de contenido de agua en el producto a medida que se aumenta la concentración previa de CO , llegando a tener disminuciones de casi el 70%.

C_2H_2 : Las concentraciones previas de CO al igual que el H_2 tiende a disminuir las concentraciones finales de acetileno en las mezclas ricas.

4.3.3. ADICIÓN DE CO_2

- Temperatura:

La adición de CO_2 parece no presentar una incidencia directa en la temperatura alcanzada en el proceso, sólo se puede apreciar una pequeña baja de temperatura cuando concentraciones superan el 60-70% de CO_2 , que se acentúa más en mezclas ricas.

- Concentraciones de productos de gasificación:

H_2 : Se presentan grandes bajas en las concentraciones de H_2 , mayores que las observadas con la adición de CO . Una inclinación considerable con disminuciones mayores al 70% y sólo midiendo hasta una concentración previa del 80% de CO_2 .

CO : Existe un aumento de concentraciones de CO pero que tienen un punto máximo cercano al 60% de concentración previa de CO_2 y luego se mantiene para finalmente comenzar a descender.

CO_2 : Aumento considerable de concentraciones finales de CO_2 legando a valor 10 veces mayores, por sobre el 40% inicial ya se comienza a observar un aumento más acelerado.

- Otros Componente:

H_2O : El contenido final de agua presenta poca variación, mientras que en mezclas más ricas se presenta un aumento poco perceptible, en las cercanas a la estequiometria se presenta una baja, ambas cercanas al 5%. Hay un punto donde convergen cercano al 40-50% de concentración previa en el que posterior a este se presenta una disminución más clara.

C_2H_2 : Al igual que en los casos anteriores la presencia de CO_2 también provoca una disminución de concentración de acetileno en el producto.

4.4. SIMULACIÓN CON COMBUSTIBLE MODELO.

Cómo se explicó anteriormente para esta modelación se utilizaron dos combustibles modelos, que son gases producto de un proceso previo de gasificación en un reactor de medios porosos. Cada uno de estos combustibles modelos son productos de una gasificación de residuos utilizando diferentes relaciones de equivalencia, 0,8 y 1,6 para el primero (de ahora en adelante Combustible Modelo 1.1 y Combustible Modelo 1.2), 1,2 y 1,6 para el segundo (de ahora en adelante Combustible Modelo 2.1 y Combustible modelo 2.2).

La utilización de estos combustibles modelos se complementa con la utilización de metano, donde las proporciones utilizadas para cada medición son las siguientes:

- 75% CH_4 – 25% Combustible Modelo
- 50% CH_4 – 50% Combustible Modelo
- 25% CH_4 – 75% Combustible Modelo
- 100% Combustible Modelo

Todo este proceso se aplica para distintas relaciones de equivalencia, partiendo desde una mezcla pobre con exceso de aire con un $\phi = 0,4$ para ir adicionando combustible en manera progresiva hasta llegar a una mezcla rica en combustible con un $\phi = 2,4$.

Teniendo en cuenta todas estas variaciones se tienen un total de 176 simulaciones a realizar. Para lograr esta malla de mediciones se controlan las fracciones molares que ingresan como reactantes, para esto basta con generar las fracciones correspondientes a cada una de la mezcla requerida, tomando en cuenta su relación de equivalencia y proporción del metano junto con los componentes del combustible modelo.

Las concentraciones de entrada para cada una de las simulaciones se encuentran adjuntas en el ANEXO 3.

4.4.1. ARCHIVOS DE SALIDA Y CONSOLIDADO DE SOLUCIONES

De acuerdo con la estructura que se obtiene en el archivo premix.out en la que se consideran los valores mencionados en el punto 4.1.3., se extrae la información contenida en la última matriz de resultados y se traslada a una planilla Excel para ser legible y manipulable. Este paso se realiza para cada una de las distintas relaciones de equivalencia y se almacena en un solo archivo.

premix.out: Bloc de notas

Archivo Edición Formato Ver Ayuda

NEWTON: SUCCESS, THE SOLUTION:

#	X	Ts	Tg	V	RHD	USOL	H2	H	O	O2	OH	H2O	NO2	H2O2	C	CH	CH2	CH2(S)	CH3
1	0.00	3.081E+02	3.081E+02	2.441E+01	1.056E-03	5.613E-04	1.180E-02	1.428E-23	3.586E-20	1.629E-01	1.611E-23	6.382E-11	1.441E-14	1.874E-14	1.665E-33	2.310E-41	9.598E-32	1.241E-36	2.762E-16
2	.44	3.081E+02	3.081E+02	2.441E+01	1.056E-03	5.613E-04	1.180E-02	3.695E-23	9.277E-20	1.629E-01	4.168E-23	3.727E-14	4.850E-14	4.308E-33	5.993E-41	2.483E-31	1.241E-36	7.146E-16	1.868E-15
3	.89	3.081E+02	3.081E+02	2.441E+01	1.056E-03	5.613E-04	1.180E-02	5.418E-24	3.168E-20	1.629E-01	1.077E-23	4.272E-10	9.645E-14	1.255E-13	8.502E-33	1.069E-37	3.558E-31	1.693E-35	1.868E-15
4	1.33	3.081E+02	3.081E+02	2.441E+01	1.056E-03	5.613E-04	1.180E-02	1.455E-23	1.882E-20	1.629E-01	2.014E-23	1.185E-09	2.495E-13	3.246E-13	1.918E-34	2.808E-36	1.542E-31	6.690E-35	4.808E-15
5	1.78	3.081E+02	3.081E+02	2.441E+01	1.056E-03	5.613E-04	1.180E-02	3.938E-23	3.694E-21	1.629E-01	1.699E-22	2.860E-09	6.456E-13	8.999E-13	1.473E-33	3.103E-36	1.325E-31	2.203E-34	1.291E-14
6	2.22	3.082E+02	3.082E+02	2.441E+01	1.056E-03	5.613E-04	1.180E-02	1.131E-22	1.259E-21	1.629E-01	1.182E-21	7.399E-09	1.670E-12	2.173E-12	2.829E-33	3.188E-36	1.050E-31	7.049E-34	3.442E-14
7	2.67	3.082E+02	3.082E+02	2.442E+01	1.055E-03	5.613E-04	1.180E-02	3.271E-22	4.176E-22	1.629E-01	8.184E-21	1.914E-08	4.322E-12	5.623E-12	1.180E-32	3.304E-35	3.754E-32	2.989E-33	9.217E-14
8	3.11	3.084E+02	3.083E+02	2.442E+01	1.055E-03	5.613E-04	1.180E-02	1.180E-21	6.382E-23	1.629E-01	5.677E-20	4.953E-08	1.118E-11	1.455E-11	3.189E-32	1.246E-35	5.220E-31	2.690E-32	2.475E-13
9	3.56	3.086E+02	3.085E+02	2.444E+01	1.054E-03	5.613E-04	1.180E-02	4.547E-21	5.219E-22	1.629E-01	3.939E-19	1.282E-07	2.893E-11	3.764E-11	5.210E-33	2.290E-35	9.504E-30	4.242E-31	6.657E-13
10	4.00	3.091E+02	3.089E+02	2.447E+01	1.053E-03	5.613E-04	1.180E-02	2.312E-20	3.852E-21	1.629E-01	2.728E-18	3.316E-07	7.486E-11	1.415E-33	1.812E-34	1.724E-28	7.703E-30	1.791E-12	1.179E-12
11	4.44	3.099E+02	3.095E+02	2.452E+01	1.051E-03	5.613E-04	1.180E-02	1.376E-19	2.632E-20	1.629E-01	1.879E-17	8.579E-07	1.937E-10	2.519E-10	2.513E-32	1.456E-34	3.167E-27	1.426E-28	4.813E-12
12	4.89	3.114E+02	3.108E+02	2.462E+01	1.047E-03	5.613E-04	1.180E-02	8.909E-19	1.815E-19	1.629E-01	1.282E-16	2.228E-06	5.013E-10	6.537E-10	1.754E-30	7.067E-34	5.787E-26	2.626E-27	1.021E-11
13	5.33	3.143E+02	3.131E+02	2.480E+01	1.039E-03	5.613E-04	1.180E-02	5.990E-18	1.275E-18	1.629E-01	8.689E-16	5.743E-06	1.298E-09	1.686E-09	1.159E-38	2.701E-33	1.043E-24	4.777E-26	3.462E-11
14	5.78	3.195E+02	3.173E+02	2.514E+01	1.025E-03	5.613E-04	1.180E-02	4.896E-17	9.150E-18	1.629E-01	5.613E-15	1.480E-05	3.366E-09	4.957E-09	4.950E-32	3.513E-33	1.841E-23	8.546E-25	9.293E-11
15	6.22	3.291E+02	3.253E+02	2.577E+01	9.999E-04	5.613E-04	1.182E-02	2.847E-16	6.666E-17	1.628E-01	3.541E-14	3.844E-05	8.751E-09	1.125E-08	2.127E-25	1.414E-33	3.161E-22	1.501E-23	2.523E-10
16	6.67	3.471E+02	3.404E+02	2.697E+01	9.554E-04	5.613E-04	1.184E-02	2.052E-15	4.843E-16	1.628E-01	2.093E-13	9.946E-05	2.291E-08	2.895E-08	1.267E-31	1.944E-32	5.256E-21	2.602E-22	7.071E-10
17	7.11	3.811E+02	3.693E+02	2.926E+01	8.808E-04	5.613E-04	1.192E-02	1.631E-14	3.373E-15	1.626E-01	1.125E-12	2.573E-04	6.076E-08	7.403E-08	7.579E-38	5.643E-33	8.421E-20	4.478E-21	2.126E-09
18	7.56	4.476E+02	4.246E+02	3.360E+01	7.669E-04	5.613E-04	1.211E-02	1.690E-13	2.133E-14	1.622E-01	5.277E-12	6.656E-04	1.647E-07	1.871E-07	1.688E-35	1.859E-30	1.286E-18	7.597E-20	1.715E-09
19	7.78	5.066E+02	4.683E+02	3.712E+01	6.942E-04	5.613E-04	1.232E-02	7.939E-13	6.332E-14	1.618E-01	1.262E-11	1.113E-03	2.875E-07	3.054E-07	1.754E-29	4.534E-29	6.460E-18	4.063E-19	1.565E-08
20	8.00	5.896E+02	5.296E+02	4.199E+01	6.136E-04	5.613E-04	1.270E-02	4.925E-12	2.254E-13	1.610E-01	3.805E-11	1.914E-03	5.197E-07	5.098E-07	6.580E-25	1.635E-27	3.707E-17	2.344E-18	6.656E-08
21	8.11	6.430E+02	5.677E+02	4.503E+01	5.723E-04	5.613E-04	1.300E-02	1.460E-11	1.460E-11	1.626E-01	5.225E-11	2.552E-03	7.127E-07	6.666E-07	5.530E-30	1.476E-26	1.102E-16	6.540E-18	6.072E-08
22	8.22	7.030E+02	6.113E+02	4.851E+01	5.312E-04	5.613E-04	1.342E-02	4.812E-11	1.674E-12	1.590E-01	9.253E-11	3.444E-03	9.884E-07	8.795E-07	1.867E-34	1.738E-25	3.940E-16	1.972E-17	1.846E-07
23	8.33	7.690E+02	6.606E+02	5.245E+01	4.913E-04	5.613E-04	1.401E-02	1.747E-10	3.683E-12	1.577E-01	1.739E-10	4.687E-03	1.379E-06	1.107E-06	1.420E-32	2.931E-24	1.810E-15	6.992E-17	1.991E-07
24	8.39	8.040E+02	6.873E+02	5.460E+01	4.720E-04	5.613E-04	1.439E-02	3.489E-10	1.344E-11	1.577E-01	2.584E-10	5.493E-03	1.631E-06	1.348E-06	1.377E-31	1.432E-23	4.433E-15	1.318E-16	2.649E-07
25	8.44	8.400E+02	7.155E+02	5.686E+01	4.532E-04	5.613E-04	1.484E-02	7.052E-10	2.940E-11	1.567E-01	3.792E-10	6.458E-03	1.929E-06	1.559E-06	4.329E-30	7.520E-23	1.147E-14	2.750E-16	3.783E-07
26	8.50	8.760E+02	7.451E+02	5.925E+01	4.349E-04	5.613E-04	1.539E-02	1.426E-09	6.504E-11	1.556E-01	5.623E-10	7.613E-03	2.278E-06	1.806E-06	4.590E-26	4.188E-22	3.084E-14	6.056E-16	5.599E-07
27	8.56	9.142E+02	7.761E+02	6.176E+01	4.172E-04	5.613E-04	1.604E-02	2.851E-09	1.431E-10	1.549E-01	6.774E-10	8.995E-03	2.678E-06	2.491E-06	5.898E-25	2.255E-21	8.426E-14	1.394E-15	8.176E-07
28	8.61	9.520E+02	8.086E+02	6.439E+01	4.002E-04	5.613E-04	1.682E-02	5.573E-09	3.801E-10	1.528E-01	1.402E-09	1.065E-02	3.130E-06	2.418E-06	1.781E-27	2.208E-20	2.294E-13	3.342E-15	1.233E-06
29	8.67	9.902E+02	8.424E+02	6.718E+01	3.837E-04	5.613E-04	1.776E-02	1.057E-08	6.424E-10	1.509E-01	2.283E-09	1.263E-02	3.627E-06	2.789E-06	1.735E-26	6.171E-20	6.132E-13	8.269E-15	1.882E-06
30	8.72	1.029E+03	8.778E+02	7.000E+01	3.678E-04	5.613E-04	1.881E-02	1.938E-08	1.290E-09	1.486E-01	3.769E-09	1.499E-02	4.169E-06	3.200E-06	1.534E-25	2.973E-19	1.596E-12	2.087E-14	2.892E-06
31	8.78	1.067E+03	9.148E+02	7.312E+01	3.524E-04	5.613E-04	2.021E-02	3.445E-08	2.497E-09	1.459E-01	6.294E-09	1.782E-02	4.766E-06	3.642E-06	1.249E-24	1.355E-18	4.044E-12	5.337E-14	4.453E-06
32	8.81	1.086E+03	9.339E+02	7.471E+01	3.449E-04	5.613E-04	2.098E-02	4.577E-08	3.454E-09	1.444E-01	8.216E-09	1.943E-02	5.098E-06	3.868E-06	3.541E-24	2.879E-18	6.426E-12	6.651E-14	5.549E-06
33	8.83	1.105E+03	9.536E+02	7.635E+01	3.375E-04	5.613E-04	2.182E-02	6.063E-08	4.754E-09	1.427E-01	1.079E-08	2.121E-02	5.463E-06	4.092E-06	9.985E-24	6.095E-18	1.019E-11	1.411E-13	6.928E-06
34	8.86	1.124E+03	9.737E+02	7.804E+01	3.302E-04	5.613E-04	2.274E-02	8.026E-08	6.326E-09	1.409E-01	1.426E-08	2.315E-02	5.873E-06	4.211E-06	8.818E-23	1.221E-17	1.618E-11	2.338E-13	8.538E-06
35	8.89	1.144E+03	9.945E+02	7.979E+01	3.230E-04	5.613E-04	2.375E-02	1.064E-07	8.951E-09	1.389E-01	1.982E-08	2.529E-02	6.343E-06	4.517E-06	8.814E-23	2.746E-17	1.257E-11	3.843E-13	1.088E-06
36	8.92	1.165E+03	1.019E+03	8.190E+01	3.146E-04	5.613E-04	2.505E-02	1.481E-07	1.293E-08	1.363E-01	2.698E-08	2.803E-02	6.992E-06	4.733E-06	2.745E-22	6.676E-17	4.438E-11	7.004E-13	1.401E-05
37	8.94	1.177E+03	1.032E+03	8.399E+01	3.059E-04	5.613E-04	2.575E-02	1.755E-07	1.559E-08	1.348E-01	3.222E-08	2.951E-02	7.370E-06	4.826E-06	5.157E-22	1.051E-16	5.860E-11	9.538E-13	1.601E-05
38	8.95	1.188E+03	1.045E+03	8.491E+01	3.064E-04	5.613E-04	2.650E-02	2.085E-07	1.883E-08	1.344E-01	3.874E-08	3.198E-02	7.791E-06	4.907E-06	9.777E-22	1.665E-16	7.760E-11	1.305E-12	1.930E-05
39	8.97	1.198E+03	1.058E+03	8.524E+01	3.023E-04	5.613E-04	2.729E-02	2.483E-07	2.277E-08	1.318E-01	4.679E-08	3.273E-02	8.259E-06	4.973E-06	1.873E-21	2.656E-16	1.031E-10	1.795E-12	2.095E-05
40	8.99	1.209E+03	1.072E+03	8.641E+01	2.982E-04	5.613E-04	2.812E-02	2.966E-07	2.760E-08	1.301E-01	5.673E-08	3.448E-02	8.782E-06	5.024E-06	3.628E-21	4.267E-16	1.376E-10	2.481E-12	2.402E-05
41	9.00	1.220E+03	1.086E+03	8.751E+01	2.941E-04	5.613E-04	2.899E-02	3.555E-07	3.353E-08	1.284E-01	6.988E-08	3.632E-02	9.365E-06	5.058E-06	7.114E-21	6.918E-16	1.044E-10	3.446E-12	2.757E-05
42	9.02	1.231E+03	1.100E+03	8.884E+01	2.900E-04	5.613E-04	2.992E-02	4.276E-07	4.083E-08	1.265E-01	8.445E-08	3.826E-02	1.001E-05	5.072E-06	1.413E-20	1.129E-15	2.481E-10	4.017E-12	3.169E-05
43	9.03	1.237E+03	1.109E+03	8.961E+01	2.876E-04	5.613E-04	3.051E-02	4.795E-07	4.611E-08	1.254E-01	9.565E-08	3.949E-02	1.044E-05	5.071E-06	2.162E-20	1.259E-15	2.808E-10	5.923E-12	3.453E-05
44	9.04	1.244E+03	1.118E+03	9.039E+01	2.851E-04	5.613E-04	3.112E-02	5.384E-07	5.123E-08	1.242E-01	1.085E-07	4.076E-02	1.090E-05	5.061E-06	3.327E-20	2.000E-15	3.587E-10	7.279E-12	3.766E-05
45	9.05	1.250E+03	1.127E+03	9.118E+01	2.820E-04	5.613E-04	3.174E-02	6.095E-07	5.897E-08	1.229E-01	1.2								

5. RESULTADOS OBTENIDOS EN SIMULACIÓN

Las matrices de los valores específicos obtenidos mediante simulación, correspondientes a temperaturas, velocidades y concentraciones de salida alcanzadas para ambos combustibles modelos con sus respectivas variaciones en composición y relación de equivalencia en cada uno de los puntos de medición quedarán explícitas en el ANEXO 4 de este trabajo.

Cabe destacar que para los 4 casos de 100% combustible modelo con una relación de equivalencia de 0,4, es decir una mezcla pobre, no se lograron obtener resultados que convergieran en el método de solución planteado, lo cual responde a la necesidad del modelo GRI.MECH_3.0 que se basa en la combustión del metano contar con una concentración mínima de este debido que en ausencia o con concentraciones muy bajas de este, la convergencia presenta problemas.

A continuación, se presentan las tendencias obtenidas y parámetros de comparación relevantes mediante gráficos.

5.1. TEMPERATURA

▪ COMBUSTIBLES MODELO 1

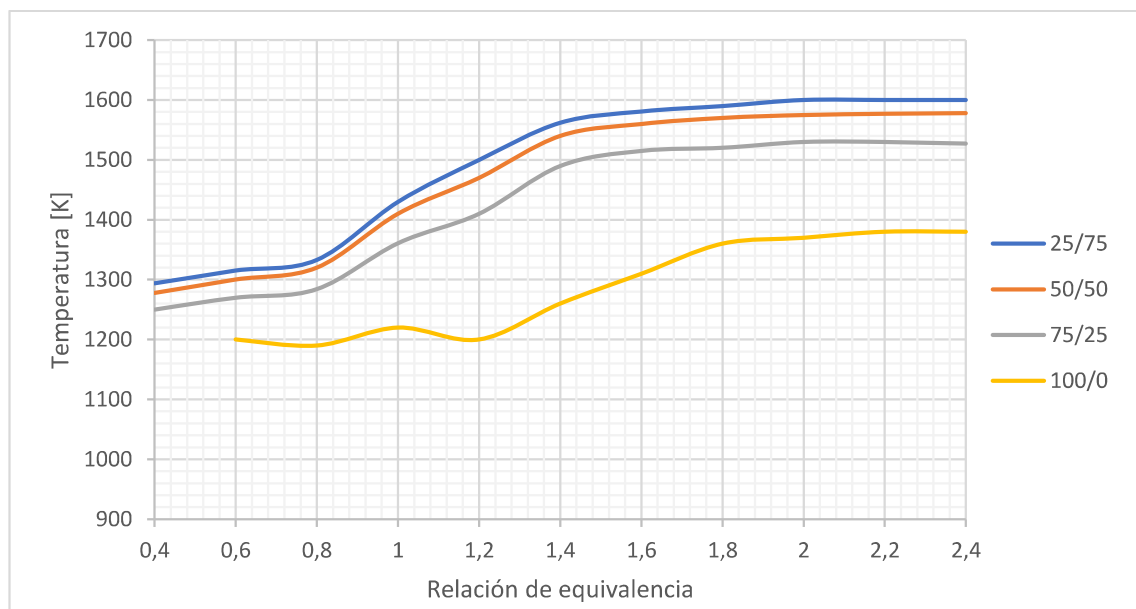


Gráfico 6: Temperatura máxima del sólido para combustible modelo 1.1

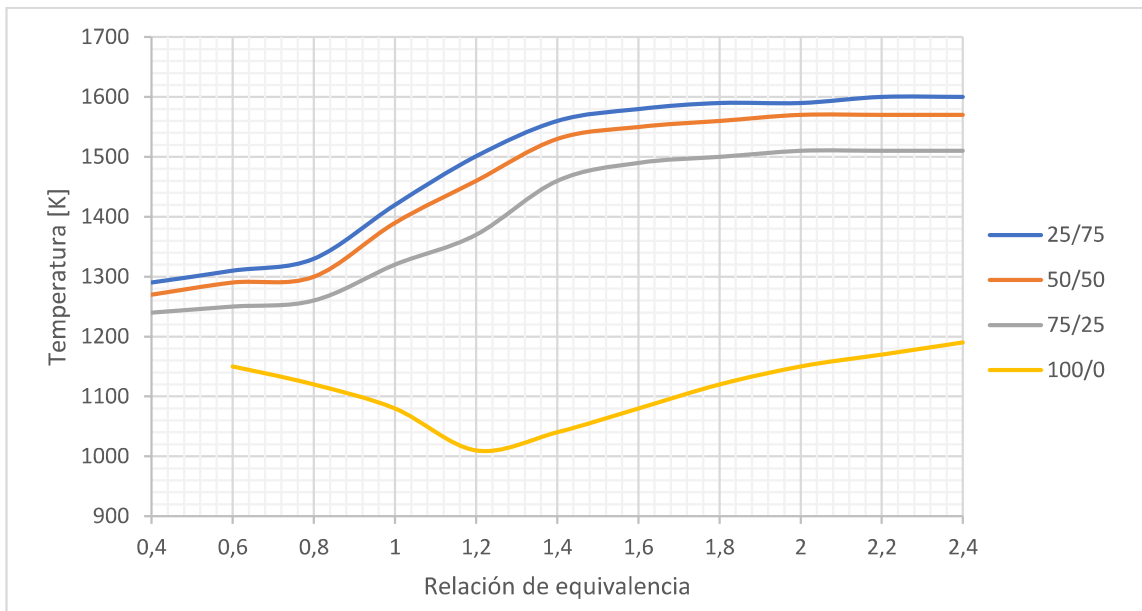


Gráfico 7: Temperatura máxima del sólido para combustible modelo 1.2

■ **COMBUSTIBLES MODELO 2**

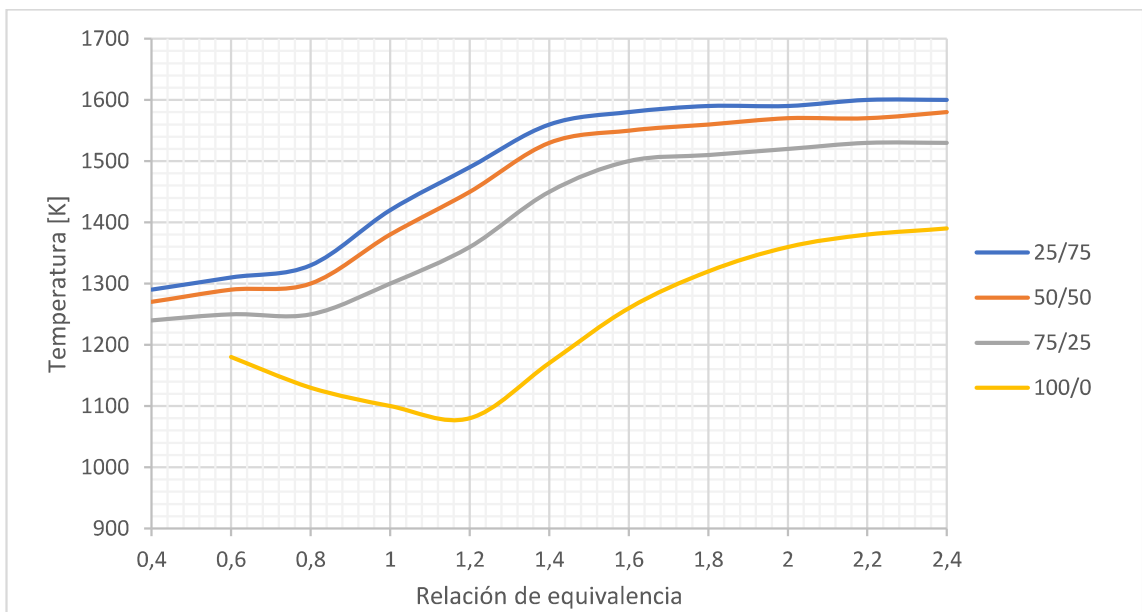


Gráfico 8: Temperatura máxima del sólido para combustible modelo 2.1

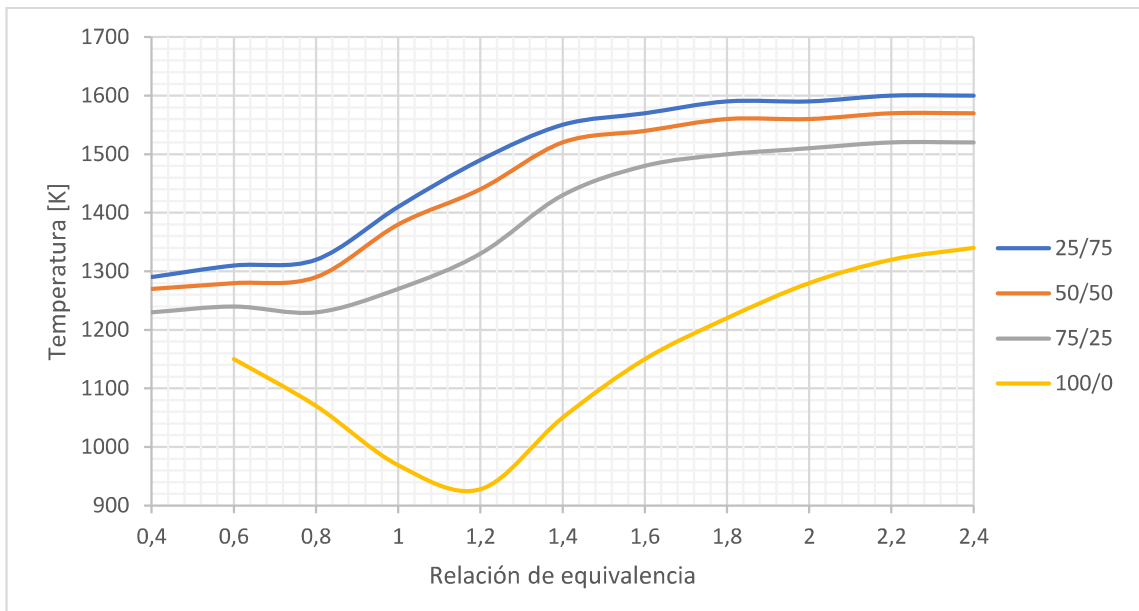


Gráfico 9: Temperatura máxima del sólido para combustible modelo 2.2

Para cada tipo de combustible modelo utilizado se ve una tendencia similar usando adición de metano, lo cual deja en evidencia el aporte calórico cuando el metano se ve involucrado en las reacciones debido a su alto poder calorífico. Se identifica además las altas temperaturas alcanzadas en las zonas de relaciones de equivalencia posterior a la estequiometría, esto atribuible a las reacciones exotérmicas que favorecen estas mezclas tales como las de oxidación parcial (2-9) – (2-12).

Para el caso de la utilización del combustible modelo sin adición de metano, el escenario cambia drásticamente, se logra observar una disminución de temperatura hacia el punto estequiométrico que cambia abruptamente una vez se supera el umbral de $\Phi = 1,2$. Estas bajas temperaturas responden a la poca presencia de metano. La menor temperatura alcanzada corresponde al combustible C2 1.6 que contiene en su mayoría CO como base combustible y una menor cantidad de CO_2 que el resto. La disponibilidad de CO puede generar tendencia a reacciones WSGR (2-14) y de Boudouar (2-15), esta última altamente endotérmica lo que puede provocar una baja en la temperatura. Los mayores valores de temperaturas registradas para mezclas sin metano adicional fueron alcanzados con C1 0.8 y C2 1.2, que de manera idónea son aquellos que tienen una mayor proporción de metano base.

5.2. VELOCIDAD DE PROPAGACIÓN DEL FRENTE

■ COMBUSTIBLES MODELO 1

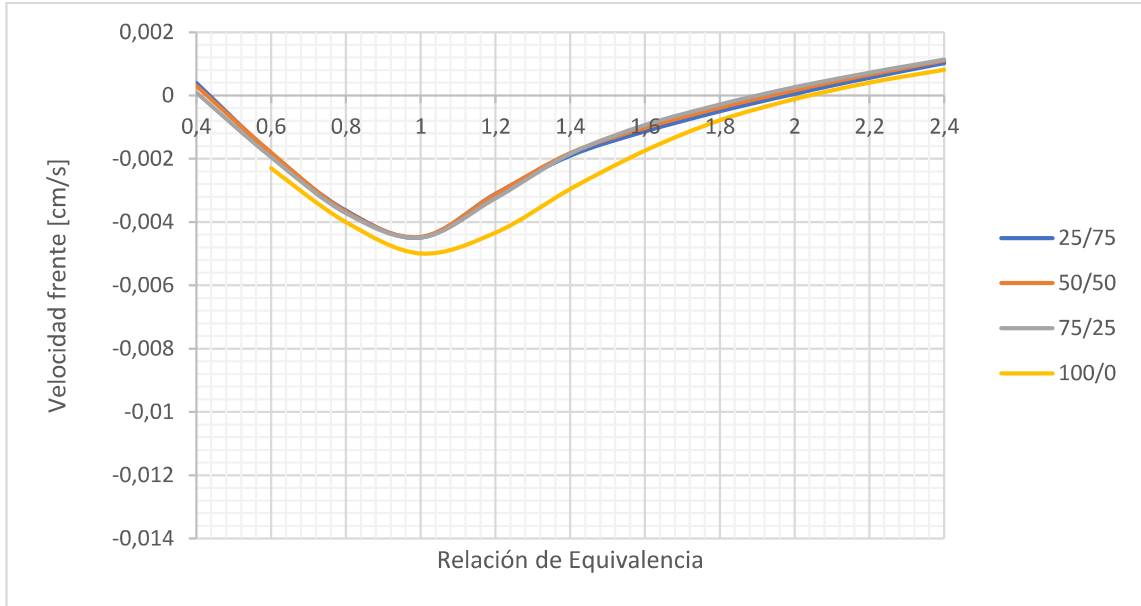


Gráfico 10: Velocidad de propagación para combustible modelo 1.1

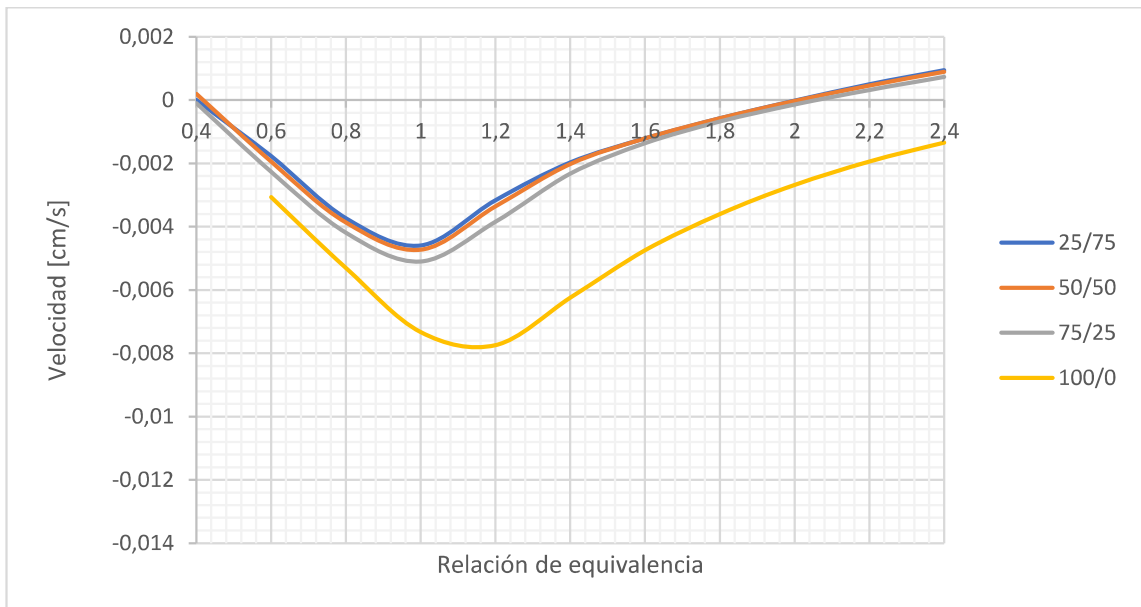


Gráfico 11: Velocidad de propagación para combustible modelo 1.2

■ COMBUSTIBLES MODELO 2

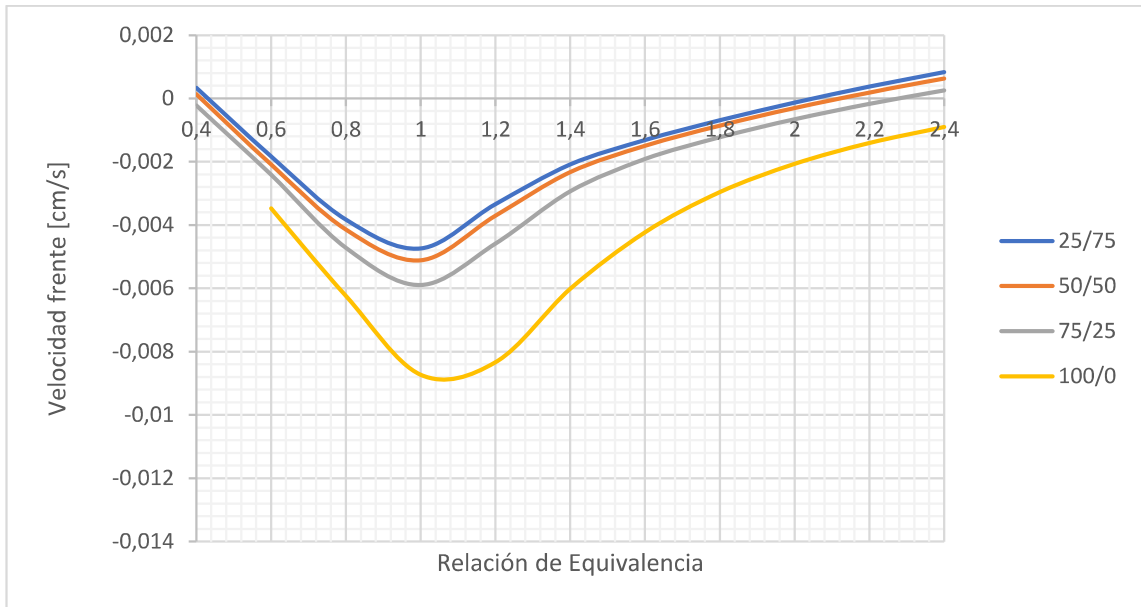


Gráfico 12: Velocidad de propagación para combustible modelo 2.1

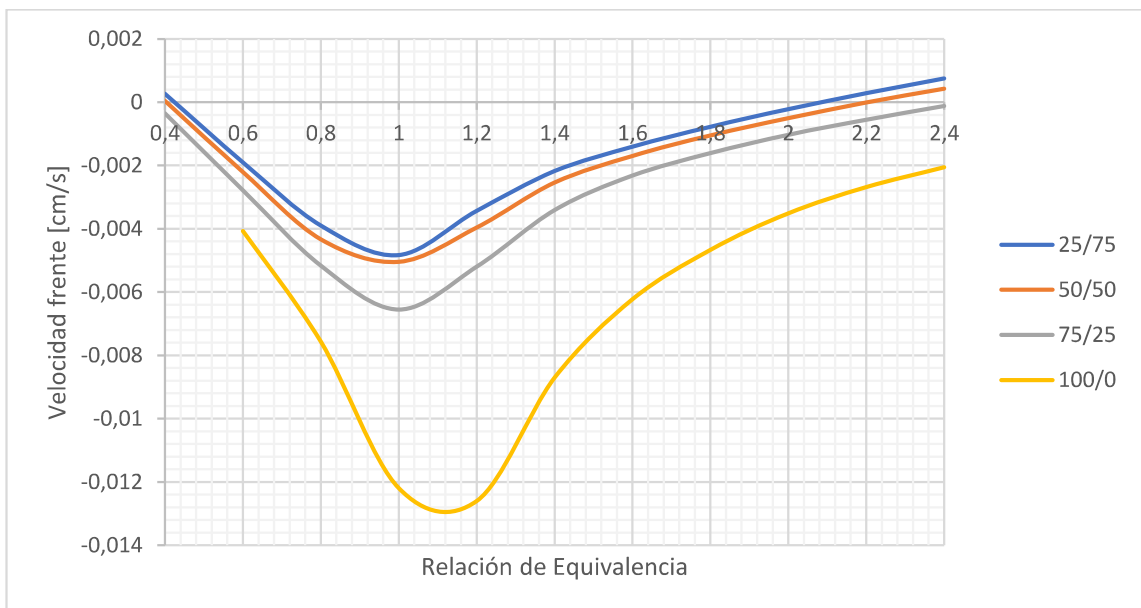


Gráfico 13: Velocidad de propagación para combustible modelo 2.2

La velocidad de propagación del frente varía de acuerdo a los distintos factores anteriormente explicados. Básicamente dado que los parámetros de entrada junto con los factores físicos y químicos dentro del modelo permanecen invariantes, el aumento y disminución de estas velocidades se debe a un cambio en los coeficientes de transferencias de calor entre las fases.

Las mezclas con mayor aporte de metano presentan poca variación en los 4 combustibles mostrando una tendencia a velocidades negativas mayores a medida que disminuye la concentración de metano, mismo comportamiento en combustibles con mayor concentración base de H₂ y CO. Esto impacta directamente en el cambio de signo de las velocidades del frente aplazando este suceso, donde el paso de velocidades negativas a positivas implica el cambio del régimen adiabático a super-adiabático.

5.3. CONCENTRACIÓN DE HIDRÓGENO

- COMBUSTIBLES MODELO 1

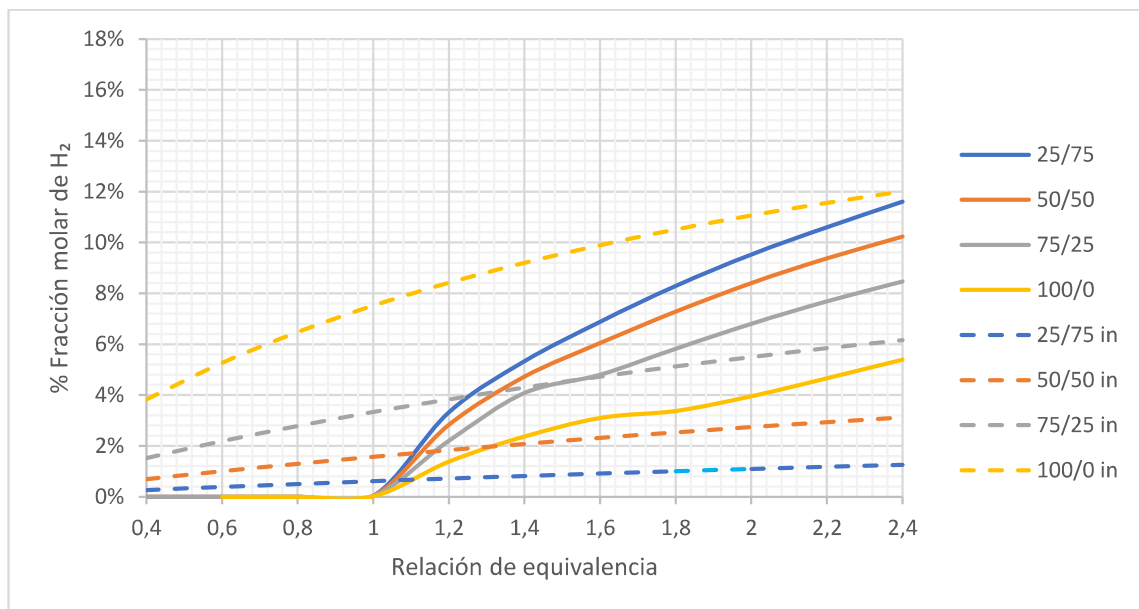


Gráfico 14: Concentración de hidrógeno para combustible modelo 1.1

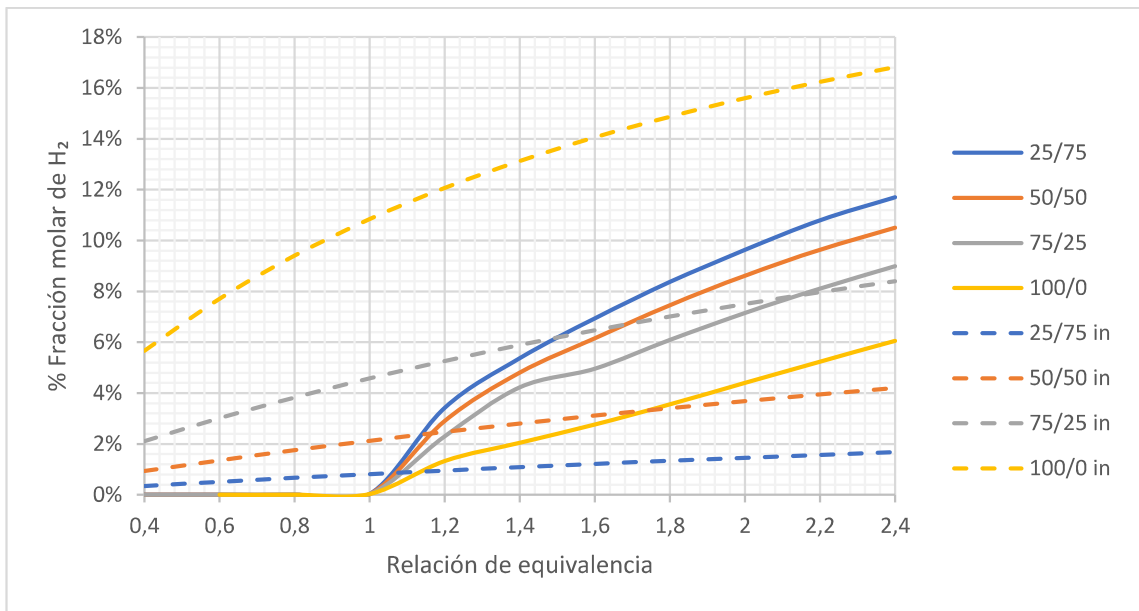


Gráfico 15: Concentración de hidrógeno para combustible modelo 1.2

- **COMBUSTIBLES MODELO 2**

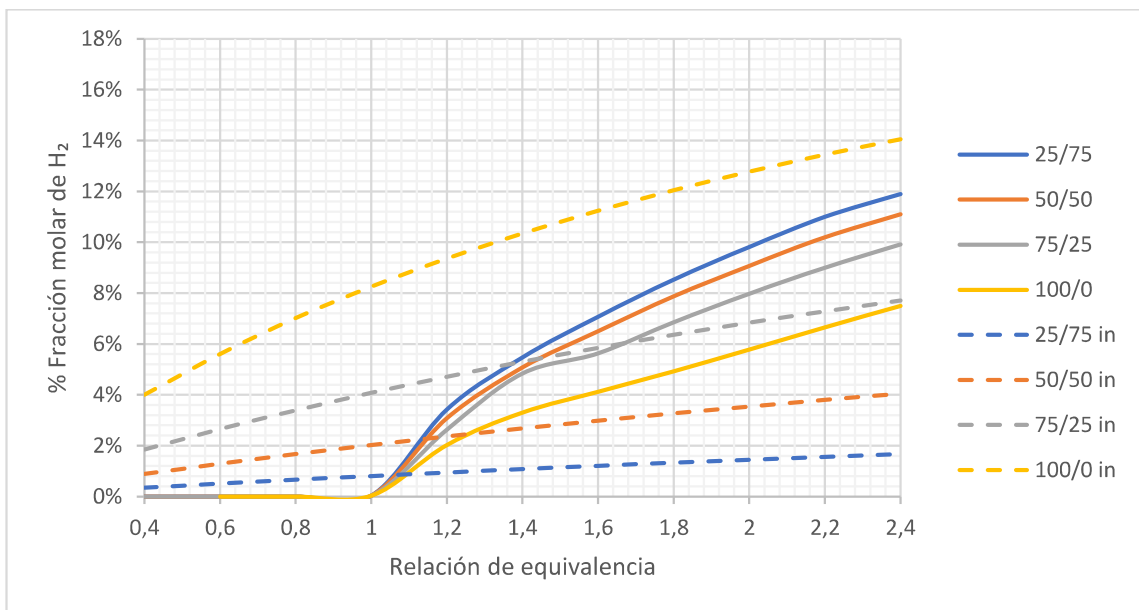


Gráfico 16: Concentración de hidrógeno para combustible modelo 2.1

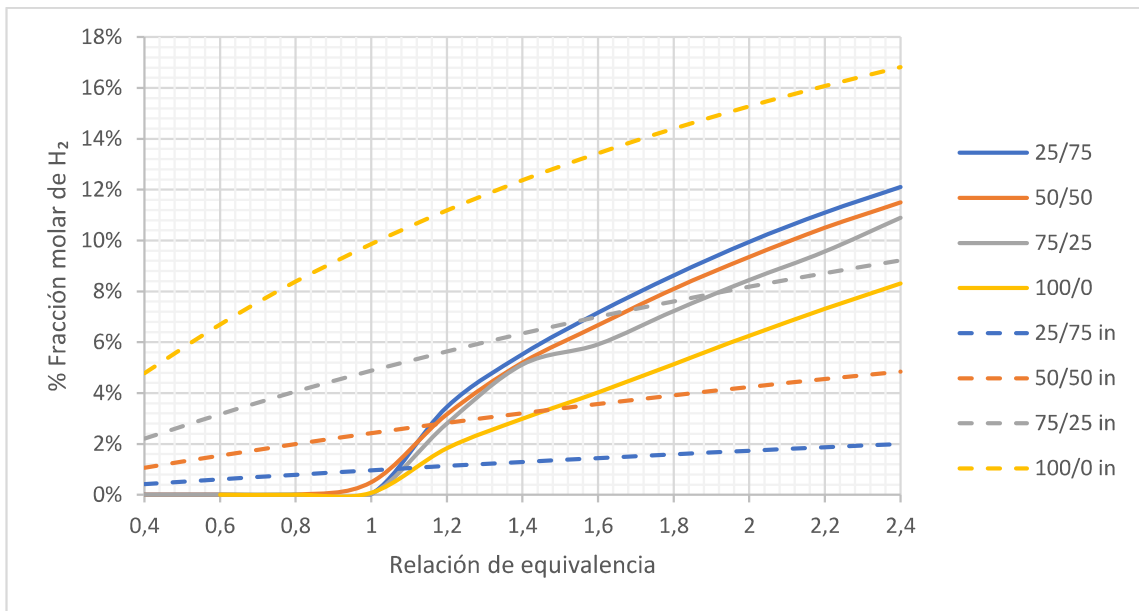


Gráfico 17: Concentración de hidrógeno para combustible modelo 2.2

El comportamiento general es el esperado donde a mayor metano y mayor relación de equivalencia se generan mayores concentraciones de hidrógeno en los gases productos, la mayor diferencia se presenta entre combustible modelo puro comparados con los que poseen aportes de 75% metano.

La comparación entre combustibles modelos presentan diferencias de bajo orden, si bien se observan menos concentraciones de hidrógeno en CM 1.1 éstas son del orden del 1% con aportes de metano y aumentan a 2% cuando se trata de combustible modelo puro que son incluso menores que la diferencias de concentraciones de hidrógeno de entrada.

La diferencia más notoria se genera comparando las concentraciones de H_2 ingresadas al sistema, donde para el caso de un CM puro las concentraciones de salida se ven reducidas, mientras que una vez que se encuentra presente el metano las concentraciones aumentan superando con ello la concentración de entrada, dejando en evidencia el aporte generado por el metano mediante reacciones de reformado y oxidación parcial de este (2-4 - 2-8), mientras que para combustibles con poca o nula presencia de metano es el hidrógeno el que pasa a ser el agente combustible, oxidándose parte de este y disminuyendo su concentración final.

5.4. CONCENTRACIONES DE MONÓXIDO DE CARBONO

- COMBUSTIBLES MODELOS 1

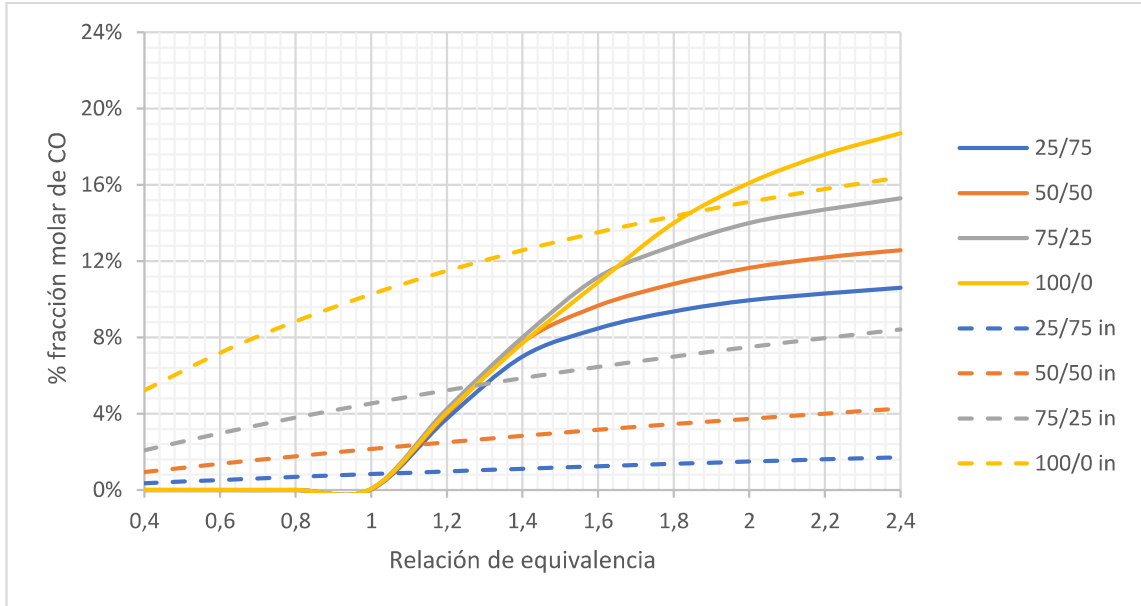


Gráfico 18: Concentración de monóxido de carbono para combustible modelo 1.1

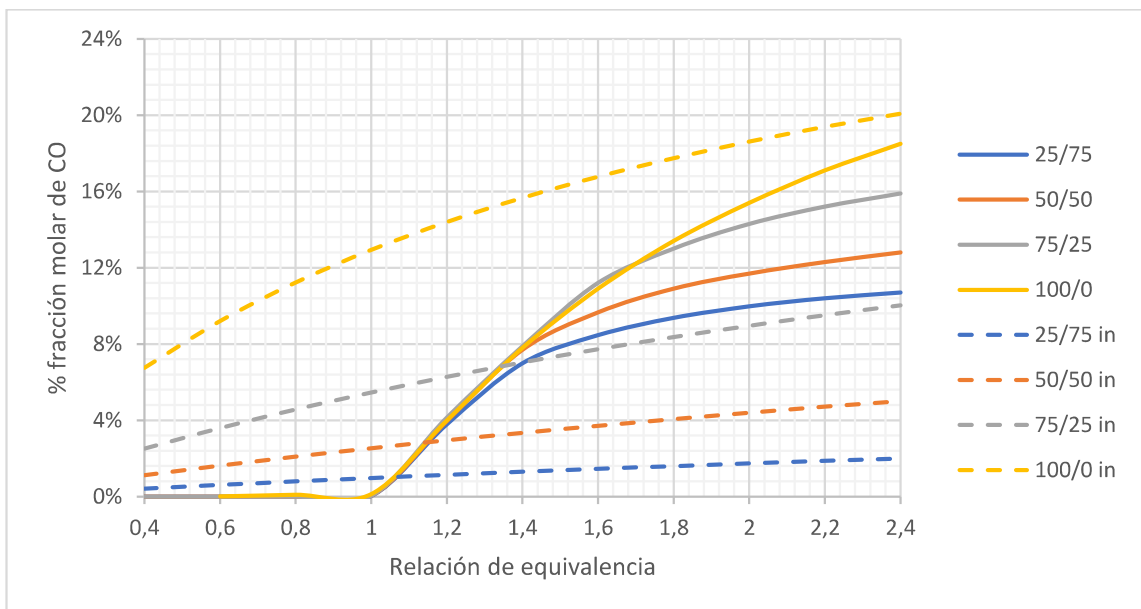


Gráfico 19: Concentración de monóxido de carbono para combustible modelo 1.2

- COMBUSTIBLES MODELO 2

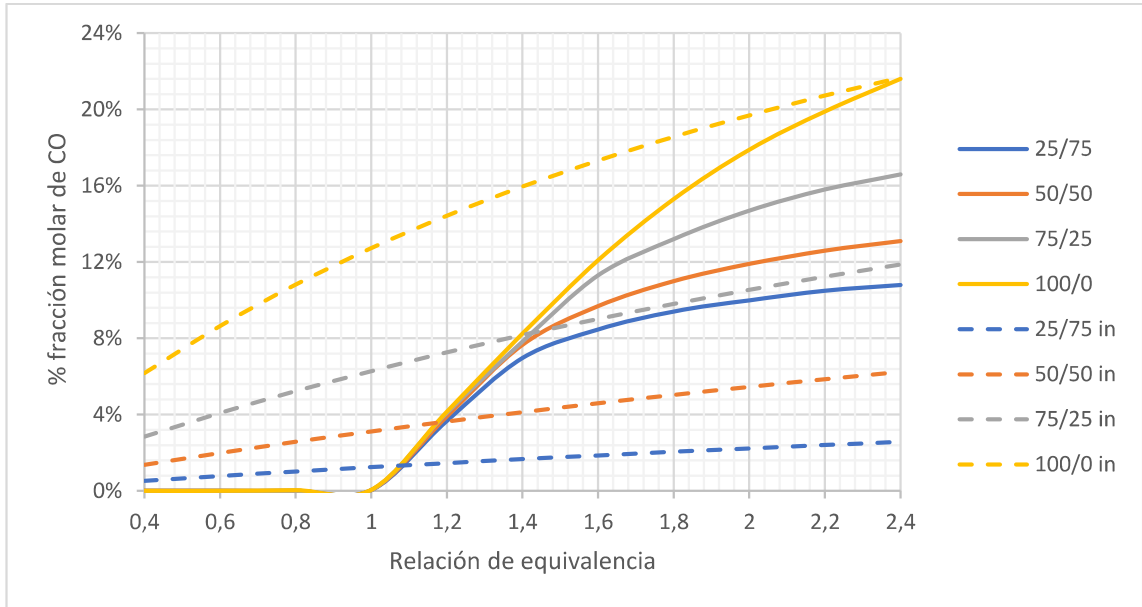


Gráfico 20: Concentración de monóxido de carbono para combustible modelo 2.1

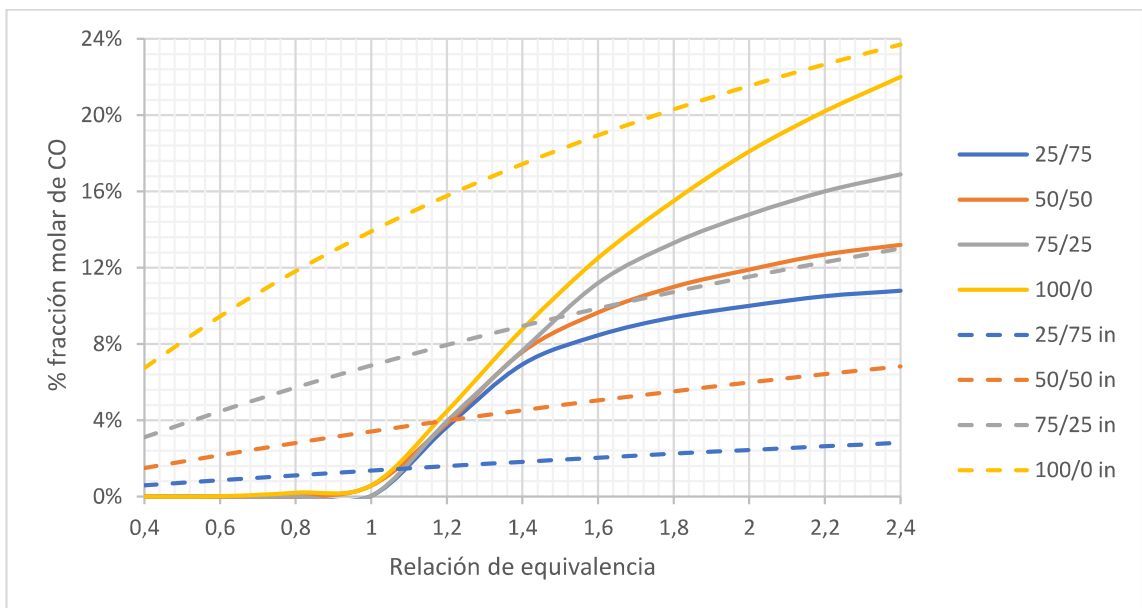


Gráfico 21: Concentración de monóxido de carbono para combustible modelo 2.2

Las concentraciones de CO claramente aumentan a medida que aumenta la relación de equivalencia y en comparación con el caso de la concentración de H_2 acá la concentración disminuye a medida que aumenta el metano adicional.

Comparando con las concentraciones de entrada se repite lo visto en las concentraciones de hidrógeno, donde en puntos particulares de relaciones de equivalencia la concentración de salida es mayor que la de entrada, pero este caso sólo se da una vez para el combustible sin adición de metano, CM 1.1, que corresponde al combustible con menos concentración de monóxido a la entrada.

A pesar que la presencia de metano en un ambiente pobre de oxígeno favorece la oxidación parcial con resultado de CO (2-7 y 2-9) se genera un caso especial donde los 4 combustibles modelos presentan altas concentraciones iniciales de monóxido, por consecuencia se puede estimar que la alta disponibilidad de carbono dentro del sistema ocasiona que la adición de metano disponga de hidrógeno favoreciendo reacciones WGR y WSGR (2-13 y 2-14) lo que disminuirá la concentración final de CO y además aumenta las de CO_2 , H_2O e H_2 .

5.5. RELACIÓN HIDRÓGENO – MONÓXIDO DE CARBONO

- COMBUSTIBLES MODELOS 1

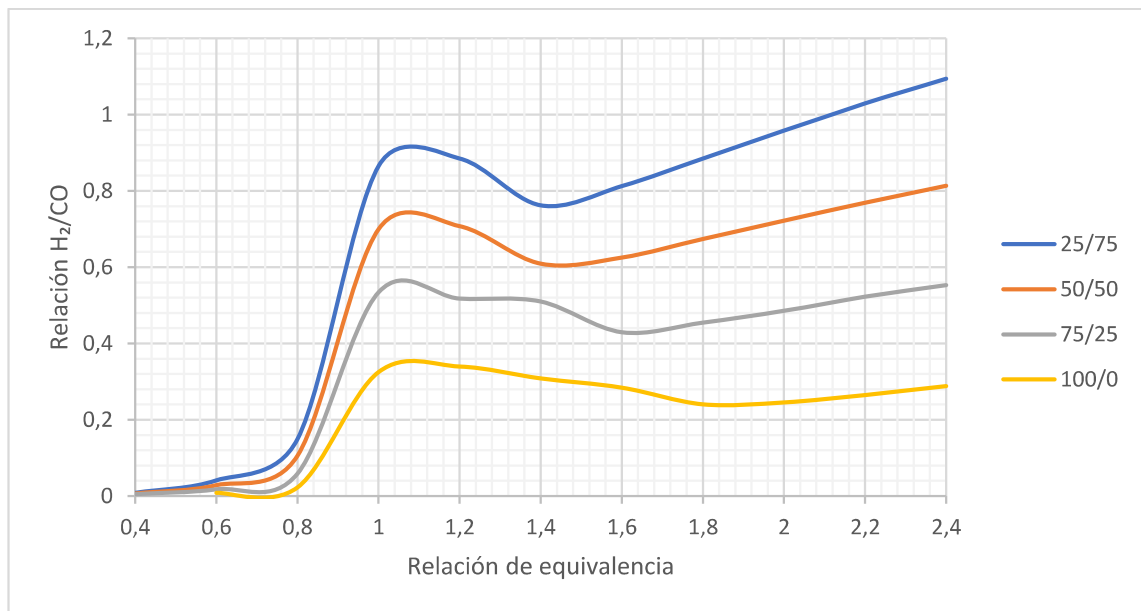


Gráfico 22: Relación H_2/CO para combustible modelo 1.1

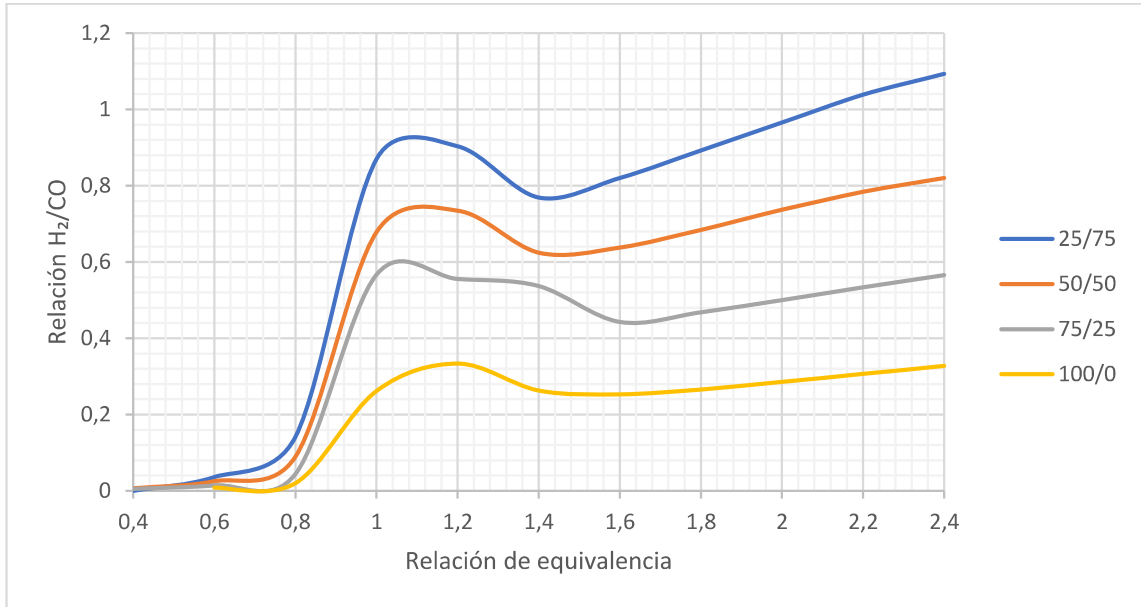


Gráfico 23: Relación H_2/CO para combustible modelo 1.2

• **COMBUSTIBLES MODELO 2**

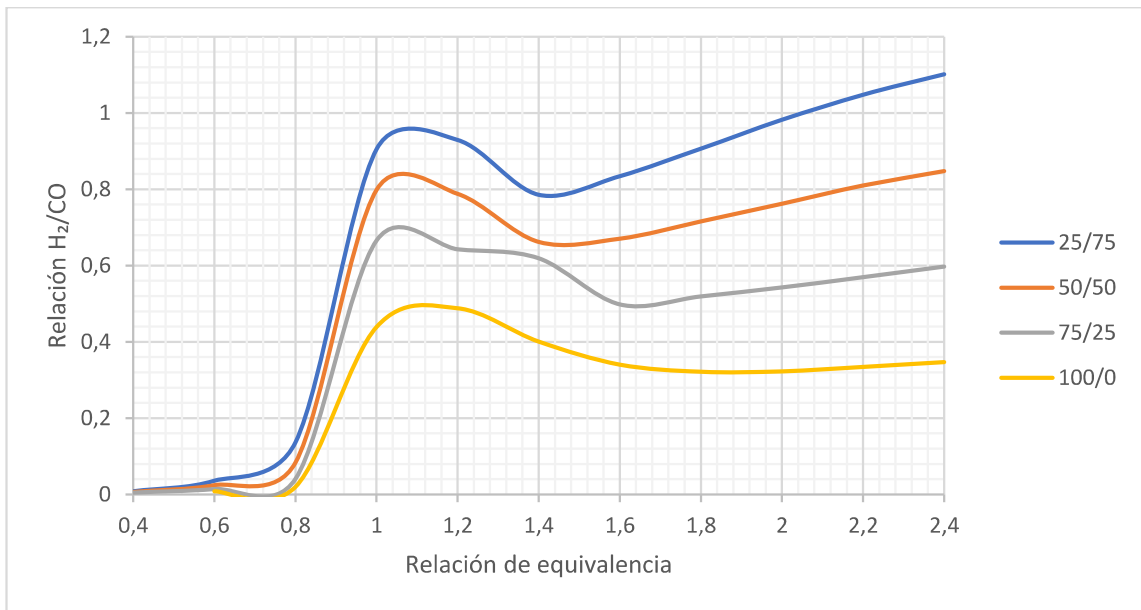


Gráfico 24: Relación H_2/CO para combustible modelo 2.1

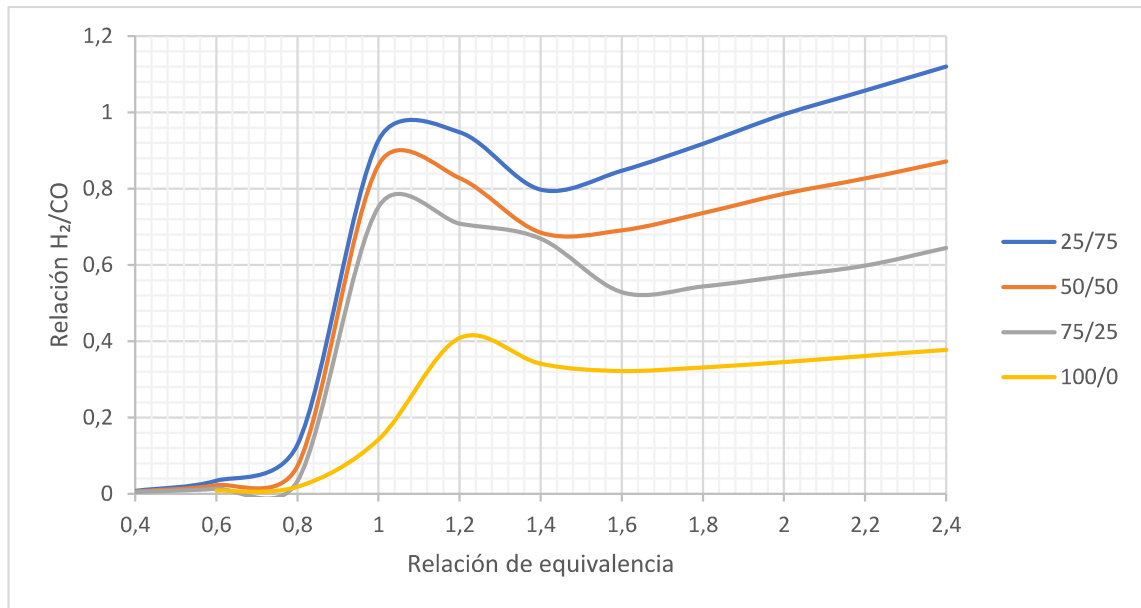


Gráfico 25: Relación H_2/CO para combustible modelo 2.2

Claramente se observa en todos los combustibles cómo la relación hidrógeno y monóxido de carbono aumenta hasta llegar al punto estequiométrico, luego pasa por un punto máximo y comienza a descender, esto conversa con las pendientes máximas alcanzadas en los gráficos de concentración CO , donde pasado de $\Phi = 1.4$ la pendiente de concentración de CO presenta leves disminuciones en comparación con la pendiente de concentraciones de H_2 que se mantienen mas bien constante a lo largo de la distintas relaciones de equivalencia.

Queda explícito que a mayores adiciones de metano se logran mayores valores de relación H_2/CO , pero que aún así no logran ser suficientes para una relación 2:1 que se espera como ideal para la utilización como gas de síntesis.

5.6. CONVERSIÓN DE CO

- COMBUSTIBLES MODELO 1

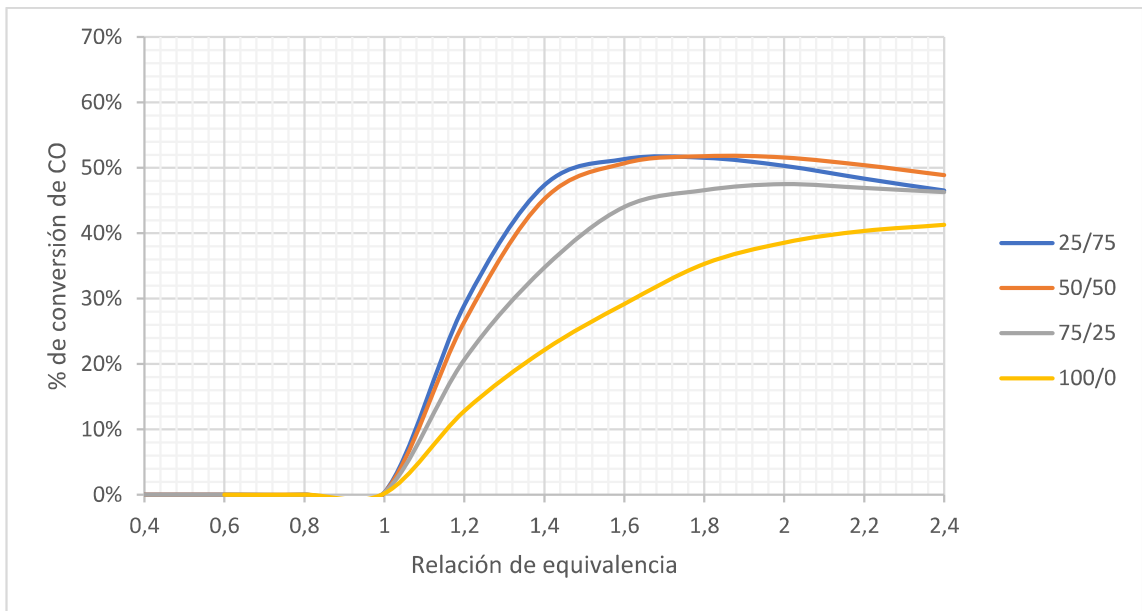


Gráfico 26: Conversión de CO para combustible modelo 1.1

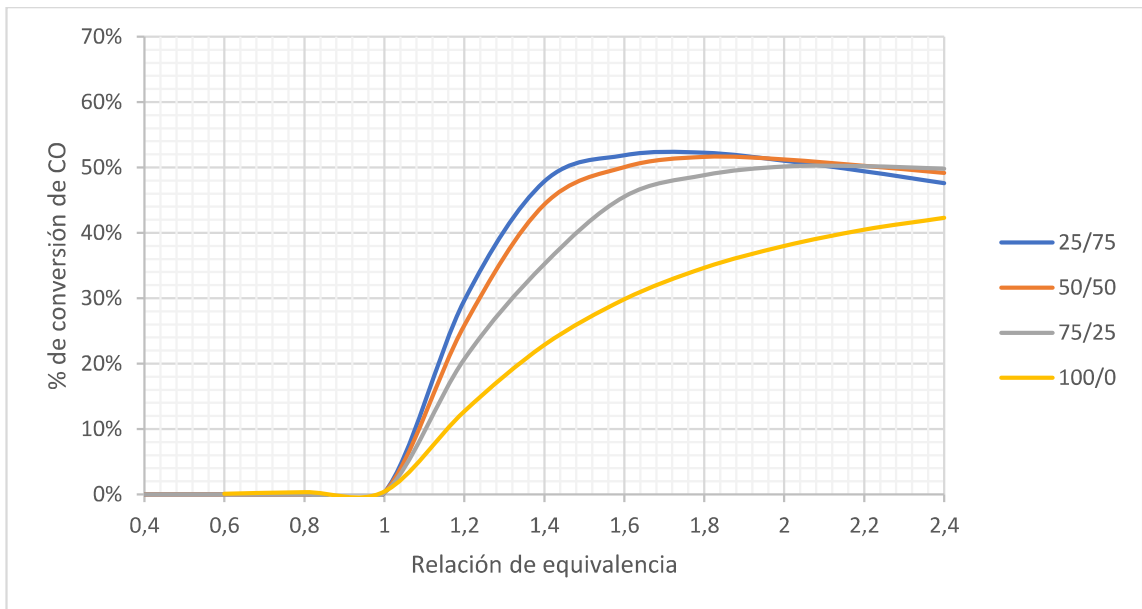


Gráfico 27: Conversión de CO para combustible modelo 1.2

- COMBUSTIBLES MODELO 2

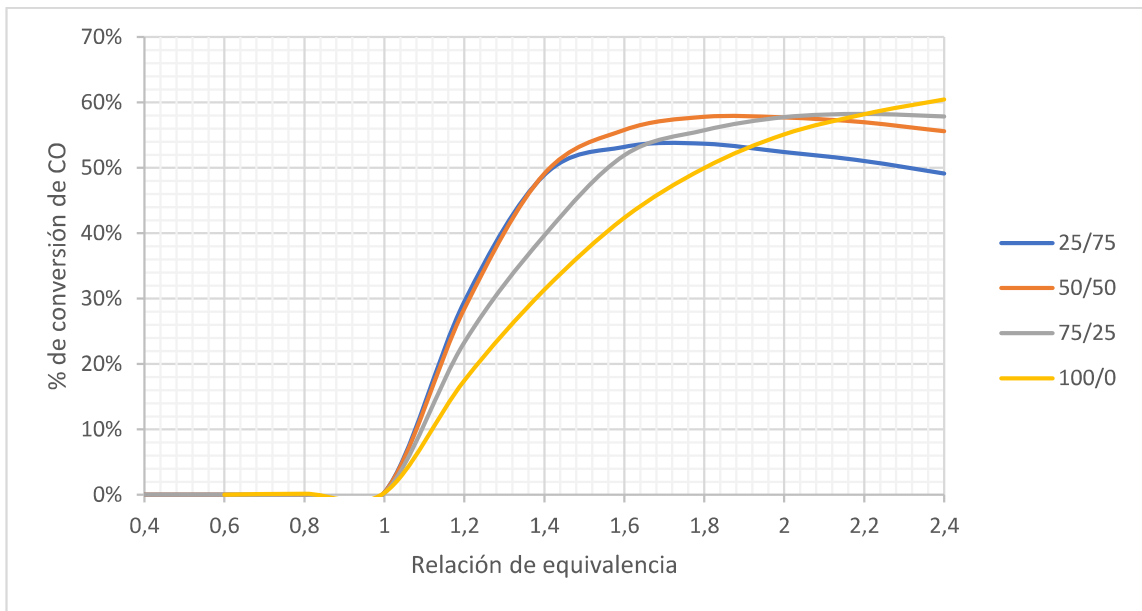


Gráfico 28: Conversión de CO para combustible modelo 2.1

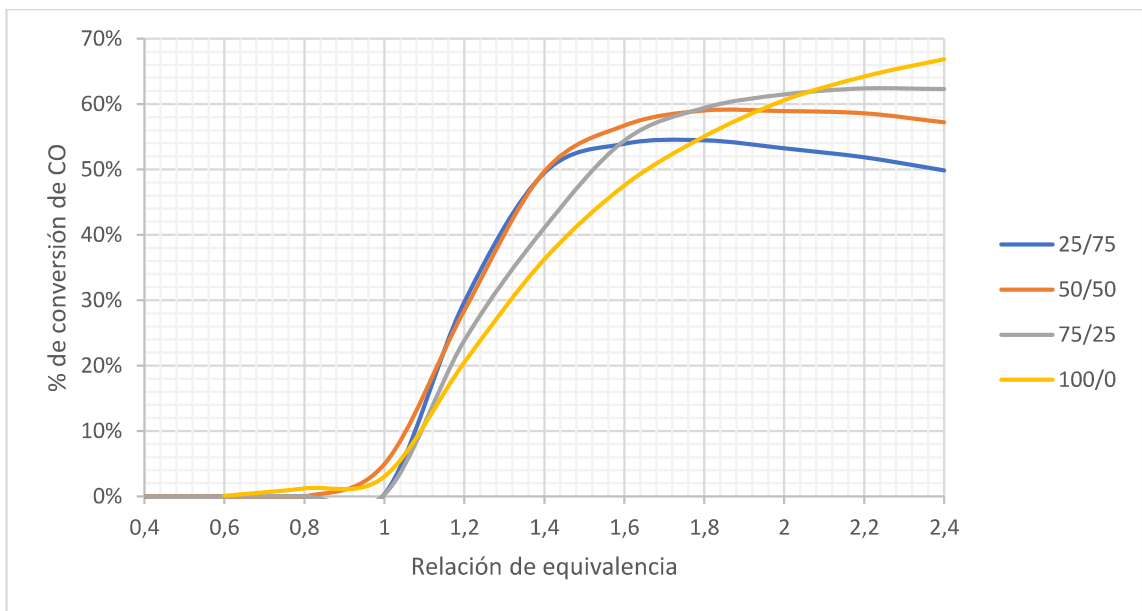


Gráfico 29: Conversión de CO para combustible modelo 2.2

Para la conversión de CO se pueden observar ciertos comportamientos particulares en esta modelación, claro está que posterior al punto estequiométrico existe un aumento sostenido en la tasa de conversión positiva que se detiene abruptamente cuando se llega relaciones de equivalencia cercanos a 1,4 – 1,6 dependiendo del aporte de metano.

Existen diferencias considerables dependiendo del combustible modelo utilizado y de la adición de metano evaluada. Para los casos C1.1 y C1.2 sin adición de metano existe una tasa de conversión que se comporta de manera logarítmica pero que para los casos con adición de metano este comportamiento logarítmico se pierde y se comienza a ver una pendiente negativa. El comportamiento anterior también se observa en los C2.1 y C2.2 donde el caso sin adición de metano llega a superar las tasas de conversión de sus pares con adición de metano. Esto debido a las altas concentraciones de CO en el combustible base y la poca disponibilidad de metano como agente comburente permitiendo mantener concentraciones mayores de CO , caso que también se justifica en las mediciones de sensibilidad con adición de CO en el punto 4.3 del presente trabajo.

5.7. CONVERSIÓN DE HIDRÓGENO

- COMBUSTIBLES MODELO 1

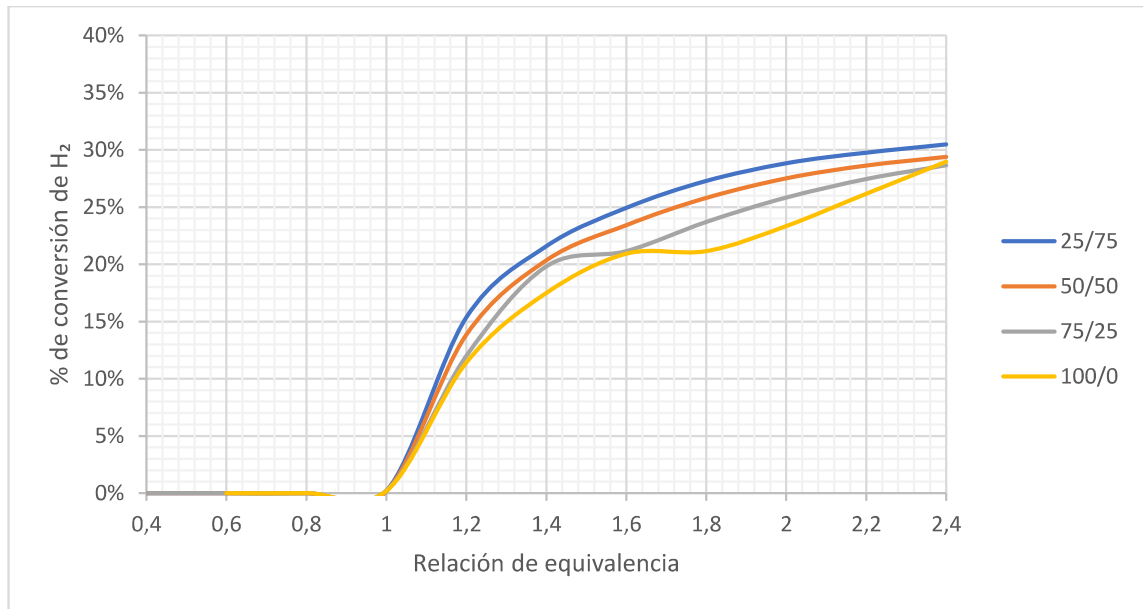


Gráfico 30: Conversión de H_2 para combustible modelo 1.1

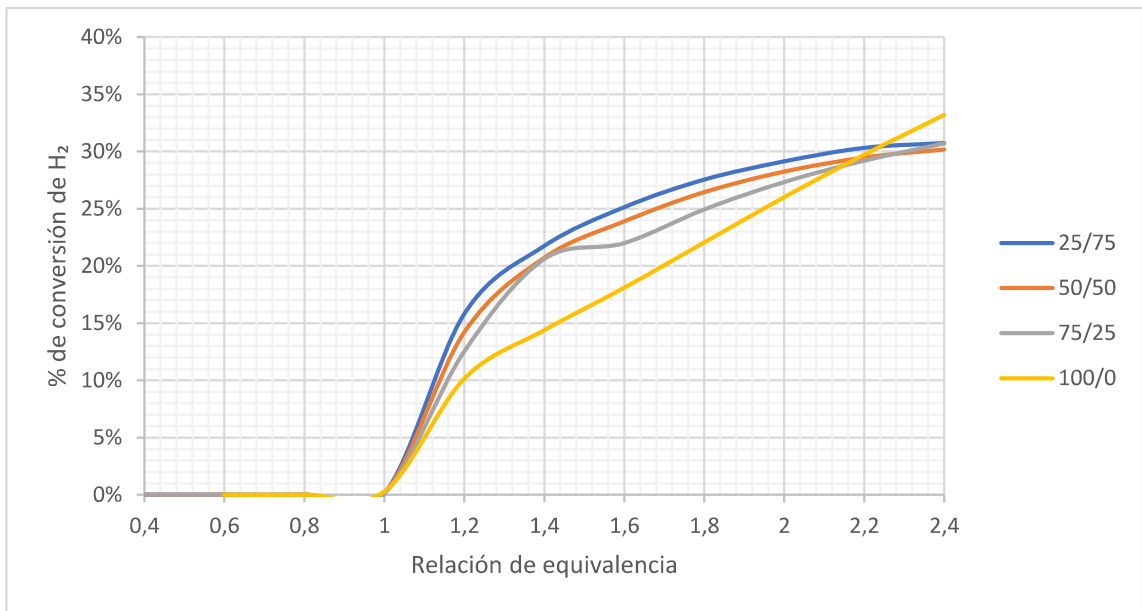


Gráfico 31: Conversión de H_2 para combustible modelo 1.2

- COMBUSTIBLES MODELOS 2

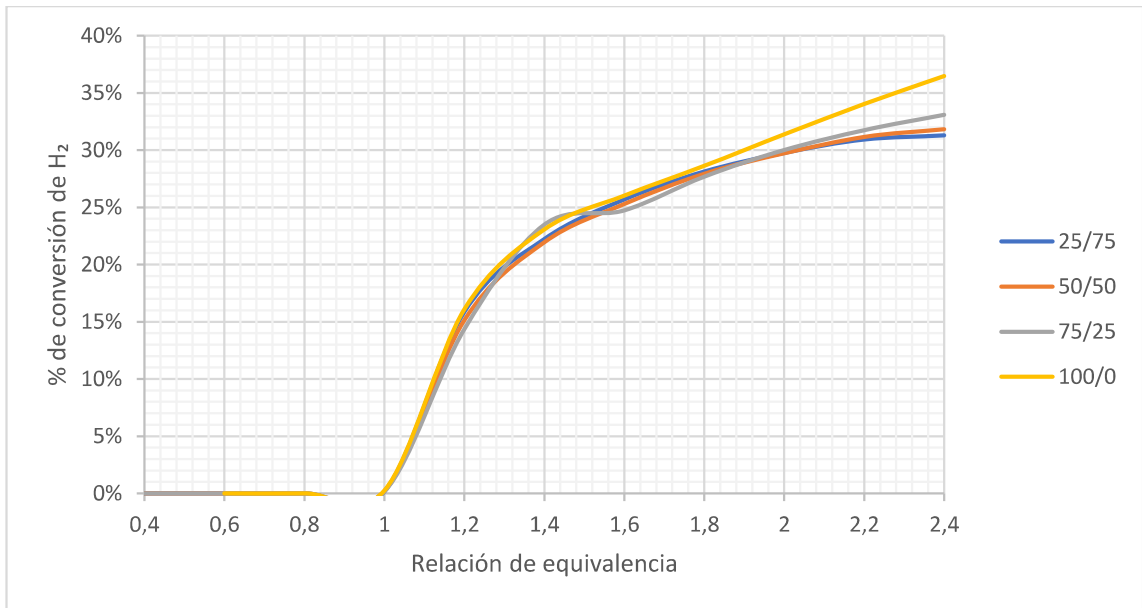


Gráfico 32: Conversión de H_2 para combustible modelo 2.1

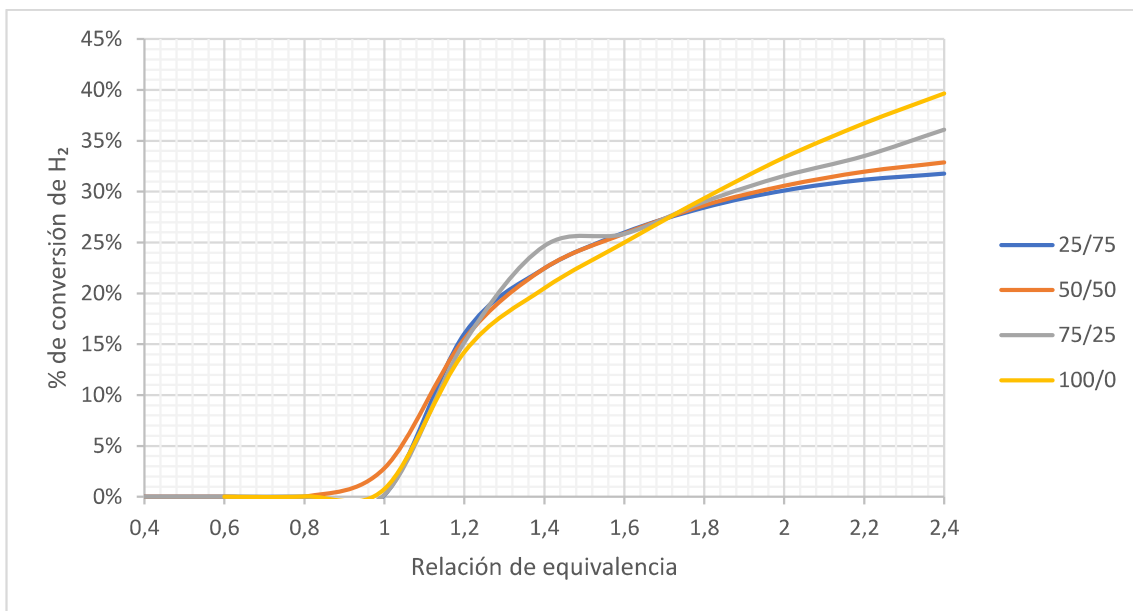


Gráfico 33: Conversión de H_2 para combustible modelo 2.2

Para el caso de la conversión de hidrógeno nuevamente se presentan comportamientos particulares en las relaciones de equivalencia 1,4 – 1,6, si bien antes del punto estequiométrico no se aprecia una conversión apreciable debido al poco hidrógeno resultante, superando este nivel se pueden ver comportamientos logarítmicos especialmente en las mediciones con adición de metano.

La observación destacada se presenta en las mediciones con un 25% y 0% de adición de metano, es decir las que presentan una mayor cantidad de combustible modelo. Donde la conversión de hidrógeno para mediciones con 25% de adición presenta puntos altos en comparación con las demás, especialmente en relaciones de equivalencia cercanos a 1,4. Para el caso sin adición de metano se observa que en mezclas muy ricas la conversión de hidrógeno tiende a superar a sus pares con adición de metano. Si bien esto parece positivo, se contrapone con las concentraciones finales obtenidas, donde la adición de metano si bien baja el porcentaje de conversión de manera general como se observa en estos últimos gráficos, aumenta en gran medida las concentraciones finales de hidrógeno.

Se aprecian grandes diferencias entre los combustibles modelos 1 y 2, donde la gran diferencia entre ellos es la mayor presencia de CO_2 en el primero mientras que en los segundos predomina

la existencia de CO , lo que hace intuir que el CO_2 al ser un gas residual que tiene poco potencial reactivo disminuye el potencial de reacción general y que el CO presente potencia reacciones de oxidación parcial (2-11) aportando calor y principalmente WSGR (2-14). Esto evidencia una mejor gestión del hidrógeno disponible en los combustibles sin adición de metano donde si bien su concentración de H_2 puede ser menor, se llega a convertir en H_2 una mayor cantidad del hidrógeno disponible que en sus pares con adición de metano.

6. ANÁLISIS DE LOS RESULTADOS

A continuación, se analizarán y fundamentarán los resultados obtenidos de acuerdo con las bases teóricas y modelos de reacción que se manejan en los procesos de gasificación y tomando en cuenta distintos puntos de comparación para los valores de temperatura y concentración de los gases productos. Para ellos se basará este análisis en lo detallado en la sección 2.3.2 y 2.3.3.

6.1. ANÁLISIS GENERAL

A modo general en todos los análisis anteriores se pueden apreciar 4 rangos que marcan cambios de comportamientos bien marcados como lo son:

- Rango de mezclas pobres ($\varphi < 1$): Es donde se registran las menores temperaturas y las más bajas concentraciones de productos deseados llegando al punto estequiométrico se ve poca variación y aumentos muy menores que no sugieren una ventaja práctica.
- Rango estequiométrico ($1 < \varphi < 1,2$): Cómo se esperaba el punto estequiométrico da una diferencia marcada entre el comportamiento de combustión frente a mezclas ricas y pobres, el único análisis donde se puede visualizar cierta ventaja cercano a este punto es en la relación H_2/CO pero las concentraciones finales son bajas a modo que no priorizan un enfoque práctico. Para todo lo demás alejándose de la estequiometría hacia las mezclas ricas hay ganancias en concentraciones y características favorables, se observa un comienzo de crecimiento sostenido y rápido en concentraciones y temperatura en las relaciones de equivalencia siguientes.

- Rango mezclas ricas ($1,2 < \phi < 1,8$): Se ven en gran medida las características de mezclas ricas, es donde se alcanzan las mayores temperaturas y comienzan a aumentar las concentraciones de gases productos deseables debido a la oxidación parcial de los componentes. El único concepto con cierta desventaja es la relación H_2/CO dado que en estos rangos se presenta un alto contenido de CO en las concentraciones finales.
- Rango mezclas ultra ricas ($\phi > 1,8$): Muy poco oxígeno disponible en la mezcla, la temperatura presenta leves aumentos con tendencia a mantenerse, existe un aumento en concentraciones de CO al igual que de H_2 , pero este último mantiene una pendiente mayor a medida que aumenta la relación de equivalencia. Debido a lo anterior mejora la relación H_2/CO dado que la tasa de conversión de H_2 sigue en aumento contrario a lo del CO que comienza a estabilizarse o decrecer según sea el caso. Hay un cambio de signo en la velocidad del frente lo que sugiere la existencia de un régimen super adiabático.

Las diferencias entre combustibles modelos tuvo ciertos matices que son de importancia como la presencia de metano en ellos y las concentraciones iniciales H_2 y CO que influían en las concentraciones finales, pero estas diferencias se tornaban poco significantes una vez se les agregaba metano al combustible inicial, dado que con ello mejoraban y se equiparaban todos los combustibles modelos en cierta medida, los puntos más diferenciales entre combustibles modelos eran las concentraciones de CO y los indicadores que se desprenden de esto % de conversión de CO y relación H_2/CO .

6.2. CONCENTRACIONES ALCANZADAS

La mayor concentración de hidrógeno alcanzada fue de 12.1% con el combustible modelo 2.2 con adición de 75% de metano y a una relación de equivalencia de 2.4.

A continuación, se presenta en la tabla 7 la comparación entre el gas producto obtenido, el combustible de entrada (combustible modelo + CH_4) y el gas producto obtenido en el proceso del primer reactor (gas previo a combustible modelo).

Tabla 7: Concentraciones de entrada y salida, simulación C2.2, CH_4 al 75% $\phi = 2.4$

Combsutible (2.2)	X_{H_2} [%]	X_{CO} [%]	X_{CO_2} [%]	X_{CH_4} [%]
Combustible de entrada	2,00	2,82	0,79	18,04
Gas producto de salida	12,10	10,80	3,11	2,34
Gas producto 1er reactor	12,21	17,21	4,82	1,85

Además, la mayor mejora de concentración de hidrógeno que se obtuvo fue de un aumento del 10.34% obtenido con el combustible modelo 1.1 de concentraciones con adición de 75% metano y a una relación de equivalencia de 2.4, se presentan las comparaciones de la misma forma que en el apartado anterior.

Tabla 8: Concentraciones de entrada y salida, simulación C1.1, CH_4 al 75% $\phi = 2.4$

Combsutible (1.1)	X_{H_2} [%]	X_{CO} [%]	X_{CO_2} [%]	X_{CH_4} [%]
Combustible de entrada	1,26	1,72	2,65	18,41
Gas producto de salida	11,60	10,60	4,10	2,35
Gas producto 1er reactor	6,56	8,96	13,80	2,00

Mientras que la mayor disminución de concentración fue de -11,31 %, alcanzada con el combustible modelo 1.2 sin adición de metano con una relación de equivalencia de 1.8.

A continuación, en las tablas 8 – 11 se presentan las ganancias y pérdidas de hidrógeno en todos sus puntos con respecto a la mezcla combustible modelo / CH_4 que ingresó al reactor 2.

Tabla 10: Aumento/disminución de concentración de H_2 , C 1.1

	25/75	50/50	75/25	100/0
0,4	-0,26%	-0,69%	-1,53%	-3,83%
0,6	-0,38%	-1,00%	-2,18%	-5,26%
0,8	-0,50%	-1,30%	-2,78%	-6,48%
1	-0,57%	-1,54%	-3,29%	-7,50%
1,2	2,60%	1,00%	-1,63%	-7,03%
1,4	4,51%	2,64%	-0,22%	-6,83%
1,6	5,97%	3,73%	0,07%	-6,79%
1,8	7,29%	4,75%	0,70%	-7,14%
2	8,44%	5,66%	1,31%	-7,11%
2,2	9,42%	6,44%	1,84%	-6,90%
2,4	10,34%	7,11%	2,30%	-6,62%

Tabla 9: Aumento/disminución de concentración de H_2 , C 1.2

	25/75	50/50	75/25	100/0
0,4	-0,35%	-0,94%	-2,11%	-5,66%
0,6	-0,51%	-1,36%	-3,01%	-7,71%
0,8	-0,67%	-1,75%	-3,83%	-9,41%
1	-0,79%	-2,10%	-4,55%	-10,81%
1,2	2,47%	0,44%	-2,96%	-10,74%
1,4	4,28%	2,01%	-1,66%	-11,08%
1,6	5,72%	3,05%	-1,51%	-11,29%
1,8	7,03%	4,05%	-0,92%	-11,31%
2	8,17%	4,94%	-0,36%	-11,20%
2,2	9,23%	5,69%	0,14%	-11,00%
2,4	10,02%	6,30%	0,59%	-10,77%

Tabla 11: Aumento/disminución de concentración de H_2 , C 2.1

	25/75	50/50	75/25	100/0
0,4	-0,35%	-0,89%	-1,84%	-4,00%
0,6	-0,51%	-1,29%	-2,65%	-5,61%
0,8	-0,66%	-1,67%	-3,39%	-7,01%
1	-0,77%	-1,99%	-4,05%	-8,23%
1,2	2,47%	0,72%	-2,08%	-7,33%
1,4	4,39%	2,39%	-0,46%	-7,05%
1,6	5,86%	3,52%	-0,22%	-7,12%
1,8	7,20%	4,60%	0,49%	-7,12%
2	8,37%	5,53%	1,14%	-6,99%
2,2	9,44%	6,40%	1,72%	-6,79%
2,4	10,23%	7,05%	2,22%	-6,56%

Tabla 12: Aumento/disminución de concentración de H_2 , C 2.2

	25/75	50/50	75/25	100/0
0,4	-0,42%	-1,06%	-2,21%	-4,78%
0,6	-0,61%	-1,54%	-3,17%	-6,70%
0,8	-0,79%	-2,00%	-4,06%	-8,38%
1	-0,93%	-1,93%	-4,85%	-9,78%
1,2	2,33%	0,34%	-2,84%	-9,36%
1,4	4,24%	1,99%	-1,22%	-9,38%
1,6	5,71%	3,10%	-1,08%	-9,41%
1,8	7,04%	4,18%	-0,38%	-9,26%
2	8,21%	5,12%	0,27%	-9,02%
2,2	9,23%	5,95%	0,85%	-8,77%
2,4	10,10%	6,65%	1,68%	-8,50%

Lo anterior deja en evidencia el aumento o disminución de la calidad del gas de síntesis obtenido del segundo reactor comparado al gas de síntesis obtenido en el primero, donde, si bien se pueden presentar valores altos y mejoras muchas veces no representa una mejora real con respecto al combustible primario (del primer reactor) como se ve en la tabla 7. Por lo que también se tiene que realizar la comparación con respecto al combustible que se obtiene en el

primer reactor para una comparación general con respecto a la efectividad de estos reactores en serie.

A continuación, se muestran la variación de concentraciones de H_2 de acuerdo a los registrado en los gases productos de ambos reactores.

Tabla 14: Aumento/disminución de concentración de H_2 , C 1.1. Respecto a gas producto 1er reactor

	C1.1 (6,56% H_2)			
	25/75	50/50	75/25	100/0
0,4	-6,56%	-6,56%	-6,56%	-6,56%
0,6	-6,56%	-6,56%	-6,56%	-6,56%
0,8	-6,56%	-6,56%	-6,56%	-6,56%
1	-6,52%	-6,53%	-6,52%	-6,54%
1,2	-3,24%	-3,73%	-4,36%	-5,18%
1,4	-1,23%	-1,84%	-2,48%	-4,19%
1,6	0,32%	-0,52%	-1,77%	-3,46%
1,8	1,73%	0,72%	-0,74%	-3,19%
2	2,97%	1,84%	0,24%	-2,61%
2,2	4,04%	2,82%	1,12%	-1,90%
2,4	5,04%	3,67%	1,90%	-1,17%

Tabla 13: Aumento/disminución de concentración de H_2 , C 1.2. Respecto a gas producto 1er reactor

	C1.2 (11,53% H_2)			
	25/75	50/50	75/25	100/0
0,4	-11,73%	-11,73%	-11,73%	-11,73%
0,6	-11,73%	-11,73%	-11,73%	-11,73%
0,8	-11,73%	-11,73%	-11,73%	-11,73%
1	-11,70%	-11,70%	-11,71%	-11,70%
1,2	-8,31%	-8,82%	-9,43%	-10,40%
1,4	-6,36%	-6,92%	-7,50%	-9,68%
1,6	-4,79%	-5,57%	-6,77%	-8,97%
1,8	-3,36%	-4,27%	-5,64%	-8,17%
2	-2,10%	-3,11%	-4,58%	-7,33%
2,2	-0,93%	-2,09%	-3,62%	-6,49%
2,4	-0,03%	-1,23%	-2,74%	-5,67%

Tabla 16: Aumento/disminución de concentración de H_2 , C 2.1. Respecto a gas producto 1er reactor

	C2.1 (5,02% H_2)			
	25/75	50/50	75/25	100/0
0,4	-5,02%	-5,02%	-5,02%	-5,02%
0,6	-5,02%	-5,02%	-5,02%	-5,02%
0,8	-5,02%	-5,02%	-5,02%	-5,02%
1	-4,99%	-4,99%	-4,99%	-4,99%
1,2	-1,60%	-1,94%	-2,39%	-2,99%
1,4	0,45%	0,05%	-0,18%	-1,72%
1,6	2,05%	1,48%	0,61%	-0,90%
1,8	3,51%	2,85%	1,83%	-0,10%
2	4,80%	4,05%	2,96%	0,76%
2,2	5,98%	5,18%	3,98%	1,63%
2,4	6,88%	6,08%	4,90%	2,48%

Tabla 15: Aumento/disminución de concentración de H_2 , C 2.2. Respecto a gas producto 1er reactor

	C2.2 (12,21% H_2)			
	25/75	50/50	75/25	100/0
0,4	-12,21%	-12,21%	-12,21%	-12,21%
0,6	-12,21%	-12,21%	-12,21%	-12,21%
0,8	-12,21%	-12,21%	-12,21%	-12,21%
1	-12,18%	-11,72%	-12,18%	-12,13%
1,2	-8,75%	-9,04%	-9,41%	-10,38%
1,4	-6,68%	-7,01%	-7,09%	-9,22%
1,6	-5,05%	-5,54%	-6,29%	-8,18%
1,8	-3,58%	-4,11%	-4,98%	-7,07%
2	-2,26%	-2,85%	-3,76%	-5,95%
2,2	-1,11%	-1,71%	-2,64%	-4,90%
2,4	-0,11%	-0,71%	-1,31%	-3,90%

De acuerdo con las mejoras evidenciadas queda claro cuáles son los parámetros en los que se presenta una verdadera mejora del gas de síntesis, donde las mayores mejoras con respecto al H_2 obtenido se obtienen en C1.1 y C2.1 con 75% de CH_4 y una relación de equivalencia de 2.4, en especial para el último. Mientras que C1.2 y C2.2 manifiestan en su totalidad una pérdida de calidad con respecto al gas de síntesis del primer reactor. Esto va directamente relacionado con las cantidades de H_2 presentes en los combustibles modelos provenientes de los gases productos del primer reactor, donde a menor H_2 implica una mayor mejora del gas de síntesis resultante.

7. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES.

En el presente trabajo se realizó una simulación computacional del proceso de generación de hidrógeno y gas de síntesis desde un reactor de medio poroso inerte que es alimentado con la premezcla de productos de gasificación de plásticos, metano y aire. Se utilizaron mezclas pobres y ricas en combustible. Queda en evidencia este proceso es eficiente como método de obtención/mejora de gas de síntesis teniendo en cuenta que se utilizan gases productos obtenidos de otro proceso de gasificación previo que suelen ser de menor calidad.

Cómo bien se busca la producción de un gas de síntesis de mejor calidad, para ello requiere aumentar las concentraciones finales de hidrógeno, mejorar la relación hidrógeno – monóxido de carbono y disminuir los productos no deseados como el dióxido de carbono (principalmente junto con humedad, acetilenos y trazas), todos estos son resultados que se dieron en esta modelación en ciertos escenarios.

Los aspectos principales con los que el (re)proceso lleva a resultados satisfactorios es que debe realizarse con aportes de metano, presentando resultados positivos en todo el rango sobre estequiométrico con adiciones del 50 y 75% mientras que para un 25% de adición se presentan resultados positivos con una relación de equivalencia mayores a 1.6 – 2 según sea el caso. Todo esto considerando que el combustible modelo provenga de un gas producto bajo en contenido de H_2 para que exista una mejora en la calidad del gas de síntesis con respecto al gas de síntesis obtenido en la primera etapa. De lo contrario, si el combustible modelo proviene de un gas

producto con altas concentraciones de H_2 no se puede esperar una mejor en calidad de este, si no más bien mantenerla en el mejor de los escenarios.

Cabe mencionar que los aumentos en la concentración final de hidrógeno en el (re)proceso son mayores que los aumentos de concentración del monóxido esta diferencia positiva a favor del hidrógeno permite visualizar un aumento sostenido en la relación H_2/CO , con ello se llega a aumentar la calidad del gas de síntesis para ser operacionalmente apto, pero frente a los resultados obtenidos en esta simulación aún no se logra la relación 2:1 deseada.

En base a lo enunciado es que se puede sugerir este (re)proceso cuando los productos de gasificación (de un primer reactor) presenten las siguientes características:

- Productos de gasificación con baja concentración de hidrógeno
- Productos de gasificación con altas trazas de metano
- Productos de gasificación con baja relación H_2/CO

Cómo método de recuperación energética y reducción de residuos plástico se presenta como una alternativa atractiva, donde se mejora la calidad tras una primera etapa de gasificación. Pero a pesar de estos resultados positivos no logra ser un proceso operacionalmente efectivo para la generación de gas de síntesis de uso industrial.

En las propuestas que deja este trabajo de investigación se proponen los siguientes desafíos:

- Validar los resultados obtenidos de manera experimental, pudiendo utilizar productos de gasificación de residuos plásticos y confeccionar un reactor de medios porosos que replique la situación planteada o bien simular la situación completa de reactores en serie.
- Modelación numérica que simule del proceso completo de gasificación de residuos junto con combustión de plásticos en medios porosos, es decir que se considere un modelo que contenga al primer reactor de matriz híbrida.
- Investigar el proceso actual modificando los tipos de reactores utilizados o bien variando el método de operación utilizado en la experiencia, considerando reactores de lecho fluidizados, de medios porosos, lechos fijos, entre otro, buscando la mejor configuración.

Con todo lo anterior se concluye de manera exitosa la modelación numérica de inyección de productos de gasificación de residuos plásticos en un reactor de medios porosos, logrando resultados fiables y realistas. Se logra presentar una tendencia clara y diferenciación entre los distintos tipos de operaciones y condiciones utilizados en el modelo generando respuestas a las preguntas planteadas.

8. REFERENCIAS

- [1] BBC News Mundo. "Crisis mundial de la basura": 3 cifras impactantes sobre el rol de Estados Unidos. BBC internet. 8 Julio 2019 < <https://bbc.com/mundo/noticias-48914734>> [consulta: dic 2019].
- [2] Enerdata. Anuario estadístico mundial de energía 2019, Consumo energético total. <<https://datos.enerdata.net/energia-total/datos-consumo-internacional.html>> [consulta: dic 2019].
- [3] Mundoplast. Producción de plásticos 2018. < <https://mundoplast.com/produccion-plasticos-2018/>> [consulta: dic 2020]
- [4] National Geographic, Medio ambiente. "El 91 por ciento de plástico que fabricamos no se recicla". 9 noviembre 2017 < <https://nationalgeographic.es/medio-ambiente/2017/07/el-91-por-ciento-del-plastico-que-fabricamos-no-se-recicla>> [consulta: nov 2019].
- [5] Kaza, Silpa; Yao, Lisa C.; Bhada-Tata, Perinaz; Van Woerden, Frank. What a Waste 2.0: A Global Snapshot of Solid Waste Management to 2050. Urban Development. Washington, DC: World Bank. © World Bank. sep 2018
- [6] Iman Ghosh. Mapping the Flow of the World's Plastic Waste. Visual Capitalist Environment. 3 Julio 2019 < <https://visualcapitalist.com/mapping-the-flow-of-the-worlds-plastic-waste/>> [consulta ene 2020]
- [7] BBC News Mundo. Los 10 países que más y menos basura generan en América Latina (y cómo se sitúan a nivel mundial). BBC internet. 9 Octubre 2018 < <https://bbc.com/mundo/noticias-45755145>> [consulta: feb 2020]

- [8] ASIPLA. Estudio sobre reciclaje de plásticos en Chile. Asipla internet. Marzo 2019 <<http://asipla.cl/wp-content/uploads/2019/04/190328-Estudio-sobre-Reciclaje-de-Pl%C3%A1sticos-en-Chile-Resumen-Ejecutivo.pdf>> [consulta: feb 2020]
- [9] Hoja de ruta: Pacto Chileno de los plásticos. Fundación Chile, Ministerio de Medio Ambiente, Plastic Fact. Chile. Primera edición;48-53, 2020.
- [10] Guía Plásticos y Fuego. Programa de Fomento de la innovación en Institutos Tecnológicos,, AMPLAS Instituto Tecnológico del Plástico. Diciembre 2010 <https://www.observatorioplastico.com/ficheros/publicaciones/126155543Guia_plasticos_fuego_2010_encrip.pdf> [consulta: feb 2020]
- [11]Ignacio Aracil Sáez. Formación de contaminantes y estudio cinético en la pirólisis y combustión de plásticos (PE, PVC, PCP), Tesis doctoral, Universidad de Alicante, Julio 2008. <https://rua.ua.es/dspace/bitstream/10045/9608/1/tesis_doctoral_ignacio_aracil.pdf>
- [12] José J. de Troya Calatayud, Luis Carral, Carlos Álvarez, M^a Jesús Rodríguez. Estudio Comparativo del uso del hidrógeno frente a combustibles fósiles en motores de combustión interna en buques. Universidad de la Coruña, La Coruña España. 2011
- [13] ARAUJO, Bruno A; PALMA, Jorge A; VILAR, Eudésio O y SILVA, Antonio A. Fragilización por Hidrógeno de los Aceros API 5L X60 y API 5L X80. Inf. tecnol. [online]. 2011, pp.129-140.
- [14] Producción mundial de hidrógeno. Tractebel – Modificado por Asociación Chilena de Hidrógeno. < <https://www.h2chile.cl/produccion-del-h2> > [consulta, feb 2020]
- [15] Padro, C.E.G and Putsche, V., Survey of the economies of hydrogen Technologies. National Renewable Energy Laboratory, NREL/TP-570-27079, September 1999.
- [16] C. A. Avila-Neto, S. Dantas, F. Silva, T. Franco, L. Romanielo, C. Hori y A. Assis, «Hydrogen production from methane reforming: Thermodynamic assessment and autothermal reactor design,» Journal of Natural Gas Science and Engineering, vol. 1, pp. 205-215, 2009.
- [17]] S. T. Oyama, P. Hacırlıoğlu, Y. Gu y D. L. , «Dry reforming of methane has no future for hydrogen production: Comparison with steam reforming at high pressure in standard and membrane reactors,» international journal of hydrogen energy, vol. 37, pp. 100444-100450, 2012.

- [18] Energías renovables, Biomasa: Gasificación. Besel S.A. Instituto para la diversificación y ahorro de energía. Vol 9. Madrid, Octubre 2007.
- [19] Borgiannia, P. De Filippisa, F. Pochettia, M. Paoluccib. Gasification process of wastes containing PVC. *Fuel* 81(14):1827-33, September, 2002.
- [20] A. Gómez Bareaa, B. Lecknerb. Modeling of biomass gasification in fluidized bed. *Progress in Energy and Combustion Science*. Volume 36, Issue 4; 444-509, August 2010.
- [21] Ueno T, Nakashima E, Takeda K. Quantitative analysis of random scission and chain-end scission in the thermal degradation of polyethylene. *Polym Degrad Stab* (95):1862–9. 2010.
- [22] Brachi P, Chirone R, Miccio F, Miccio M, Picarelli A, Ruoppolo G. Fluidized bed cogasification of biomass and polymeric wastes for a flexible end-use of the syngas: focus on bio-methanol. *Fuel* (128):88–98. 2014.
- [23] Tsuji T, Hatayama A. Gasification of waste plastics by steam reforming in a fluidized bed. *J Mater Cycl Waste Manag* (11);144–7, 2009.
- [24] Arena U, Di Gregorio F. Energy generation by air gasification of two industrial plastic wastes in a pilot scale fluidized bed reactor. *Energy*. 735–43. 2014
- [25] Arena U, Zaccariello L, Mastellone ML. Fluidized bed gasification of waste-derived fuels. *Waste Manag*. (30): 1212-19, 2010.
- [26] Erkiaga A, Lopez G, Amutio M, Bilbao J, Olazar M. Syngas from steam gasification of polyethylene in a conical spouted bed reactor. *Fuel* (109): 461–9, 2013.
- [27] McKendry P. Energy production from biomass (part 3): gasification technologies. *Bioresour Technol* (83):55–63, 2002.
- [28] Arena U, Di Gregorio F. Energy generation by air gasification of two industrial plastic wastes in a pilot scale fluidized bed reactor. *Energy* (68):735–43. 2014.
- [29] Wilk V, Hofbauer H. Conversion of mixed plastic wastes in a dual fluidized bed steam gasifier. *Fuel* 107:787–99. 2013.
- [30] Sancho JA, Aznar MP, Toledo JM. Catalytic air gasification of plastic waste (polypropylene) in fluidized bed. Part I: use of in-gasifier bed additives. *Ind Eng Chem Res* (47):1005–10. 2008

- [31] Wilk V, Hofbauer H. Conversion of mixed plastic wastes in a dual fluidized bed steam gasifier. *Fuel* (107):787–99. 2013.
- [32] Ahmed II, Nipattummakul N, Gupta AK. Characteristics of syngas from co-gasification of polyethylene and woodchips. *Appl Energy* (88):165–74. 2011.
- [33] He M, Xiao B, Hu Z, Liu S, Guo X, Luo S. Syngas production from catalytic gasification of waste polyethylene: influence of temperature on gas yield and composition. *Int J Hydrog Energy* 2009;34:1342–8.
- [34] Li J, Liao S, Dan W, Jia K, Zhou X. Experimental study on catalytic steam gasification of municipal solid waste for bioenergy production in a combined fixed bed reactor. *Biomass Bioenergy* 2012;46:174–80.
- [35] Makibar J, Fernandez-Akarregi AR, Alava I, Cueva F, Lopez G, Olazar M. Investigations on heat transfer and hydrodynamics under pyrolysis conditions of a pilot-plant draft tube conical spouted bed reactor. *Chem Eng Process* 2011;50:790–8.
- [36] Fernandez-Akarregi AR, Makibar J, Lopez G, Amutio M, Olazar M. Design and operation of a conical spouted bed reactor pilot plant (25 kg/h) for biomass fast pyrolysis. *Fuel Process Technol* 2013;112:48–56.
- [37] Sanlisoy A, Carpinlioglu MO. A review on plasma gasification for solid waste disposal. *Int J Hydrog Energy* 2017;42:1361-5.
- [38] Rutberg PG, Kuznetsov VA, Serba EO, Popov SD, Surov AV, Nakonechny GV, et al. Novel three-phase steam-air plasma torch for gasification of high-caloric waste. *Appl Energy* 2013;108:505–14.
- [39] M. Abdul Mujeebu, M.Z.Abdullah, M.Z. Abu Bakar, A.. A.Mohamad, R.M.N. Muhad and M.K. Abdullah. Combustion in porous media and its applications – A comprehensive survey. *Journal of Environmental Management* Volume 90, Issue 8, June 2009, Pages 2287-2312
- [40] Henry Copete Lopez, Combustión con Exceso de Entalpía, *Revista Tecnológicas*, N° 21, Diciembre 2008.

[41] R. J. Kee, J. F. Grcar, M. D. Smooke, J. A. Miller, and E. Meeks. "PREMIX: AFORTRAN Program for Modeling Steady Laminar One-Dimensional Premixed Flames", 1998

[42] T. P. Coffee and J. M. Heimerl, *Combustion and Flame* 43, 273 (1981).

[43] "Chemical structures of methane-air filtration combustion waves for fuel-lean and fuel-rich conditions" Lawrence A. Kennedy et al. 2000.

ANEXOS

ANEXO 1:

EXPERIENCIA EXPERIMENTAL PREVIA

La experiencia experimental aportada a este trabajo de título fue desarrollada en el laboratorio de termodinámica de la Universidad Técnica Federico Santa María. Se realizaron distintos tipos de experiencias dentro de las cuales en primera instancia se realiza un acercamiento al reactor de medios porosos y el método de trabajo utilizado. Para posteriormente realizar distintas mediciones de gasificación utilizando medios porosos inerte.

Se logran identificar 5 sectores/etapas principales para el proceso.

- Líneas de suministro aire/combustible
- Reactor de medios porosos
- Sistema de toma de muestra
- Sistema de registro de temperatura
- Análisis cromatográfico

Las líneas de suministro son abastecidas por el compresor del laboratorio, mientras que el combustible se administra mediante un estanque contenedor. Los flujos de estas líneas pasan a través de controladores de flujo independientes que se encargan suministrar el correcto volumen de aire y de combustible, acá se varían los parámetros de mezcla, variando de esta forma la relación de equivalencia, el aire y el combustible pasan a una línea común donde se mezclan antes de llegar al reactor. Cabe mencionar que se utiliza el controlador de flujo de CO_2 para el caso del suministro de aire, de modo que se debe de generar un coeficiente de correlación lineal a modo de entregar el flujo correcto, esto debido a que este era el único controlador de flujo disponible para tratar el aire.



Figura 18: Controlador de flujo

El reactor utilizado para esta experiencia, Figura 19, consta de un tubo de cuarzo dispuesto en una base metálica, además el interior y el exterior del tubo se encuentra envuelto por capas de lana térmica (lana de roca). El lecho del reactor dependerá de la experiencia particular que se desarrolle, albergando de esta manera un medio poroso inerte (esferas de alúmina) y un medio híbrido donde las proporciones de cada uno de los materiales mencionados variará según el caso a analizar.



Figura 19: Reactor de medios porosos utilizado en la experiencia

En la parte inferior del tubo de cuarzo se encuentran las líneas de suministro de aire/combustible mientras que en la parte superior el reactor se encuentra abierto y por ahí se introduce una varilla cerámica con 5 termocuplas tipo S Pt-Rd, además de la manguera de extracción que se une al sistema de toma de muestra. Aquí toman un rol importante la ubicación de las termocuplas dado que se deben registrar las temperaturas máximas dentro de la matriz para poder tener registro del movimiento del frente de llama a lo largo del reactor. En ambos lados del reactor se conectan además los respectivos polos para el registro de temperaturas mediante un data logger.

Los datos entregados por el data logger son mostrados en pantalla en tiempo real mediante el software PDAQVIEW, mediante este se registran las temperaturas en intervalos según

convenga. Para luego llevarlo a hojas de cálculo y entregar los gráficos con las curvas características. La configuración esquemática del reactor y termocuplas es la mostrada en la figura 20.

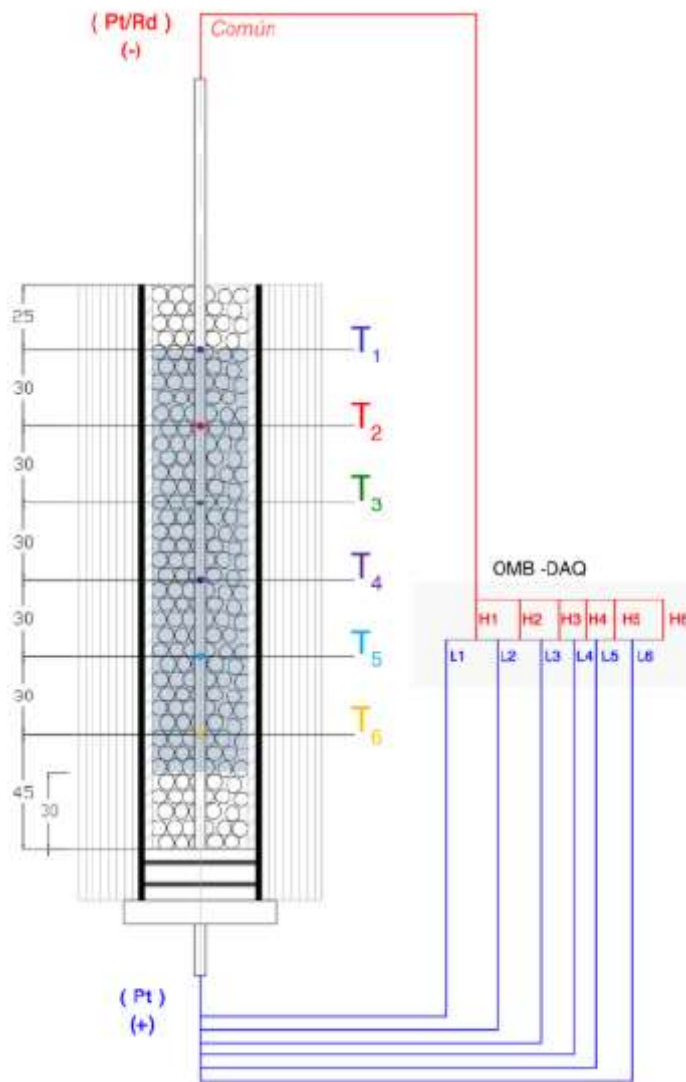


Figura 20: Esquema y distribución de termocuplas con conexión a data logger, Lorena Espinoza

La toma de muestra es realizada mediante una configuración de mangueras, válvulas y jeringas como se observa en la figura 21 y es inyectada en bolsas de toma de muestras herméticas, para su posterior análisis cromatográfico. Debido a la alta probabilidad de filtración del Hidrógeno es que se tiene un límite de 2 días para el análisis de las muestras de gasificación, posterior a

eso se considera altamente probable que se haya filtrado cierto porcentaje de hidrógeno, entregando de esta manera resultados pobres para un syngas.



Figura 21: Sistema de toma de muestras

La muestra es analizada mediante un cromatógrafo Clarus 580, utilizando gas Carrier Helio, para detectar de mejor manera los valores de hidrógeno y CO y otros componentes dentro del gas producto, debido a que presentan una mayor gama de detección en comparación con el otro gas Carrier de Nitrógeno, a pesar de que este último tenga un mejor grado de detección para el hidrógeno.

El análisis cromatográfico entrega datos mediante un software específico, donde se debe de configurar el método de detección el cual entregará las curvas (picos) en tiempos determinados para cada uno de los componentes a detectar.

MÉTODO DE OPERACIÓN

- Acondicionamiento

La correcta manera de proceder en esta experiencia consiste en una primera etapa acondicionar los equipos necesarios, debido a que muchos necesitan de cierto tiempo de arranque para

calibrarse. Dentro de lo anterior se debe de poner en marcha el compresor de aire y revisar los estanques de combustible.

Luego se deben de encender el cromatógrafo y los controladores de flujo, debido a que necesitan un tiempo de calibración previo para operar correctamente. Una vez que se encuentran calibrados se procede a revisar el reactor y ubicarlo dentro de la campana de extracción, se verifican las conexiones y demás.

Se pone en marcha tanto el software para el registro de temperatura como el de análisis cromatográfico para poder comenzar con la ignición del sistema.

- Regulación de parámetros

Se abren la válvula de admisión de aire para el reactor y para luego abrir la de gas combustible, esto calibrando los controladores de flujo que debiendo partir en 0, se deben regular poco a poco para lograr de manera correcta la relación de equivalencia requerida.

- Encendido

Una vez logrado los parámetros necesarios para mantener un régimen transitorio, se procede a encender el reactor mediante encendido manual, generando una chispa de ignición.

Una vez encendido y observar una estabilidad en la llama, se espera que el frente de llama recorra completamente el reactor, precalentando así el medio poroso inerte, en esta etapa el frente de llama se mueve contrario al flujo de reactantes, aguas arriba.

Desde este punto se puede proceder de distinta forma, dado que, si estamos ante gasificación con MPI, basta con esperar que el frente de llama se mueva aguas abajo para aprovechar el efecto superadiabático y tomar muestra sin realizar cambio alguno. Mientras que si estamos con un medio híbrido plástico/biomasa/carbón se debe de tomar en cuenta el modo de llenado, donde normalmente es llenado desde un principio, pero se puede dar la situación de llenar de medio híbrido el reactor luego del precalentamiento estabilizando la llama de manera estacionaria, pero es un proceso complicado y que requiere de un alto grado de precisión.

- Toma de muestra

La toma de muestra se debe de realizar cuando el frente de llama vaya aguas abajo y esté pronto a llegar a la 4ta o 3ra termocupla según se estime conveniente. Antes de que ello ocurra, se

debe de acondicionar la línea saturándola de gases producto una cantidad determinada de veces (3 normalmente) antes de tomar la muestra oficial. La operación del sistema consiste en 2 válvulas de paso, que controlan la salida al ambiente y la entrada de gases productos desde el reactor, reguladas mediante las jeringas que ejercen la presión necesaria para la circulación y expulsión. Una vez saturada la línea botando los gases al ambiente, se une una bolsa hermética y se procede a tomar la muestra para análisis. Esta bolsa de muestra es de la que se toma la muestra final para el análisis cromatográfico, pudiendo esperar un máximo de 2 días debido a la filtración del hidrógeno.

- Análisis cromatógrafo.

Una vez obtenida la bolsa hermética, esta es llevada al sector de análisis cromatográfico, aquí el cromatógrafo ya debe de encontrarse habilitado para operar luego de llevar a la temperatura correcta. Luego mediante una jeringa especial se extrae una cantidad determinada de gas producto (determinada por el método de análisis en el equipo), para finalmente depositar el contenido de la jeringa en el equipo y hacer correr la prueba. Una vez que la prueba se hace correr el cromatógrafo entrega distintos picos en distintos tiempos, aquí de acuerdo a la calibración del equipo se sabrá el componente al cual corresponden.

- Análisis de resultados.

Acá se tendrán dos compilaciones de datos que analizar, el primero de ellos es el registro de temperaturas, acá las temperaturas registradas mediante el software son exportadas a Excel para obtener los gráficos de temperatura en función del tiempo en los 5 termopares. De aquí se puede obtener además la velocidad del frente de llama observando el tiempo transcurrido entre las temperaturas máximas de cada termocupla. De acá se desprenden las buenas características que presentan los medios porosos en cuanto a temperaturas y expresa cómo se comporta el frente de llama de acuerdo a la relación de equivalencia utilizada.

El segundo análisis que considerar es el de cromatografía, acá el software entrega los picos en distintos intervalos, mediante estos se puede calcular la concentración de dicho componente (determinado por el orden de exposición) entregando así una concentración de los principales componentes a analizar entre ellos, H_2 , CO , CO_2 , CO_4 , N_2 , entre otros. De acá se puede desprender la eficiencia de gasificación que presentan los medios porosos, junto con el gas

combustible utilizado, además de poder considerar como afecta un medio híbrido aportando a la gasificación evaluando si es o no una buena alternativa.

ANEXO 2

CONCENTRACIONES DE ENTRADA PARA SIMULACIÓN ANÁLISIS DE

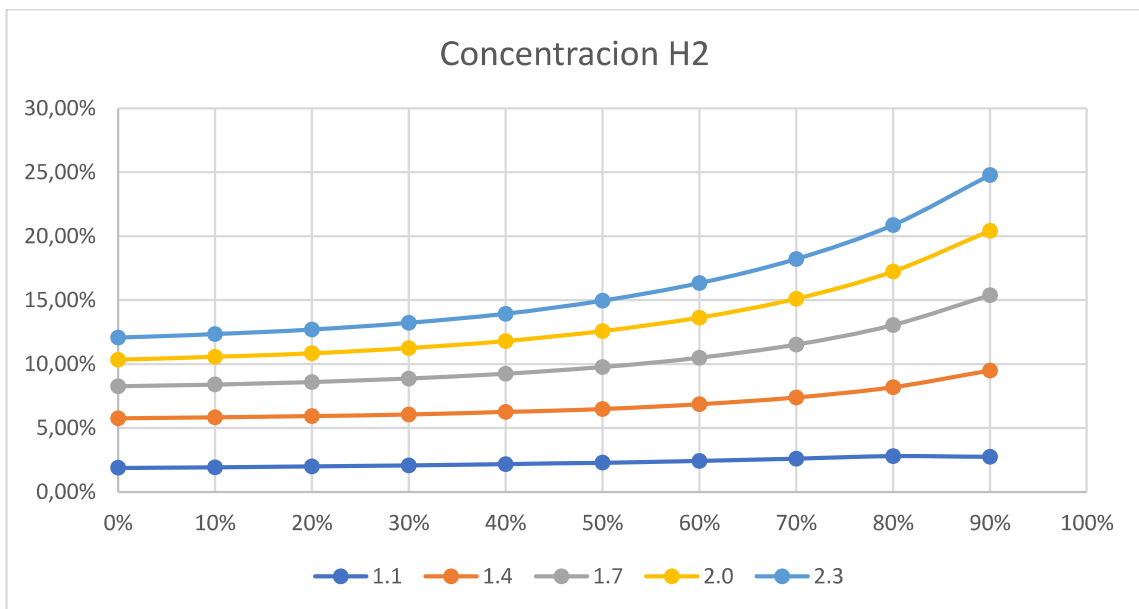
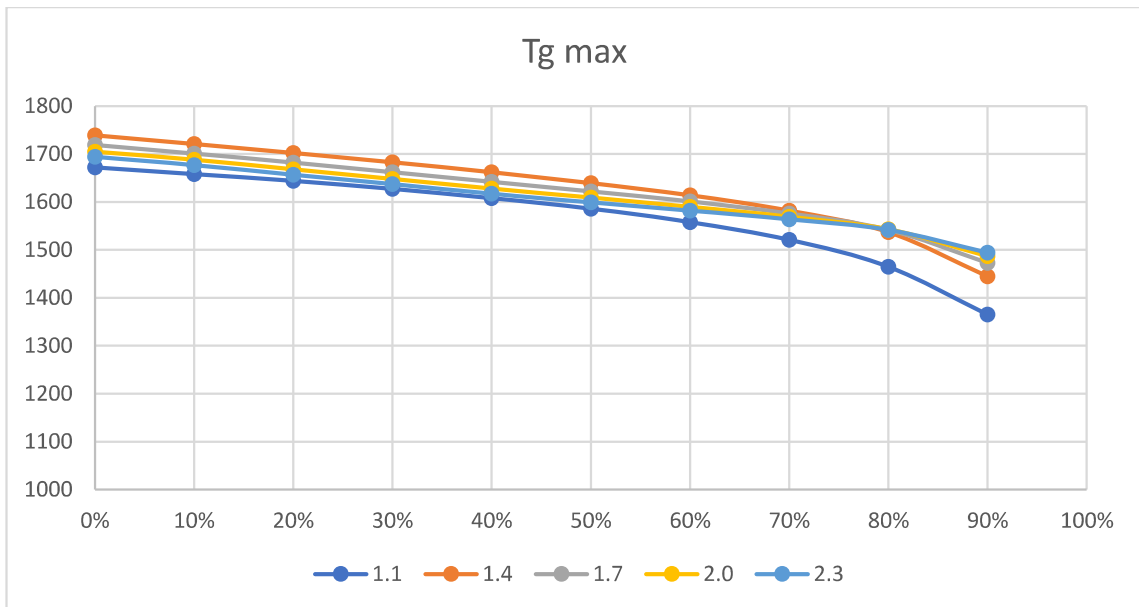
SENSIBILIDAD

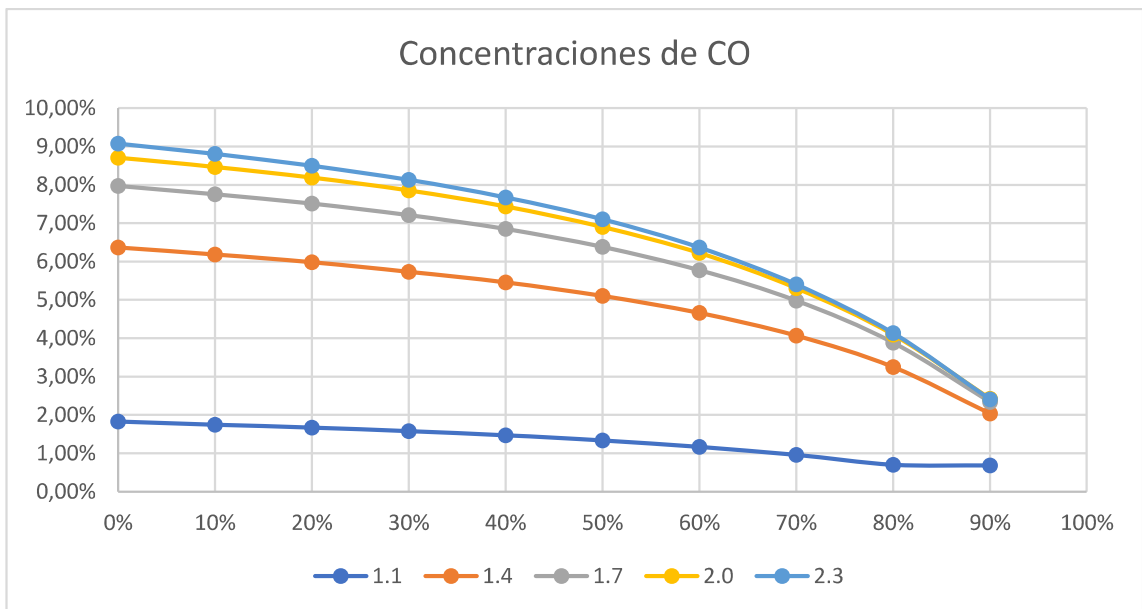
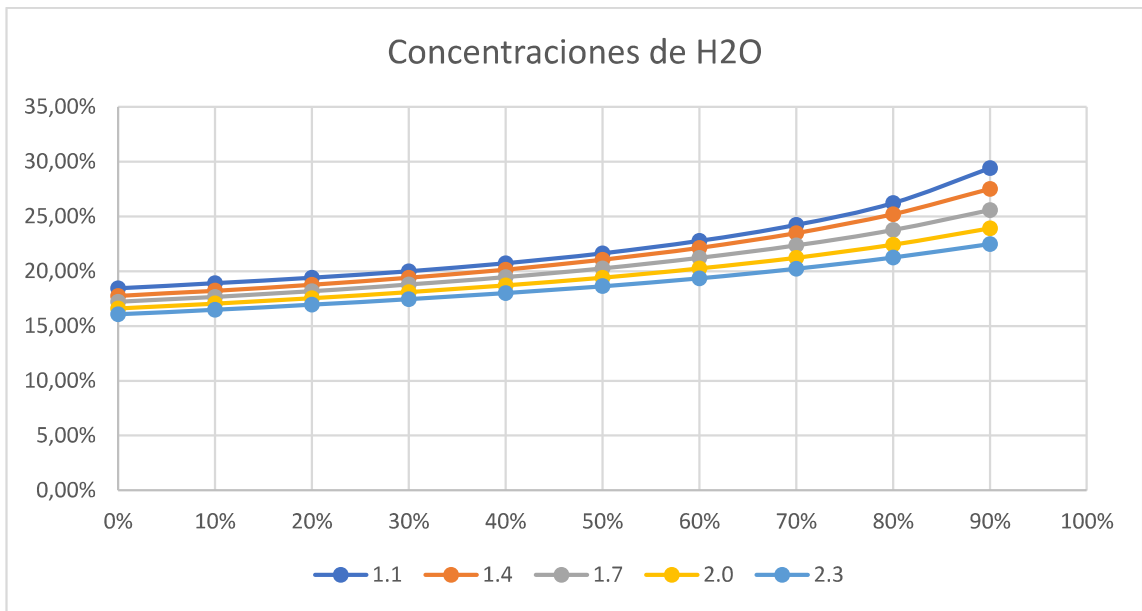
		H2				CO				CO2			
		CH4	H2	O2	N2	CH4	CO	O2	N2	CH4	CO2	O2	N2
1,1	0%	0,1036	0,0000	0,1883	0,7081	0,1036	0,0000	0,1883	0,7081	0,1036	0,0000	0,1883	0,7081
	10%	0,0999	0,0111	0,1868	0,7022	0,0999	0,0111	0,1868	0,7022	0,1024	0,0114	0,1862	0,7000
	20%	0,0957	0,0239	0,1849	0,6954	0,0957	0,0239	0,1849	0,6954	0,1010	0,0252	0,1836	0,6902
	30%	0,0908	0,0389	0,1828	0,6874	0,0908	0,0389	0,1828	0,6874	0,0992	0,0425	0,1803	0,6780
	40%	0,0850	0,0567	0,1803	0,6780	0,0850	0,0567	0,1803	0,6780	0,0969	0,0646	0,1762	0,6624
	50%	0,0780	0,0780	0,1773	0,6667	0,0780	0,0780	0,1773	0,6667	0,0939	0,0939	0,1706	0,6416
	60%	0,0694	0,1042	0,1736	0,6528	0,0694	0,1042	0,1736	0,6528	0,0896	0,1345	0,1630	0,6129
	70%	0,0587	0,1370	0,1690	0,6354	0,0587	0,1370	0,1690	0,6354	0,0834	0,1946	0,1517	0,5703
	80%	0,0448	0,1793	0,1630	0,6129	0,0448	0,1793	0,1630	0,6129	0,0732	0,2929	0,1332	0,5007
	90%	0,0262	0,2361	0,1550	0,5827	0,0262	0,2361	0,1550	0,5827	0,0536	0,4825	0,0975	0,3665
1,4	0%	0,1282	0,0000	0,1832	0,6886	0,1282	0,0000	0,1832	0,6886	0,1282	0,0000	0,1832	0,6886
	10%	0,1235	0,0137	0,1813	0,6816	0,1235	0,0137	0,1813	0,6816	0,1264	0,0140	0,1806	0,6790
	20%	0,1180	0,0295	0,1791	0,6734	0,1180	0,0295	0,1791	0,6734	0,1242	0,0311	0,1775	0,6673
	30%	0,1116	0,0478	0,1766	0,6639	0,1116	0,0478	0,1766	0,6639	0,1215	0,0521	0,1736	0,6528
	40%	0,1042	0,0694	0,1736	0,6528	0,1042	0,0694	0,1736	0,6528	0,1181	0,0787	0,1687	0,6344
	50%	0,0952	0,0952	0,1701	0,6395	0,0952	0,0952	0,1701	0,6395	0,1136	0,1136	0,1623	0,6104
	60%	0,0844	0,1266	0,1658	0,6233	0,0844	0,1266	0,1658	0,6233	0,1075	0,1613	0,1536	0,5776
	70%	0,0709	0,1655	0,1604	0,6032	0,0709	0,1655	0,1604	0,6032	0,0987	0,2303	0,1410	0,5301
	80%	0,0538	0,2151	0,1536	0,5776	0,0538	0,2151	0,1536	0,5776	0,0847	0,3390	0,1211	0,4552
	90%	0,0312	0,2804	0,1446	0,5438	0,0312	0,2804	0,1446	0,5438	0,0595	0,5357	0,0850	0,3197
1,7	0%	0,1515	0,0000	0,1783	0,6702	0,1515	0,0000	0,1783	0,6702	0,1515	0,0000	0,1783	0,6702
	10%	0,1456	0,0162	0,1761	0,6621	0,1456	0,0162	0,1761	0,6621	0,1490	0,0166	0,1753	0,6591
	20%	0,1389	0,0347	0,1736	0,6528	0,1389	0,0347	0,1736	0,6528	0,1460	0,0365	0,1717	0,6458
	30%	0,1311	0,0562	0,1707	0,6420	0,1311	0,0562	0,1707	0,6420	0,1423	0,0610	0,1674	0,6294
	40%	0,1220	0,0813	0,1674	0,6294	0,1220	0,0813	0,1674	0,6294	0,1376	0,0917	0,1619	0,6087
	50%	0,1111	0,1111	0,1634	0,6144	0,1111	0,1111	0,1634	0,6144	0,1316	0,1316	0,1548	0,5820

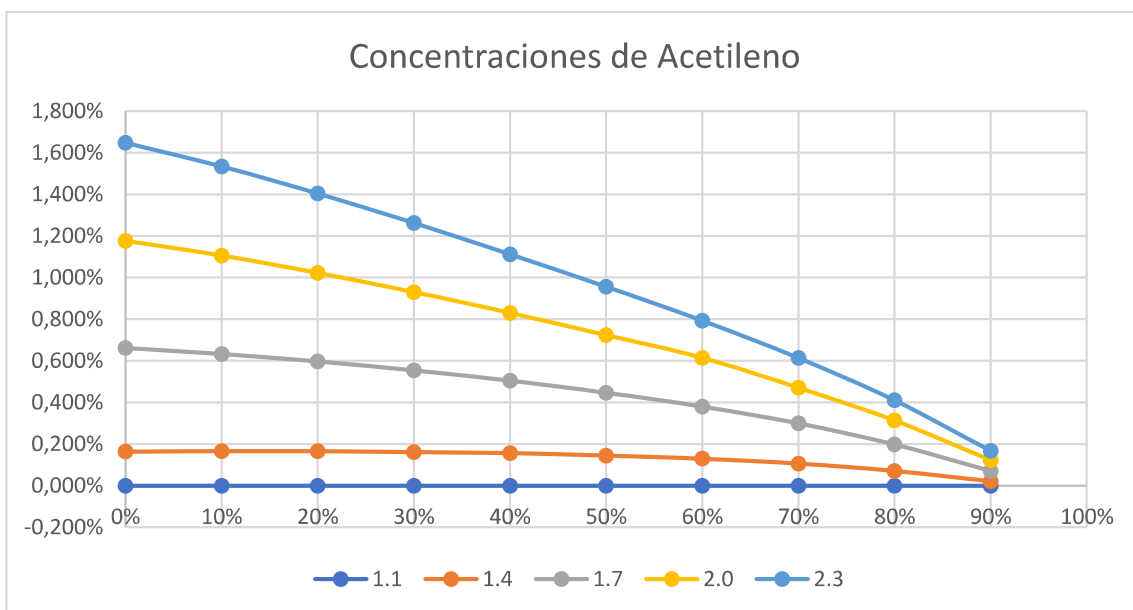
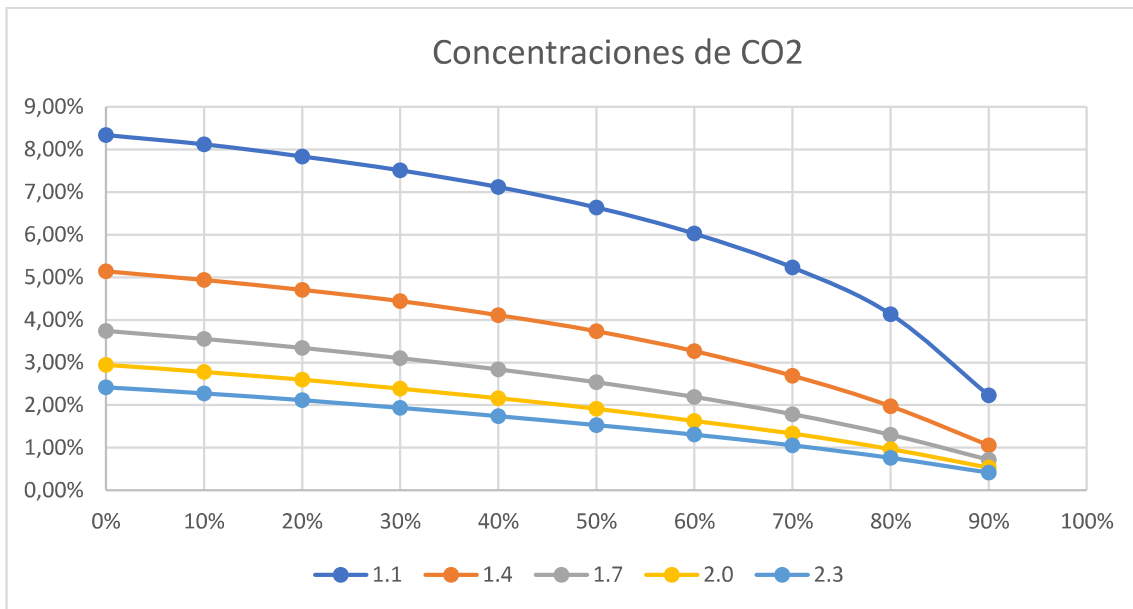
	60%	0,0980	0,1471	0,1586	0,5963	0,0980	0,1471	0,1586	0,5963	0,1235	0,1852	0,1452	0,5461
	70%	0,0820	0,1913	0,1527	0,5741	0,0820	0,1913	0,1527	0,5741	0,1119	0,2612	0,1317	0,4952
	80%	0,0617	0,2469	0,1452	0,5461	0,0617	0,2469	0,1452	0,5461	0,0943	0,3774	0,1110	0,4173
	90%	0,0355	0,3191	0,1356	0,5098	0,0355	0,3191	0,1356	0,5098	0,0641	0,5769	0,0754	0,2836
2	0%	0,1736	0,0000	0,1736	0,6528	0,1736	0,0000	0,1736	0,6528	0,1736	0,0000	0,1736	0,6528
	10%	0,1666	0,0185	0,1712	0,6437	0,1666	0,0185	0,1712	0,6437	0,1703	0,0189	0,1703	0,6404
	20%	0,1585	0,0396	0,1685	0,6334	0,1585	0,0396	0,1685	0,6334	0,1664	0,0416	0,1664	0,6256
	30%	0,1493	0,0640	0,1653	0,6215	0,1493	0,0640	0,1653	0,6215	0,1616	0,0693	0,1616	0,6076
	40%	0,1385	0,0923	0,1616	0,6076	0,1385	0,0923	0,1616	0,6076	0,1556	0,1037	0,1556	0,5851
	50%	0,1258	0,1258	0,1572	0,5912	0,1258	0,1258	0,1572	0,5912	0,1479	0,1479	0,1479	0,5562
	60%	0,1106	0,1658	0,1520	0,5716	0,1106	0,1658	0,1520	0,5716	0,1377	0,2066	0,1377	0,5179
	70%	0,0920	0,2147	0,1457	0,5477	0,0920	0,2147	0,1457	0,5477	0,1236	0,2883	0,1236	0,4646
	80%	0,0689	0,2755	0,1377	0,5179	0,0689	0,2755	0,1377	0,5179	0,1025	0,4098	0,1025	0,3852
	90%	0,0393	0,3534	0,1276	0,4798	0,0393	0,3534	0,1276	0,4798	0,0678	0,6098	0,0678	0,2547
2,3	0%	0,1946	0,0000	0,1692	0,6362	0,1946	0,0000	0,1692	0,6362	0,1946	0,0000	0,1692	0,6362
	10%	0,1864	0,0207	0,1666	0,6263	0,1864	0,0207	0,1666	0,6263	0,1905	0,0212	0,1656	0,6227
	20%	0,1771	0,0443	0,1636	0,6151	0,1771	0,0443	0,1636	0,6151	0,1856	0,0464	0,1614	0,6067
	30%	0,1664	0,0713	0,1602	0,6022	0,1664	0,0713	0,1602	0,6022	0,1796	0,0770	0,1562	0,5872
	40%	0,1539	0,1026	0,1562	0,5872	0,1539	0,1026	0,1562	0,5872	0,1722	0,1148	0,1498	0,5632
	50%	0,1394	0,1394	0,1515	0,5697	0,1394	0,1394	0,1515	0,5697	0,1629	0,1629	0,1416	0,5326
	60%	0,1221	0,1831	0,1460	0,5488	0,1221	0,1831	0,1460	0,5488	0,1506	0,2259	0,1310	0,4925
	70%	0,1011	0,2360	0,1393	0,5236	0,1011	0,2360	0,1393	0,5236	0,1338	0,3123	0,1164	0,4375
	80%	0,0753	0,3012	0,1310	0,4925	0,0753	0,3012	0,1310	0,4925	0,1094	0,4377	0,0951	0,3578
	90%	0,0426	0,3838	0,1205	0,4531	0,0426	0,3838	0,1205	0,4531	0,0707	0,6365	0,0615	0,2312

CONCENTRACIONES GASES PRODUCTOR ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD

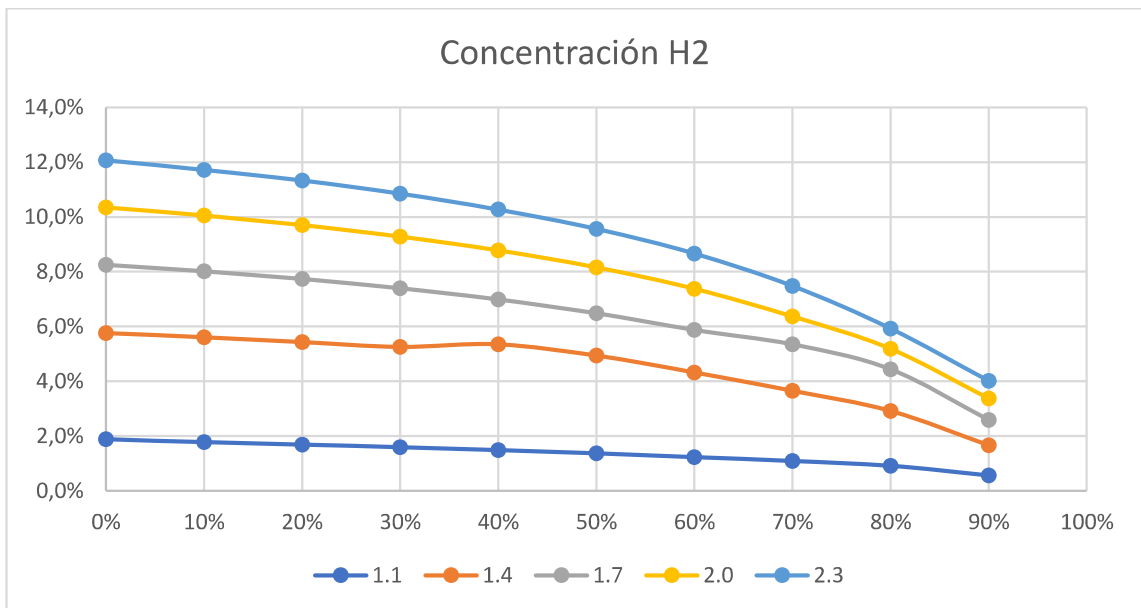
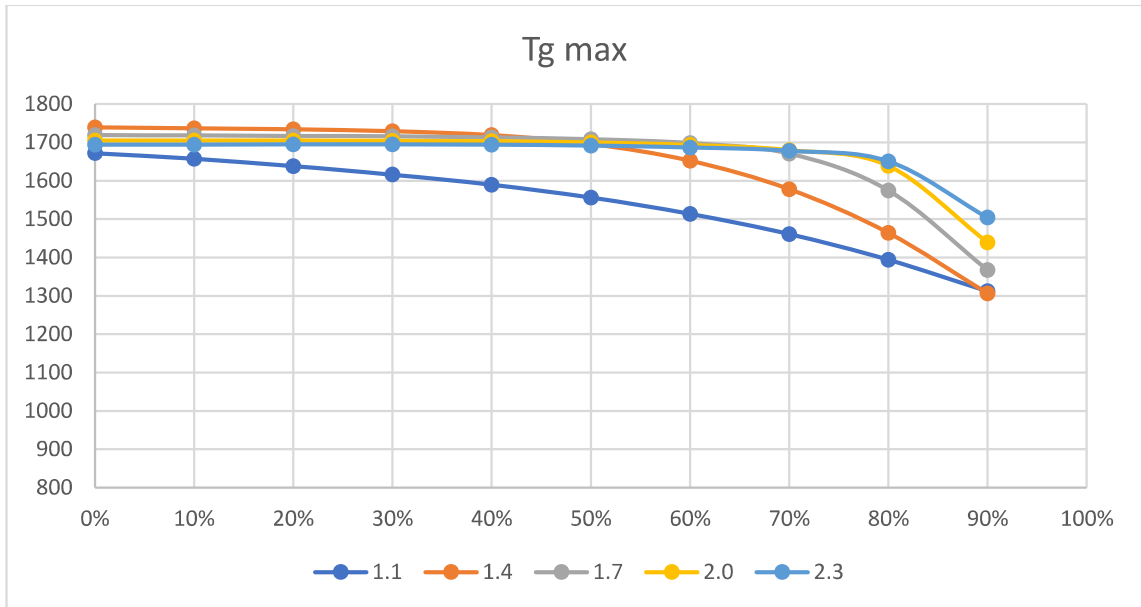
- Transición $CH_4 \rightarrow H_2$

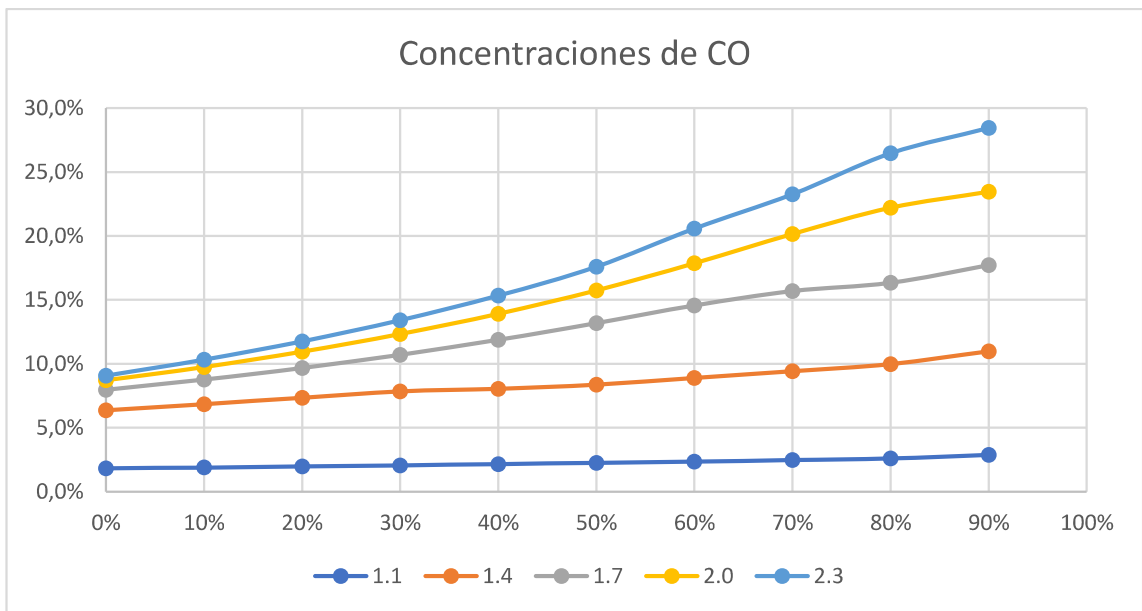
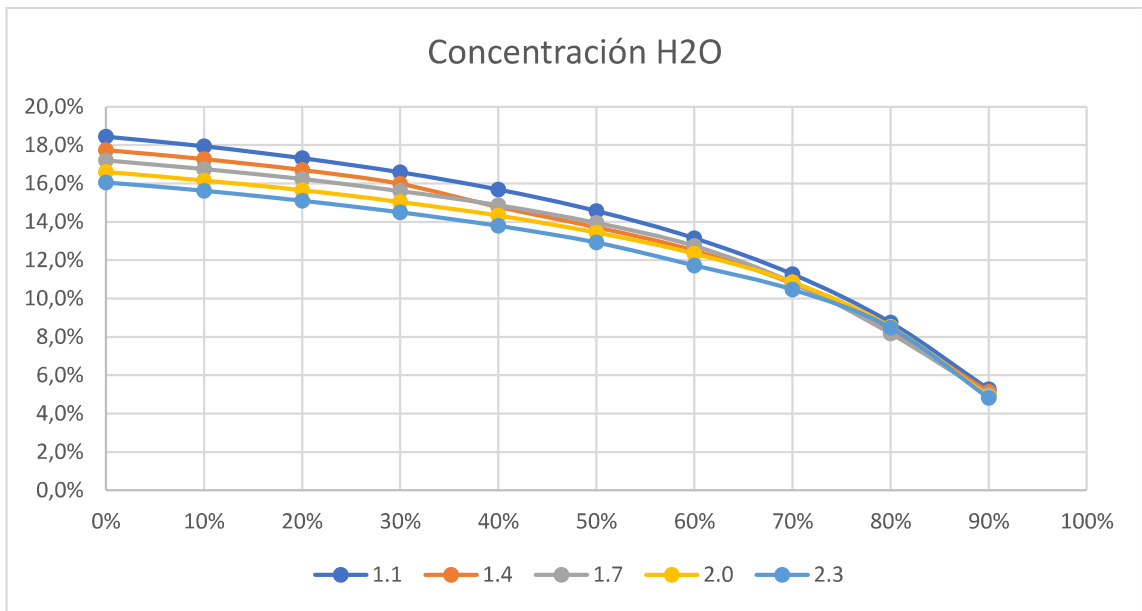


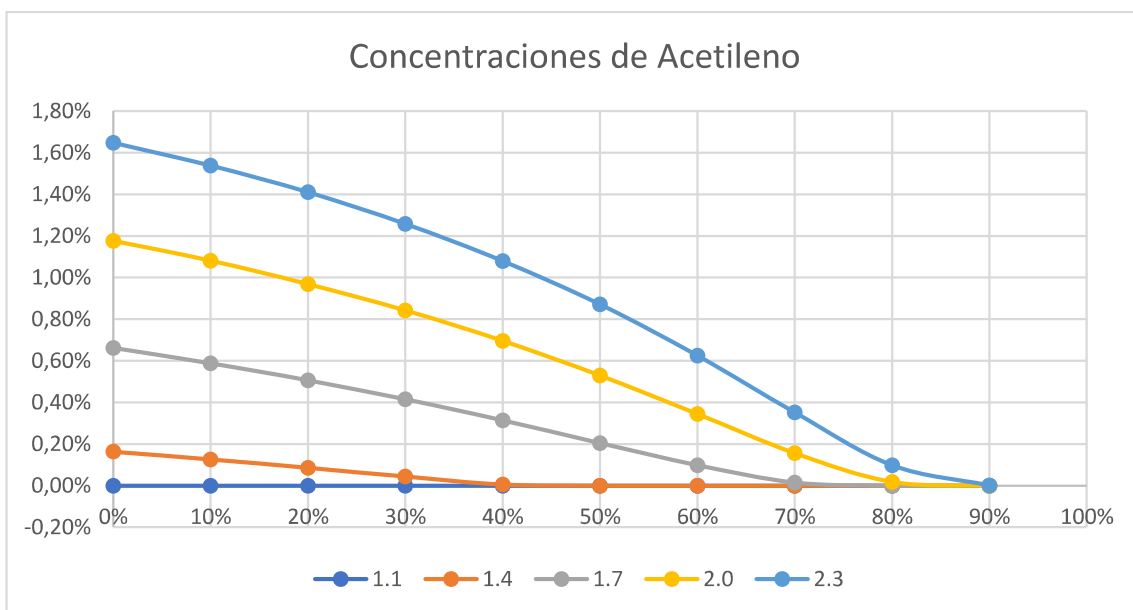
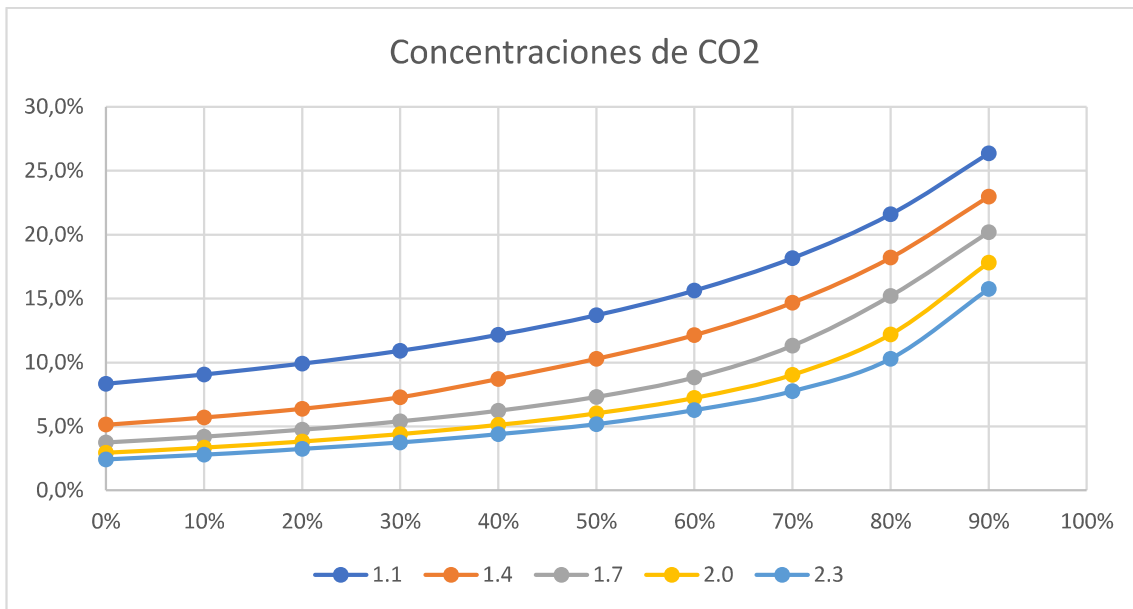




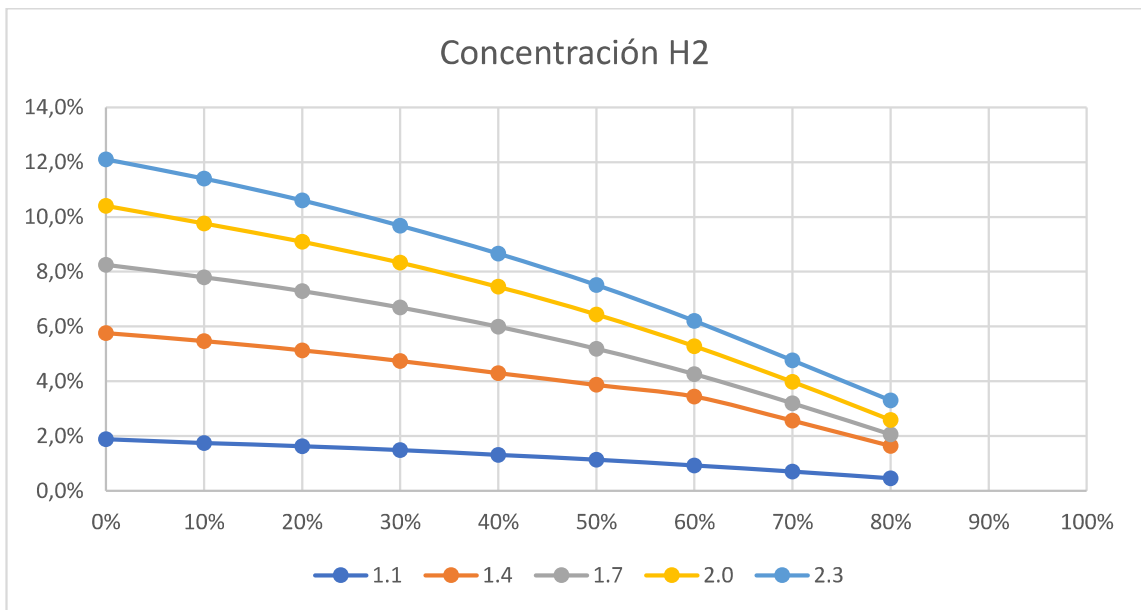
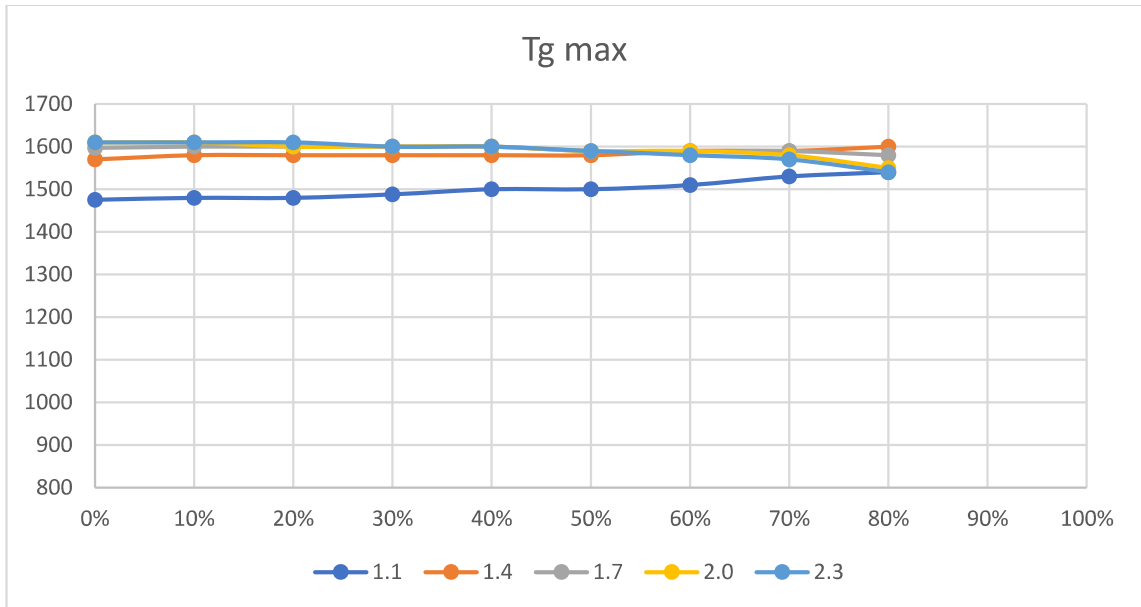
- Transición $CH_4 \rightarrow CO$

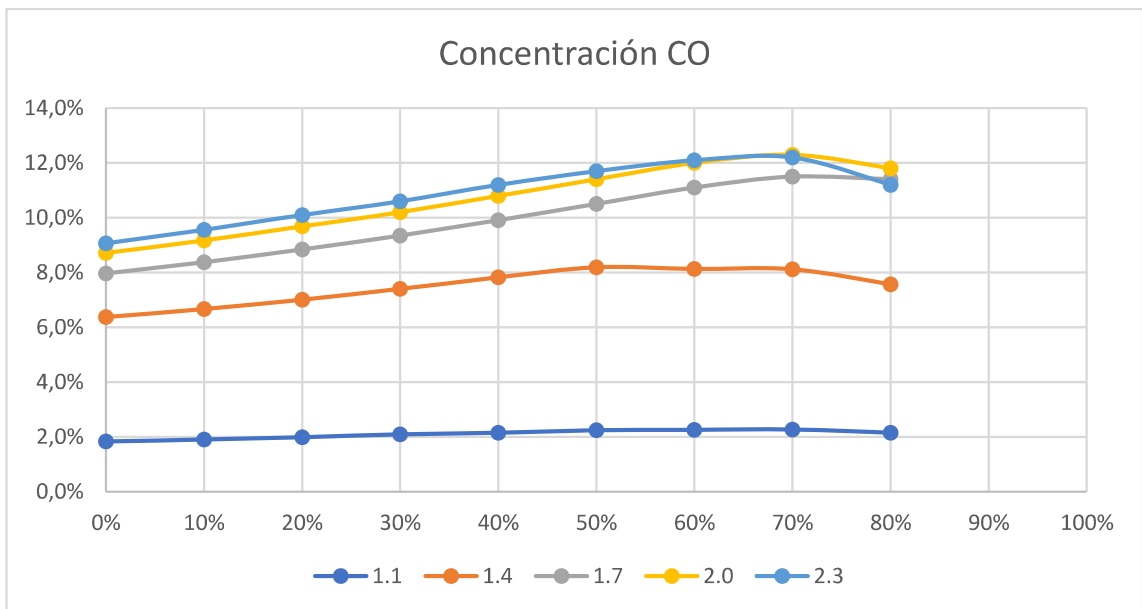
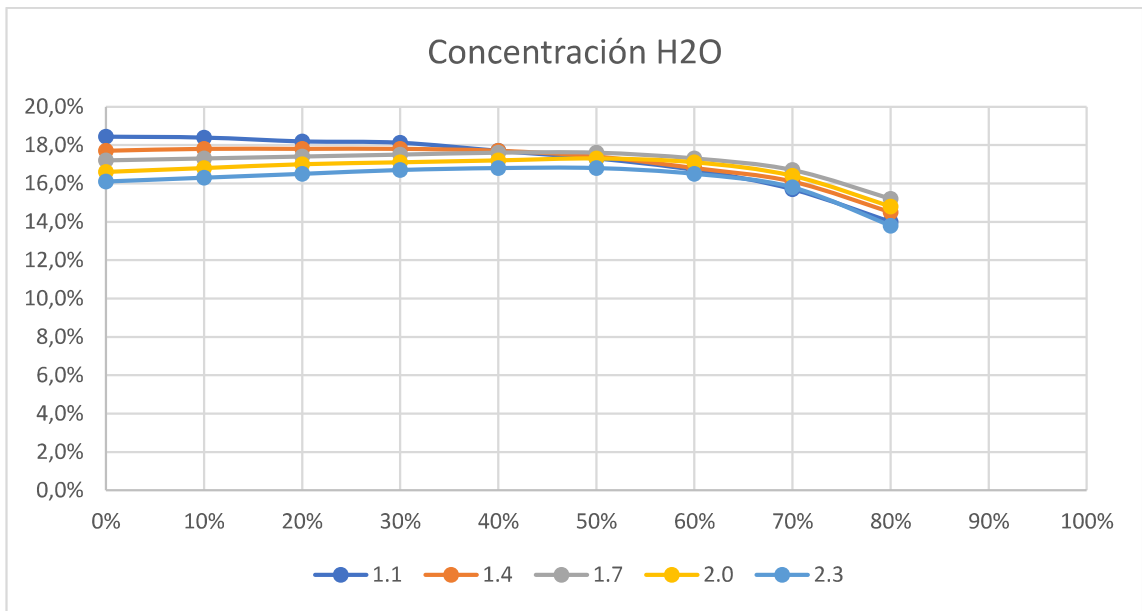


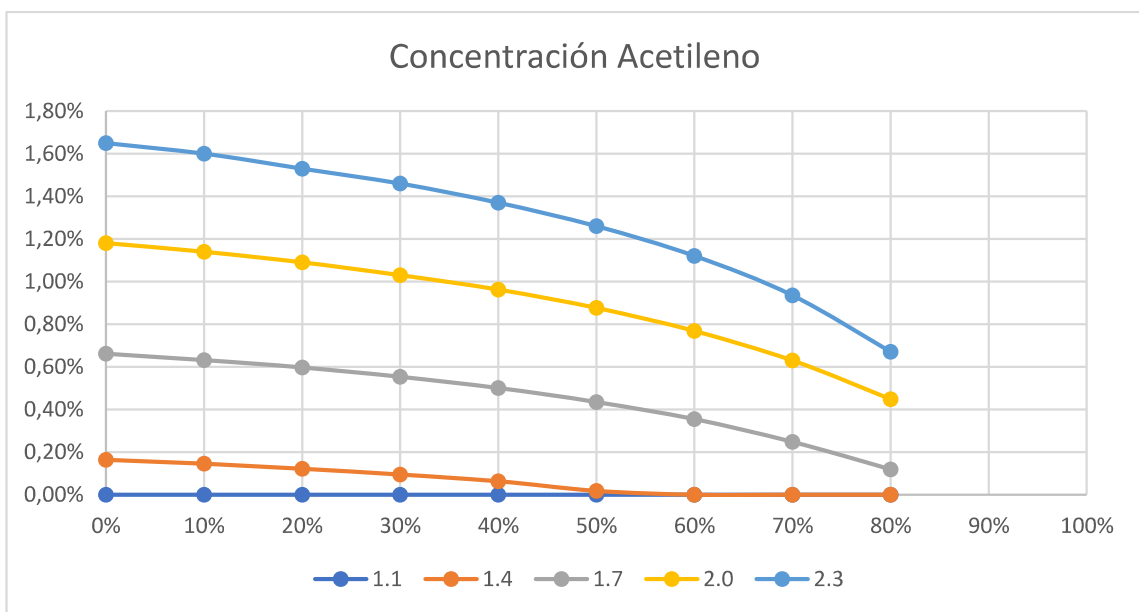
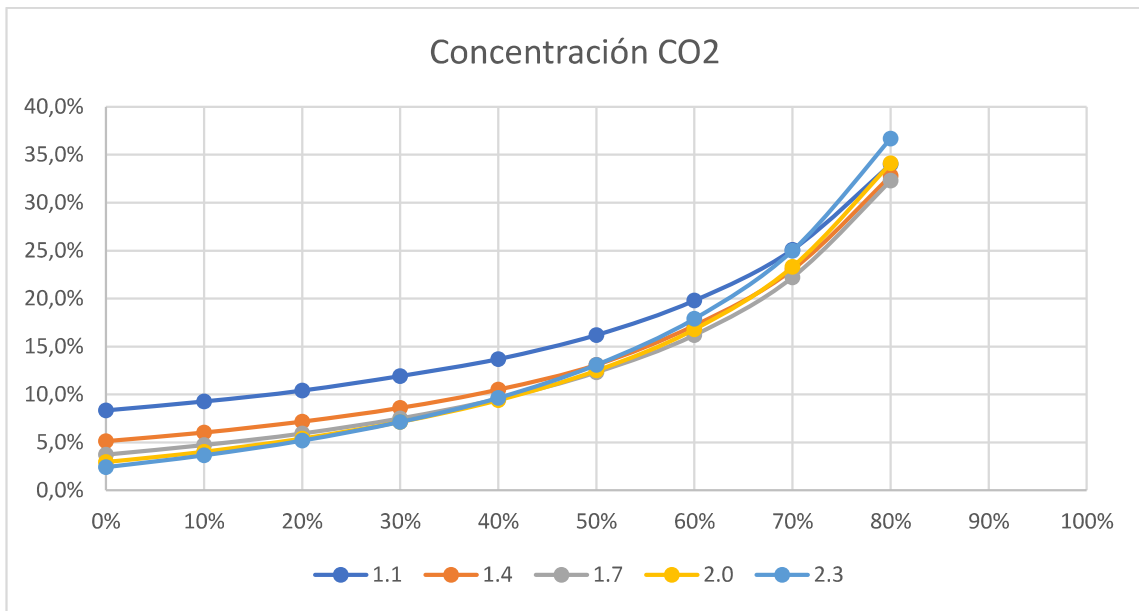




- Transición $CH_4 \rightarrow CO_2$







ANEXO 3:

CONCENTRACIONES DE ENTRADA PARA SIMULACIÓN CON COMBUSTIBLES

MODELO

- **Combustible modelo 1.1**

75% CH ₄ 25% COMB. MODELO							
R.E. (φ)	H ₂	CO	CO ₂	CH ₄	CH ₄ ad	O ₂	N ₂
0,4	0,0026	0,0036	0,0055	0,0008	0,0376	0,1996	0,7504
0,6	0,0038	0,0052	0,0081	0,0012	0,0550	0,1947	0,7320
0,8	0,0050	0,0068	0,0105	0,0015	0,0715	0,1900	0,7146
1	0,0061	0,0083	0,0128	0,0019	0,0873	0,1856	0,6979
1,2	0,0072	0,0098	0,0150	0,0022	0,1024	0,1814	0,6820
1,4	0,0082	0,0111	0,0172	0,0025	0,1168	0,1774	0,6669
1,6	0,0091	0,0125	0,0192	0,0028	0,1306	0,1735	0,6523
1,8	0,0100	0,0137	0,0211	0,0031	0,1438	0,1698	0,6384
2	0,0109	0,0149	0,0230	0,0033	0,1565	0,1663	0,6251
2,2	0,0118	0,0161	0,0248	0,0036	0,1686	0,1629	0,6124
2,4	0,0126	0,0172	0,0265	0,0038	0,1802	0,1596	0,6001

50% CH ₄ 50% COMB. MODELO							
R.E. (φ)	H ₂	CO	CO ₂	CH ₄	CH ₄ ad	O ₂	N ₂
0,4	0,0069	0,0095	0,0146	0,0021	0,0330	0,1962	0,7377
0,6	0,0100	0,0137	0,0211	0,0031	0,0480	0,1899	0,7141
0,8	0,0130	0,0177	0,0273	0,0040	0,0620	0,1840	0,6920
1	0,0157	0,0215	0,0331	0,0048	0,0751	0,1785	0,6712
1,2	0,0183	0,0250	0,0386	0,0056	0,0875	0,1733	0,6516
1,4	0,0208	0,0284	0,0437	0,0063	0,0992	0,1684	0,6331
1,6	0,0231	0,0316	0,0486	0,0070	0,1103	0,1637	0,6157
1,8	0,0253	0,0345	0,0532	0,0077	0,1207	0,1594	0,5992
2	0,0274	0,0374	0,0576	0,0083	0,1307	0,1552	0,5835
2,2	0,0293	0,0401	0,0617	0,0089	0,1401	0,1512	0,5686
2,4	0,0312	0,0426	0,0656	0,0095	0,1490	0,1475	0,5545

25% CH ₄ 75% COMB. MODELO							
R.E. (φ)	H ₂	CO	CO ₂	CH ₄	CH ₄ ad	O ₂	N ₂
0,4	0,0153	0,0208	0,0321	0,0047	0,0243	0,1897	0,7132
0,6	0,0218	0,0298	0,0459	0,0067	0,0347	0,1809	0,6802
0,8	0,0278	0,0380	0,0585	0,0085	0,0442	0,1729	0,6501
1	0,0333	0,0455	0,0700	0,0102	0,0530	0,1656	0,6226
1,2	0,0383	0,0523	0,0806	0,0117	0,0610	0,1589	0,5973
1,4	0,0430	0,0587	0,0903	0,0131	0,0683	0,1526	0,5740
1,6	0,0472	0,0645	0,0993	0,0144	0,0752	0,1469	0,5524
1,8	0,0512	0,0700	0,1077	0,0156	0,0815	0,1416	0,5324
2	0,0549	0,0750	0,1155	0,0168	0,0874	0,1366	0,5138
2,2	0,0584	0,0797	0,1228	0,0178	0,0929	0,1320	0,4964
2,4	0,0616	0,0841	0,1295	0,0188	0,0980	0,1277	0,4802

100% COMB. MODELO							
R.E. (φ)	H ₂	CO	CO ₂	CH ₄	CH ₄ ad	O ₂	N ₂
0,4	0,0383	0,0523	0,0805	0,0117	0,0000	0,1717	0,6455
0,6	0,0526	0,0719	0,1107	0,0161	0,0000	0,1573	0,5914
0,8	0,0648	0,0884	0,1362	0,0198	0,0000	0,1451	0,5457
1	0,0751	0,1026	0,1580	0,0229	0,0000	0,1347	0,5066
1,2	0,0841	0,1149	0,1769	0,0257	0,0000	0,1257	0,4727
1,4	0,0920	0,1256	0,1935	0,0281	0,0000	0,1178	0,4430
1,6	0,0989	0,1351	0,2080	0,0302	0,0000	0,1109	0,4169
1,8	0,1051	0,1435	0,2210	0,0321	0,0000	0,1047	0,3936
2	0,1106	0,1511	0,2326	0,0337	0,0000	0,0992	0,3728
2,2	0,1156	0,1578	0,2430	0,0353	0,0000	0,0942	0,3541
2,4	0,1201	0,1640	0,2524	0,0366	0,0000	0,0897	0,3372

- **Combustible modelo 1.2**

75% CH₄ 25% COMB. MODELO							
R.E. (φ)	H ₂	CO	CO ₂	CH ₄	CH ₄ ad	O ₂	N ₂
0,4	0,0035	0,0042	0,0048	0,0001	0,0378	0,1995	0,7501
0,6	0,0051	0,0061	0,0070	0,0002	0,0553	0,1946	0,7316
0,8	0,0067	0,0080	0,0091	0,0003	0,0720	0,1899	0,7141
1	0,0081	0,0097	0,0111	0,0003	0,0879	0,1855	0,6973
1,2	0,0095	0,0114	0,0130	0,0004	0,1031	0,1812	0,6813
1,4	0,0109	0,0130	0,0148	0,0005	0,1176	0,1772	0,6661
1,6	0,0122	0,0145	0,0166	0,0005	0,1314	0,1733	0,6515
1,8	0,0134	0,0160	0,0183	0,0006	0,1447	0,1696	0,6375
2	0,0146	0,0174	0,0199	0,0006	0,1574	0,1660	0,6242
2,2	0,0157	0,0187	0,0214	0,0007	0,1696	0,1626	0,6113
2,4	0,0168	0,0200	0,0229	0,0007	0,1813	0,1593	0,5990

50% CH₄ 50% COMB. MODELO							
R.E. (φ)	H ₂	CO	CO ₂	CH ₄	CH ₄ ad	O ₂	N ₂
0,4	0,0094	0,0112	0,0128	0,0004	0,0337	0,1959	0,7367
0,6	0,0136	0,0162	0,0185	0,0006	0,0489	0,1896	0,7127
0,8	0,0175	0,0209	0,0239	0,0007	0,0631	0,1836	0,6903
1	0,0212	0,0253	0,0290	0,0009	0,0764	0,1780	0,6692
1,2	0,0247	0,0295	0,0337	0,0011	0,0890	0,1727	0,6493
1,4	0,0280	0,0334	0,0382	0,0012	0,1008	0,1677	0,6306
1,6	0,0311	0,0371	0,0424	0,0013	0,1120	0,1630	0,6129
1,8	0,0341	0,0406	0,0465	0,0014	0,1226	0,1586	0,5962
2	0,0368	0,0440	0,0502	0,0016	0,1326	0,1544	0,5804
2,2	0,0395	0,0471	0,0538	0,0017	0,1421	0,1504	0,5654
2,4	0,0420	0,0501	0,0573	0,0018	0,1511	0,1466	0,5512

25% CH ₄ 75% COMB. MODELO							
R.E. (φ)	H ₂	CO	CO ₂	CH ₄	CH ₄ ad	O ₂	N ₂
0,4	0,0211	0,0252	0,0288	0,0009	0,0253	0,1888	0,7100
0,6	0,0301	0,0359	0,0411	0,0013	0,0361	0,1797	0,6758
0,8	0,0383	0,0457	0,0522	0,0016	0,0460	0,1715	0,6447
1	0,0458	0,0546	0,0624	0,0019	0,0549	0,1639	0,6164
1,2	0,0526	0,0628	0,0718	0,0022	0,0631	0,1570	0,5904
1,4	0,0589	0,0703	0,0803	0,0025	0,0707	0,1507	0,5666
1,6	0,0647	0,0772	0,0883	0,0027	0,0776	0,1448	0,5446
1,8	0,0701	0,0836	0,0956	0,0030	0,0841	0,1394	0,5242
2	0,0751	0,0896	0,1024	0,0032	0,0901	0,1344	0,5054
2,2	0,0797	0,0951	0,1087	0,0034	0,0956	0,1297	0,4878
2,4	0,0840	0,1003	0,1146	0,0036	0,1008	0,1254	0,4714

0% CH ₄ 100% COMB. MODELO							
R.E. (φ)	H ₂	CO	CO ₂	CH ₄	CH ₄ ad	O ₂	N ₂
0,4	0,0566	0,0676	0,0772	0,0024	0,0000	0,1673	0,6289
0,6	0,0771	0,0920	0,1051	0,0033	0,0000	0,1518	0,5707
0,8	0,0941	0,1123	0,1283	0,0040	0,0000	0,1389	0,5224
1	0,1084	0,1294	0,1479	0,0046	0,0000	0,1281	0,4817
1,2	0,1207	0,1440	0,1646	0,0051	0,0000	0,1188	0,4468
1,4	0,1313	0,1567	0,1791	0,0056	0,0000	0,1108	0,4166
1,6	0,1405	0,1677	0,1917	0,0060	0,0000	0,1038	0,3903
1,8	0,1487	0,1775	0,2028	0,0063	0,0000	0,0976	0,3671
2	0,1560	0,1861	0,2127	0,0066	0,0000	0,0921	0,3465
2,2	0,1624	0,1938	0,2216	0,0069	0,0000	0,0872	0,3280
2,4	0,1683	0,2008	0,2295	0,0071	0,0000	0,0828	0,3115

- **Combustible modelo 2.1**

75% CH₄ 25% COMB. MODELO							
R.E. (φ)	H ₂	CO	CO ₂	CH ₄	CH ₄ ad	O ₂	N ₂
0,4	0,0035	0,0053	0,0025	0,0009	0,0368	0,1998	0,7511
0,6	0,0051	0,0078	0,0037	0,0013	0,0539	0,1950	0,7331
0,8	0,0066	0,0102	0,0049	0,0018	0,0702	0,1904	0,7160
1	0,0081	0,0124	0,0059	0,0021	0,0858	0,1861	0,6996
1,2	0,0095	0,0146	0,0070	0,0025	0,1006	0,1819	0,6839
1,4	0,0108	0,0167	0,0079	0,0029	0,1148	0,1779	0,6690
1,6	0,0121	0,0186	0,0089	0,0032	0,1284	0,1741	0,6547
1,8	0,0133	0,0205	0,0098	0,0035	0,1414	0,1705	0,6410
2	0,0145	0,0223	0,0107	0,0038	0,1539	0,1670	0,6278
2,2	0,0156	0,0241	0,0115	0,0041	0,1659	0,1636	0,6152
2,4	0,0167	0,0257	0,0123	0,0044	0,1774	0,1604	0,6030

50% CH₄ 50% COMBUSTIBLE MODELO							
R.E. (φ)	H ₂	CO	CO ₂	CH ₄	CH ₄ ad	O ₂	N ₂
0,4	0,0089	0,0137	0,0065	0,0023	0,0314	0,1969	0,7403
0,6	0,0129	0,0199	0,0095	0,0034	0,0457	0,1909	0,7178
0,8	0,0167	0,0257	0,0123	0,0044	0,0591	0,1853	0,6966
1	0,0203	0,0312	0,0149	0,0054	0,0717	0,1799	0,6766
1,2	0,0236	0,0364	0,0174	0,0063	0,0837	0,1749	0,6577
1,4	0,0268	0,0413	0,0197	0,0071	0,0950	0,1702	0,6399
1,6	0,0298	0,0460	0,0219	0,0079	0,1057	0,1657	0,6230
1,8	0,0327	0,0504	0,0240	0,0087	0,1158	0,1614	0,6069
2	0,0354	0,0546	0,0260	0,0094	0,1255	0,1574	0,5917
2,2	0,0380	0,0586	0,0280	0,0101	0,1346	0,1535	0,5772
2,4	0,0405	0,0624	0,0298	0,0107	0,1434	0,1498	0,5634

25% CH ₄ 75% COMB. MODELO							
R.E. (φ)	H ₂	CO	CO ₂	CH ₄	CH ₄ ad	O ₂	N ₂
0,4	0,0184	0,0284	0,0136	0,0049	0,0218	0,1918	0,7212
0,6	0,0265	0,0409	0,0195	0,0070	0,0313	0,1838	0,6911
0,8	0,0339	0,0523	0,0249	0,0090	0,0400	0,1764	0,6634
1	0,0408	0,0628	0,0300	0,0108	0,0481	0,1696	0,6379
1,2	0,0471	0,0726	0,0346	0,0125	0,0556	0,1634	0,6142
1,4	0,0530	0,0817	0,0390	0,0140	0,0626	0,1575	0,5923
1,6	0,0585	0,0901	0,0430	0,0155	0,0690	0,1521	0,5718
1,8	0,0636	0,0980	0,0467	0,0168	0,0751	0,1470	0,5527
2	0,0684	0,1054	0,0503	0,0181	0,0807	0,1423	0,5349
2,2	0,0728	0,1123	0,0536	0,0193	0,0860	0,1378	0,5182
2,4	0,0770	0,1188	0,0567	0,0204	0,0910	0,1336	0,5025

100% COMB. MODELO							
R.E. (φ)	H ₂	CO	CO ₂	CH ₄	CH ₄ ad	O ₂	N ₂
0,4	0,0400	0,0617	0,0294	0,0106	0,0000	0,1803	0,6779
0,6	0,0561	0,0865	0,0412	0,0149	0,0000	0,1683	0,6330
0,8	0,0701	0,1081	0,0516	0,0186	0,0000	0,1579	0,5937
1	0,0825	0,1273	0,0607	0,0219	0,0000	0,1487	0,5589
1,2	0,0936	0,1443	0,0688	0,0248	0,0000	0,1404	0,5281
1,4	0,1035	0,1595	0,0761	0,0274	0,0000	0,1331	0,5004
1,6	0,1124	0,1733	0,0826	0,0298	0,0000	0,1265	0,4755
1,8	0,1204	0,1857	0,0886	0,0319	0,0000	0,1205	0,4530
2	0,1277	0,1970	0,0939	0,0338	0,0000	0,1150	0,4325
2,2	0,1344	0,2073	0,0989	0,0356	0,0000	0,1100	0,4138
2,4	0,1406	0,2167	0,1034	0,0372	0,0000	0,1055	0,3966

- **Combustible modelo 2.2**

75% CH₄ 25% COMB. MODELO							
R.E. (φ)	H₂	CO	CO₂	CH₄	CH₄ ad	O₂	N₂
0,4	0,0042	0,0059	0,0016	0,0006	0,0368	0,1998	0,7511
0,6	0,0061	0,0086	0,0024	0,0009	0,0539	0,1950	0,7331
0,8	0,0079	0,0112	0,0031	0,0012	0,0702	0,1904	0,7160
1	0,0097	0,0136	0,0038	0,0015	0,0857	0,1861	0,6996
1,2	0,0113	0,0160	0,0045	0,0017	0,1006	0,1819	0,6840
1,4	0,0129	0,0182	0,0051	0,0020	0,1148	0,1779	0,6690
1,6	0,0145	0,0204	0,0057	0,0022	0,1284	0,1741	0,6547
1,8	0,0159	0,0225	0,0063	0,0024	0,1414	0,1705	0,6410
2	0,0174	0,0245	0,0068	0,0026	0,1539	0,1670	0,6278
2,2	0,0187	0,0264	0,0074	0,0028	0,1659	0,1636	0,6152
2,4	0,0200	0,0282	0,0079	0,0030	0,1774	0,1604	0,6031

50% CH₄ 50% COMB. MODELO							
R.E. (φ)	H₂	CO	CO₂	CH₄	CH₄ ad	O₂	N₂
0,4	0,0106	0,0150	0,0042	0,0016	0,0314	0,1969	0,7403
0,6	0,0154	0,0218	0,0061	0,0023	0,0456	0,1909	0,7178
0,8	0,0200	0,0282	0,0079	0,0030	0,0590	0,1853	0,6966
1	0,0243	0,0342	0,0096	0,0037	0,0717	0,1800	0,6767
1,2	0,0283	0,0399	0,0112	0,0043	0,0836	0,1749	0,6578
1,4	0,0321	0,0453	0,0127	0,0049	0,0949	0,1702	0,6400
1,6	0,0357	0,0504	0,0141	0,0054	0,1056	0,1657	0,6231
1,8	0,0392	0,0552	0,0155	0,0059	0,1158	0,1614	0,6070
2	0,0424	0,0598	0,0167	0,0064	0,1254	0,1574	0,5918
2,2	0,0455	0,0642	0,0180	0,0069	0,1346	0,1535	0,5773
2,4	0,0485	0,0683	0,0191	0,0074	0,1433	0,1499	0,5635

25% CH ₄ 75% COMB. MODELO							
R.E. (φ)	H ₂	CO	CO ₂	CH ₄	CH ₄ ad	O ₂	N ₂
0,4	0,0221	0,0311	0,0087	0,0033	0,0217	0,1918	0,7212
0,6	0,0317	0,0447	0,0125	0,0048	0,0312	0,1838	0,6912
0,8	0,0406	0,0572	0,0160	0,0062	0,0400	0,1765	0,6636
1	0,0488	0,0688	0,0192	0,0074	0,0481	0,1697	0,6381
1,2	0,0564	0,0795	0,0222	0,0085	0,0555	0,1634	0,6144
1,4	0,0634	0,0894	0,0250	0,0096	0,0625	0,1576	0,5925
1,6	0,0700	0,0986	0,0276	0,0106	0,0689	0,1521	0,5721
1,8	0,0761	0,1073	0,0300	0,0115	0,0750	0,1471	0,5530
2	0,0818	0,1154	0,0323	0,0124	0,0806	0,1423	0,5352
2,2	0,0872	0,1229	0,0344	0,0132	0,0859	0,1379	0,5184
2,4	0,0922	0,1300	0,0364	0,0140	0,0909	0,1337	0,5027

100% COMB. MODELO							
R.E. (φ)	H ₂	CO	CO ₂	CH ₄	CH ₄ ad	O ₂	N ₂
0,4	0,0478	0,0674	0,0189	0,0073	0,0000	0,1804	0,6782
0,6	0,0670	0,0945	0,0264	0,0102	0,0000	0,1685	0,6334
0,8	0,0838	0,1182	0,0331	0,0127	0,0000	0,1580	0,5942
1	0,0987	0,1391	0,0389	0,0150	0,0000	0,1488	0,5595
1,2	0,1119	0,1577	0,0441	0,0170	0,0000	0,1406	0,5287
1,4	0,1237	0,1744	0,0488	0,0188	0,0000	0,1333	0,5011
1,6	0,1344	0,1894	0,0530	0,0204	0,0000	0,1266	0,4762
1,8	0,1440	0,2030	0,0568	0,0218	0,0000	0,1207	0,4537
2	0,1528	0,2154	0,0603	0,0232	0,0000	0,1152	0,4332
2,2	0,1608	0,2267	0,0635	0,0244	0,0000	0,1102	0,4145
2,4	0,1681	0,2370	0,0664	0,0255	0,0000	0,1057	0,3973

ANEXO 4

Temperatura máxima del sólido, temperatura máxima del gas, velocidad de propagación y concentraciones de salida de simulaciones con combustibles modelos.

COMBUSTIBLE MODELO 1

COMBUSTIBLE MODELO 1.1

C1.1 medición 25% CM – 75% CH₄

ϕ	Ts max [K]	Tg max [K]	u [cm/sg]	H ₂	O ₂	H ₂ O	CH ₄	CO	CO ₂	C ₂ H ₂	C ₂ H ₄
0,4	1294	1368	0,0004	0,0000	0,1201	0,0796	0,0000	0,0000	0,0476	0,0000	0,0000
0,6	1315	1432	-0,0018	0,0000	0,0761	0,1186	0,0000	0,0000	0,0708	0,0000	0,0000
0,8	1333	1492	-0,0036	0,0000	0,0383	0,1519	0,0000	0,0000	0,0908	0,0000	0,0000
1	1430	1590	-0,0045	0,0004	0,0004	0,1850	0,0000	0,0004	0,1110	0,0000	0,0000
1,2	1500	1700	-0,0031	0,0332	0,0000	0,1770	0,0000	0,0375	0,0885	0,0000	0,0000
1,4	1562	1726	-0,0019	0,0533	0,0000	0,1766	0,0013	0,0699	0,0663	0,0011	0,0000
1,6	1581	1711	-0,0011	0,0688	0,0000	0,1740	0,0049	0,0847	0,0559	0,0040	0,0000
1,8	1590	1700	-0,0005	0,0829	0,0000	0,1710	0,0090	0,0937	0,0496	0,0071	0,0000
2	1600	1690	0,0001	0,0953	0,0000	0,1670	0,0135	0,0995	0,0455	0,0101	0,0000
2,2	1600	1680	0,0006	0,1060	0,0001	0,1640	0,0184	0,1030	0,0428	0,0130	0,0000
2,4	1600	1680	0,0010	0,1160	0,0001	0,1600	0,0235	0,1060	0,0410	0,0156	0,0000

C1.1 medición 50% CM – 50% CH₄

ϕ	Ts max [K]	Tg max [K]	u [cm/sg]	H ₂	O ₂	H ₂ O	CH ₄	CO	CO ₂	C ₂ H ₂	C ₂ H ₄
0,4	1278	1348	0,0003	0,0000	0,1188	0,0777	0,0000	0,0000	0,0597	0,0000	0,0000
0,6	1300	1410	-0,0018	0,0000	0,0768	0,1140	0,0000	0,0000	0,0869	0,0000	0,0000
0,8	1320	1470	-0,0037	0,0000	0,0372	0,1470	0,0000	0,0000	0,1130	0,0000	0,0000
1	1410	1560	-0,0045	0,0003	0,0004	0,1790	0,0000	0,0004	0,1370	0,0000	0,0000
1,2	1470	1660	-0,0031	0,0283	0,0000	0,1740	0,0000	0,0400	0,1150	0,0000	0,0000
1,4	1540	1700	-0,0018	0,0472	0,0000	0,1740	0,0005	0,0775	0,0917	0,0005	0,0000
1,6	1560	1680	-0,0010	0,0604	0,0000	0,1730	0,0037	0,0966	0,0809	0,0027	0,0001
1,8	1570	1670	-0,0004	0,0728	0,0001	0,1710	0,0073	0,1080	0,0754	0,0052	0,0002
2	1575	1662	0,0002	0,0840	0,0001	0,1672	0,0115	0,1164	0,0725	0,0077	0,0004
2,2	1577	1654	0,0007	0,0938	0,0001	0,1637	0,0160	0,1219	0,0712	0,0101	0,0006
2,4	1578	1647	0,0011	0,1023	0,0001	0,1603	0,0208	0,1258	0,0710	0,0122	0,0008

C1.1 medición 75% CM – 25% CH₄

ϕ	Ts max [K]	Tg max [K]	u [cm/sg]	H ₂	O ₂	H ₂ O	CH ₄	CO	CO ₂	C ₂ H ₂	C ₂ H ₄
0,4	1250	1320	0,0001	0,0000	0,1160	0,0746	0,0000	0,0000	0,0834	0,0000	0,0000
0,6	1270	1370	-0,0020	0,0000	0,0742	0,1070	0,0000	0,0000	0,1200	0,0000	0,0000
0,8	1284	1424	-0,0037	0,0000	0,0358	0,1377	0,0000	0,0000	0,1543	0,0000	0,0000
1	1361	1500	-0,0045	0,0004	0,0003	0,1657	0,0000	0,0007	0,1852	0,0000	0,0000
1,2	1410	1580	-0,0033	0,0220	0,0000	0,1640	0,0000	0,0425	0,1660	0,0000	0,0000
1,4	1490	1650	-0,0018	0,0408	0,0000	0,1630	0,0000	0,0800	0,1480	0,0000	0,0000
1,6	1515	1632	-0,0009	0,0479	0,0000	0,1681	0,0017	0,1116	0,1313	0,0011	0,0001
1,8	1520	1620	-0,0003	0,0582	0,0001	0,1670	0,0044	0,1280	0,1270	0,0026	0,0002
2	1530	1600	0,0003	0,0680	0,0001	0,1630	0,0078	0,1400	0,1250	0,0043	0,0003
2,2	1530	1590	0,0007	0,0768	0,0002	0,1600	0,0114	0,1470	0,1270	0,0058	0,0005
2,4	1527	1583	0,0011	0,0846	0,0002	0,1556	0,0154	0,1530	0,1287	0,0071	0,0006

C1.1 medición 100% CM

ϕ	Ts max [K]	Tg max [K]	u [cm/sg]	H ₂	O ₂	H ₂ O	CH ₄	CO	CO ₂	C ₂ H ₂	C ₂ H ₄
0,4	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
0,6	1200	1280	-0,0023	0,0000	0,0670	0,0904	0,0000	0,0000	0,2120	0,0000	0,0000
0,8	1190	1300	-0,0040	0,0000	0,0313	0,1130	0,0000	0,0000	0,2650	0,0000	0,0000
1	1220	1330	-0,0050	0,0002	0,0004	0,1320	0,0000	0,0006	0,3110	0,0000	0,0000
1,2	1200	1340	-0,0043	0,0138	0,0000	0,1330	0,0000	0,0406	0,3020	0,0000	0,0000
1,4	1260	1380	-0,0030	0,0237	0,0000	0,1340	0,0000	0,0769	0,2930	0,0000	0,0000
1,6	1310	1430	-0,0017	0,0310	0,0000	0,1370	0,0000	0,1090	0,2840	0,0000	0,0000
1,8	1360	1450	-0,0008	0,0337	0,0000	0,1420	0,0002	0,1400	0,2730	0,0000	0,0000
2	1370	1440	-0,0001	0,0395	0,0001	0,1430	0,0009	0,1610	0,2700	0,0002	0,0000
2,2	1380	1430	0,0004	0,0466	0,0002	0,1410	0,0019	0,1760	0,2700	0,0004	0,0001
2,4	1380	1420	0,0008	0,0539	0,0003	0,1370	0,0031	0,1870	0,2720	0,0006	0,0002

COMBUSTIBLE MODELO 1.2

C1.2 medición 25% CM – 75% CH₄

ϕ	Ts max [K]	Tg max [K]	u [cm/sg]	H ₂	O ₂	H ₂ O	CH ₄	CO	CO ₂	C ₂ H ₂	C ₂ H ₄
0,4	1290	1360	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
0,6	1310	1430	-0,0018	0,0000	0,0785	0,1170	0,0000	0,0000	0,0690	0,0000	0,0000
0,8	1330	1490	-0,0037	0,0000	0,0382	0,1520	0,0000	0,0000	0,0901	0,0000	0,0000
1	1420	1590	-0,0046	0,0003	0,0005	0,1860	0,0000	0,0003	0,1100	0,0000	0,0000
1,2	1501	1701	-0,0032	0,0343	0,0000	0,1773	0,0000	0,0379	0,0870	0,0000	0,0000
1,4	1560	1720	-0,0020	0,0537	0,0000	0,1770	0,0013	0,0698	0,0650	0,0011	0,0000
1,6	1580	1710	-0,0012	0,0694	0,0000	0,1740	0,0049	0,0846	0,0546	0,0039	0,0001
1,8	1590	1700	-0,0006	0,0837	0,0000	0,1710	0,0090	0,0938	0,0482	0,0069	0,0003
2	1590	1690	0,0000	0,0963	0,0000	0,1670	0,0135	0,0997	0,0439	0,0099	0,0005
2,2	1600	1680	0,0005	0,1080	0,0001	0,1640	0,0185	0,1040	0,0409	0,0128	0,0007
2,4	1600	1670	0,0009	0,1170	0,0001	0,1600	0,0236	0,1070	0,0391	0,0153	0,0010

C1.2 medición 50% CM – 50% CH₄

ϕ	Ts max [K]	Tg max [K]	u [cm/sg]	H ₂	O ₂	H ₂ O	CH ₄	CO	CO ₂	C ₂ H ₂	C ₂ H ₄
0,4	1270	1340	0,0002	0,0000	0,1190	0,0784	0,0000	0,0000	0,0587	0,0000	0,0000
0,6	1290	1400	-0,0019	0,0000	0,0768	0,1140	0,0000	0,0000	0,0855	0,0000	0,0000
0,8	1300	1460	-0,0039	0,0000	0,0375	0,1480	0,0000	0,0000	0,1110	0,0000	0,0000
1	1390	1550	-0,0047	0,0003	0,0005	0,1800	0,0000	0,0004	0,1340	0,0000	0,0000
1,2	1460	1650	-0,0034	0,0291	0,0000	0,1740	0,0000	0,0396	0,1130	0,0000	0,0000
1,4	1530	1690	-0,0020	0,0481	0,0000	0,1750	0,0005	0,0770	0,0894	0,0005	0,0000
1,6	1550	1680	-0,0012	0,0616	0,0000	0,1740	0,0036	0,0966	0,0780	0,0026	0,0001
1,8	1560	1660	-0,0006	0,0746	0,0001	0,1710	0,0073	0,1090	0,0721	0,0049	0,0002
2	1570	1650	0,0000	0,0862	0,0001	0,1670	0,0114	0,1170	0,0688	0,0073	0,0004
2,2	1570	1640	0,0005	0,0964	0,0001	0,1640	0,0159	0,1230	0,0671	0,0095	0,0006
2,4	1570	1640	0,0009	0,1050	0,0001	0,1600	0,0207	0,1280	0,0666	0,0115	0,0008

C1.2 medición 75% CM – 25% CH₄

ϕ	Ts max [K]	Tg max [K]	u [cm/sg]	H ₂	O ₂	H ₂ O	CH ₄	CO	CO ₂	C ₂ H ₂	C ₂ H ₄
0,4	1240	1300	-0,0001	0,0000	0,1160	0,0752	0,0000	0,0000	0,0821	0,0000	0,0000
0,6	1250	1350	-0,0023	0,0000	0,0744	0,1090	0,0000	0,0000	0,1180	0,0000	0,0000
0,8	1260	1400	-0,0042	0,0000	0,0358	0,1390	0,0000	0,0000	0,1520	0,0000	0,0000
1	1320	1470	-0,0051	0,0002	0,0004	0,1680	0,0000	0,0004	0,1830	0,0000	0,0000
1,2	1370	1550	-0,0039	0,0230	0,0000	0,1650	0,0000	0,0414	0,1640	0,0000	0,0000
1,4	1460	1620	-0,0023	0,0423	0,0000	0,1640	0,0000	0,0788	0,1460	0,0000	0,0000
1,6	1490	1610	-0,0014	0,0496	0,0000	0,1690	0,0015	0,1120	0,1280	0,0008	0,0000
1,8	1500	1600	-0,0007	0,0609	0,0001	0,1680	0,0040	0,1300	0,1220	0,0021	0,0001
2	1510	1580	-0,0001	0,0715	0,0001	0,1650	0,0071	0,1430	0,1200	0,0035	0,0003
2,2	1510	1570	0,0003	0,0811	0,0002	0,1610	0,0105	0,1520	0,1200	0,0047	0,0004
2,4	1510	1560	0,0007	0,0899	0,0002	0,1560	0,0142	0,1590	0,1210	0,0058	0,0006

C1.2 medición 100% CM

ϕ	Ts max [K]	Tg max [K]	u [cm/sg]	H ₂	O ₂	H ₂ O	CH ₄	CO	CO ₂	C ₂ H ₂	C ₂ H ₄
0,4	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
0,6	1150	1230	-0,0031	0,0000	0,0663	0,0914	0,0000	0,0002	0,2190	0,0000	0,0000
0,8	1120	1230	-0,0053	0,0000	0,0313	0,1140	0,0000	0,0009	0,2720	0,0000	0,0000
1	1080	1230	-0,0073	0,0003	0,0008	0,1330	0,0000	0,0013	0,3180	0,0000	0,0000
1,2	1010	1200	-0,0077	0,0133	0,0000	0,1340	0,0000	0,0399	0,3120	0,0000	0,0000
1,4	1040	1200	-0,0063	0,0205	0,0001	0,1380	0,0001	0,0779	0,3010	0,0000	0,0000
1,6	1080	1210	-0,0048	0,0276	0,0002	0,1400	0,0003	0,1090	0,2930	0,0000	0,0000
1,8	1120	1220	-0,0036	0,0356	0,0003	0,1400	0,0004	0,1340	0,2880	0,0000	0,0000
2	1150	1230	-0,0027	0,0440	0,0003	0,1390	0,0007	0,1540	0,2860	0,0000	0,0000
2,2	1170	1240	-0,0019	0,0524	0,0003	0,1360	0,0009	0,1710	0,2850	0,0000	0,0000
2,4	1190	1240	-0,0013	0,0606	0,0003	0,1340	0,0011	0,1850	0,2840	0,0000	0,0000

COMBUSTIBLE MODELO 2

COMBUSTIBLE MODELO 2.1

C2.1 medición 25% CM – 75% CH₄

ϕ	Ts max [K]	Tg max [K]	u [cm/sg]	H ₂	O ₂	H ₂ O	CH ₄	CO	CO ₂	C ₂ H ₂	C ₂ H ₄
0,4	1290	1360	0,0003	0,0000	0,1210	0,0793	0,0000	0,0000	0,0457	0,0000	0,0000
0,6	1310	1420	-0,0018	0,0000	0,0787	0,1160	0,0000	0,0000	0,0671	0,0000	0,0000
0,8	1330	1490	-0,0038	0,0000	0,0383	0,1520	0,0000	0,0000	0,0878	0,0000	0,0000
1	1420	1590	-0,0047	0,0003	0,0004	0,1850	0,0000	0,0004	0,1070	0,0000	0,0000
1,2	1490	1700	-0,0033	0,0342	0,0000	0,1760	0,0000	0,0368	0,0849	0,0000	0,0000
1,4	1560	1720	-0,0021	0,0547	0,0000	0,1750	0,0013	0,0696	0,0620	0,0011	0,0000
1,6	1580	1710	-0,0013	0,0707	0,0000	0,1730	0,0049	0,0847	0,0510	0,0039	0,0001
1,8	1590	1700	-0,0007	0,0853	0,0000	0,1690	0,0089	0,0941	0,0442	0,0069	0,0003
2	1590	1690	-0,0001	0,0982	0,0000	0,1650	0,0134	0,1000	0,0395	0,0099	0,0005
2,2	1600	1680	0,0004	0,1100	0,0001	0,1620	0,0182	0,1050	0,0361	0,0127	0,0007
2,4	1600	1680	0,0008	0,1190	0,0001	0,1580	0,0234	0,1080	0,0336	0,0153	0,0010

C2.1 medición 50% CM – 50% CH₄

ϕ	Ts max [K]	Tg max [K]	u [cm/sg]	H ₂	O ₂	H ₂ O	CH ₄	CO	CO ₂	C ₂ H ₂	C ₂ H ₄
0,4	1270	1340	0,0001	0,0000	0,1200	0,0772	0,0000	0,0000	0,0545	0,0000	0,0000
0,6	1290	1400	-0,0021	0,0000	0,0776	0,1130	0,0000	0,0000	0,0798	0,0000	0,0000
0,8	1300	1460	-0,0041	0,0000	0,0379	0,1470	0,0000	0,0000	0,1040	0,0000	0,0000
1	1380	1540	-0,0051	0,0004	0,0003	0,1790	0,0000	0,0004	0,1260	0,0000	0,0000
1,2	1450	1650	-0,0037	0,0308	0,0000	0,1720	0,0000	0,0391	0,1040	0,0000	0,0000
1,4	1530	1690	-0,0023	0,0507	0,0000	0,1720	0,0005	0,0766	0,0800	0,0005	0,0000
1,6	1550	1680	-0,0015	0,0650	0,0000	0,1700	0,0036	0,0969	0,0673	0,0025	0,0001
1,8	1560	1670	-0,0009	0,0787	0,0001	0,1670	0,0072	0,1100	0,0600	0,0049	0,0002
2	1570	1660	-0,0003	0,0907	0,0001	0,1630	0,0112	0,1190	0,0557	0,0073	0,0004
2,2	1570	1650	0,0002	0,1020	0,0001	0,1600	0,0157	0,1260	0,0523	0,0095	0,0006
2,4	1580	1650	0,0006	0,1110	0,0001	0,1560	0,0204	0,1310	0,0503	0,0116	0,0008

C2.1 medición 75% CM – 25% CH₄

ϕ	Ts max [K]	Tg max [K]	u [cm/sg]	H ₂	O ₂	H ₂ O	CH ₄	CO	CO ₂	C ₂ H ₂	C ₂ H ₄
0,4	1240	1310	-0,0002	0,0000	0,1180	0,0735	0,0000	0,0000	0,0703	0,0000	0,0000
0,6	1250	1350	-0,0024	0,0000	0,0784	0,1050	0,0000	0,0000	0,1010	0,0000	0,0000
0,8	1250	1410	-0,0047	0,0000	0,0369	0,1380	0,0000	0,0000	0,1320	0,0000	0,0000
1	1300	1470	-0,0059	0,0003	0,0003	0,1670	0,0000	0,0004	0,1600	0,0000	0,0000
1,2	1360	1550	-0,0046	0,0263	0,0000	0,1620	0,0000	0,0409	0,1390	0,0000	0,0000
1,4	1450	1630	-0,0029	0,0484	0,0000	0,1590	0,0000	0,0782	0,1200	0,0000	0,0000
1,6	1500	1630	-0,0019	0,0563	0,0000	0,1640	0,0016	0,1130	0,0988	0,0009	0,0001
1,8	1510	1620	-0,0012	0,0685	0,0001	0,1620	0,0042	0,1320	0,0898	0,0023	0,0001
2	1520	1610	-0,0007	0,0798	0,0001	0,1590	0,0072	0,1470	0,0847	0,0038	0,0003
2,2	1530	1600	-0,0002	0,0900	0,0001	0,1560	0,0106	0,1580	0,0816	0,0052	0,0004
2,4	1530	1590	0,0003	0,0992	0,0002	0,1520	0,0143	0,1660	0,0799	0,0065	0,0006

C2.1 medición 100% CM

ϕ	Ts max [K]	Tg max [K]	u [cm/sg]	H ₂	O ₂	H ₂ O	CH ₄	CO	CO ₂	C ₂ H ₂	C ₂ H ₄
0,4	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
0,6	1180	1270	-0,0035	0,0000	0,0724	0,0925	0,0000	0,0000	0,1540	0,0000	0,0000
0,8	1130	1290	-0,0062	0,0000	0,0349	0,1180	0,0000	0,0003	0,1950	0,0000	0,0000
1	1100	1310	-0,0087	0,0003	0,0005	0,1410	0,0000	0,0006	0,2340	0,0000	0,0000
1,2	1080	1320	-0,0083	0,0203	0,0000	0,1370	0,0000	0,0416	0,2200	0,0000	0,0000
1,4	1170	1360	-0,0060	0,0330	0,0000	0,1390	0,0000	0,0824	0,2030	0,0000	0,0000
1,6	1260	1420	-0,0042	0,0412	0,0000	0,1430	0,0001	0,1210	0,1850	0,0000	0,0000
1,8	1320	1450	-0,0030	0,0492	0,0000	0,1450	0,0005	0,1530	0,1710	0,0000	0,0000
2	1360	1460	-0,0021	0,0578	0,0001	0,1450	0,0012	0,1790	0,1620	0,0002	0,0000
2,2	1380	1470	-0,0014	0,0665	0,0001	0,1440	0,0020	0,1990	0,1550	0,0004	0,0001
2,4	1390	1460	-0,0009	0,0750	0,0001	0,1420	0,0031	0,2160	0,1510	0,0006	0,0002

COMBUSTIBLE MODELO 2.2

C2.2 medición 25% CM – 75% CH₄

ϕ	Ts max [K]	Tg max [K]	u [cm/sg]	H ₂	O ₂	H ₂ O	CH ₄	CO	CO ₂	C ₂ H ₂	C ₂ H ₄
0,4	1290	1360	0,0003	0,0000	0,1200	0,0798	0,0000	0,0000	0,0453	0,0000	0,0000
0,6	1310	1420	-0,0019	0,0000	0,0786	0,1170	0,0000	0,0000	0,0663	0,0000	0,0000
0,8	1320	1490	-0,0039	0,0000	0,0384	0,1520	0,0000	0,0000	0,0865	0,0000	0,0000
1	1410	1580	-0,0048	0,0003	0,0004	0,1860	0,0000	0,0004	0,1050	0,0000	0,0000
1,2	1490	1690	-0,0034	0,0346	0,0000	0,1770	0,0000	0,0365	0,0835	0,0000	0,0000
1,4	1550	1720	-0,0022	0,0553	0,0000	0,1760	0,0013	0,0693	0,0605	0,0011	0,0000
1,6	1570	1710	-0,0014	0,0716	0,0000	0,1730	0,0049	0,0845	0,0493	0,0038	0,0001
1,8	1590	1700	-0,0008	0,0863	0,0000	0,1690	0,0090	0,0940	0,0423	0,0068	0,0003
2	1590	1690	-0,0002	0,0995	0,0000	0,1650	0,0134	0,1000	0,0374	0,0098	0,0005
2,2	1600	1680	0,0003	0,1110	0,0001	0,1610	0,0183	0,1050	0,0338	0,0125	0,0007
2,4	1600	1670	0,0007	0,1210	0,0001	0,1580	0,0234	0,1080	0,0311	0,0151	0,0009

C2.1 medición 50% CM – 50% CH₄

ϕ	Ts max [K]	Tg max [K]	u [cm/sg]	H ₂	O ₂	H ₂ O	CH ₄	CO	CO ₂	C ₂ H ₂	C ₂ H ₄
0,4	1270	1340	0,0000	0,0000	0,1200	0,0776	0,0000	0,0000	0,0529	0,0000	0,0000
0,6	1280	1390	-0,0022	0,0000	0,0780	0,1130	0,0000	0,0000	0,0772	0,0000	0,0000
0,8	1290	1450	-0,0043	0,0000	0,0381	0,1480	0,0000	0,0000	0,1010	0,0000	0,0000
1	1380	1550	-0,0050	0,0049	0,0000	0,1750	0,0000	0,0057	0,1170	0,0000	0,0000
1,2	1440	1640	-0,0040	0,0317	0,0000	0,1720	0,0000	0,0383	0,1010	0,0000	0,0000
1,4	1520	1690	-0,0025	0,0520	0,0000	0,1720	0,0006	0,0759	0,0762	0,0005	0,0000
1,6	1540	1680	-0,0017	0,0667	0,0000	0,1700	0,0036	0,0965	0,0630	0,0024	0,0001
1,8	1560	1670	-0,0011	0,0810	0,0001	0,1670	0,0072	0,1100	0,0551	0,0047	0,0002
2	1560	1660	-0,0005	0,0936	0,0001	0,1630	0,0112	0,1190	0,0500	0,0070	0,0004
2,2	1570	1650	0,0000	0,1050	0,0001	0,1590	0,0156	0,1270	0,0464	0,0092	0,0006
2,4	1570	1640	0,0004	0,1150	0,0001	0,1560	0,0203	0,1320	0,0439	0,0112	0,0008

C2.1 medición 75% CM – 25% CH₄

ϕ	Ts max [K]	Tg max [K]	u [cm/sg]	H ₂	O ₂	H ₂ O	CH ₄	CO	CO ₂	C ₂ H ₂	C ₂ H ₄
0,4	-0,0004	0,0000	0,1180	0,0741	0,0000	0,0000	0,0666	0,0000	0,0000	-0,0004	0,0000
0,6	-0,0028	0,0000	0,0765	0,1080	0,0000	0,0000	0,0969	0,0000	0,0000	-0,0028	0,0000
0,8	-0,0052	0,0000	0,0370	0,1400	0,0000	0,0000	0,1260	0,0000	0,0000	-0,0052	0,0000
1	-0,0066	0,0003	0,0003	0,1690	0,0000	0,0004	0,1520	0,0000	0,0000	-0,0066	0,0003
1,2	-0,0052	0,0280	0,0000	0,1630	0,0000	0,0395	0,1320	0,0000	0,0000	-0,0052	0,0280
1,4	-0,0034	0,0512	0,0000	0,1590	0,0000	0,0765	0,1130	0,0000	0,0000	-0,0034	0,0512
1,6	-0,0023	0,0592	0,0000	0,1650	0,0016	0,1120	0,0898	0,0008	0,0001	-0,0023	0,0592
1,8	-0,0016	0,0723	0,0001	0,1630	0,0041	0,1330	0,0798	0,0020	0,0001	-0,0016	0,0723
2	-0,0010	0,0845	0,0001	0,1600	0,0070	0,1480	0,0735	0,0034	0,0003	-0,0010	0,0845
2,2	-0,0006	0,0957	0,0001	0,1560	0,0103	0,1600	0,0693	0,0047	0,0004	-0,0006	0,0957
2,4	-0,0001	0,1090	0,0002	0,1530	0,0143	0,1690	0,0653	0,0059	0,0006	-0,0001	0,1090

C2.1 medición 100% CM

ϕ	Ts max [K]	Tg max [K]	u [cm/sg]	H ₂	O ₂	H ₂ O	CH ₄	CO	CO ₂	C ₂ H ₂	C ₂ H ₄
0,4	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
0,6	1150	1260	-0,0041	0,0000	0,0733	0,0951	0,0000	0,0001	0,1430	0,0000	0,0000
0,8	1070	1260	-0,0076	0,0000	0,0361	0,1210	0,0000	0,0020	0,1800	0,0000	0,0000
1	969	1270	-0,0122	0,0008	0,0032	0,1450	0,0000	0,0058	0,2130	0,0000	0,0000
1,2	928	1260	-0,0126	0,0183	0,0000	0,1450	0,0000	0,0448	0,2000	0,0000	0,0000
1,4	1050	1300	-0,0087	0,0299	0,0001	0,1480	0,0002	0,0877	0,1800	0,0000	0,0000
1,6	1150	1340	-0,0062	0,0403	0,0001	0,1510	0,0004	0,1250	0,1620	0,0000	0,0000
1,8	1220	1370	-0,0047	0,0514	0,0001	0,1510	0,0007	0,1550	0,1500	0,0000	0,0000
2	1280	1390	-0,0035	0,0626	0,0001	0,1490	0,0011	0,1810	0,1400	0,0001	0,0000
2,2	1320	1410	-0,0027	0,0731	0,0001	0,1470	0,0017	0,2020	0,1320	0,0001	0,0001
2,4	1340	1420	-0,0021	0,0831	0,0001	0,1450	0,0024	0,2200	0,1260	0,0003	0,0001