



Universidad
Zaragoza

TRABAJO FIN DE MÁSTER

Estudio de la combustión de mezclas
de amoníaco, metano y monóxido de
nitrógeno.

Autora

Loreto Sieso Ladera

Directora

Dra. M^a Ujué Alzueta Anía

Escuela de Ingeniería y Arquitectura (EINA)

2020



DECLARACIÓN DE AUTORÍA Y ORIGINALIDAD

(Este documento debe entregarse en la Secretaría de la EINA, dentro del plazo de depósito del TFG/TFM para su evaluación).

D./D^a. Loreto Sieso Ladera

, en

aplicación de lo dispuesto en el art. 14 (Derechos de autor) del Acuerdo de 11 de septiembre de 2014, del Consejo de Gobierno, por el que se aprueba el Reglamento de los TFG y TFM de la Universidad de Zaragoza,

Declaro que el presente Trabajo de Fin de (Grado/Máster)

Máster

(Título del Trabajo)

Estudio de la combustión de mezclas de amoníaco, metano y monóxido de nitrógeno.

es de mi autoría y es original, no habiéndose utilizado fuente sin ser citada debidamente.

Zaragoza, 15 de junio de 2020

Fdo: Loreto Sieso Ladera

RESUMEN

El amoníaco es un compuesto de uso habitual en industria que puede utilizarse como combustible alternativo debido a su combustión limpia.

En el presente trabajo se ha realizado un estudio experimental de la combustión de diferentes mezclas de amoníaco y metano para aumentar su poder calorífico y monóxido de nitrógeno para controlar la emisión de NO_x . Se han usado diferentes concentraciones de amoníaco y de metano, variando también la concentración de oxígeno para variar la estequiometría total. La combustión se realizó en un reactor y se ha controlado la temperatura en la zona de reacción para que varíe de 700 a 1125°C.

Además, se han simulado los mismos experimentos usando un modelo cinético-químico previo, replicando las mismas condiciones y concentraciones, pero alcanzando un rango de temperatura más elevado, hasta los 1500°C. Con este modelo se han obtenido resultados muy similares a los vistos experimentalmente.

Se ha observado que una estequiometría más oxidante permite alcanzar temperaturas de conversión más bajas. En la combustión del monóxido de nitrógeno se observa que se consume hasta llegar a un mínimo para después volver a aumentar su concentración. La temperatura a la que se produce este mínimo varía según las condiciones del experimento.

CONTENIDO

| | |
|---|----|
| RESUMEN..... | 5 |
| CONTENIDO..... | 6 |
| 1. INTRODUCCIÓN Y OBJETIVOS..... | 8 |
| 2. ANTECEDENTES..... | 9 |
| 2.1. Problemática actual de los hidrocarburos..... | 9 |
| 2.2. Uso del amoníaco como combustible..... | 9 |
| 2.3. Control de óxidos de nitrógeno..... | 10 |
| 2.4. Estudio de mezclas de NH_3 | 12 |
| 3. METODOLOGÍA EXPERIMENTAL..... | 14 |
| 3.1. Metodología y procedimiento..... | 14 |
| 3.2. Experimentos realizados..... | 15 |
| 3.3. Influencia de la estequiometría..... | 15 |
| 3.4. Influencia de la concentración de CH_4 | 22 |
| 3.5. Influencia de la concentración de NH_3 | 26 |
| 3.6. Repetibilidad..... | 30 |
| 4. MODELADO..... | 33 |
| 4.1. Software y modelo utilizados..... | 33 |
| 4.2. Resultados numéricos..... | 33 |
| 4.3. Caminos de conversión..... | 44 |
| 5. CONCLUSIONES Y LÍNEAS FUTURAS..... | 48 |
| 6. BIBLIOGRAFÍA..... | 51 |
| ANEXO A: RESULTADOS EXPERIMENTALES..... | 52 |
| A.1 Cálculo de caudales..... | 52 |
| A.2. Experimento 1a: $1000[\text{NH}_3] + 1200[\text{CH}_4] + 900[\text{NO}]$; $\lambda = 0,8$ | 53 |
| A.3. Experimento 1b: $1000[\text{NH}_3] + 1200[\text{CH}_4] + 900[\text{NO}]$; $\lambda = 0,8$ | 54 |
| A.4. Experimento 2: $1000[\text{NH}_3] + 800[\text{CH}_4] + 800[\text{NO}]$; $\lambda = 0,3$ | 55 |

| | |
|---|----|
| A.5. Experimento 3: $1000[\text{NH}_3] + 900[\text{CH}_4] + 1000[\text{NO}]; \lambda = 1,7$ | 56 |
| A.6. Experimento 4: $900[\text{NH}_3] + 400[\text{CH}_4] + 800[\text{NO}]; \lambda = 1,2$ | 57 |
| A.7. Experimento 5: $1000[\text{NH}_3] + 1400[\text{CH}_4] + 900[\text{NO}]; \lambda = 1,3$ | 58 |
| A.8. Experimento 6: $300[\text{NH}_3] + 700[\text{CH}_4] + 900[\text{NO}]; \lambda = 1,5$ | 59 |
| A.9. Experimento 7: $2300[\text{NH}_3] + 700[\text{CH}_4] + 900[\text{NO}]; \lambda = 1,1$ | 60 |
| ANEXO B: BALANCE DE CARBONO | 61 |
| B.1. Experimento 1: $1000[\text{NH}_3] + 1200[\text{CH}_4] + 900[\text{NO}]; \lambda = 0,8$ | 61 |
| B.2. Experimento 2: $900[\text{NH}_3] + 800[\text{CH}_4] + 900[\text{NO}]; \lambda = 0,3$ | 61 |
| B.3. Experimento 3: $1400[\text{NH}_3] + 900[\text{CH}_4] + 1000[\text{NO}]; \lambda = 1,7$ | 62 |
| B.4. Experimento 4: $900[\text{NH}_3] + 400[\text{CH}_4] + 800[\text{NO}]; \lambda = 1,2$ | 62 |
| B.5. Experimento 5: $1000[\text{NH}_3] + 1400[\text{CH}_4] + 900[\text{NO}]; \lambda = 1,3$ | 63 |
| B.6. Experimento 6: $300[\text{NH}_3] + 700[\text{CH}_4] + 900[\text{NO}]; \lambda = 1,5$ | 63 |
| B.7. Experimento 7: $2300[\text{NH}_3] + 700[\text{CH}_4] + 900[\text{NO}]; \lambda = 1,1$ | 64 |
| ANEXO C: RESULTADOS COMPUTACIONALES | 65 |
| C.1. Experimento 1: $1000[\text{NH}_3] + 1200[\text{CH}_4] + 900[\text{NO}]; \lambda = 0,8$ | 65 |
| C.2. Experimento 2: $900[\text{NH}_3] + 800[\text{CH}_4] + 900[\text{NO}]; \lambda = 0,3$ | 67 |
| C.3. Experimento 3: $1400[\text{NH}_3] + 900[\text{CH}_4] + 1000[\text{NO}]; \lambda = 1,7$ | 70 |
| C.4. Experimento 4: $900[\text{NH}_3] + 400[\text{CH}_4] + 800[\text{NO}]; \lambda = 1,2$ | 72 |
| C.5. Experimento 5: $1000[\text{NH}_3] + 1400[\text{CH}_4] + 900[\text{NO}]; \lambda = 1,3$ | 74 |
| C.6. Experimento 6: $300[\text{NH}_3] + 700[\text{CH}_4] + 900[\text{NO}]; \lambda = 1,5$ | 76 |
| C.7. Experimento 7: $2300[\text{NH}_3] + 700[\text{CH}_4] + 900[\text{NO}]; \lambda = 1,1$ | 78 |
| ANEXO D: INSTALACIÓN EXPERIMENTAL | 80 |
| D.1. Sistema de alimentación de gases | 80 |
| D.2. Sistema de reacción | 82 |
| D.3. Sistema de análisis de gases | 83 |
| ANEXO E: CALIBRACIÓN DEL CROMATÓGRAFO | 86 |

1. INTRODUCCIÓN Y OBJETIVOS

En los últimos años se está realizando un gran esfuerzo por reducir el uso de combustibles fósiles y así minimizar la emisión de gases de efecto invernadero como el CO_2 . En este contexto se recupera la idea de utilizar amoníaco como combustible.

El proceso de obtención del amoníaco es de principios del siglo XX (Haber-Bosch) y a mitad de esa misma centuria aparecieron algunas aplicaciones como un autobús o un cohete propulsados con amoníaco. Por tanto, esta tecnología ya ha sido investigada y cuenta con una avanzada tecnología de transporte y almacenamiento, facilitando así un posible uso futuro.

El objetivo del presente trabajo es aportar algo más de información a lo que se conoce acerca de la combustión de amoníaco y su modelado, analizando la influencia de la temperatura de combustión, la presencia de otros compuestos y de la estequiometría.

La combustión de amoníaco presenta el problema de que puede producir NO_x , que son compuestos muy nocivos. Por ello, este proyecto quiere estudiar en qué condiciones se puede reducir la formación de estas sustancias.

Para lograrlo se plantea experimentar la combustión del amoníaco con metano y con monóxido de nitrógeno. Por ello, se sigue la línea de trabajo abierta por otros compañeros, tomando como referencia el estudio de Muñoz (2019) sobre la combustión de mezclas de amoníaco con metano y el de Ara (2019) sobre mezclas de amoníaco y óxido de nitrógeno.

Además, con ayuda del software ANSYS CHEMKIN-PRO [\[1\]](#) se ha usado un mecanismo cinético de reacción para modelar el proceso de combustión, que tal y como se verá más adelante, se ajusta bastante al resultado experimental.

2. ANTECEDENTES

2.1. Problemática actual de los hidrocarburos

Hoy en día, la búsqueda de combustibles alternativos a los hidrocarburos se ha convertido en una prioridad en muchos sectores industriales. El uso de combustibles tradicionales tales como el carbón, el petróleo o el gas natural da lugar a emisiones de contaminantes y contribuye al efecto invernadero.

En el año 2018 el uso de esta triada como fuente de energía supuso el 84,7% del total mundial. Sin embargo, las reservas de los citados combustibles son finitas, lo que urge a encontrar otras soluciones de similares prestaciones [\[2\]](#).

En la combustión de cualquier hidrocarburo se producen idealmente CO_2 y agua. Este gas, aunque se encuentra de manera natural en la atmósfera terrestre, es el mayor contribuyente al efecto invernadero.

Además, es frecuente que se produzca CO a causa de combustiones incompletas. Este compuesto es tóxico y muy inflamable [\[3\]](#).

2.2. Uso del amoníaco como combustible

El amoníaco ha sido un compuesto que se viene utilizando de antiguo. Se obtiene principalmente con el proceso de Haber-Bosch, desarrollado en la década de 1910 y que produce amoníaco a través de nitrógeno (proveniente del aire) e hidrógeno, este último obtenido del reformado de gas natural. Este proceso se ha utilizado principalmente para obtener fertilizantes de uso agrícola [\[4\]](#).

Además de esta utilidad, existen varios ejemplos de uso del amoníaco como combustible a lo largo de las últimas décadas.

Para paliar la falta de diésel durante la Segunda Guerra Mundial, en Bélgica se adaptó el motor de varios autobuses para funcionar con amoníaco líquido y una pequeña parte de gas ciudad. Esta transformación estaba basada en el conocido como proceso Gazamo, patentado unos años antes [\[5\]](#).

Además de la combustión en cámaras de combustión, existen otras formas de generar energía a través del amoníaco. Pueden usarse mezclas de amoníaco con agua como fluido en un ciclo de vapor, denominado ciclo Kalina y patentado en los 80 [\[5\]](#).

Éste puede sustituir al ciclo Rankine en plantas de ciclo combinado, incluso sin modificar el diseño de las turbinas de vapor. Esta flexibilidad se da porque el peso molecular del amoníaco (17gr/mol) es similar al del agua (18gr/mol). Se puede trabajar con mezclas del 84% en amoníaco y 16% en agua (fracción másica) [5].

Comparándolo con el ciclo Rankine, el ciclo Kalina tiene una mayor eficiencia, que puede ser de un 15 a un 56% mayor. Como desventajas, este ciclo puede resultar más caro que Rankine y no permite trabajar a muy altas temperaturas porque la descomposición podría producir problemas de corrosión [6].

Existen también bastantes ejemplos de turbinas que funcionan con amoníaco y varios estudios de referencia. El desarrollo de esta tecnología comenzó en la década de 1960 y se ha desarrollado con especial interés en la producción cuasi nula de NO_x , existiendo además varios ejemplos que usan mezclas de amoníaco y metano [5].

El amoníaco es un compuesto tóxico e inflamable, lo que podría suponer un reto a la hora de usarlo como combustible [7]. El hecho de que su obtención y uso sean bien conocidos desde hace tantos años hace que tanto la logística de distribución y su almacenamiento no resulten problemáticos, puesto que han sido perfeccionados con el tiempo. Por tanto, la combustión de amoníaco se presenta como una atractiva solución al problema de generación de energía al que nos enfrentamos [5].

2.3. Control de óxidos de nitrógeno

La combustión ideal deseada se dará según la siguiente reacción:



De este modo se producirá nitrógeno molecular (que está naturalmente presente en la atmósfera) y agua. Sin embargo, si la combustión no es ideal es posible que se formen otros compuestos que pueden ser potencialmente dañinos.

A continuación, se presenta una pequeña descripción de estos compuestos y sus efectos:

- **Óxido nítrico (NO).** Es un gas estable y uno de los precursores del efecto invernadero tras su oxidación a NO_2 en la atmósfera. Adicionalmente, su peligrosidad radica en que puede reaccionar para convertirse en ácido nítrico y provocar lluvia ácida.

La mayor parte de sus emisiones proceden de combustiones de alta temperatura (> 1300°C) con un mecanismo conocido como termal o Zeldovich [8]. Su reacción principal sería:



Este proceso sólo es apreciable a muy elevadas temperaturas.

También se puede producir la formación de NO con la reacción del amoníaco con oxígeno para producir NO, vía la formación de HNO [10].

- **Dióxido de nitrógeno (NO₂).** Es un gas tóxico e irritante. Aunque en la atmósfera tiene una vida corta, también contribuye a la formación de la lluvia ácida según la reacción de la ecuación 3 [3]:



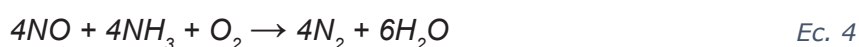
Procede también de combustiones, aunque aparece en menor cantidad que el NO. Su principal origen es la oxidación de NO una vez emitido y presente en la atmósfera. Estos dos compuestos comúnmente se agrupan bajo la fórmula de NO_x.

- **Óxido nítrico (N₂O).** Es un gas estable que puede ser tóxico para el ser humano. Está dentro de los gases de efecto invernadero y además puede atacar la capa de ozono. Puede producirse en combustiones en las que reaccionan átomos de oxígeno con el nitrógeno de la atmósfera [3].

Actualmente existen diversos procesos para tratar de minimizar las emisiones de NO_x. En las combustiones de diésel, por ejemplo, es común el empleo del proceso SCR (selective catalytic reduction). En él se utiliza NH₃ (u otros compuestos nitrogenados como la urea) para que reaccione con el NO para dar nitrógeno molecular y agua, consiguiendo una reducción de NO de hasta el 90% [8].

Este proceso requiere de un catalizador, pero también existe la versión no catalítica, SNCR (selective non catalytic reduction). Esta última es más barata porque no tiene el coste de la catálisis, pero menos efectiva porque está limitada a un rango de temperatura.

La reacción principal que se produce es la siguiente:



Sin embargo, esta reacción se da en un marco más pequeño de temperatura, de 900 a 1200°C, pudiéndose incluso formar más NO_x si se sobrepasa esa temperatura.

Con este mecanismo la reducción de NO alcanzada es menor, entre el 20% y el 60% dependiendo de las condiciones de operación concretas [8].

Puesto que la combustión planteada en el presente proyecto generará NO, éste puede interactuar con el propio NH₃, pudiéndose producir las típicas reacciones del mecanismo de SNCR.

2.4. Estudio de mezclas de NH₃

A pesar de las ventajas comentadas del uso del amoníaco, su poder calorífico es significativamente menor que el de los compuestos que usualmente se usan como combustible, como se ve en la tabla 1. Si se combustiona una mezcla de amoníaco con metano se aumenta la energía obtenida, con una drástica reducción de las emisiones de CO₂.

Tabla 1. Poder calorífico de varios combustibles. Fuente: [5], [10].

| Combustible | Poder Calorífico [MJ/kg] |
|-----------------|--------------------------|
| NH ₃ | 22,5 |
| Gas Natural | 55 |
| CH ₄ | 50 |

El metano, un hidrocarburo del grupo de los alcanos, es el principal componente del gas natural, cuyo contenido es entre el 79-97% de metano y siendo habitualmente mayor del 90% [11].

Se utiliza la investigación de otros proyectos de combustión de mezclas de amoníaco y metano, y de amoníaco y óxido de nitrógeno, en diferentes condiciones de estequiometría [12] [13] [14]. Los resultados que se manejan son los de los experimentos mostrados la tabla 2.

En la tabla 2 se muestran las concentraciones en ppm de los reactivos y del oxígeno. La concentración de este último compuesto, además, define el parámetro lambda, según la fórmula de la ecuación 5.

$$\lambda = \frac{O_2 \text{ introducido}}{O_2 \text{ estequiométrico}} \quad \text{Ec. 5}$$

Varios de estos experimentos se realizaron en presencia de agua, utilizando para ello un borboteador.

Tabla 2. Experimentos anteriores de mezclas de NH_3 .

| NH_3 (ppm) | CH_4 (ppm) | NO (ppm) | O_2 (ppm) | λ Total | Tiempo de residencia (s) | Presencia de agua | Fuente |
|------------------------|------------------------|----------------------|-----------------------|-----------------|--------------------------------|----------------------|--------------|
| 1149 | 0 | 0 | 0 | 0 | T/195 | | Goñi (2018) |
| 1033 | 0 | 0 | 256 | 0,33 | T/195 | | Goñi (2018) |
| 884 | 0 | 0 | 484 | 0,73 | T/195 | | Goñi (2018) |
| 1095 | 0 | 0 | 534 | 0,65 | T/195 | | Goñi (2018) |
| 1116 | 0 | 0 | 804 | 0,96 | T/195 | | Goñi (2018) |
| 990 | 0 | 0 | 668 | 0,9 | T/195 | | Goñi (2018) |
| 1067 | 0 | 0 | 1144 | 1,43 | T/195 | | Goñi (2018) |
| 885 | 0 | 0 | 1334 | 2,01 | T/195 | | Goñi (2018) |
| 1070 | 0 | 0 | 3924 | 4,89 | T/195 | | Goñi (2018) |
| 1032 | 0 | 0 | 7353 | 9,5 | T/195 | | Goñi (2018) |
| 1000 | 0 | 0 | 750 | 1 | T/195 | | Muñoz (2019) |
| 1000 | 0 | 0 | 750 | 1 | T/195 | | Muñoz (2019) |
| 1000 | 0 | 0 | 750 | 1 | T/195 | 0,3% | Muñoz (2019) |
| 1000 | 0 | 0 | 225 | 0,3 | T/195 | | Muñoz (2019) |
| 1000 | 0 | 0 | 375 | 0,5 | T/195 | | Muñoz (2019) |
| 0 | 1000 | 0 | 2000 | 1 | T/195 | | Muñoz (2019) |
| 0 | 1000 | 0 | 10000 | 5 | T/195 | | Muñoz (2019) |
| 1000 | 1000 | 0 | 2750 | 1 | T/195 | | Muñoz (2019) |
| 1000 | 1000 | 0 | 2750 | 1 | T/195 | | Muñoz (2019) |
| 1000 | 1000 | 0 | 825 | 0,3 | T/195 | | Muñoz (2019) |
| 1000 | 1000 | 0 | 13750 | 5 | T/195 | | Muñoz (2019) |
| 1000 | 1000 | 0 | 2750 | 1 | T/195 | | Muñoz (2019) |
| 1000 | 1000 | 0 | 2750 | 1 | T/195 | | Muñoz (2019) |
| 1000 | 0 | 1000 | 750 | 1 | T/195 | 5000ppm | Ara (2019) |
| 1000 | 0 | 1000 | 750 | 1 | T/195 | | Ara (2019) |
| 1000 | 0 | 1000 | 750 | 1 | T/195 | | Ara (2019) |
| 1000 | 0 | 1000 | 300 | 0,4 | T/195 | | Ara (2019) |
| 1000 | 0 | 1000 | 450 | 0,6 | T/195 | | Ara (2019) |
| 1000 | 0 | 1000 | 3900 | 5,2 | T/195 | | Ara (2019) |
| 1000 | 0 | 1000 | 1350 | 1,8 | T/195 | | Ara (2019) |
| 1000 | 0 | 1500 | 3900 | 5,2 | T/195 | | Ara (2019) |
| 1000 | 0 | 1500 | 1350 | 1,8 | T/195 | | Ara (2019) |
| 1000 | 0 | 300 | 3900 | 5,2 | T/195 | | Ara (2019) |
| 1000 | 0 | 300 | 1350 | 1,8 | T/195 | | Ara (2019) |

3. METODOLOGÍA EXPERIMENTAL

3.1. Metodología y procedimiento

En los experimentos realizados se ha utilizado un caudal de gases de 1L/min, medido en condiciones normales. Para obtener las concentraciones deseadas de los comburentes se cierra el balance añadiendo N₂.

La cantidad de oxígeno que entra al reactor dependerá de la estequiometría que se quiera analizar, midiéndose con el factor multiplicador lambda. Si la reacción perfecta de la combustión del amoníaco, como ya se ha visto en la ecuación 1, es:



y la reacción del metano:



Entonces, para lambda la unidad, el oxígeno que se introducirá en el reactor será 3/4 veces la cantidad de amoníaco, más 2 veces la cantidad de metano.

La instalación consiste en un reactor de tubo, insertado en un horno eléctrico con una temperatura de trabajo máxima de 1125°C.

La alimentación de gases se hace a través de botellas presurizadas. El NH₃, el CH₄ y el NO se suministran en tres líneas diferentes directamente a la cabeza del reactor. La alimentación del O₂ y N₂ se realiza en una única línea a la entrada del tubo.

A la salida del reactor hay una inyección de aire. De este modo, en ese punto la reacción se corta y se garantiza que el tiempo de residencia corresponde al del flujo del gas a través del reactor, según la fórmula de la ecuación 7.

$$\tau \text{ (s)} = \frac{195}{T \text{ (K)}} \quad \text{Ec. 7}$$

Los gases de salida pasan por un filtro de partículas y un condensador que recoge el vapor de agua. Luego son analizados a través de un microcromatógrafo de gases, un analizador de NO y un medidor de CO y CO₂. Durante el desarrollo de cada experimento se aumenta la temperatura del horno desde 700 hasta 1125°C en escalones y en cada temperatura se toman muestras de los gases de salida.

Una descripción más detallada de la instalación utilizada se encuentra en el [anexo D](#).

3.2. Experimentos realizados

Los experimentos realizados y sus condiciones se pueden ver en la tabla 3.

Tabla 3. Experimentos realizados.

| NH_3 (ppm) | CH_4 (ppm) | NO (ppm) | O_2 (ppm) | λ Total | Tiempo de residencia (s) | Experimento |
|------------------------|------------------------|----------------------|-----------------------|-----------------|--------------------------------|-------------|
| 1000 | 1200 | 900 | 2500 | 0,8 | 195/T | 1a |
| 1000 | 1200 | 900 | 2500 | 0,8 | 195/T | 1b |
| 1000 | 800 | 800 | 700 | 0,3 | 195/T | 2 |
| 1400 | 900 | 1000 | 4300 | 1,7 | 195/T | 3 |
| 900 | 400 | 800 | 1800 | 1,2 | 195/T | 4 |
| 1000 | 1400 | 900 | 4700 | 1,3 | 195/T | 5 |
| 300 | 700 | 900 | 2400 | 1,5 | 195/T | 6 |
| 2300 | 700 | 900 | 3500 | 1,1 | 195/T | 7 |

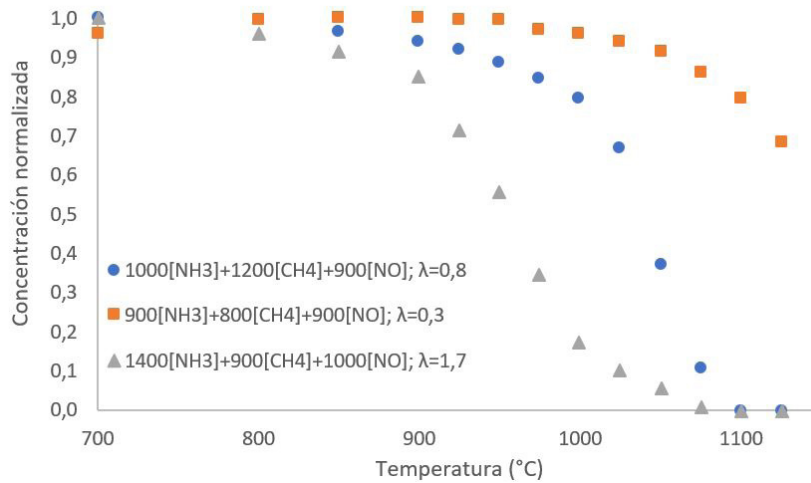
Puesto que en los anteriores experimentos en los que se incluía un borboteo de agua éste no parecía tener influencia [14] [13], aquí se ha optado por hacer todos los experimentos sin la presencia de agua.

El experimento 1 se toma como experimento de referencia. En él amoníaco, metano y monóxido de nitrógeno tienen parecida concentración y la entrada de oxígeno es tal que se aproxima a $\lambda=1$.

3.3. Influencia de la estequiometría

Los primeros experimentos están destinados a analizar la influencia de la estequiometría. El experimento 2 se hace en condiciones reductoras (oxígeno por debajo del mínimo para que los reactivos se consuman) y el 3 en condiciones oxidantes (exceso de oxígeno).

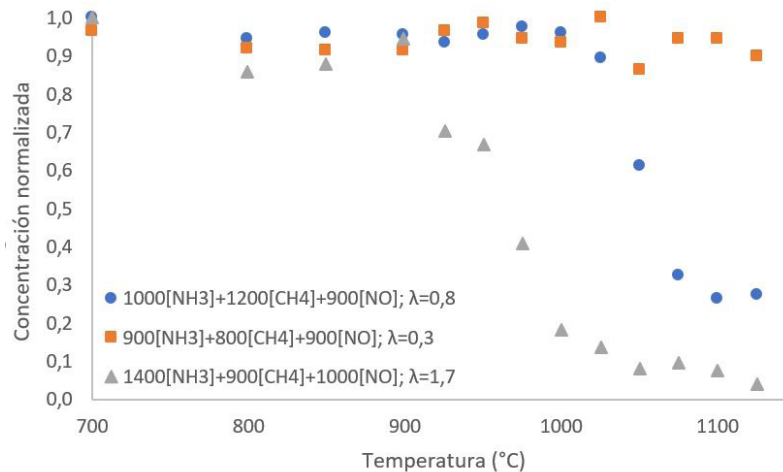
La gráfica 1 muestra la concentración normalizada del amoníaco en el gas de salida del reactor. Como se ve, la conversión total del amoníaco se alcanza sólo en las condiciones oxidantes (experimento 3), a una temperatura de 1100°C. Para el experimento 1, que es con oxígeno estequiométrico, la conversión total se hubiera alcanzado a una temperatura mayor de la máxima de 1125°C. En el caso de la atmósfera reductora (experimento 2) la conversión total no se puede alcanzar en las condiciones de este trabajo.



Gráfica 1. Conversión del NH_3 en función de la temperatura para tres valores de λ .

En la gráfica 2, se ve la conversión del metano. Éste se consume con mayor dificultad que el amoníaco y en ninguno de estos tres experimentos llega al 100% de conversión. En condiciones de exceso de oxígeno (experimento 3) se llega a alcanzar el 96% de la conversión a 1125°C.

Se observa, que en el experimento 2 aparece una fluctuación extraña en el valor del metano, posiblemente durante el experimento sucediera algo imprevisto que modificara las condiciones. A pesar de que los resultados se corresponden al comportamiento esperado, sería interesante realizar una repetición de este experimento.

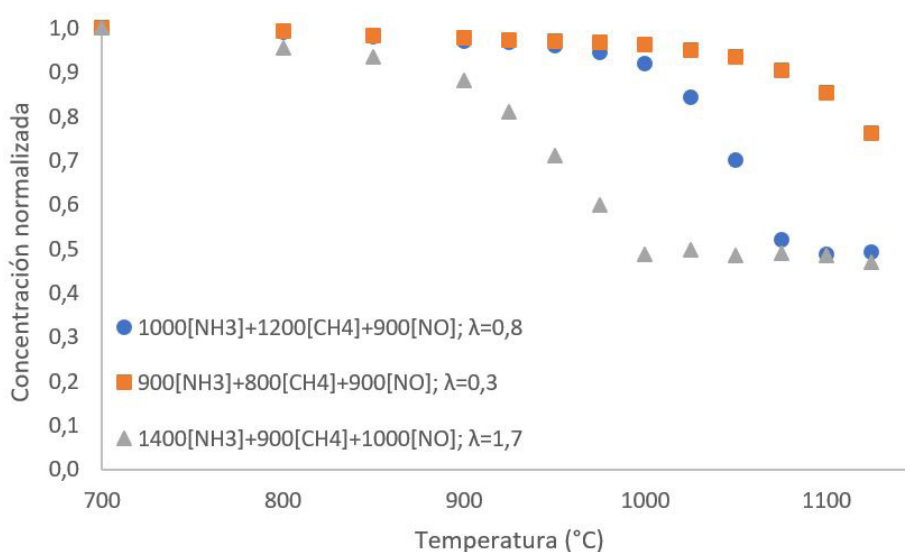


Gráfica 2. Conversión del CH_4 en función de la temperatura para tres valores de λ .

El comportamiento del monóxido de nitrógeno es diferente, como se observa en la gráfica 3, puesto que empieza a consumirse a una temperatura, pero cuando ésta aumenta se detiene su consumo y comienza a aumentar de nuevo su concentración.

Este comportamiento puede deberse a la creación del NO termal a partir de 1100°C. No obstante, esto se discutirá más adelante con el resultado del modelado.

El punto mínimo, en torno al 50% de NO consumido, se alcanza a 1000°C en condiciones oxidantes y a 1075°C en condiciones estequiométricas. En condiciones reductoras este punto no llega a alcanzarse para este rango de temperaturas.

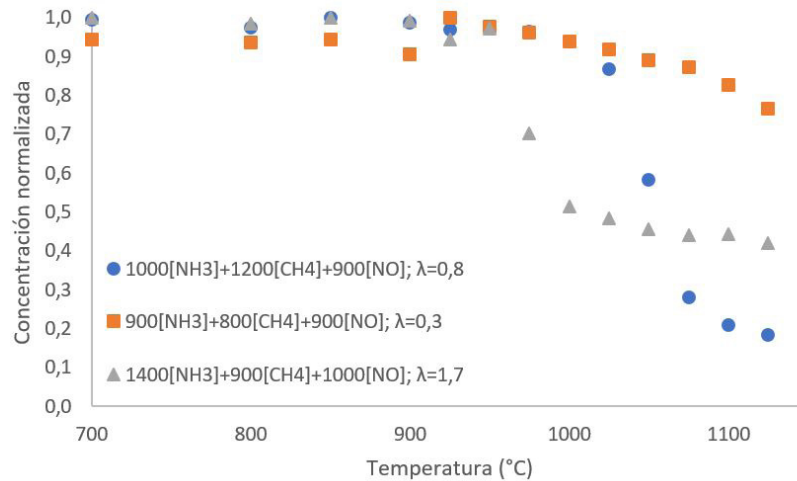


Gráfica 3. Conversión del NO en función de la temperatura para tres valores de lambda.

Como se ve en la gráfica 4, el consumo de oxígeno se produce a 900°C cuando está en exceso. Esta temperatura coincide con la que se empieza a producir la conversión del amoníaco y metano.

El mismo fenómeno se produce en condiciones estequiométricas, aunque la temperatura de inicio de la conversión es mayor, 1000°C.

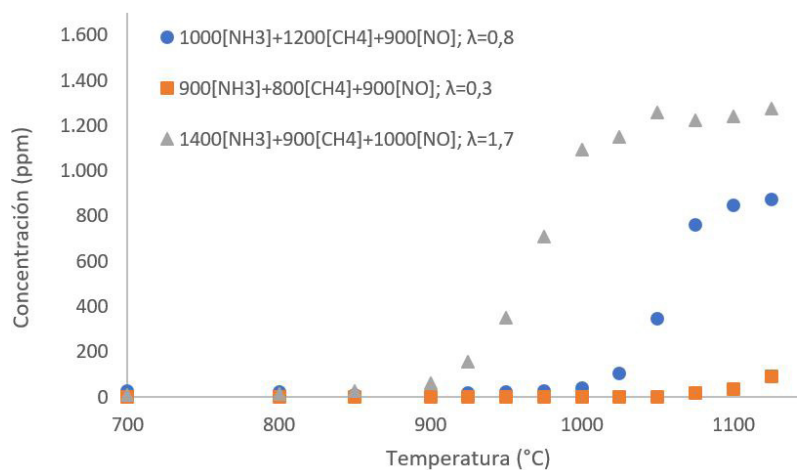
Sin embargo, en condiciones en las que el oxígeno está por debajo del mínimo (lambda 0,3), la concentración de oxígeno apenas se empieza a consumir. Las reacciones de combustión de amoníaco y metano se producen difícilmente y sólo a alta temperatura porque no están favorecidas, a pesar de que hay oxígeno suficiente como para producir un consumo de los reactivos mayor del que se da.



Gráfica 4. Consumo del O_2 en función de la temperatura para tres valores de λ .

Analizado el comportamiento de los gases reactivos, es necesario ahora analizar lo que sucede con los productos de la combustión.

La gráfica 5 muestra la concentración en ppm del dióxido de carbono a la salida del reactor. Como es obvio este compuesto no aparece hasta que se llega a la temperatura a la que el metano reacciona. En condiciones oxidantes (experimento 3) la concentración de CO_2 alcanzada es prácticamente la misma que la de entrada de CH_4 , produciéndose la combustión completa.

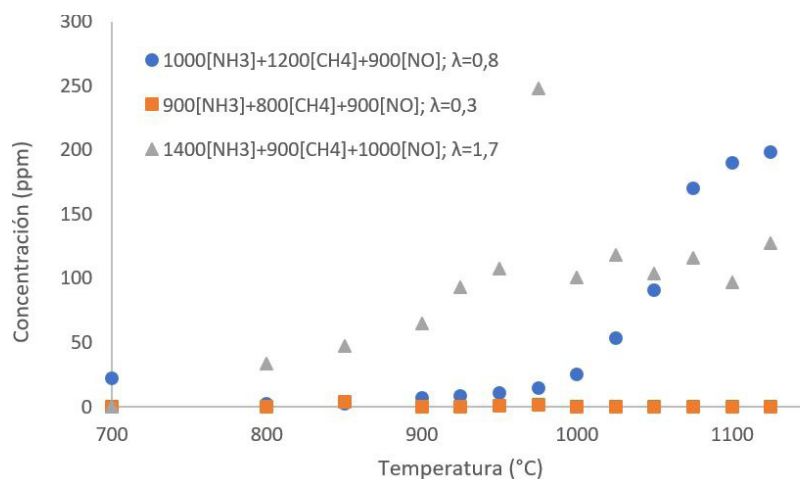


Gráfica 5. Concentración de CO_2 en la salida en función de la temperatura para tres valores de λ .

Para comprobar si se trata de la reacción ideal, es necesario analizar la aparición de monóxido de carbono, que es un producto no deseado.

La gráfica 6 registra la aparición de este compuesto. Como se observa aparece también al inicio de la reacción, aunque en menor cantidad.

En condiciones estequiométricas se alcanza un máximo de 200 ppm mientras que en condiciones oxidantes se produce un máximo muy acusado, alcanzando 250 ppm a 975°C y disminuyendo después. En condiciones reductoras el CO producido es casi nulo.



Gráfica 6. Concentración de CO en la salida en función de la temperatura para tres valores de lambda.

Con las instalaciones que se disponen, el carbono es la única especie a la que puede realizar el balance de materia, de la siguiente manera:

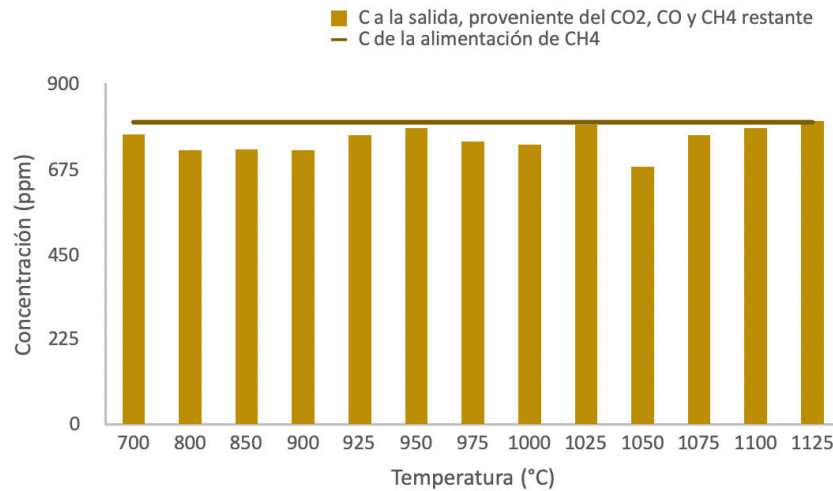
$$C_{entrada} = C_{salida}$$

El C de la entrada proviene del metano, mientras que en la salida encontramos el elemento C en el dióxido de carbono, en el monóxido de carbono y en el metano restante que no ha reaccionado, quedando entonces:

$$C_{entrada CH_4} = C_{salida CO_2} + C_{salida CO} + C_{salida CH_4}$$

Para el experimento 2 estos resultados se visualizan gráficamente en la gráfica 7.

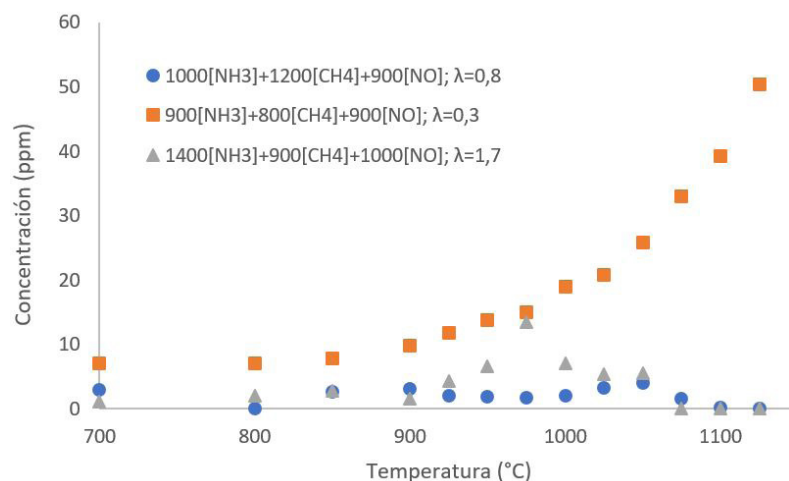
Se puede apreciar que la línea de C de entrada, siempre constante, coincide con la suma de ppm de C a la salida, con un porcentaje de desviación máxima del 14,63%. Éste puede ser debido a la formación de otros compuestos minoritarios que no se han analizado en el laboratorio.



Gráfica 7. Balance del C en el experimento 2: $900[\text{NH}_3] + 800[\text{CH}_4] + 900[\text{NO}]$; $\lambda=0,3$

El resto de balances, correspondientes a los otros experimentos, se pueden consultar en el [anexo B](#).

La gráfica 8 muestra la aparición del N_2O , compuesto indeseado también. Se observa que las condiciones reductoras y las altas temperaturas estimulan su aparición. Para condiciones de exceso de oxígeno se produce un pico de 14 ppm a 975°C y luego desciende hasta valores nulos.

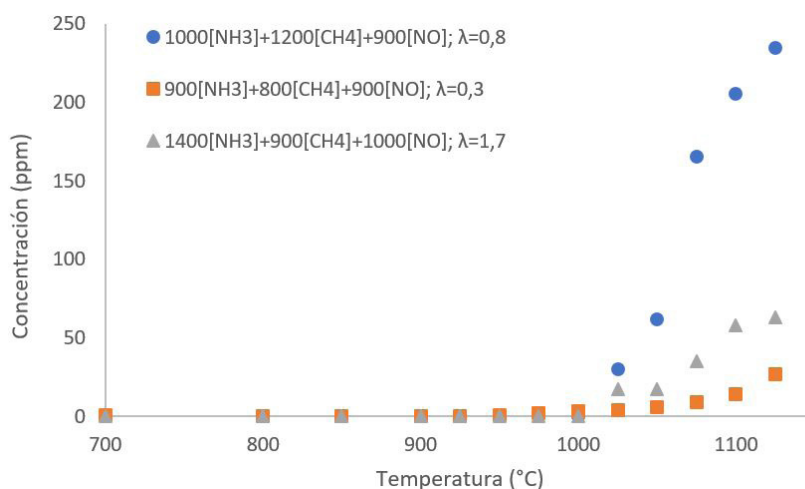


Gráfica 8. Concentración de N_2O en la salida en función de la temperatura para tres valores de λ .

Los otros compuestos de nitrógeno cuya formación se preveía no se registran aquí. Para medir el dióxido de nitrógeno no se contaba con el equipo adecuado y en el caso del nitrógeno molecular, no se puede contabilizar correctamente puesto que es el principal componente de la atmósfera usada.

La presencia de H_2 en la salida indica que éste ha aparecido porque se han producido otras reacciones a las de combustión deseadas.

Estas reacciones se producen mayormente en la combustión estequiométrica (experimento 1) y aumentan conforme aumenta la temperatura. Como se ve en la combustión con exceso de oxígeno (experimento 3) posiblemente la tendencia sea a formar un máximo y luego disminuir.



Gráfica 9. Concentración de H_2 en la salida en función de la temperatura para tres valores de λ .

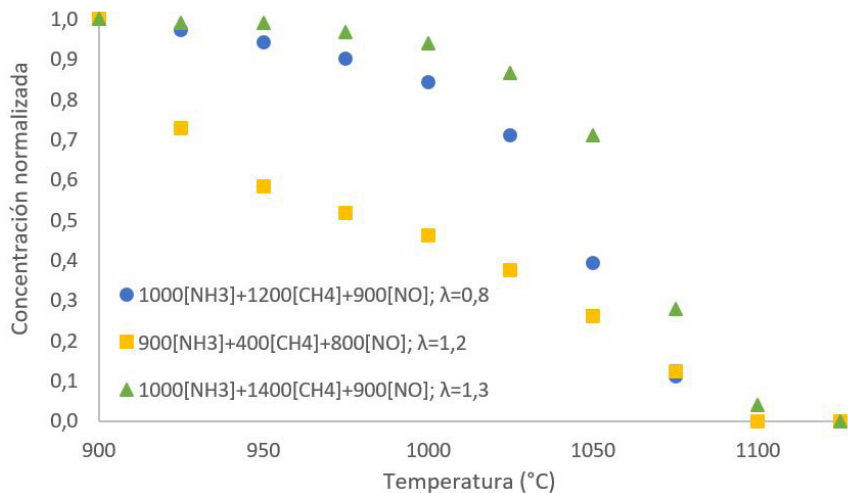
En ningún experimento se registró la aparición de HCN.

3.4. Influencia de la concentración de CH_4

En este lote de experimentos, se analiza la influencia de la concentración del metano. Se compara con el experimento 1, un experimento con 400 ppm de metano (experimento 4) y otro con 1400ppm de metano (experimento 5). En ambos se introduce aproximadamente el oxígeno estequiométrico.

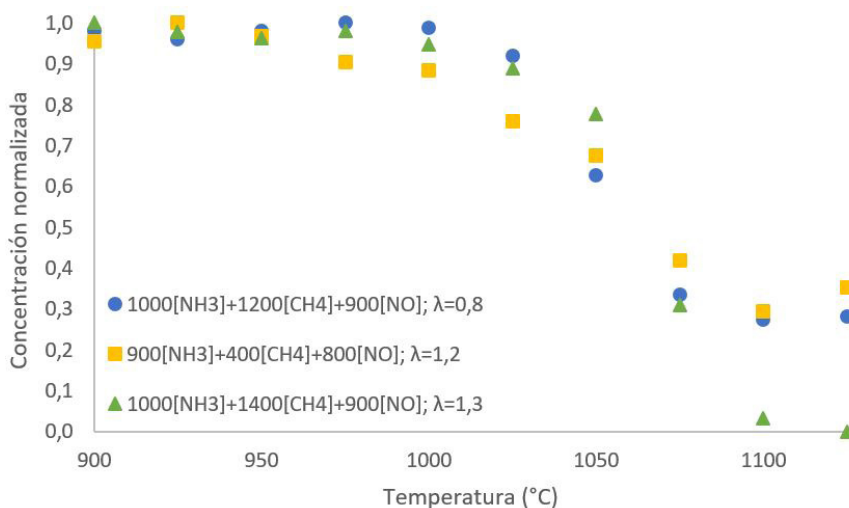
En la gráfica 10 se aprecia que la conversión del amoniaco empieza a menor temperatura cuando la concentración inicial de metano es de 400 ppm (experimento 4), siguiendo una pendiente más acusada y alcanzando el valor nulo a los 1100°C. Esto puede deberse también a que este experimento se hizo con una lambda algo oxidante.

Con una concentración de metano más alta (experimento 5) el comportamiento es similar al del experimento de referencia, aunque el valor nulo se alcanza un poco más tarde con mayor presencia de metano.



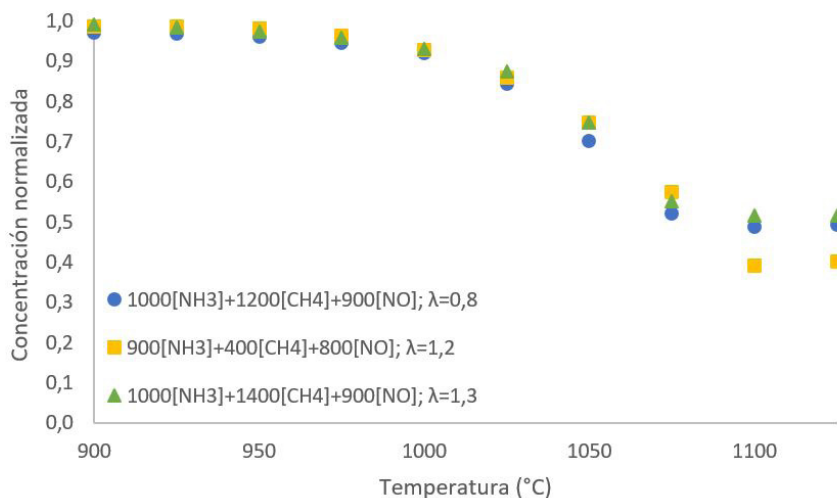
Gráfica 10. Conversión del NH_3 en función de la temperatura para diferentes concentraciones de metano.

El metano, mostrado en la gráfica 11, se comporta de similar manera en estos tres experimentos, iniciando la combustión a temperatura parecida. En el caso de la mayor concentración a la entrada (experimento 5) se llega a dar la conversión total del compuesto.



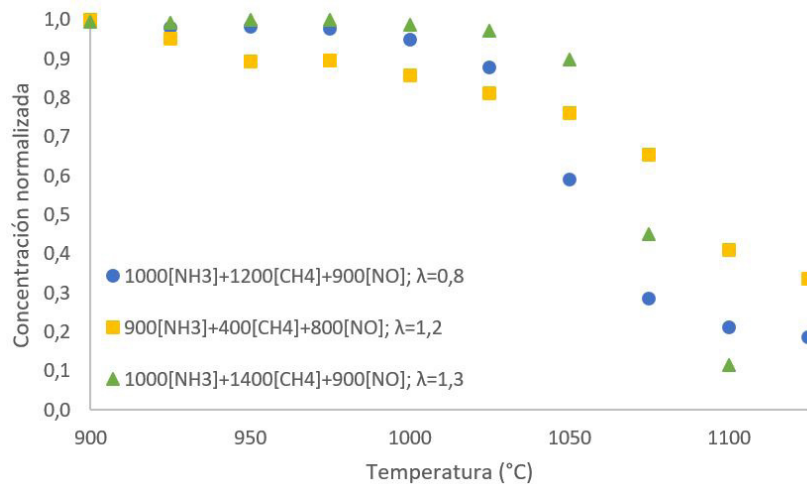
Gráfica 11. Conversión del CH_4 en función de la temperatura para diferentes concentraciones de metano.

La concentración de NO (gráfica 12) sigue el comportamiento descrito en el apartado anterior, alcanza un mínimo y luego vuelve a crecer. En este caso los tres experimentos llegan al mínimo a alta temperatura, por lo que el efecto de subida en la concentración no es tan evidente.



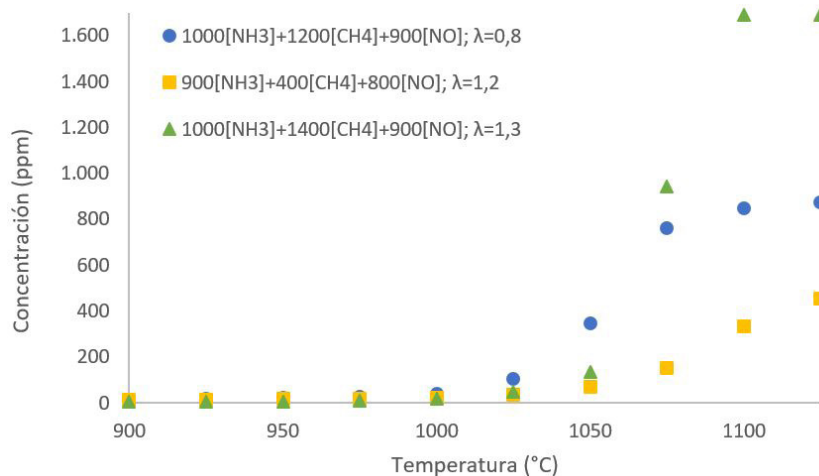
Gráfica 12. Conversión del NO en función de la temperatura para diferentes concentraciones de metano.

El consumo de oxígeno se muestra en la gráfica 13. Para los experimentos 1 y 5 se inicia a similares temperaturas y desciende en una curva parecida, llegando a valores bajos. Sin embargo, en el experimento realizado con 400ppm de metano, el consumo de oxígeno comienza antes, a 900°C, aunque no llega a valores tan bajos como los otros experimentos.



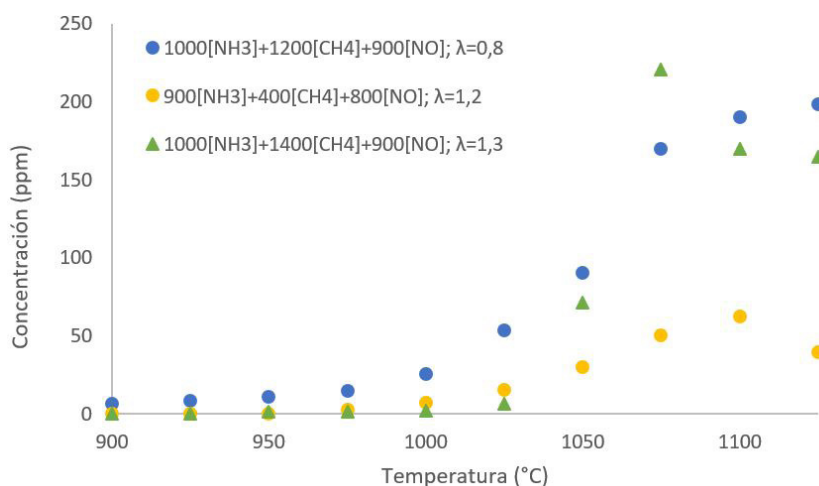
Gráfica 13. Consumo del O_2 en función de la temperatura para diferentes concentraciones de metano.

En cuanto a las concentraciones de los productos formados, en la gráfica 14 se observa la concentración de salida de dióxido de carbono. Como su fuente es la combustión de metano, en el experimento 4 la aparición de este no es elevada. Al contrario de lo que sucede con el experimento 5, donde se da una gran formación de CO_2 , llegando a un máximo en las temperaturas más elevadas. Sin embargo, la temperatura a la que se empieza a formar es prácticamente la misma en los tres experimentos.



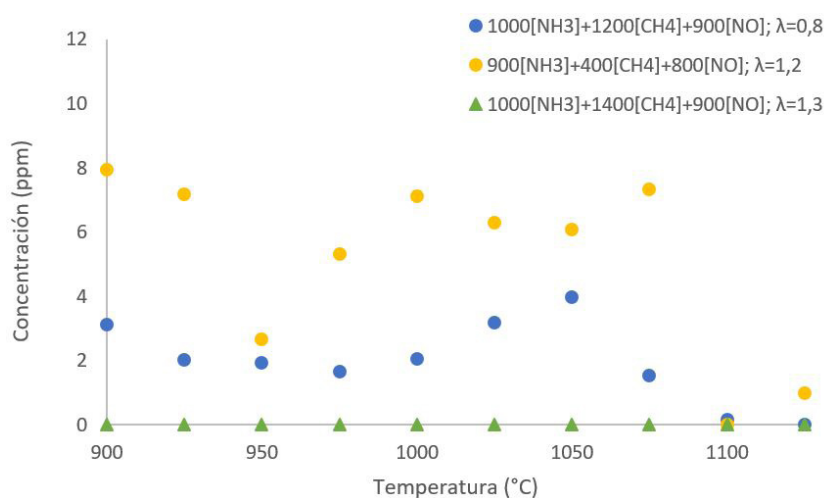
Gráfica 14. Concentración de CO_2 en la salida en función de la temperatura para diferentes concentraciones de metano.

En la gráfica 15 se representa la aparición del monóxido de carbono. Al igual que con el compuesto anterior, en el experimento 5 aparece mayor cantidad que en el 4. La temperatura de inicio formación es ligeramente inferior que la del CO_2 y además se producen máximos, para el experimento 5 a 1075°C y en el 4 a 1100°C.



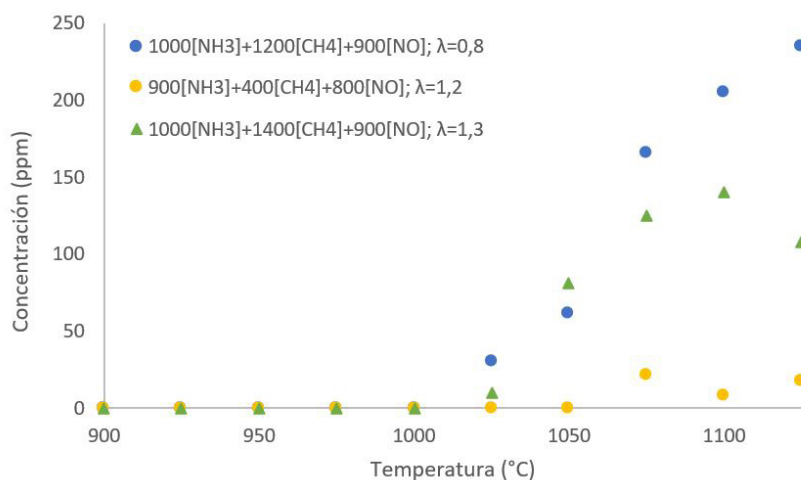
Gráfica 15. Concentración de CO en la salida en función de la temperatura para diferentes concentraciones de metano.

La formación del óxido nitroso se muestra en la gráfica 16. En el experimento 4 aparecen unas pocas ppm y en el caso de mayor nivel de metano a la entrada la aparición de N₂O ha sido nula.



Gráfica 16. Concentración de N₂O en la salida en función de la temperatura para diferentes concentraciones de metano.

La aparición de hidrógeno molecular, como se muestra en la gráfica 17, es menor que en el experimento de referencia, tanto si hay gran cantidad de metano o poca. La temperatura del inicio de la formación permanece igual, en la mezcla con 1400ppm de metano (experimento 5) aparece un máximo a 1100°C.



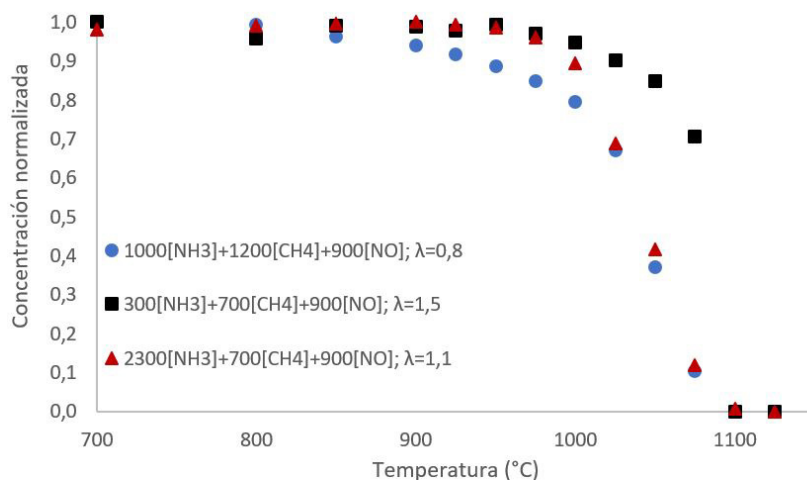
Gráfica 17. Concentración de H_2 en la salida en función de la temperatura para diferentes concentraciones de metano.

En ninguno de estos experimentos se registró la aparición de HCN.

3.5. Influencia de la concentración de NH_3

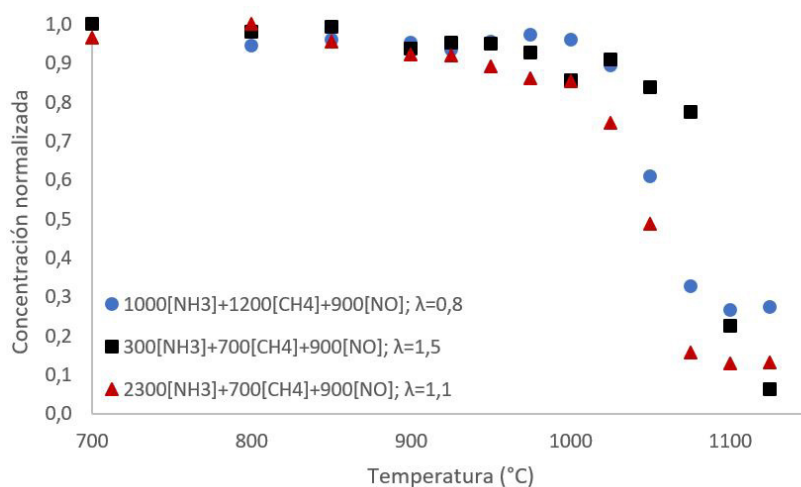
La última tanda de experimentos realizada analiza el efecto de la presencia del amoníaco en la mezcla. Con la concentración base de 900 ppm de NO y 700 de CH_4 , se añaden 300 ppm de NH_3 en el experimento 6 y 2300 ppm en el experimento 7. Se realizan con estequiometría de lambda igual a 1,5 y 1,1 respectivamente y se comparan con los resultados del experimento 1.

La gráfica 18 muestra la conversión del amoníaco. Para todos los experimentos se alcanza la conversión total y para la misma temperatura, incluido el experimento que se inicia con 2300 ppm de amoníaco (experimento 7). En este último caso, se aprecia un descenso brusco, puesto que se pasa del 30% de conversión al 100%.



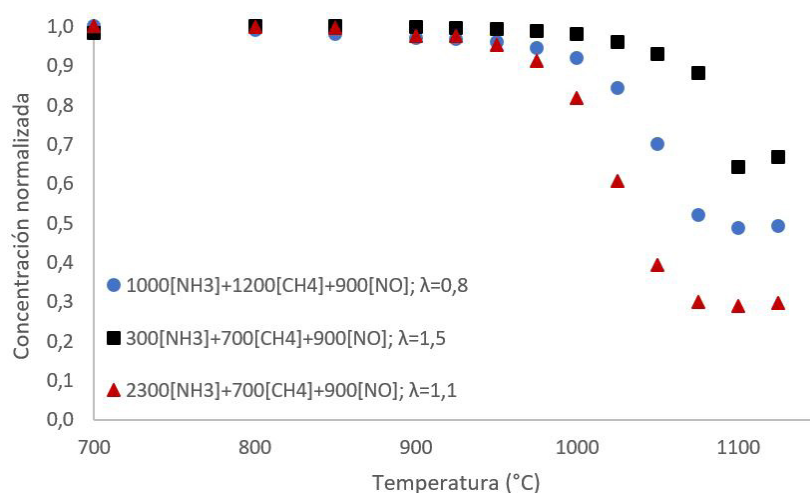
Gráfica 18. Conversión del NH_3 en función de la temperatura para diferentes concentraciones de amoníaco.

En la gráfica 19 se observa la conversión del metano. Tanto disminuir como aumentar la concentración de amoníaco en la mezcla aumenta la conversión del metano alcanzada, hasta el 87% y el 94%, respectivamente.



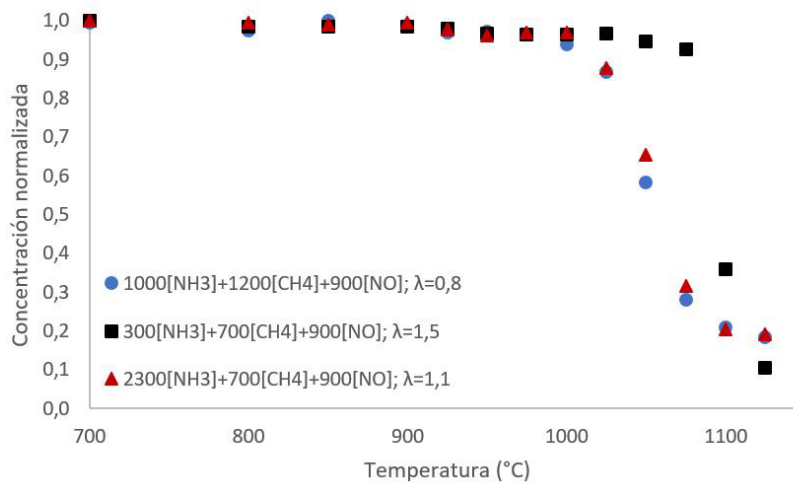
Gráfica 19. Conversión del CH₄ en función de la temperatura para diferentes concentraciones de amoníaco.

En cuanto a la conversión del NO, vuelve a aparecer el efecto comentado en los apartados anteriores. En el experimento con mayor cantidad de amoníaco (experimento 7) el mínimo alcanza un valor de conversión más bajo respecto de la referencia, mientras que en el experimento 6, con menor cantidad de amoníaco el valor del mínimo es más alto.



Gráfica 20. Conversión del NO en función de la temperatura para diferentes concentraciones de amoníaco.

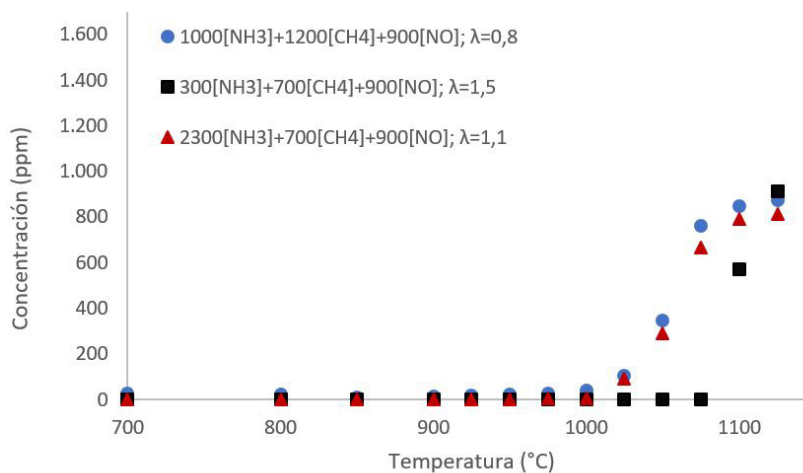
La conversión del oxígeno, mostrada en la gráfica 21, es muy similar para los experimentos 1 y 7, pero se muestra diferente para el experimento con mayor cantidad de amoníaco, iniciándose más tarde.



Gráfica 21. Conversión del O_2 en función de la temperatura para diferentes concentraciones de amoníaco.

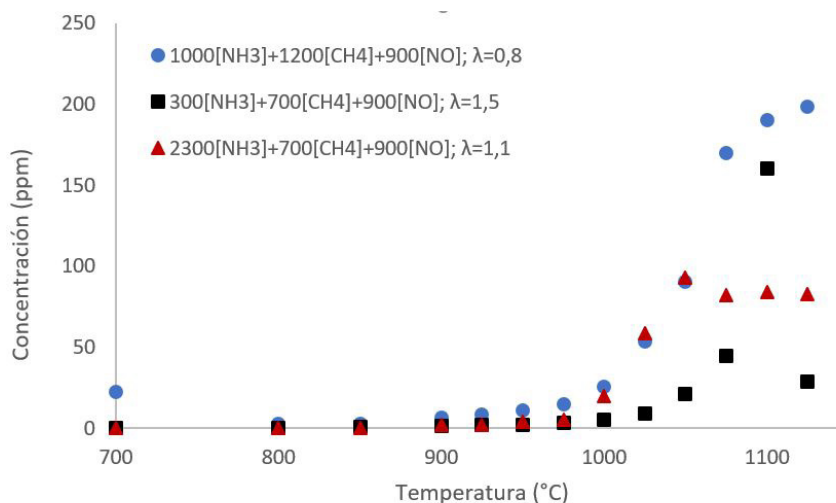
A continuación, se muestra el análisis de los productos formados durante la combustión.

En la formación del CO_2 (gráfica 22), nuevamente los experimentos 1 y 7 muestran un comportamiento similar, mientras que en el experimento 6 (300 ppm NH_3) la formación de este gas no se inicia hasta los 1075°C, puesto que la conversión del metano ha comenzado a mayor temperatura que en los otros experimentos. A la temperatura final, la cantidad de CO_2 formada es similar en los tres casos.



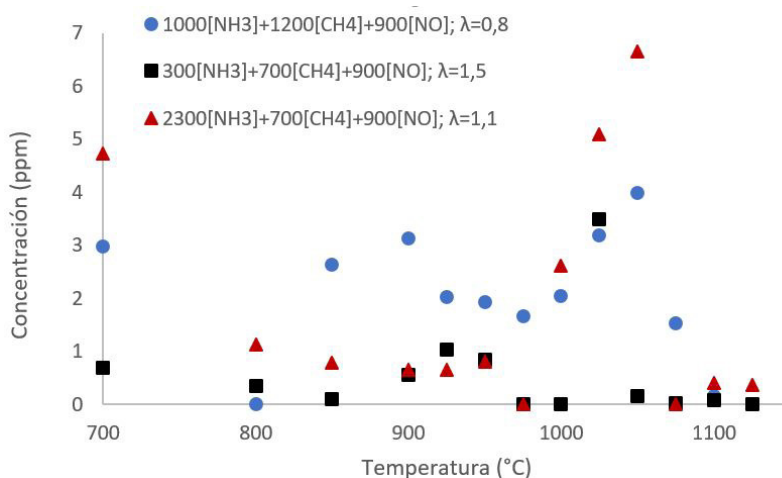
Gráfica 22. Concentración de CO_2 en la salida en función de la temperatura para diferentes concentraciones de amoníaco.

La formación de monóxido de carbono (gráfica 23) alcanza en los dos experimentos aquí estudiados un máximo para disminuir luego por encima de esa temperatura. En el caso del experimento con menor contenido de amoníaco (experimento 6), ese efecto es más acusado, alcanzándose un valor de 160 ppm a 1100°C. En el experimento con 2300 ppm de amoníaco (experimento 7), este valor es más bajo, 93 ppm, se alcanza a 1050°C y su valor parece estabilizarse después.



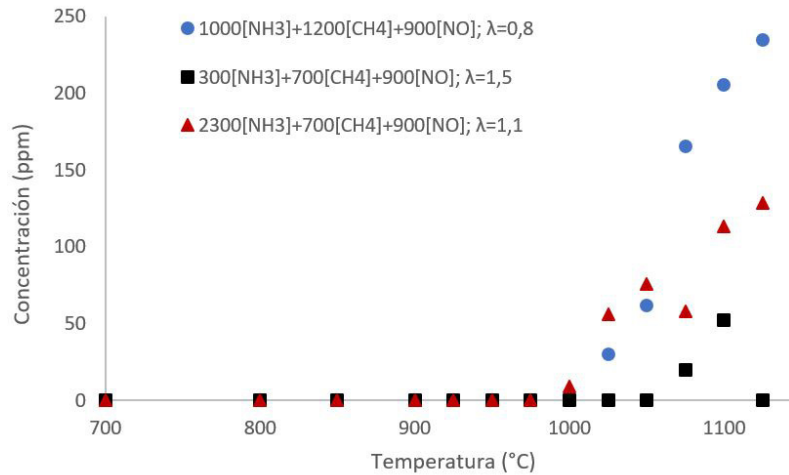
Gráfica 23. Concentración de CO en la salida en función de la temperatura para diferentes concentraciones de amoníaco.

En cuanto al N_2O , la concentración obtenida como muestra la gráfica 24, es baja. Para los experimentos 6 y 7 se produce un máximo a las temperaturas de 1025 y 1050°C. En cualquier caso, se trata de variaciones muy pequeñas, de menos de 8 ppm.



Gráfica 24. Concentración de N_2O en la salida en función de la temperatura para diferentes concentraciones de amoníaco.

Finalmente, la gráfica 25 muestra el hidrógeno. A pesar de incluir más de esta especie en la mezcla de combustión, se forma menos en los experimentos 6 y 7 que en el de referencia. En el caso del menor contenido en amoníaco, el hidrógeno alcanza un valor máximo y después vuelve al valor nulo.



Gráfica 25. Concentración de H_2 en la salida en función de la temperatura para diferentes concentraciones de amoníaco.

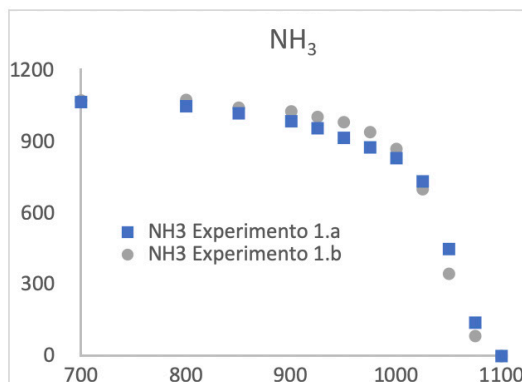
En ninguno de estos experimentos se registró la aparición de HCN.

3.6. Repetibilidad

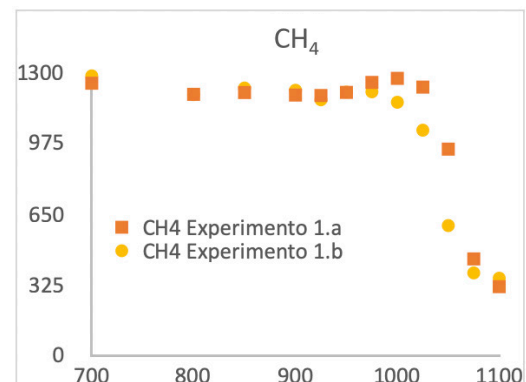
El experimento 1, que se toma como referencia de comparación, se ha repetido para realizar el estudio de repetibilidad.

Hasta ahora las medidas dadas para el experimento 1 eran una media de los resultados de las dos repeticiones.

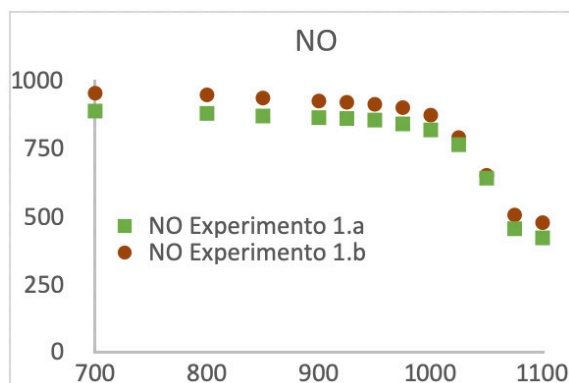
En las gráficas 26 a 31 se puede ver los resultados de ambos experimentos para todos los gases que se han analizado y se observa que se producen resultados muy similares.



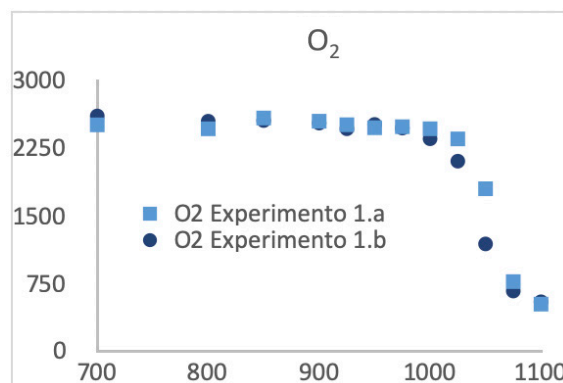
Gráfica 26



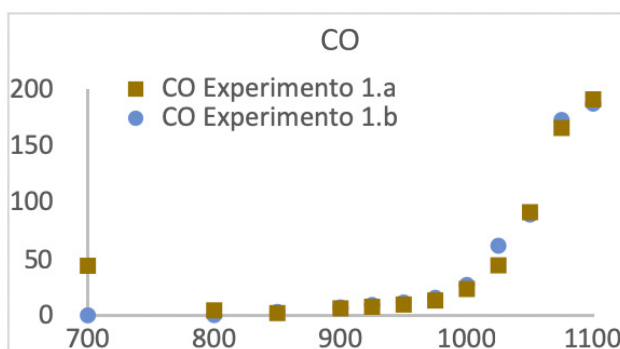
Gráfica 27



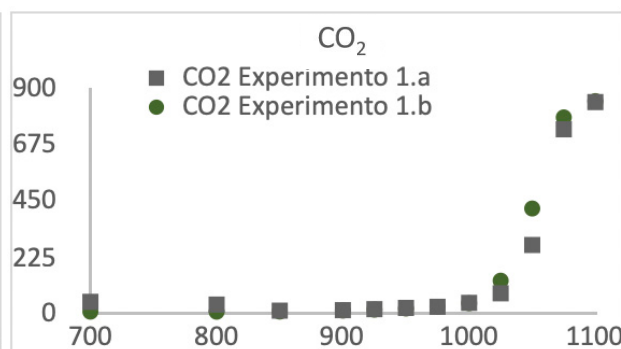
Gráfica 28



Gráfica 29



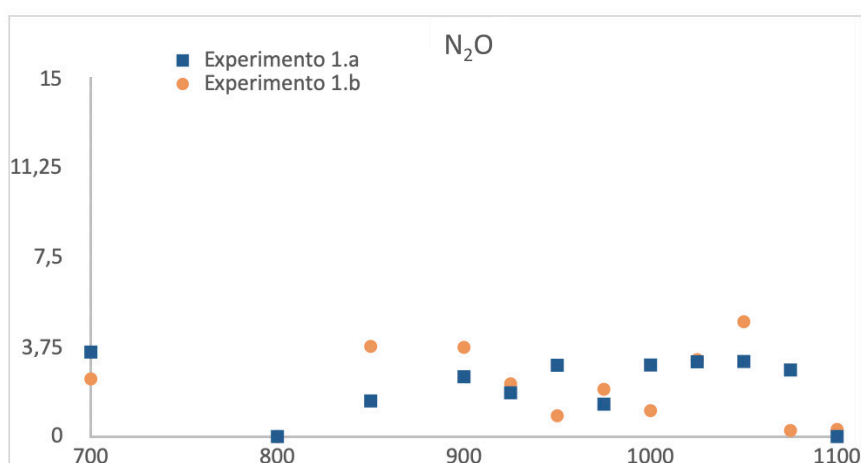
Gráfica 30



Gráfica 31

Gráficas 26 a 31. Comparación de los resultados del experimento 1a y 1b. Concentración en ppm frente a temperatura en grados centígrados.

Únicamente en el N_2O (gráfica 32) puede apreciarse algo de diferencia de valores entre los experimentos a (con un cuadrado) y b (con círculo), pero esto se debe a que son valores de concentración muy bajos, por debajo de 5 ppm. Esta concentración es similar a la sensibilidad del equipo de análisis y hace que la medida sea menos exacta.



Gráfica 32. Comparación de los resultados de N_2O del experimento 1^a y 1b.

Con una muestra de dos elementos un análisis estadístico más profundo no tendría sentido, por lo que en este caso únicamente se garantiza la repetibilidad de la metodología y los equipos usados observando gráficamente que para ambos experimentos los resultados son muy similares.

En el experimento 1a no se registró el hidrógeno molecular, por tanto, su valor no se compara en la gráfica. Además, la temperatura máxima alcanzada fue de 1100°C, mientras que en el experimento 1.b se llegó a 1125°C.

Sería interesante también garantizar la reproducibilidad los experimentos. Para ello, estos deberían repetirse por otro operador.

4. MODELADO

4.1. Software y modelo utilizados

Utilizando el programa CHEMKIN-PRO, desarrollado por ANSYS, se simulan los mismos experimentos realizados en el laboratorio.

Este programa simula para unas condiciones determinadas que reacciones se producen y que compuestos aparecen. El programa permite definir entre otros parámetros el tipo de reactor, la presión, el rango de temperatura de trabajo y la composición del gas de entrada.

Para la realización de los cálculos es necesario suministrarle un código que incluya todos los elementos presentes en la instalación y sus diferentes especies. También es necesario introducir todas las reacciones que se podrían producir y su cinética, además de otros datos termodinámicos. La información contenida en este código forma el modelo de combustión.

Existen varios modelos que ayudan a la comprensión y cálculo de diferentes procesos industriales, pero ninguno cubre todas las variaciones que se pueden hacer de las condiciones en la combustión del amoníaco.

En este caso, partiendo del modelo Glarborg [\[15\]](#) se han añadido algunas modificaciones que predicen mejor el comportamiento obtenido. El modelo original incluye cinco mecanismos de formación del NO, entre ellos el termal y la oxidación del amoníaco, y de reducción del NO por reducción selectiva no catalítica (SNCR).

Las modificaciones aplicadas, que incluyen otras reacciones de pirólisis del amoníaco y de reducción de los óxidos de nitrógeno, permiten mejorar un poco las predicciones realizadas.

El modelo final empleado maneja seis elementos: oxígeno, hidrógeno, carbono, nitrógeno, helio y argón. Incluye 151 especies contenedoras de estos elementos y 1413 posibles reacciones con sus datos de cinética.

Se comprueba que en general, el modelo se adecúa bastante bien al resultado experimental. Sin embargo, tiene algunas limitaciones, como por ejemplo al simular la formación del H_2 .

4.2. Resultados numéricos

Cada uno de los experimentos realizados en el laboratorio se ha simulado con el software recreando las mismas condiciones, introduciendo las concentraciones deseadas de cada gas, en un reactor de flujo pistón de las mismas dimensiones.

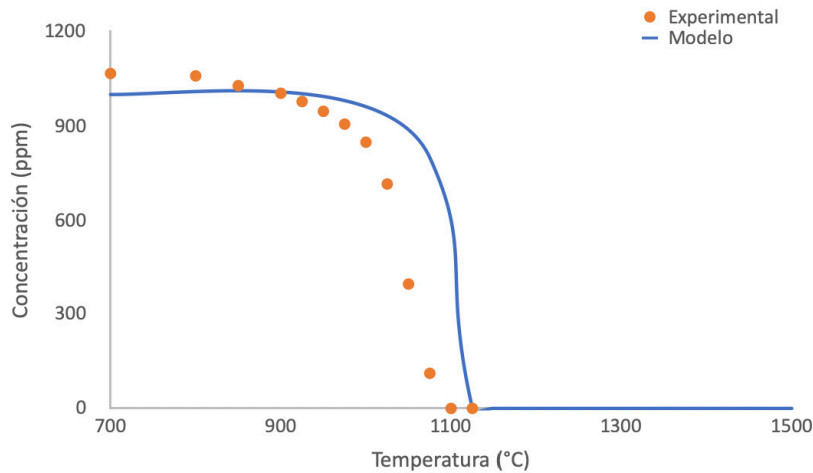
Ya que la herramienta permite un cálculo potente y rápido, el marco de temperatura se amplía, recreándose de los 700 a los 1500°C en escalones de 25°C.

A continuación, se expone la comparación de resultados experimentales frente a los simulados, para todos los experimentos realizados.

▪ **Experimento 1:** $1000[\text{NH}_3] + 1200[\text{CH}_4] + 900[\text{NO}]$; $\lambda=0,8$

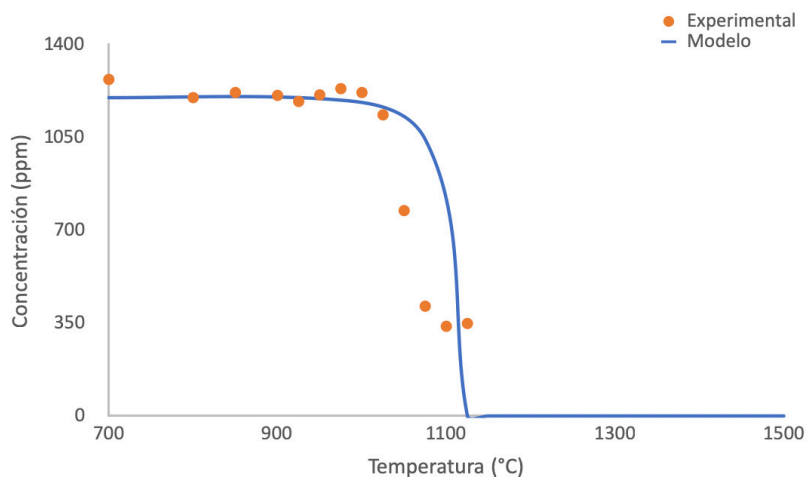
En el experimento de referencia el modelo se ajusta razonablemente bien a lo visto en el laboratorio.

El amoníaco sigue una evolución prácticamente igual a la predicha por el modelo, como se ve en la gráfica 33. Predice bien cuando se inicia el consumo y a qué temperatura se ha alcanzado la conversión total.



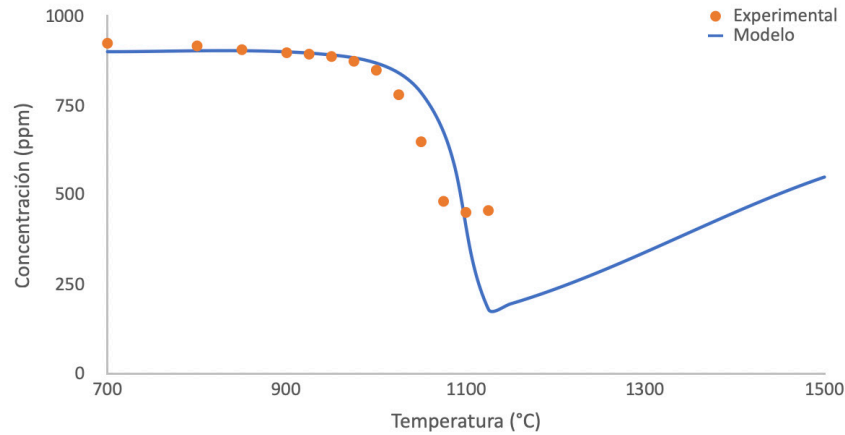
Gráfica 33. Comparación NH_3 en experimento 1.

Con el metano se obtiene también un resultado similar, y el modelo muestra una temperatura similar para el inicio de la combustión.



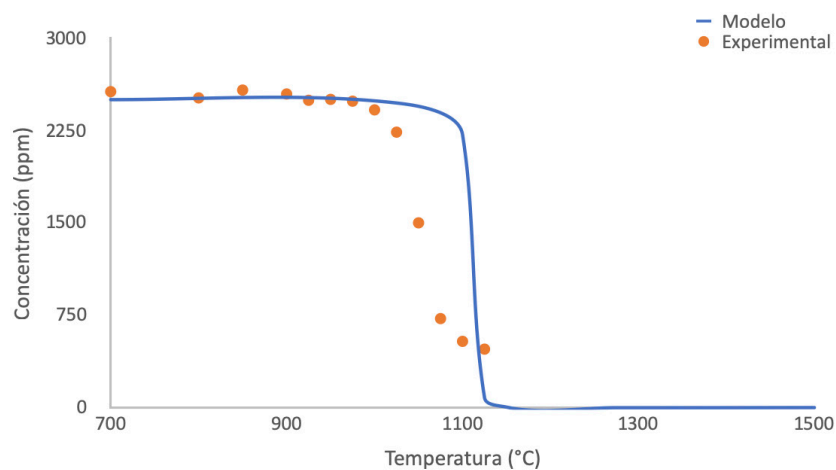
Gráfica 34. Comparación CH_4 en experimento 1.

El caso del monóxido de nitrógeno ya se ha comentado que resulta particular. Se registra un mínimo a la temperatura de 1100°C y luego la concentración aumenta de nuevo. El modelo predice bien la temperatura de este suceso, pero no la concentración.



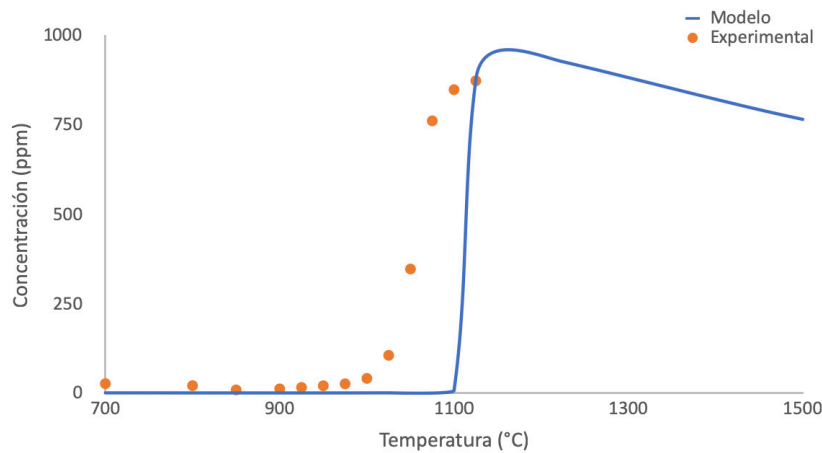
Gráfica 35. Conversión NO en el experimento 1.

El oxígeno (en la gráfica 36) también se aproxima bastante bien. Como ya se ha visto en las anteriores gráficas la temperatura a la que empiezan las reacciones coincide y también la temperatura a la que se alcanza el mínimo.



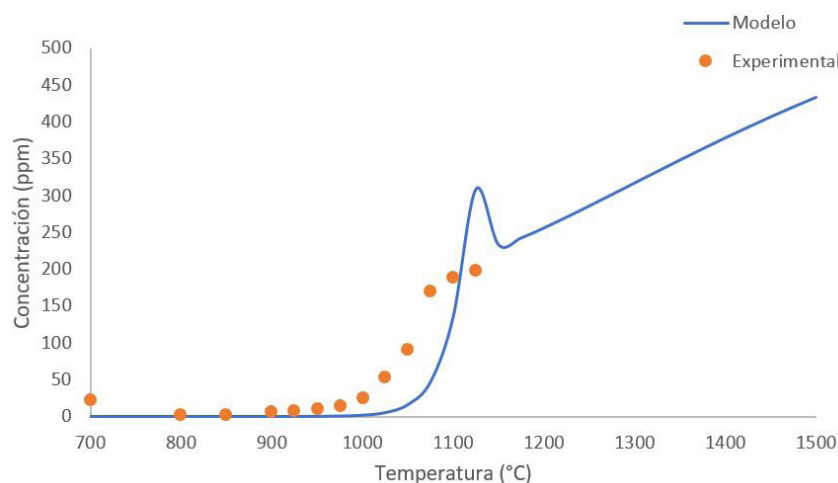
Gráfica 36. Consumo de O_2 en el experimento 1.

La gráfica 37 muestra la formación de CO_2 . Nuevamente, lo registrado en el laboratorio se adecúa a lo que el modelo desarrolla.



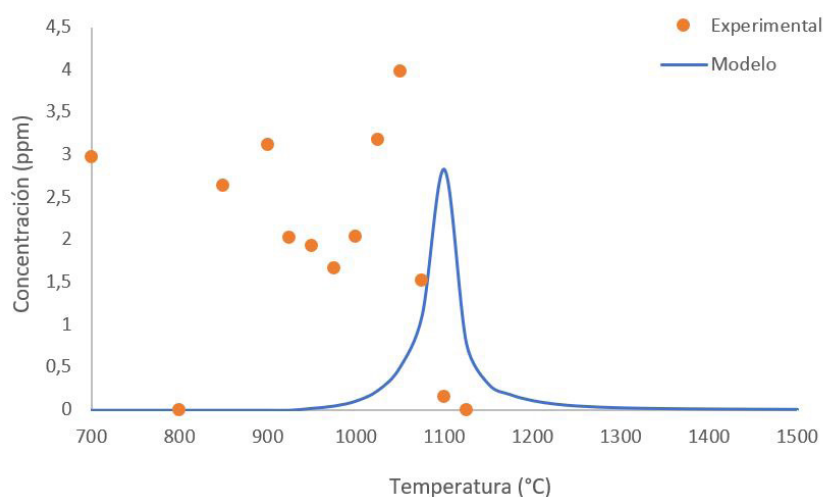
Gráfica 37. Formación de CO_2 en el experimento 1.

El monóxido de carbono alcanza un máximo, aunque ese punto no queda perfectamente reflejado por el modelo como se ve en la gráfica 38. Por otro lado, el modelo sirve para ver el comportamiento a temperaturas mayores, indicando cómo después de alcanzar un máximo la concentración sigue subiendo.



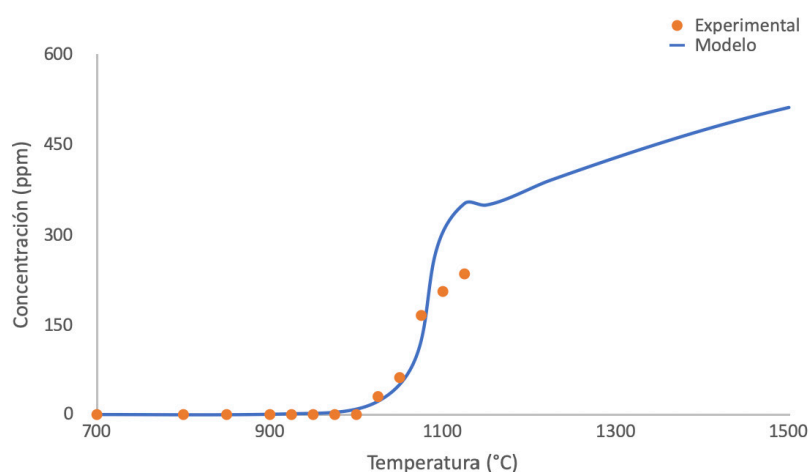
Gráfica 38. Formación de CO en el experimento 1.

El N_2O de la gráfica 39 muestra una distribución poco clara en el valor experimental, esto puede provenir de un error asociado a la resolución del equipo. La escala utilizada es de 5 ppm, un valor muy bajo. El modelo únicamente predice la formación de unas trazas en torno a la temperatura de 1100°C .



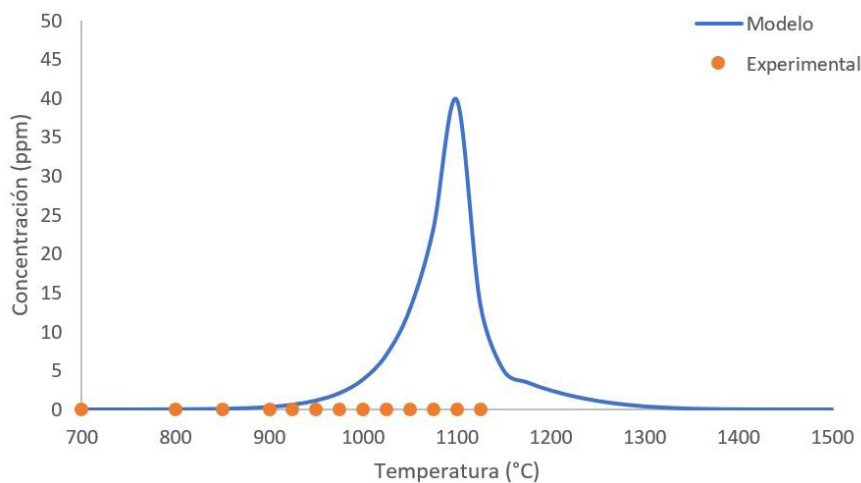
Gráfica 39. Formación de N_2O en el experimento 1.

Con el hidrógeno molecular sucede como con otros compuestos ya comentados, en torno a los 1100°C se produce un máximo de formación. Gracias al modelo, que se adecúa razonablemente bien, podemos observar que se pasada la temperatura de 1150 vuelve a ascender.



Gráfica 40. Formación de H_2 en el experimento 1.

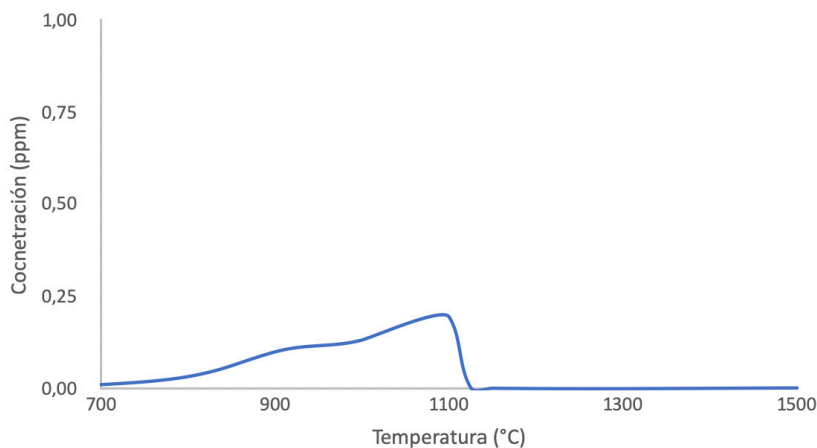
Ya se ha comentado que en el laboratorio no se registró la aparición de HCN. Sin embargo, como se muestra en la gráfica 41, el modelo predice que se formarán hasta 40 ppm.



Gráfica 41 Formación de HCN en el experimento 1.

El modelado además permite conocer la formación del dióxido de nitrógeno, gas que en el laboratorio no se puede medir.

Según el modelo, el valor del NO_2 es residual, representándose en la gráfica 42 con una escala de 1 ppm.

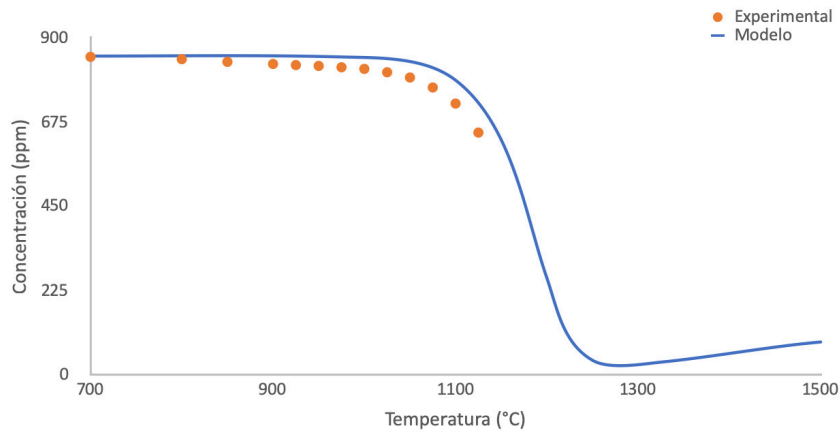


Gráfica 42. Formación de NO_2 en el experimento 1.

▪ **Experimento 2:** $900[\text{NH}_3] + 800[\text{CH}_4] + 900[\text{NO}]$; $\lambda=0,3$

En este experimento se comprueba que el modelo se adecua al resultado experimental con el amoníaco, el metano y el oxígeno (Ver tablas y gráficas completas en el [anexo C](#)).

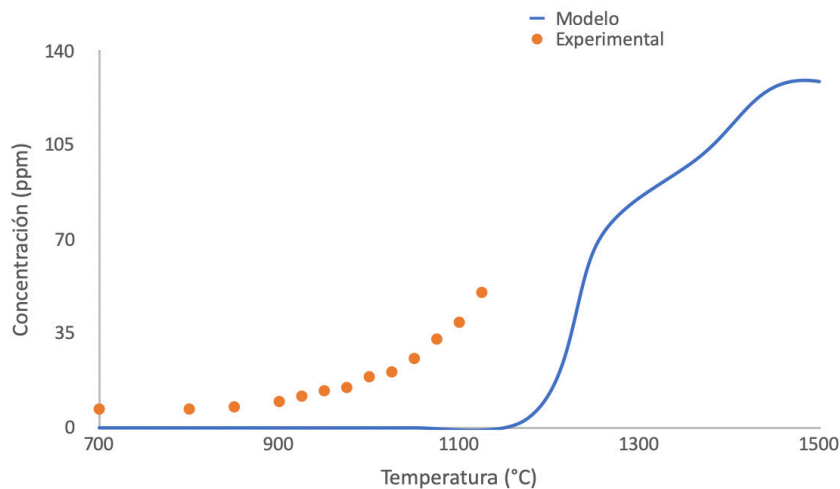
En cuanto al NO, es interesante observar, en la gráfica 43, cómo el modelo muestra que se produce el mínimo previsto a una mayor temperatura y que este casi alcanza el valor nulo.



Gráfica 43. Comparación del consumo de NO en el experimento 2.

La formación del CO_2 , comienza lógicamente a la temperatura a la que se empieza a consumir el metano. Sin embargo, en el modelo (gráfica 44) esta no comienza hasta más tarde. Por tanto, para que el balance del C cuadre, el modelo prevé la formación de otra especie con carbono aquí no contemplada.

Una nueva simulación más detallada muestra que en los resultados aparecen pequeñas concentraciones de acetileno (C_2H_2), etileno (C_2H_4) y trazas del radical metilo (CH_3) y etano (C_2H_6).



Gráfica 44. Comparación de la formación de CO_2 en el experimento 2.

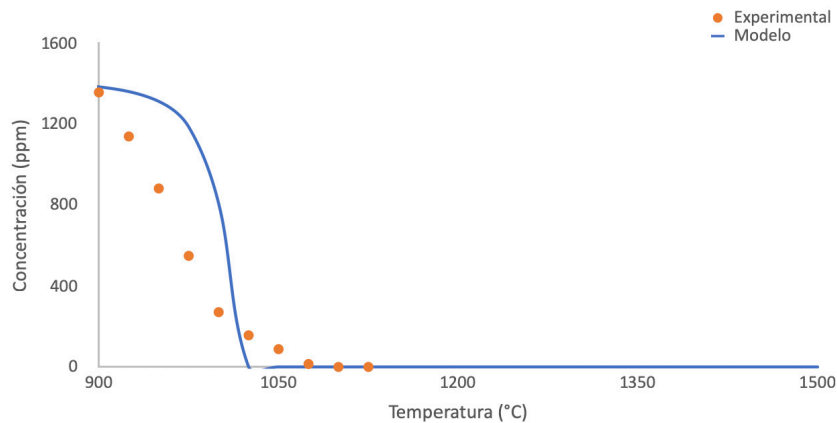
Para los otros gases que se pueden formar, CO y H_2 , el modelo sí coincide con el resultado experimental, mostrando concentraciones similares para las temperaturas usadas en el reactor.

El modelo también muestra la formación de HCN y concentraciones menores a 1 ppm de NO_2 .

▪ **Experimento 3:** $1400[\text{NH}_3] + 900[\text{CH}_4] + 1000[\text{NO}]; \lambda=1,7$

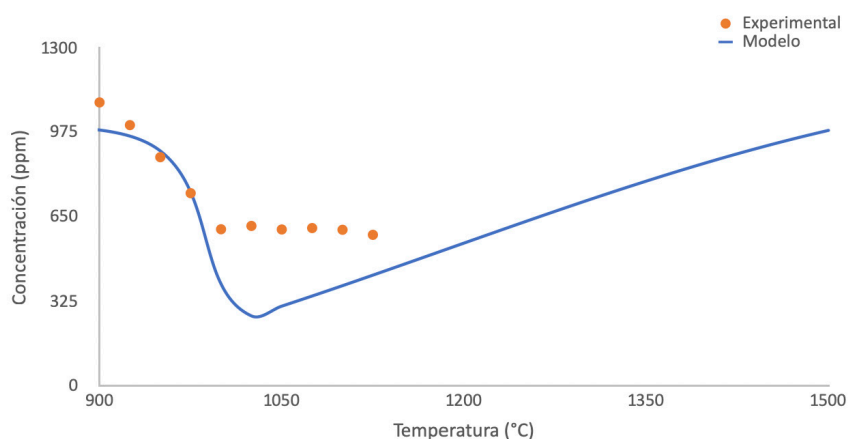
Para estas condiciones el modelo se ajusta bien a lo obtenido con los resultados obtenidos con casi todas las especies. Sin embargo, se ven ligeras variaciones en dos de las especies de entrada.

En la gráfica 45 se ve cómo el consumo de amoníaco está más suavizado con respecto al modelo, donde la caída de su concentración es más brusca y a mayor temperatura.



Gráfica 45. Comparación de la conversión del NH_3 en el experimento 3.

El NO, como ya se ha visto, llega a un mínimo (gráfica 46). Modelo y experimentación no coinciden en la recuperación que se produce después, siendo más pronunciada en el modelo.



Gráfica 46. Comparación de la conversión del NO en el experimento 3.

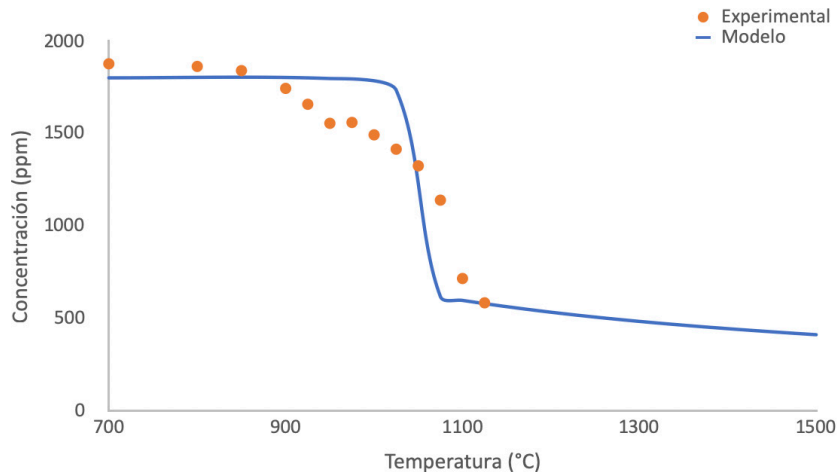
En los productos de combustión, CO_2 , CO y H_2 los resultados experimentales coinciden con el resultado del modelado.

El modelo también registra la aparición de HCN y trazas de NO_2 .

▪ **Experimento 4:** $900[\text{NH}_3] + 400[\text{CH}_4] + 800[\text{NO}]; \lambda=1,2$

En este experimento el modelo nuevamente predice bien el comportamiento de los gases de entrada al reactor y los productos formados, con las excepciones explicadas a continuación.

Experimentalmente, se observa como el consumo de O_2 (gráfica 47) se inicia a menor temperatura que en el modelo. Además, se puede observar que a la temperatura máxima de 1500°C no se habría alcanzado el consumo total.

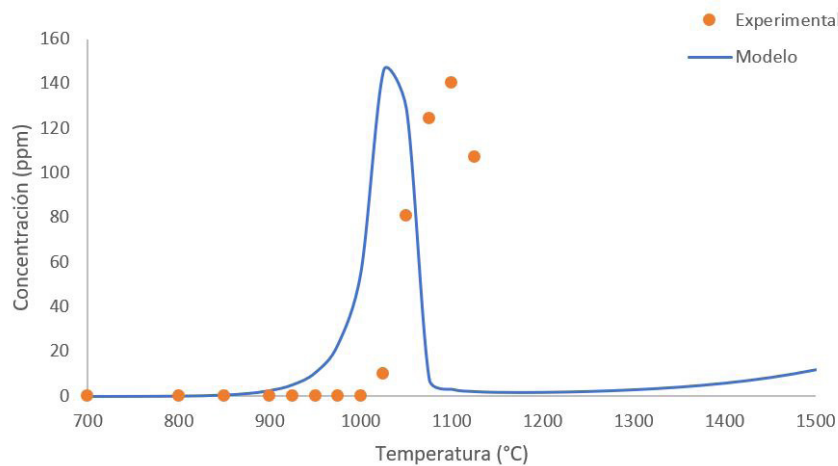


Gráfica 47. Comparación del consumo de O_2 en el experimento 4.

▪ **Experimento 5:** $1000[\text{NH}_3] + 1400[\text{CH}_4] + 900[\text{NO}]; \lambda=1,3$

En los siguientes experimentos la comparación de resultados es similar a las anteriormente descritas. A continuación, se destacan aquellos gases en los que los resultados son más interesantes.

El hidrógeno molecular (gráfica 48) se mantiene en valores casi nulos excepto en una ventana de temperatura, en la que alcanza un máximo muy evidente. Esta ventana varía entre el modelo y la experimentación, siendo mayor en el resultado de laboratorio.

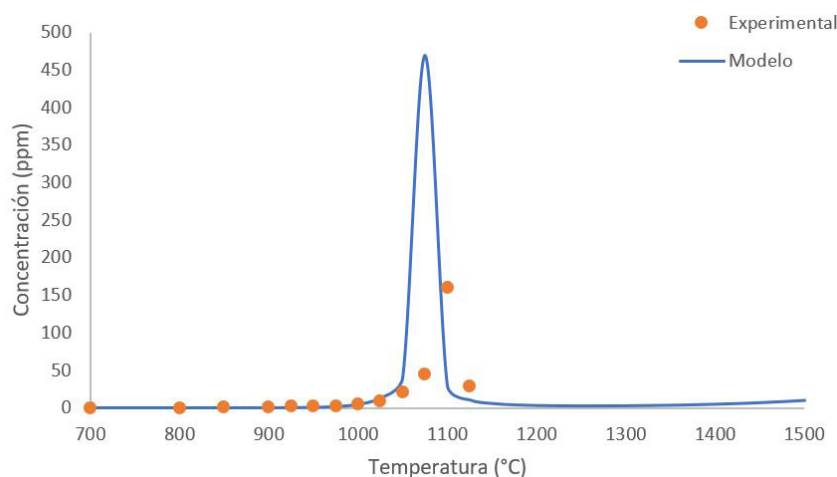


Gráfica 48. Comparación de la formación de H_2 en el experimento 5.

▪ **Experimento 6:** $300[NH_3] + 700[CH_4] + 900[NO]$; $\lambda=1,5$

En este experimento se observa un caso parecido al descrito en el experimento 2.

La figura 49 muestra la formación de CO. En el modelo el máximo alcanzado es mayor que en el experimental, con 450 ppm en el modelado y 150 ppm en el experimental. Para que el balance del C en el modelo se mantenga correcto, tiene que producirse a la misma temperatura menor cantidad de CO_2 o consumirse menos CH_4 .

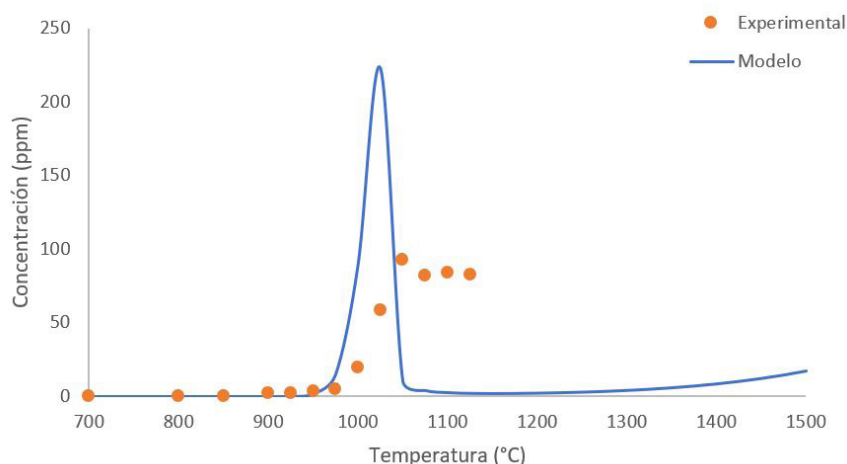


Gráfica 49. Comparación de la formación de CO en el experimento 6.

▪ **Experimento 7: $2300[\text{NH}_3] + 700[\text{CH}_4] + 900[\text{NO}]; \lambda=1,1$**

Por último, en el segundo experimento que analiza la influencia de la concentración de amoníaco en la entrada, se encuentra también una discrepancia en la formación de CO, en la gráfica 50.

Como en otros casos comentados, el modelo predice la formación de un máximo de CO a una determinada temperatura. Sin embargo, en los resultados experimentales el máximo de CO formado fue menor y manteniéndose constante hasta la temperatura máxima.



Gráfica 50. Comparación de la formación de CO en el experimento 7.

Como resumen, se puede concluir que el modelo se adecúa con bastante precisión al describir el consumo del amoníaco, del metano y del oxígeno. Para el monóxido de nitrógeno, además, permite conocer bien el característico valle que se produce en la curva.

La formación del CO_2 en general queda bien descrita. Con el CO se produce un máximo, pero el modelo en algunos casos falla al describir su máximo y la temperatura a la que se consigue.

En el apartado de análisis de los resultados experimentales ya se ha explicado que las medidas de N_2O no siguen una curva clara debido a que son concentraciones muy pequeñas. Por tanto, coinciden poco con los resultados del modelo, pero con éste se ve que el compuesto también presenta un pequeño máximo.

Con el hidrógeno molecular los resultados del modelo no son tan buenos, aunque sirven también para apreciar el máximo que describe el compuesto.

Aunque en los experimentos no se registró la formación de HCN, el modelo muestra la formación de un pico de varias decenas de ppm según el caso. También da como resultado trazas de N_2O .

4.3. Caminos de conversión

El modelado mediante software permite conocer no sólo el desarrollo cuantitativo de las reacciones en el reactor sino también como se producen éstas y los caminos que toma cada especie para reaccionar. Con el programa CHEMKIN-PRO se puede hacer este análisis a lo largo de toda la longitud del reactor y a diferentes temperaturas.

Esta herramienta nos va a permitir matizar los resultados que ya se han comentado en el análisis experimental. En concreto se discute acerca de la formación de NO y su evolución frente a la temperatura, la formación de CO-CO₂ y el origen de la formación de HCN.

▪ Consumo y formación de NO

En las siguientes ilustraciones se ve el esquema de reacción que siguen los compuestos, a una determinada temperatura y a la salida del reactor ($x=20\text{cm}$). El grosor de las flechas indica la importancia de la reacción.

Para el experimento 3, con exceso de oxígeno, analizamos el consumo y la formación de NO. En la ilustración 1 vemos el consumo del NO a una temperatura anterior al mínimo del valle, que principalmente va a formar HONO. Aparece también una descomposición en N₂ y agua, proveniente de la reacción con el NH₂.

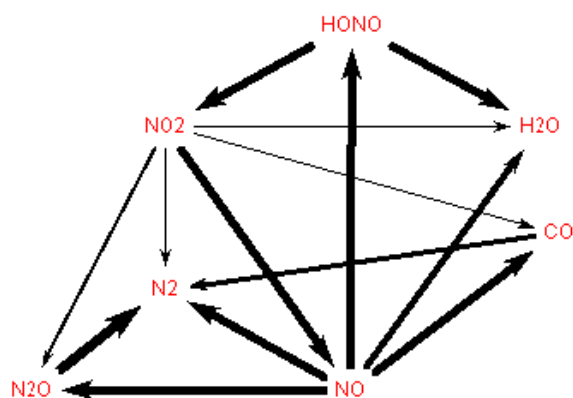


Ilustración 1. Consumo del NO a 1050°C el experimento 3 en $x=20\text{cm}$.

A temperaturas superiores, pasada la temperatura del mínimo, el proceso de consumo ha cambiado, como se ve en la ilustración 2. Aunque la reacción a HONO, N₂ y agua siguen siendo las principales, ya no hay descomposición en CO.

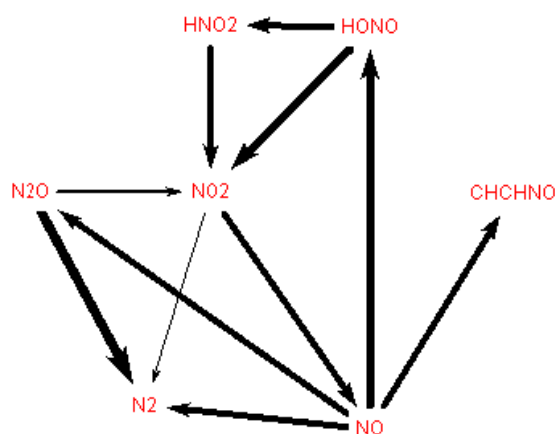


Ilustración 2. Consumo del NO a 1200°C el experimento 3 en $x=20\text{cm}$.

Se analiza ahora el proceso de formación. En la ilustración 3 se ve su formación a temperatura inferior al mínimo producido.

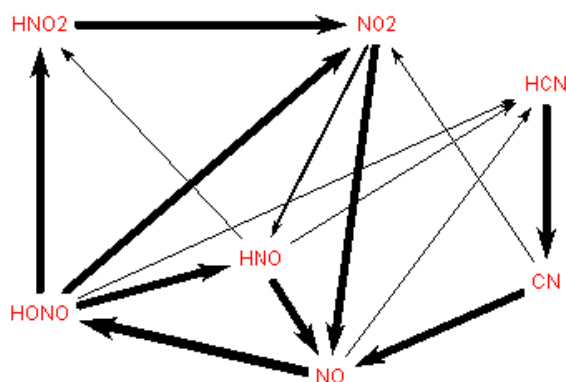
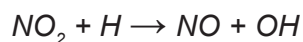


Ilustración 3. Formación de NO a 1050°C en el experimento 3 en $x=20\text{cm}$.

Esta formación se produce de la reacción del NO_2 con H para dar NO y el grupo OH (ecuación 8).



Ec. 8

A temperatura superior, 1200°C, la formación de NO es parecida, pero cambian algunos compuestos intermedios (ilustración 4), no hay descomposición de HCN para dar NO. La reacción de la ecuación 8 sigue siendo la principal, pero la reacción a partir de OH (ecuación 9) está menos favorecida.

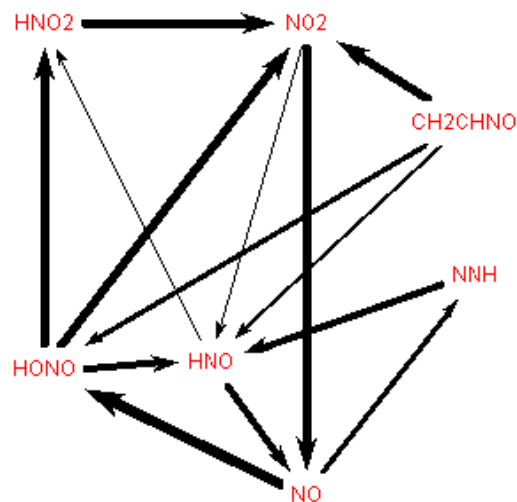
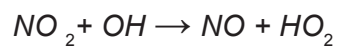


Ilustración 4. Formación de NO a 1200°C en el experimento 3 en $x=20\text{cm}$.



Ec. 9

▪ Formación CO – CO₂

En el experimento 5 (1400 ppm de CH₄), en el que se ha registrado mayor formación de CO, se analiza la formación de este compuesto en la temperatura a la que se produce su máximo, 1075°C.

La ilustración 5 muestra cómo la formación de CO se produce principalmente vía NO y HCN.

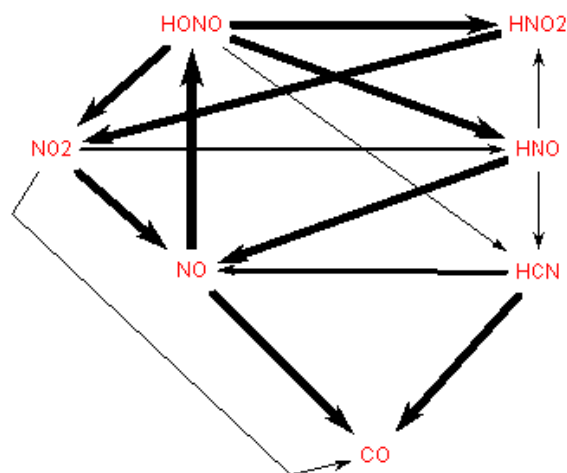


Ilustración 5. Formación de CO a 1075°C en el experimento 5 en $x=20\text{cm}$.

A una temperatura un poco mayor (ilustración 6), se observa la formación del CO_2 que viene a través del CO , por lo que disminuye la concentración de este gas en la salida.

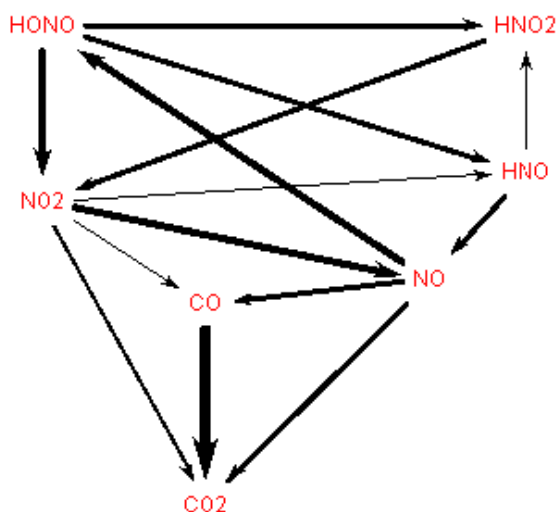


Ilustración 6. Formación de CO_2 a 1100°C en el experimento 5 en $x=20\text{cm}$.

▪ Formación HCN

Tomando el experimento 1 de referencia, se analiza la formación de HCN. Según el resultado numérico se produce un máximo de 45 ppm en 1100°C . Experimentalmente no se obtiene este compuesto, pero con el modelo se puede observar una formación que viene mayoritariamente de la reacción del CH_3 con el NO y de la descomposición del H_2CN .

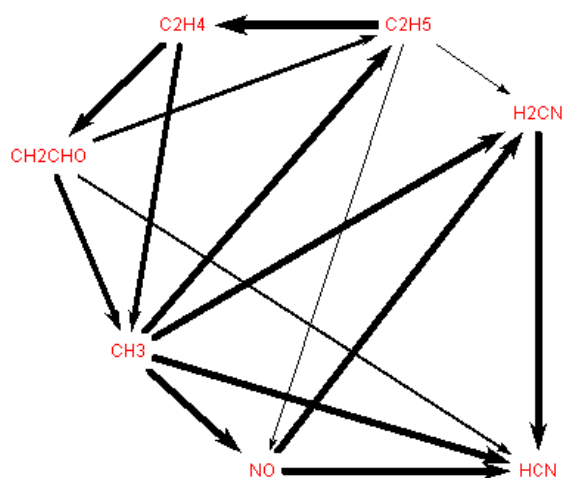


Ilustración 7. Formación de HCN a 1100°C en el experimento 1 en $x=20\text{cm}$.

5. CONCLUSIONES Y LÍNEAS FUTURAS

Este trabajo se ha centrado en estudiar la combustión de mezclas de NH_3 , CH_4 y NO , con objeto de analizar la influencia de la estequiometría y la concentración de los diferentes compuestos.

Los diferentes experimentos se han llevado a cabo a presión atmosférica en un reactor y a diferentes temperaturas, entre los 700 y los 1125°C. Además, se ha realizado la simulación de estos experimentos con el software específico de ANSYS CHEMKIN-PRO. Para realizar el modelo cinético-químico se ha partido de datos bibliográficos y del trabajo de simulación desarrollado en el I3A.

Los resultados experimentales se comparan con los computacionales, de modo que se verifican y así el modelo permite analizar los diferentes caminos de reacción y los compuestos intermedios formados, además de prever la evolución de temperaturas en un rango mayor.

Tras todo este estudio, se pueden extraer las siguientes conclusiones:

- Aunque se analiza un rango de temperatura que empieza en 700°C, no se aprecian reacciones en los reactivos hasta los 900°C.
- El exceso de aire contribuye a que se propicien las reacciones a más baja temperatura. La combustión de NH_3 y CH_4 comenzará a menor temperatura y se alcanzan mayores grados de conversión.
- La concentración de metano menor favorece el consumo de NH_3 alcanzándose conversiones mayores para temperaturas inferiores. Sin embargo, en el experimento donde se aumenta la concentración de CH_4 no influye en la combustión de amoníaco.
- En todos los casos, el NO muestra un mínimo y luego vuelve a subir. La menor temperatura a la que se alcanza este mínimo son 1000°C en el experimento con exceso de oxígeno y con condiciones reductoras este mínimo no se alcanza. Según la predicción del modelo estaría en 1250°C.
- En el experimento con 2300ppm de NH_3 , el NO se consume hasta el 70%. Por el contrario, en el experimento con 300 ppm de NH_3 sólo se produce una conversión máxima del 12%.

- Se produce un máximo de CO a temperaturas que van de 975 a 1100°C según las condiciones. A partir de ahí, las reacciones que producen CO₂ se ven más favorecidas.
- El H₂ experimenta un comportamiento similar, presentando máximos en las temperaturas de 1000 a 1100°C. Según el modelo, a partir de 1400°C la concentración de H₂ vuelve a aumentar. El máximo registrado de hidrógeno molecular son 1600ppm en el experimento 2, con $\lambda=0,3$.
- En los resultados experimentales no se registra HCN aunque el modelo sí lo muestra, proveniente de las reacciones del CH₃ con el NO y de la descomposición del H₂CN.
- Los valores máximos alcanzados de N₂O son de 50 ppm en el experimento 2, con condiciones reductoras. En el resto de experimentos no se sobrepasan las 14 ppm.
- El modelo muestra en todos los experimentos trazas de NO₂ menores a 1 ppm.
- El modelo cinético químico utilizado se ajusta razonablemente bien con el resultado obtenido experimentalmente.

Así como se han tomado referencias de estudios similares anteriores, el presente trabajo permite el desarrollo de algunas líneas futuras. Dentro de estas, las más interesantes serían:

- Analizar la influencia del NO. Tal y como se ha hecho con el NH₃ y el CH₄, se podrían hacer experimentos donde se variara la concentración de NO (500 y 1500 ppm, por ejemplo) con concentraciones de 1000 ppm de CH₄ y NH₃. Así se entendería mejor como la presencia del NO afecta a las reacciones.
- Combinar análisis de estequiometría y concentración de reactivo. Utilizando algunas de las combinaciones de los experimentos 4, 5, 6 ó 7, variar su estequiometría, probando el impacto de las condiciones reductoras y oxidantes.

- Cambiar la atmósfera de N_2 por otra inerte como, por ejemplo, una atmósfera de argón. Así se obtienen datos fiables sobre la creación de N_2 durante la combustión.
- Realizar más repeticiones de alguno de los experimentos. Especialmente del experimento de referencia 1, para que sea posible realizar un estudio estadístico y determinar mejor la consistencia de los resultados.

6. BIBLIOGRAFÍA

- [1] ANSYS, «Página web de ANSYS» [En línea]. <https://www.ansys.com/products/fluids/ansys-chemkin-pro>. [Último acceso: junio 2020].
- [2] BP, «BP Statistical Review of World Energy, 68th. edition» 2019.
- [3] Registro Estatal de Emisiones y fuentes contaminantes, «PRTR España» [En línea]. <http://www.prtr-es.es/Oxidos-nitrogeno-769112007.html>. [Último acceso: marzo 2020].
- [4] BASF, «The Story. Fertilizer out of thin air» [En línea]. <https://archive.is/20140210085650/http://www.basf.com/group/corporate/en/news-and-media-relations/science-around-us/ammonia/story>. [Último acceso: marzo 2020].
- [5] A. Valera, H. Xiao, M. Owen-Jones, W. I. F. David y P. J. Bowen, «Ammonia for Power» *Progress in Energy and Combustion Science*, pp. 63 - 102, 2018.
- [6] X. Zhang, M. He y Y. Zhang, «A review of research on the Kalina cycle» *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, p. 5309 – 5318, 2012.
- [7] C. Zamfirescu y I. Dincer, «Using ammonia as a sustainable fuel» *Journal of Power Sources*, pp. 459 - 465, 2008.
- [8] B. G. Miller, «Formation and Control of Nitrogen Oxides» de *Clean Coal Engineering Technology*, Butterworth-Heinemann, 2017, pp. 507 -538.
- [10] H. Kobayashi, A. Hayakawa, K. D. Kunkuma, C. Somarathne y E. C. Okafor, «Science and technology of ammonia combustion» *Proceedings of the Combustion Institute*, pp. 109 - 133, 2019.
- [11] Unión Fenosa Gas. [En línea]. https://www.unionfenosagas.com/es/Newsletter/NoticiaNewsletter/NL-marzo-2015-que-es-el-gas-natural?p=NL_MARZO_2015. [Último acceso: marzo 2020].
- [12] A. de Goñi, *Estudio de la combustión de amoníaco como alternativa a combustibles basados en carbono*, Universidad de Zaragoza, 2018.
- [13] B. Muñoz, *Estudio de la oxidación de mezclas de amoníaco-metano como combustible alternativo en procesos de combustión*, Universidad de Zaragoza, 2019.
- [14] L. Ara, *Estudio de la oxidación de amoníaco en presencia de óxido de nitrógeno.*, Universidad de Zaragoza, 2019.
- [15] P. Glarborg, J. A. Miller, B. Ruscik y S. J. Klippestein, «Modeling Nitrogen Chemistry in Combustion» *Progress in Energy and Combustion Science*, pp. 31-68, 2018.

ANEXO A: RESULTADOS EXPERIMENTALES

A.1 Cálculo de caudales

Los caudales de cada gas introducidos al reactor deben ser tales que el caudal total sea 1000ml/min y que la composición volumétrica de este gas sea la descrita en el nombre del experimento. El cálculo se hace teniendo en cuenta en primer lugar la concentración del gas en la botella, especificada en la tabla.

Tabla 4. Concentraciones de las botellas de gas.

| COMPUESTO | CONCENTRACIÓN EN LA BOTELLA (%) | CONCENTRACIÓN EN LA BOTELLA (ppm) |
|-----------------|---------------------------------|-----------------------------------|
| NH ₃ | 1 | 10 000 |
| CH ₄ | 1 | 10 000 |
| NO | 0,4 | 4 000 |
| O ₂ | 1,8 | 18 000 |
| N ₂ | 100 | 1 000 000 |

Además, es necesario realizar una conversión de las condiciones del laboratorio a las normales.

- Temperatura del laboratorio: 295 K
- Presión del laboratorio: 746 mmHg

De modo que se utiliza un factor de conversión según la fórmula:

$$Q_{normal} = \frac{Q * P_{laboratorio} * T_{laboratorio}}{P_{normal} * T_{laboratorio}} = Q * \frac{746 * 273}{760 * 298} = 1,101Q \quad Ec. 10$$

A.2. Experimento 1a: 1000[NH₃] + 1200[CH₄] + 900[NO]; $\lambda = 0,8$

Tabla 5. Concentraciones experimento 1a.

| Compuesto | Concentración final | Q _{norm} [ml/min] | Q [ml/min] |
|-----------------|---------------------|----------------------------|------------|
| NH ₃ | 1000 | 100 | 110,09 |
| CH ₄ | 1200 | 120 | 132,10 |
| NO | 900 | 225 | 247,69 |
| O ₂ | 2500 | 138,9 | 152,90 |
| N ₂ | 994400 | 416,1 | 458,08 |
| Lambda Total | | 0,8 | |

Tabla 6. Resultados del experimento 1a.

| Temperatura (°C) | NH ₃ (ppm) | CH ₄ (ppm) | O ₂ (ppm) | CO ₂ (ppm) | CO (ppm) | NO (ppm) | N ₂ O (ppm) |
|---------------------|--------------------------|--------------------------|-------------------------|--------------------------|-------------|-------------|---------------------------|
| 22 | 1010 | 1318 | 2551 | 6 | 0 | 877 | 9 |
| 700 | 1063 | 1252 | 2516 | 46 | 44 | 891 | 4 |
| 800 | 1046 | 1201 | 2472 | 35 | 4 | 882 | 0 |
| 850 | 1016 | 1209 | 2592 | 10 | 2 | 872 | 1 |
| 900 | 983 | 1198 | 2556 | 12 | 6 | 866 | 3 |
| 925 | 954 | 1195 | 2517 | 16 | 8 | 863 | 2 |
| 950 | 914 | 1210 | 2484 | 21 | 10 | 857 | 3 |
| 975 | 874 | 1256 | 2495 | 26 | 13 | 843 | 1 |
| 1000 | 829 | 1274 | 2473 | 41 | 23 | 821 | 3 |
| 1025 | 731 | 1234 | 2360 | 80 | 44 | 767 | 3 |
| 1050 | 448 | 950 | 1807 | 274 | 92 | 643 | 3 |
| 1075 | 140 | 446 | 776 | 738 | 166 | 456 | 3 |
| 1100 | 0 | 319 | 525 | 847 | 192 | 423 | 0 |

Nota: No aparece HCN.

A.3. Experimento 1b: $1000[\text{NH}_3] + 1200[\text{CH}_4] + 900[\text{NO}]; \lambda = 0,8$

Tabla 7. Concentraciones experimento 1b.

| Compuesto | Concentración final | Q_{norm} [ml/min] | Q [ml/min] |
|---------------|---------------------|----------------------------|------------|
| NH_3 | 1000 | 100 | 110,09 |
| CH_4 | 1200 | 120 | 132,10 |
| NO | 900 | 225 | 247,69 |
| O_2 | 2500 | 138,9 | 152,90 |
| N_2 | 994400 | 416,1 | 458,08 |
| Lambda Total | | 0,8 | |

Tabla 8. Resultados del experimento 1b.

| Temperatura (°C) | NH_3 (ppm) | CH_4 (ppm) | O_2 (ppm) | CO_2 (ppm) | CO (ppm) | NO (ppm) | N_2O (ppm) | H_2 (ppm) |
|------------------|---------------------|---------------------|--------------------|---------------------|----------|----------|----------------------------|--------------------|
| 22 | 936 | 1198 | 2779 | 8 | 0 | 953 | 3 | 0 |
| 700 | 1070 | 1286 | 2615 | 6 | 0 | 957 | 2 | 0 |
| 800 | 1072 | 1200 | 2556 | 6 | 0 | 950 | 0 | 0 |
| 850 | 1040 | 1230 | 2564 | 7 | 3 | 939 | 4 | 0 |
| 900 | 1025 | 1220 | 2536 | 10 | 7 | 928 | 4 | 0 |
| 925 | 1001 | 1176 | 2472 | 14 | 9 | 923 | 2 | 0 |
| 950 | 979 | 1211 | 2521 | 19 | 11 | 916 | 1 | 0 |
| 975 | 938 | 1212 | 2480 | 25 | 16 | 903 | 2 | 0 |
| 1000 | 867 | 1165 | 2362 | 40 | 27 | 876 | 1 | 0 |
| 1025 | 698 | 1036 | 2113 | 130 | 62 | 793 | 3 | 30 |
| 1050 | 344 | 599 | 1194 | 420 | 90 | 654 | 5 | 62 |
| 1075 | 84 | 382 | 671 | 786 | 174 | 507 | 0 | 165 |
| 1100 | 0 | 357 | 552 | 851 | 188 | 479 | 0 | 205 |
| 1125 | 0 | 349 | 476 | 874 | 199 | 456 | 0 | 235 |

Nota: No aparece HCN.

A.4. Experimento 2: $1000[\text{NH}_3] + 800[\text{CH}_4] + 800[\text{NO}]; \lambda = 0,3$

Tabla 9. Concentraciones experimento 2.

| Compuesto | Concentración final | Q_{norm} [ml/min] | Q [ml/min] |
|---------------|---------------------|----------------------------|------------|
| NH_3 | 1000 | 100 | 110,09 |
| CH_4 | 800 | 80 | 88,07 |
| NO | 800 | 200 | 220,17 |
| O_2 | 700 | 38,9 | 42,81 |
| N_2 | 996700 | 581,1 | 639,72 |
| Lambda Total | | 0,3 | |

Tabla 10. Resultados del experimento 2.

| Temperatura (°C) | NH_3 (ppm) | CH_4 (ppm) | O_2 (ppm) | CO_2 (ppm) | CO (ppm) | NO (ppm) | N_2O (ppm) | H_2 (ppm) |
|------------------|---------------------|---------------------|--------------------|---------------------|----------|----------|----------------------------|--------------------|
| 22 | 738 | 779 | 728 | 11 | 0 | 853 | 0 | 0 |
| 700 | 908 | 767 | 692 | 7 | 1 | 848 | 0 | 0 |
| 800 | 944 | 727 | 687 | 7 | 0 | 842 | 0 | 0 |
| 850 | 948 | 724 | 692 | 8 | 0 | 835 | 4 | 0 |
| 900 | 946 | 726 | 665 | 10 | 0 | 829 | 0 | 0 |
| 925 | 944 | 766 | 734 | 12 | 0 | 826 | 0 | 0 |
| 950 | 943 | 783 | 718 | 14 | 1 | 824 | 1 | 0 |
| 975 | 919 | 749 | 706 | 15 | 2 | 820 | 1 | 0 |
| 1000 | 911 | 741 | 689 | 19 | 3 | 816 | 0 | 0 |
| 1025 | 890 | 793 | 674 | 21 | 4 | 807 | 0 | 0 |
| 1050 | 864 | 683 | 653 | 26 | 6 | 793 | 0 | 0 |
| 1075 | 816 | 749 | 640 | 33 | 9 | 766 | 0 | 17 |
| 1100 | 756 | 750 | 607 | 39 | 14 | 723 | 0 | 35 |
| 1125 | 646 | 715 | 561 | 50 | 27 | 646 | 0 | 90 |

Nota: No aparece HCN.

A.5. Experimento 3: $1000[\text{NH}_3] + 900[\text{CH}_4] + 1000[\text{NO}]; \lambda = 1,7$

Tabla 11. Concentraciones experimento 3.

| Compuesto | Concentración final | Q_{norm} [ml/min] | Q [ml/min] |
|---------------|---------------------|----------------------------|------------|
| NH_3 | 1000 | 100 | 110,09 |
| CH_4 | 900 | 90 | 99,08 |
| NO | 1000 | 250 | 275,22 |
| O_2 | 4300 | 238,9 | 262,98 |
| N_2 | 992800 | 321,1 | 353,50 |
| Lambda Total | | 1,7 | |

Tabla 12. Resultados del experimento 3.

| Temperatura (°C) | NH_3 (ppm) | CH_4 (ppm) | O_2 (ppm) | CO_2 (ppm) | CO (ppm) | NO (ppm) | N_2O (ppm) | H_2 (ppm) |
|------------------|---------------------|---------------------|--------------------|---------------------|----------|----------|----------------------------|--------------------|
| 700 | 1594 | 925 | 4335 | 7 | 0 | 1237 | 1 | 0 |
| 800 | 1533 | 793 | 4266 | 15 | 33 | 1183 | 2 | 0 |
| 850 | 1457 | 813 | 4333 | 25 | 47 | 1157 | 3 | 0 |
| 900 | 1356 | 871 | 4304 | 61 | 65 | 1090 | 2 | 0 |
| 925 | 1139 | 649 | 4088 | 156 | 93 | 1002 | 4 | 0 |
| 950 | 882 | 617 | 4216 | 351 | 107 | 879 | 7 | 0 |
| 975 | 549 | 374 | 3045 | 708 | 248 | 740 | 14 | 0 |
| 1000 | 270 | 168 | 2231 | 1094 | 100 | 602 | 7 | 0 |
| 1025 | 156 | 126 | 2096 | 1151 | 118 | 614 | 5 | 17 |
| 1050 | 88 | 74 | 1970 | 1256 | 104 | 601 | 6 | 17 |
| 1075 | 14 | 89 | 1905 | 1224 | 116 | 606 | 0 | 35 |
| 1100 | 0 | 71 | 1922 | 1240 | 97 | 600 | 0 | 58 |
| 1125 | 0 | 37 | 1816 | 1275 | 127 | 580 | 0 | 63 |

Nota: No aparece HCN.

A.6. Experimento 4: $900[\text{NH}_3] + 400[\text{CH}_4] + 800[\text{NO}]; \lambda = 1,2$

Tabla 13. Concentraciones experimento 4.

| Compuesto | Concentración final | Q_{norm} [ml/min] | Q [ml/min] |
|---------------|---------------------|----------------------------|------------|
| NH_3 | 900 | 90 | 99,08 |
| CH_4 | 400 | 40 | 44,03 |
| NO | 800 | 200 | 220,17 |
| O_2 | 1800 | 94,4 | 103,97 |
| N_2 | 996200 | 575,6 | 633,61 |
| Lambda Total | | 1,2 | |

Tabla 14. Resultados del experimento 4.

| Temperatura (°C) | NH_3 (ppm) | CH_4 (ppm) | O_2 (ppm) | CO_2 (ppm) | CO (ppm) | NO (ppm) | N_2O (ppm) | H_2 (ppm) |
|------------------|---------------------|---------------------|--------------------|---------------------|----------|----------|----------------------------|--------------------|
| 700 | 918 | 305 | 1876 | 17 | 0 | 818 | 11 | 0 |
| 800 | 907 | 309 | 1862 | 16 | 0 | 815 | 5 | 0 |
| 850 | 840 | 297 | 1839 | 15 | 0 | 811 | 9 | 0 |
| 900 | 674 | 374 | 1743 | 15 | 0 | 807 | 8 | 0 |
| 925 | 491 | 392 | 1657 | 15 | 0 | 806 | 7 | 0 |
| 950 | 394 | 379 | 1554 | 16 | 0 | 802 | 3 | 0 |
| 975 | 349 | 354 | 1559 | 17 | 2 | 787 | 5 | 0 |
| 1000 | 311 | 346 | 1492 | 22 | 7 | 758 | 7 | 0 |
| 1025 | 254 | 297 | 1414 | 36 | 15 | 702 | 6 | 0 |
| 1050 | 177 | 264 | 1324 | 68 | 30 | 610 | 6 | 0 |
| 1075 | 84 | 164 | 1139 | 150 | 50 | 470 | 7 | 21 |
| 1100 | 0 | 115 | 715 | 334 | 62 | 320 | 0 | 8 |
| 1125 | 0 | 138 | 584 | 452 | 39 | 327 | 1 | 17 |

Nota: No aparece HCN.

A.7. Experimento 5: $1000[\text{NH}_3] + 1400[\text{CH}_4] + 900[\text{NO}]; \lambda = 1,3$

Tabla 15. Concentraciones experimento 5.

| Compuesto | Concentración final | Q_{norm} [ml/min] | Q [ml/min] |
|---------------------|---------------------|----------------------------|------------|
| NH_3 | 1000 | 100 | 110,09 |
| CH_4 | 1400 | 140 | 154,12 |
| NO | 900 | 225 | 247,69 |
| O_2 | 4700 | 261,1 | 287,45 |
| N_2 | 992000 | 273,9 | 301,51 |
| Lambda Total | | 1,3 | |

Tabla 16. Resultados del experimento 5.

| Temperatura (°C) | NH_3 (ppm) | CH_4 (ppm) | O_2 (ppm) | CO_2 (ppm) | CO (ppm) | NO (ppm) | N_2O (ppm) | H_2 (ppm) |
|------------------|---------------------|---------------------|--------------------|---------------------|----------|----------|----------------------------|--------------------|
| 700 | 1244 | 1285 | 4752 | 4 | 4 | 905 | 0 | 0 |
| 800 | 1091 | 1343 | 4735 | 1 | 0 | 916 | 0 | 0 |
| 850 | 1087 | 1349 | 4739 | 1 | 0 | 913 | 0 | 0 |
| 900 | 1074 | 1392 | 4694 | 3 | 0 | 907 | 0 | 0 |
| 925 | 1064 | 1360 | 4690 | 4 | 0 | 901 | 0 | 0 |
| 950 | 1065 | 1339 | 4724 | 6 | 1 | 892 | 0 | 0 |
| 975 | 1041 | 1366 | 4723 | 9 | 1 | 876 | 0 | 0 |
| 1000 | 1011 | 1318 | 4661 | 17 | 2 | 852 | 0 | 0 |
| 1025 | 932 | 1238 | 4584 | 48 | 6 | 800 | 0 | 10 |
| 1050 | 764 | 1082 | 4238 | 132 | 71 | 685 | 0 | 81 |
| 1075 | 301 | 430 | 2131 | 940 | 221 | 504 | 0 | 124 |
| 1100 | 43 | 44 | 541 | 1690 | 170 | 471 | 0 | 140 |
| 1125 | 0 | 0 | 528 | 1689 | 165 | 471 | 0 | 107 |

Nota: No aparece HCN.

A.8. Experimento 6: $300[\text{NH}_3] + 700[\text{CH}_4] + 900[\text{NO}]; \lambda = 1,5$

Tabla 17. Concentraciones experimento 6.

| Compuesto | Concentración final | Q_{norm} [ml/min] | Q [ml/min] |
|---------------|---------------------|----------------------------|------------|
| NH_3 | 300 | 30 | 33,03 |
| CH_4 | 700 | 70 | 77,06 |
| NO | 900 | 225 | 247,69 |
| O_2 | 2400 | 133,3 | 146,78 |
| N_2 | 995700 | 541,7 | 596,30 |
| Lambda Total | | 1,5 | |

Tabla 18. Resultados del experimento 6.

| Temperatura (°C) | NH_3 (ppm) | CH_4 (ppm) | O_2 (ppm) | CO_2 (ppm) | CO (ppm) | NO (ppm) | N_2O (ppm) | H_2 (ppm) |
|------------------|---------------------|---------------------|--------------------|---------------------|----------|----------|----------------------------|--------------------|
| 700 | 284 | 702 | 2397 | 0 | 0 | 917 | 1 | 0 |
| 800 | 273 | 689 | 2357 | 0 | 0 | 934 | 0 | 0 |
| 850 | 282 | 697 | 2361 | 0 | 1 | 933 | 0 | 0 |
| 900 | 281 | 658 | 2360 | 0 | 1 | 931 | 1 | 0 |
| 925 | 278 | 668 | 2345 | 0 | 2 | 930 | 1 | 0 |
| 950 | 283 | 667 | 2315 | 0 | 2 | 927 | 1 | 0 |
| 975 | 276 | 651 | 2313 | 0 | 3 | 923 | 0 | 0 |
| 1000 | 269 | 601 | 2307 | 0 | 5 | 914 | 0 | 0 |
| 1025 | 256 | 639 | 2316 | 0 | 9 | 897 | 3 | 0 |
| 1050 | 242 | 588 | 2265 | 1 | 21 | 867 | 0 | 0 |
| 1075 | 201 | 544 | 2216 | 1 | 45 | 823 | 0 | 19 |
| 1100 | 0 | 159 | 859 | 569 | 160 | 600 | 0 | 52 |
| 1125 | 0 | 44 | 253 | 913 | 29 | 623 | 0 | 0 |

Nota: No aparece HCN.

A.9. Experimento 7: 2300[NH₃] + 700[CH₄] + 900[NO]; $\lambda = 1,1$

Tabla 19. Concentraciones experimento 7.

| Compuesto | Concentración final | Q _{norm} [ml/min] | Q [ml/min] |
|-----------------|---------------------|----------------------------|------------|
| NH ₃ | 2300 | 230 | 253,20 |
| CH ₄ | 700 | 70 | 77,06 |
| NO | 900 | 225 | 247,69 |
| O ₂ | 3500 | 194,4 | 214,06 |
| N ₂ | 992600 | 280,6 | 308,85 |
| Lambda Total | | 1,1 | |

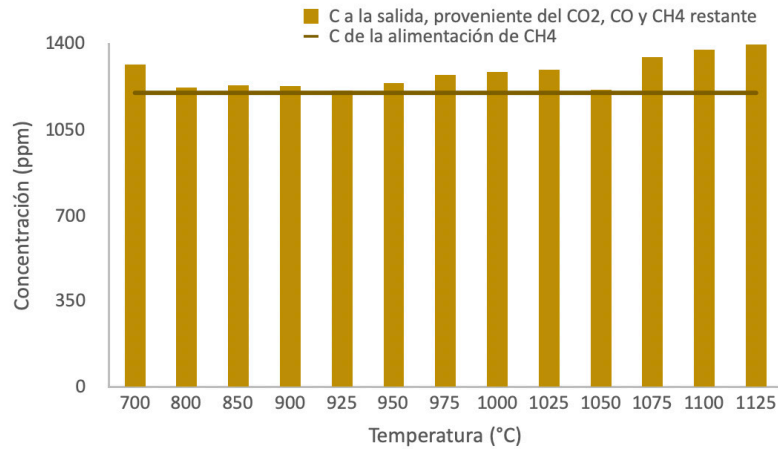
Tabla 20. Resultados del experimento 7.

| Temperatura (°C) | NH ₃ (ppm) | CH ₄ (ppm) | O ₂ (ppm) | CO ₂ (ppm) | CO (ppm) | NO (ppm) | N ₂ O (ppm) | H ₂ (ppm) |
|------------------|-----------------------|-----------------------|----------------------|-----------------------|----------|----------|------------------------|----------------------|
| 700 | 2291 | 665 | 3520 | 0 | 0 | 897 | 5 | 0 |
| 800 | 2316 | 689 | 3501 | 0 | 0 | 895 | 1 | 0 |
| 850 | 2324 | 658 | 3483 | 1 | 0 | 892 | 1 | 0 |
| 900 | 2335 | 635 | 3500 | 0 | 2 | 876 | 1 | 0 |
| 925 | 2322 | 634 | 3439 | 0 | 2 | 876 | 1 | 0 |
| 950 | 2304 | 614 | 3384 | 0 | 4 | 855 | 1 | 0 |
| 975 | 2240 | 593 | 3413 | 3 | 5 | 819 | 0 | 0 |
| 1000 | 2086 | 587 | 3409 | 5 | 20 | 734 | 3 | 9 |
| 1025 | 1608 | 514 | 3085 | 91 | 59 | 545 | 5 | 56 |
| 1050 | 973 | 335 | 2299 | 289 | 93 | 352 | 7 | 76 |
| 1075 | 279 | 107 | 1110 | 663 | 82 | 269 | 0 | 58 |
| 1100 | 19 | 89 | 716 | 791 | 84 | 260 | 0 | 116 |
| 1125 | 0 | 90 | 673 | 811 | 83 | 266 | 0 | 128 |

Nota: No aparece HCN.

ANEXO B: BALANCE DE CARBONO

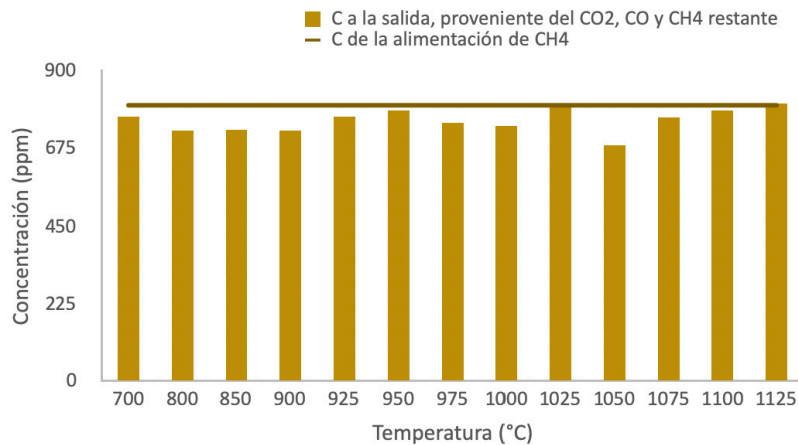
B.1. Experimento 1: $1000[\text{NH}_3] + 1200[\text{CH}_4] + 900[\text{NO}]; \lambda = 0,8$



Gráfica 51. Balance del carbono en el experimento 1.

- Mínima desviación: 0,78% (en 925°C)
- Máxima desviación: 18,41% (en 1125°C)
- Desviación media: 6,75%

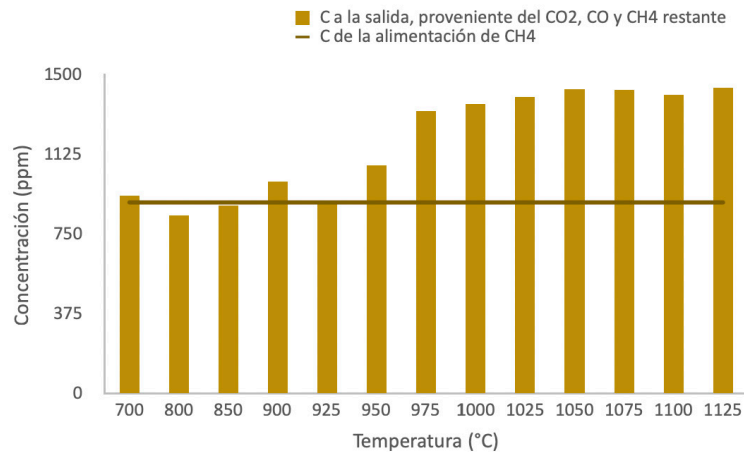
B.2. Experimento 2: $900[\text{NH}_3] + 800[\text{CH}_4] + 900[\text{NO}]; \lambda = 0,3$



Gráfica 52. Balance del carbono en el experimento 2.

- Mínima desviación: 0,56% (en 1125°C)
- Máxima desviación: 14,63% (en 1050°C)
- Desviación media: 5,65%

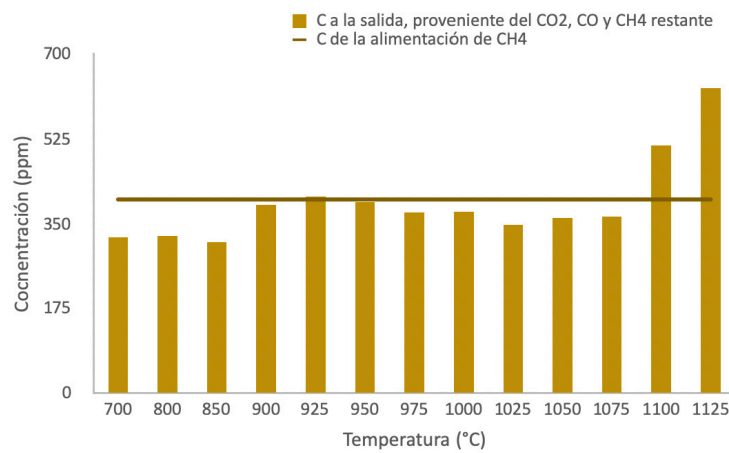
B.3. Experimento 3: $1400[\text{NH}_3] + 900[\text{CH}_4] + 1000[\text{NO}]; \lambda = 1,7$



Gráfica 53. Balance del carbono en el experimento 3.

- Mínima desviación: 0,14% (en 925°C)
- Máxima desviación: 59,94% (en 1125°C)
- Desviación media: 33,16%

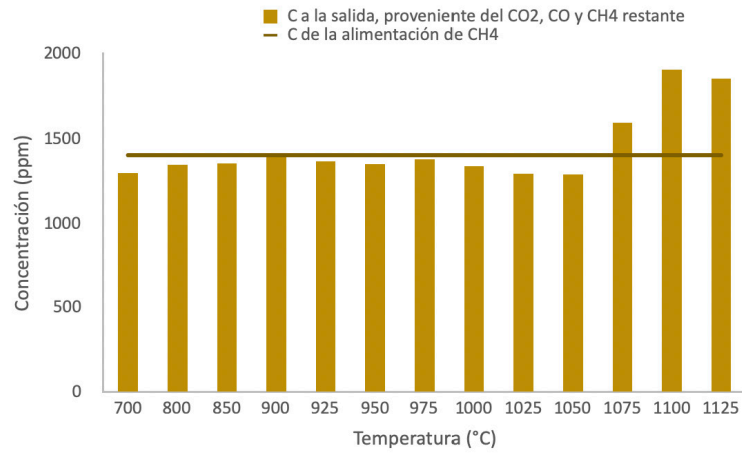
B.4. Experimento 4: $900[\text{NH}_3] + 400[\text{CH}_4] + 800[\text{NO}]; \lambda = 1,2$



Gráfica 54. Balance del carbono en el experimento 4.

- Mínima desviación: 1,36% (en 925°C)
- Máxima desviación: 57,37% (en 1125°C)
- Desviación media: 15,05%

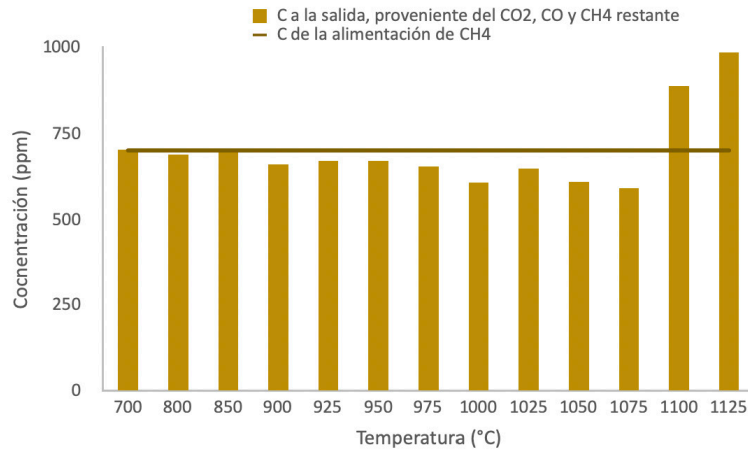
B.5. Experimento 5: $1000[\text{NH}_3] + 1400[\text{CH}_4] + 900[\text{NO}]; \lambda = 1,3$



Gráfica 55. Balance del carbono en el experimento 5.

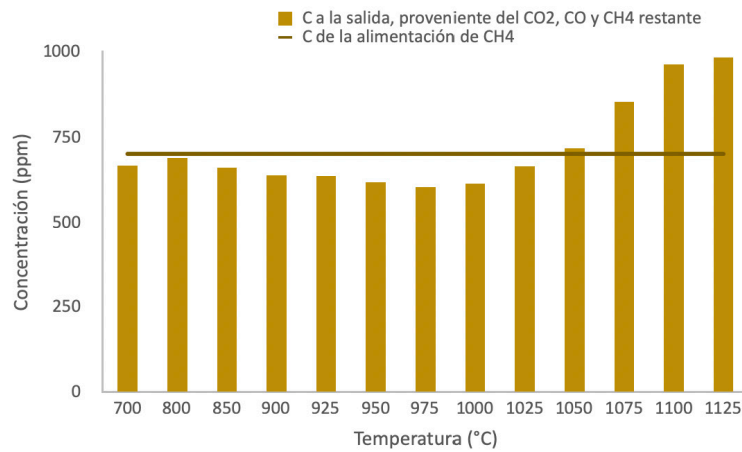
- Mínima desviación: 0,35% (en 900°C)
- Máxima desviación: 35,96% (en 1100°C)
- Desviación media: 9,7%

B.6. Experimento 6: $300[\text{NH}_3] + 700[\text{CH}_4] + 900[\text{NO}]; \lambda = 1,5$



Gráfica 56. Balance del carbono en el experimento 5.

- Mínima desviación: 0,27% (en 700°C)
- Máxima desviación: 40,67% (en 1125°C)
- Desviación media: 10,81%

B.7. Experimento 7 : $2300[\text{NH}_3] + 700[\text{CH}_4] + 900[\text{NO}]$; $\lambda = 1,1$ 

Gráfica 57. Balance del carbono en el experimento 7.

- Mínima desviación: 1,59% (en 800°C)
- Máxima desviación: 40,48% (en 1125°C)
- Desviación media: 13,59%

ANEXO C: RESULTADOS COMPUTACIONALES

C.1. Experimento 1: $1000[\text{NH}_3] + 1200[\text{CH}_4] + 900[\text{NO}]; \lambda = 0,8$

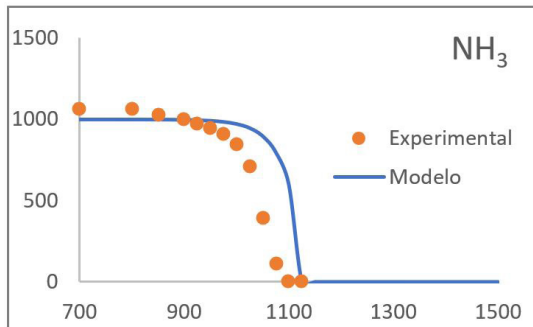
Tabla 21. Concentraciones en ppm en el modelado del experimento 1.

| | Concentración |
|---------------|---------------|
| NH_3 | 1200 |
| CH_4 | 1000 |
| NO | 900 |
| O_2 | 2500 |
| N_2 | 994400 |

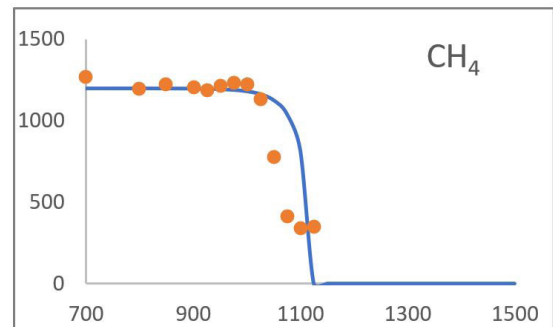
Tabla 22. Resultados del modelado del experimento 1. Concentraciones en ppm.

| T (°C) | O_2 | CH_4 | NO | NH_3 | NO_2 | H_2 | HCN | CO | N_2O | CO_2 |
|-----------|--------------|---------------|-------------|---------------|---------------|--------------|--------------|-------------|----------------------|---------------|
| 700 | 2499,99 | 1199,99 | 899,98 | 999,99 | 0,01 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 725 | 2499,98 | 1199,98 | 899,96 | 999,98 | 0,01 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 750 | 2499,96 | 1199,97 | 899,94 | 999,96 | 0,02 | 0,01 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 775 | 2499,94 | 1199,95 | 899,89 | 999,93 | 0,02 | 0,02 | 0,01 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 800 | 2499,90 | 1199,91 | 899,82 | 999,87 | 0,03 | 0,04 | 0,02 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 825 | 2499,82 | 1199,83 | 899,66 | 999,74 | 0,04 | 0,07 | 0,04 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 850 | 2499,67 | 1199,67 | 899,35 | 999,49 | 0,06 | 0,15 | 0,08 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 875 | 2499,37 | 1199,35 | 898,74 | 998,97 | 0,08 | 0,30 | 0,16 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 900 | 2498,80 | 1198,70 | 897,54 | 997,95 | 0,10 | 0,63 | 0,31 | 0,01 | 0,00 | 0,00 |
| 925 | 2497,74 | 1197,45 | 895,23 | 995,94 | 0,11 | 1,29 | 0,61 | 0,05 | 0,00 | 0,00 |
| 950 | 2495,81 | 1195,10 | 890,97 | 992,21 | 0,11 | 2,60 | 1,14 | 0,17 | 0,02 | 0,00 |
| 975 | 2492,34 | 1190,72 | 883,20 | 985,38 | 0,12 | 5,16 | 2,09 | 0,53 | 0,05 | 0,00 |
| 1000 | 2485,81 | 1182,23 | 868,59 | 972,48 | 0,13 | 10,47 | 3,83 | 1,65 | 0,11 | 0,02 |
| 1025 | 2472,95 | 1165,01 | 840,57 | 947,54 | 0,15 | 22,09 | 7,00 | 5,15 | 0,23 | 0,06 |
| 1050 | 2445,92 | 1127,88 | 785,42 | 897,86 | 0,18 | 49,38 | 12,84 | 15,98 | 0,51 | 0,23 |
| 1075 | 2384,87 | 1042,77 | 677,59 | 798,86 | 0,19 | 115,53 | 23,08 | 46,77 | 1,11 | 1,08 |
| 1100 | 2216,38 | 817,89 | 468,76 | 599,20 | 0,19 | 289,83 | 39,79 | 134,85 | 2,82 | 6,84 |
| 1125 | 81,06 | 0,00 | 180,41 | 0,01 | 0,00 | 352,03 | 13,64 | 308,38 | 0,79 | 876,87 |
| 1150 | 5,04 | 0,00 | 195,24 | 0,02 | 0,00 | 349,37 | 5,01 | 233,05 | 0,31 | 961,16 |
| 1175 | 1,51 | 0,00 | 217,83 | 0,02 | 0,00 | 364,66 | 3,49 | 242,36 | 0,18 | 953,40 |
| 1200 | 0,80 | 0,00 | 242,33 | 0,01 | 0,00 | 378,17 | 2,45 | 255,83 | 0,11 | 940,96 |
| 1225 | 0,54 | 0,00 | 268,08 | 0,01 | 0,00 | 391,13 | 1,68 | 270,50 | 0,07 | 927,08 |
| 1250 | 0,43 | 0,00 | 294,73 | 0,01 | 0,00 | 403,85 | 1,10 | 285,74 | 0,05 | 912,41 |
| 1275 | 0,38 | 0,00 | 321,97 | 0,01 | 0,00 | 416,41 | 0,68 | 301,31 | 0,04 | 897,25 |
| 1300 | 0,37 | 0,00 | 349,45 | 0,00 | 0,00 | 428,75 | 0,39 | 316,99 | 0,03 | 881,85 |
| 1325 | 0,39 | 0,00 | 376,91 | 0,00 | 0,00 | 440,81 | 0,21 | 332,64 | 0,02 | 866,37 |
| 1350 | 0,43 | 0,00 | 404,05 | 0,00 | 0,00 | 452,51 | 0,10 | 348,12 | 0,02 | 850,98 |
| 1375 | 0,49 | 0,00 | 430,63 | 0,00 | 0,00 | 463,78 | 0,04 | 363,34 | 0,02 | 835,80 |
| 1400 | 0,59 | 0,00 | 456,47 | 0,00 | 0,00 | 474,57 | 0,02 | 378,22 | 0,01 | 820,93 |
| 1425 | 0,71 | 0,00 | 481,41 | 0,00 | 0,00 | 484,85 | 0,01 | 392,70 | 0,01 | 806,44 |
| 1450 | 0,87 | 0,00 | 505,33 | 0,00 | 0,00 | 494,58 | 0,00 | 406,74 | 0,01 | 792,40 |
| 1475 | 1,07 | 0,00 | 528,09 | 0,00 | 0,00 | 503,70 | 0,00 | 420,28 | 0,01 | 778,84 |
| 1500 | 1,33 | 0,00 | 549,60 | 0,00 | 0,00 | 512,19 | 0,00 | 433,30 | 0,01 | 765,80 |

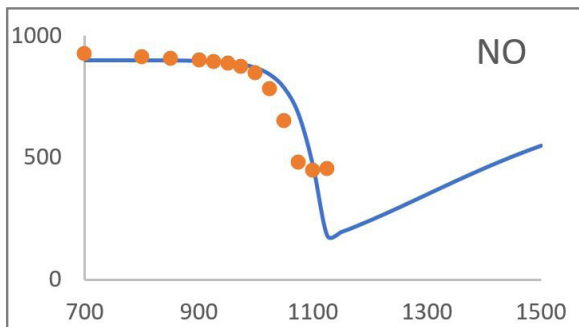
Las gráficas 58 a 67 muestran la comparación de resultados experimentales y computacionales para el experimento 1. Concentración en ppm frente a temperatura en grados centígrados.



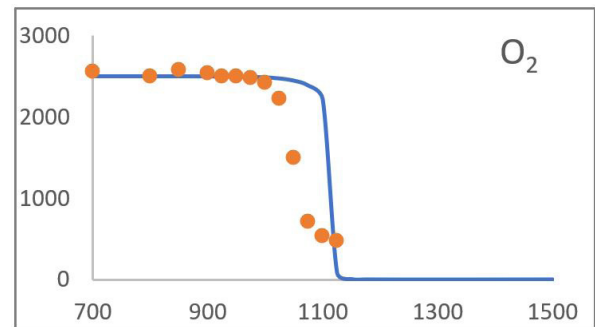
Gráfica 58



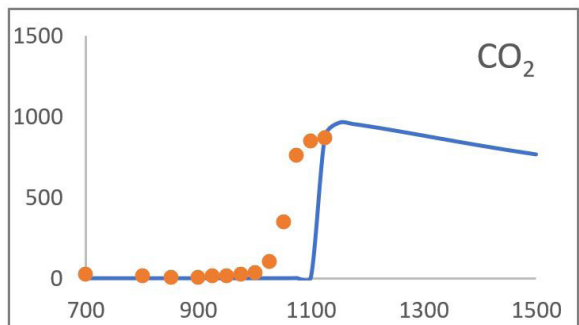
Gráfica 59



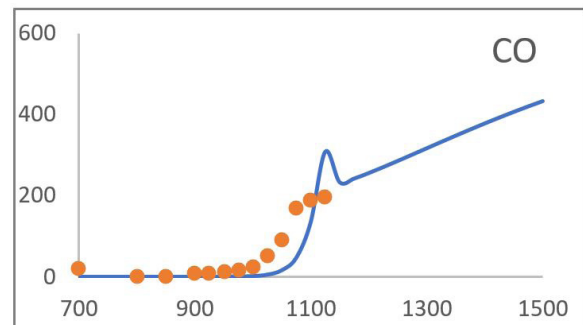
Gráfica 60



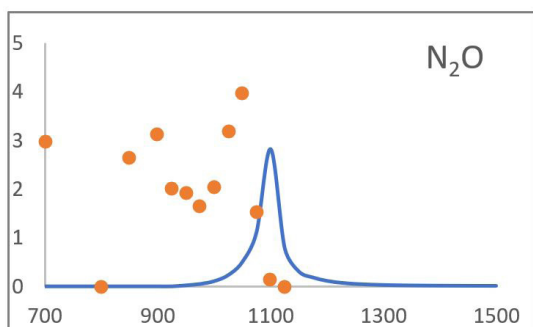
Gráfica 61



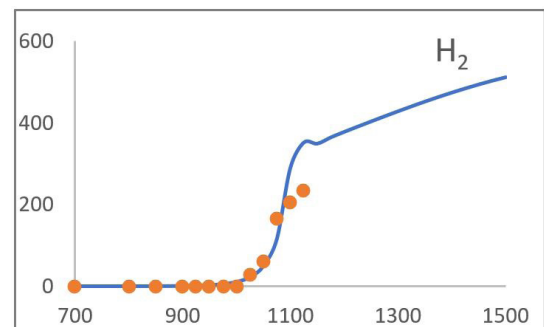
Gráfica 62



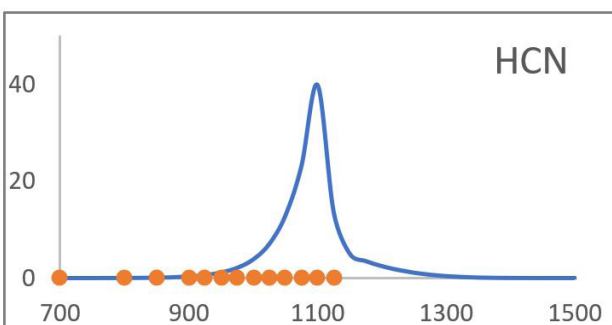
Gráfica 63



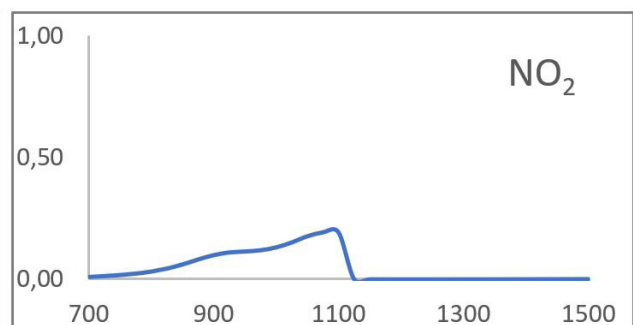
Gráfica 64



Gráfica 65



Gráfica 66



Gráfica 67

C.2. Experimento 2: $900[\text{NH}_3] + 800[\text{CH}_4] + 900[\text{NO}]; \lambda = 0,3$

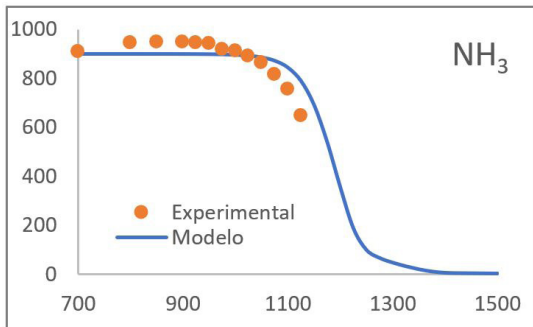
Tabla 23. Concentraciones en ppm en el modelado del experimento 2.

| | Concentración |
|---------------|---------------|
| NH_3 | 900 |
| CH_4 | 800 |
| NO | 850 |
| O_2 | 700 |
| N_2 | 996750 |

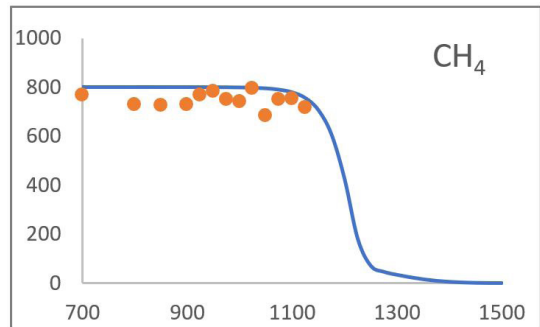
Tabla 24. Resultados del modelado del experimento 2. Concentraciones en ppm.

| T (°C) | O ₂ | CH ₄ | NO | NH ₃ | H ₂ | HCN | NO ₂ | CH ₃ | C ₂ H ₆ | CO | N ₂ O | C ₂ H ₄ | CO ₂ | C ₂ H ₂ |
|--------|----------------|-----------------|--------|-----------------|----------------|--------|-----------------|-----------------|-------------------------------|--------|------------------|-------------------------------|-----------------|-------------------------------|
| 700 | 700,00 | 800,00 | 850,00 | 900,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 725 | 700,00 | 800,00 | 850,00 | 900,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 750 | 700,00 | 800,00 | 849,99 | 900,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 775 | 700,00 | 800,00 | 849,99 | 899,99 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 800 | 699,99 | 799,99 | 849,97 | 899,98 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 825 | 699,99 | 799,98 | 849,95 | 899,96 | 0,01 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 850 | 699,97 | 799,97 | 849,90 | 899,93 | 0,03 | 0,02 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 875 | 699,95 | 799,94 | 849,82 | 899,86 | 0,05 | 0,03 | 0,01 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 900 | 699,92 | 799,89 | 849,66 | 899,74 | 0,11 | 0,05 | 0,02 | 0,01 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 925 | 699,86 | 799,79 | 849,36 | 899,49 | 0,21 | 0,10 | 0,03 | 0,03 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 950 | 699,74 | 799,61 | 848,79 | 899,01 | 0,43 | 0,19 | 0,04 | 0,04 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 975 | 699,53 | 799,25 | 847,69 | 898,09 | 0,84 | 0,36 | 0,04 | 0,08 | 0,02 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 1000 | 699,15 | 798,58 | 845,58 | 896,30 | 1,68 | 0,68 | 0,05 | 0,14 | 0,05 | 0,02 | 0,01 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 1025 | 698,43 | 797,28 | 841,51 | 892,82 | 3,34 | 1,28 | 0,04 | 0,25 | 0,13 | 0,06 | 0,03 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 1050 | 697,05 | 794,72 | 833,50 | 885,93 | 6,72 | 2,44 | 0,04 | 0,48 | 0,29 | 0,21 | 0,06 | 0,03 | 0,00 | 0,00 |
| 1075 | 694,32 | 789,53 | 817,50 | 872,08 | 13,83 | 4,69 | 0,04 | 0,93 | 0,65 | 0,70 | 0,12 | 0,13 | 0,01 | 0,00 |
| 1100 | 688,72 | 778,69 | 785,62 | 844,23 | 29,10 | 9,02 | 0,03 | 1,82 | 1,45 | 2,32 | 0,25 | 0,55 | 0,05 | 0,02 |
| 1125 | 676,88 | 755,48 | 723,80 | 789,53 | 62,04 | 17,01 | 0,03 | 3,51 | 3,10 | 7,16 | 0,47 | 2,23 | 0,20 | 0,14 |
| 1150 | 651,49 | 706,13 | 614,14 | 690,74 | 130,03 | 30,25 | 0,03 | 6,30 | 5,68 | 19,53 | 0,88 | 8,22 | 0,83 | 1,07 |
| 1175 | 596,63 | 606,48 | 450,25 | 539,08 | 258,88 | 48,60 | 0,03 | 9,88 | 7,69 | 47,66 | 1,70 | 23,28 | 3,29 | 6,79 |
| 1200 | 476,50 | 424,80 | 257,87 | 354,26 | 483,30 | 72,00 | 0,02 | 12,89 | 6,58 | 115,19 | 3,55 | 40,34 | 12,59 | 29,17 |
| 1225 | 241,64 | 180,91 | 97,28 | 186,12 | 792,76 | 107,49 | 0,00 | 11,08 | 2,19 | 266,61 | 6,73 | 26,35 | 40,25 | 63,08 |
| 1250 | 66,87 | 70,25 | 38,07 | 97,81 | 952,08 | 135,44 | 0,00 | 5,21 | 0,33 | 384,25 | 4,63 | 5,60 | 66,36 | 59,61 |
| 1275 | 21,39 | 45,86 | 27,75 | 65,27 | 1020,24 | 147,63 | 0,00 | 2,64 | 0,07 | 416,73 | 1,67 | 1,29 | 78,26 | 49,89 |
| 1300 | 8,03 | 33,56 | 28,39 | 46,30 | 1081,37 | 156,26 | 0,00 | 1,53 | 0,02 | 430,49 | 0,58 | 0,35 | 85,48 | 42,91 |
| 1325 | 2,94 | 23,66 | 33,20 | 31,34 | 1142,54 | 164,11 | 0,00 | 0,97 | 0,00 | 440,15 | 0,24 | 0,10 | 91,12 | 36,86 |
| 1350 | 0,87 | 15,42 | 40,60 | 18,98 | 1202,80 | 171,29 | 0,00 | 0,65 | 0,00 | 448,26 | 0,12 | 0,03 | 96,60 | 30,85 |
| 1375 | 0,16 | 9,13 | 49,94 | 9,79 | 1260,49 | 177,20 | 0,00 | 0,44 | 0,00 | 455,34 | 0,07 | 0,01 | 102,99 | 24,43 |
| 1400 | 0,01 | 4,97 | 60,46 | 4,72 | 1315,14 | 180,76 | 0,00 | 0,30 | 0,00 | 461,80 | 0,05 | 0,00 | 111,50 | 17,30 |
| 1425 | 0,00 | 2,47 | 70,03 | 3,32 | 1366,26 | 180,29 | 0,00 | 0,21 | 0,00 | 469,93 | 0,06 | 0,00 | 121,32 | 9,82 |
| 1450 | 0,00 | 0,87 | 76,56 | 2,86 | 1410,00 | 174,08 | 0,00 | 0,12 | 0,00 | 482,80 | 0,10 | 0,00 | 128,11 | 3,95 |
| 1475 | 0,01 | 0,18 | 81,40 | 2,30 | 1443,24 | 162,09 | 0,00 | 0,04 | 0,00 | 499,59 | 0,13 | 0,00 | 129,97 | 1,07 |
| 1500 | 0,01 | 0,03 | 86,91 | 1,88 | 1470,32 | 147,53 | 0,00 | 0,01 | 0,00 | 517,48 | 0,13 | 0,00 | 128,71 | 0,22 |

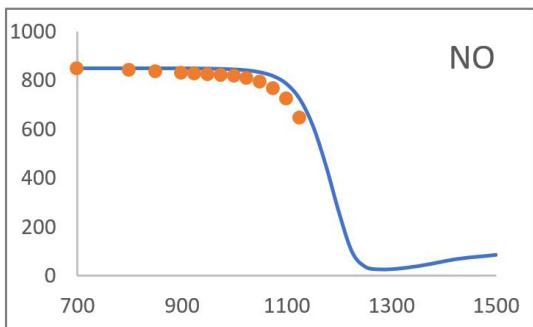
Las gráficas 68 a 77 muestran la comparación de resultados experimentales y computacionales para el experimento 2. Concentración en ppm frente a temperatura en grados centígrados.



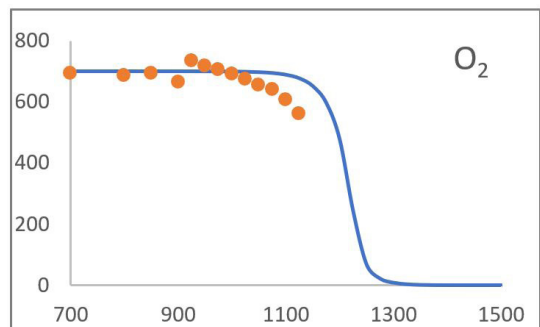
Gráfica 68



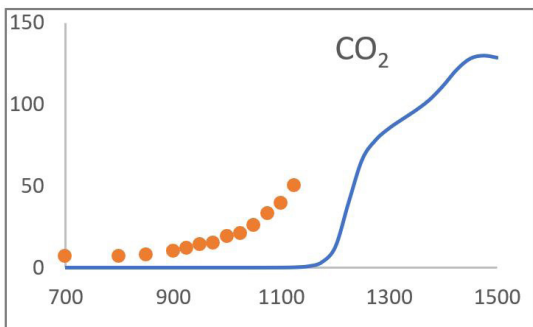
Gráfica 69



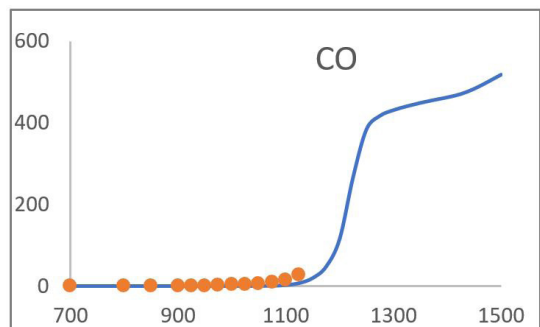
Gráfica 70



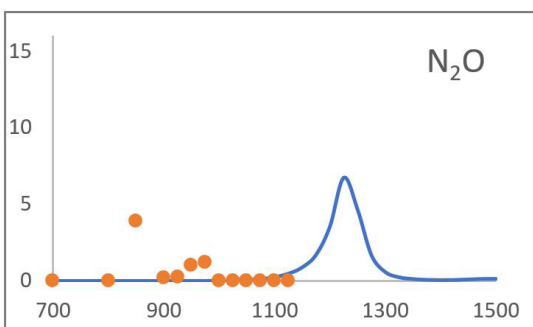
Gráfica 71



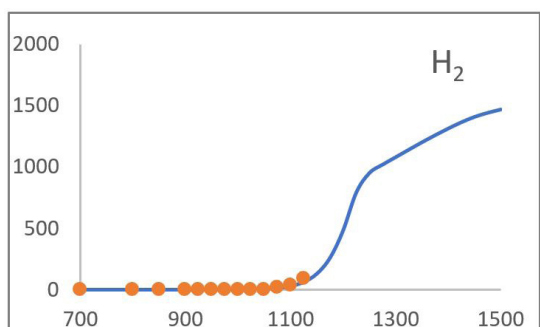
Gráfica 72



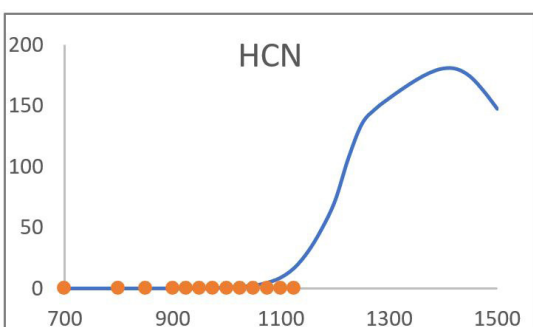
Gráfica 73



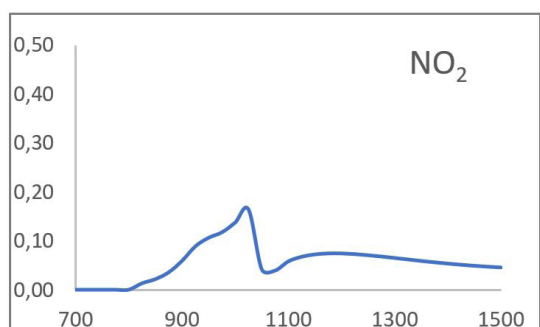
Gráfica 74



Gráfica 75



Gráfica 76



Gráfica 77

C.3. Experimento 3: $1400[\text{NH}_3] + 900[\text{CH}_4] + 1000[\text{NO}]; \lambda = 1,7$

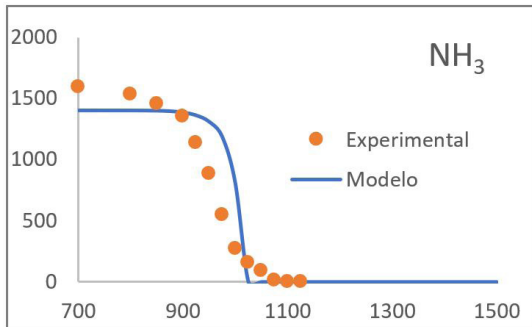
Tabla 25. Concentraciones en ppm en el modelado del experimento 3.

| | Concentración |
|---------------|---------------|
| NH_3 | 1400 |
| CH_4 | 900 |
| NO | 1000 |
| O_2 | 4300 |
| N_2 | 992400 |

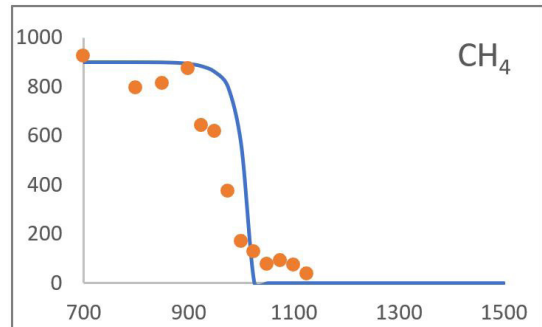
Tabla 26. Resultados del modelado del experimento 3. Concentraciones en ppm.

| T (°C) | O_2 | CH_4 | NO | NH_3 | NO_2 | H_2 | HCN | CO | N_2O | CO_2 |
|--------|--------------|---------------|-------------|---------------|---------------|--------------|--------------|-------------|----------------------|---------------|
| 700 | 4299,98 | 899,99 | 999,97 | 1399,98 | 0,01 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 725 | 4299,97 | 899,98 | 999,94 | 1399,96 | 0,02 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 750 | 4299,94 | 899,96 | 999,88 | 1399,92 | 0,03 | 0,02 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 775 | 4299,89 | 899,93 | 999,78 | 1399,84 | 0,04 | 0,03 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 800 | 4299,79 | 899,85 | 999,56 | 1399,65 | 0,07 | 0,06 | 0,02 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 825 | 4299,54 | 899,67 | 999,03 | 1399,19 | 0,10 | 0,15 | 0,05 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 850 | 4298,90 | 899,16 | 997,61 | 1397,91 | 0,16 | 0,39 | 0,14 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 875 | 4297,05 | 897,59 | 993,43 | 1394,04 | 0,23 | 1,18 | 0,39 | 0,05 | 0,01 | 0,00 |
| 900 | 4292,24 | 893,31 | 982,41 | 1383,67 | 0,26 | 3,46 | 1,02 | 0,35 | 0,04 | 0,00 |
| 925 | 4281,37 | 883,20 | 957,47 | 1360,02 | 0,31 | 9,28 | 2,36 | 1,79 | 0,12 | 0,01 |
| 950 | 4257,07 | 859,55 | 903,15 | 1308,04 | 0,40 | 24,24 | 4,95 | 7,69 | 0,34 | 0,07 |
| 975 | 4195,64 | 797,81 | 777,37 | 1185,66 | 0,51 | 66,88 | 9,85 | 30,43 | 0,97 | 0,46 |
| 1000 | 3943,40 | 561,72 | 412,68 | 807,11 | 0,56 | 232,27 | 20,16 | 140,78 | 4,33 | 6,75 |
| 1025 | 1824,47 | 0,00 | 268,17 | 0,00 | 0,12 | 9,35 | 2,67 | 36,74 | 15,93 | 859,92 |
| 1050 | 1792,60 | 0,00 | 305,70 | 0,00 | 0,21 | 2,37 | 0,73 | 7,50 | 10,76 | 891,23 |
| 1075 | 1772,55 | 0,00 | 345,30 | 0,00 | 0,25 | 1,34 | 0,29 | 3,35 | 6,80 | 895,92 |
| 1100 | 1752,80 | 0,00 | 386,18 | 0,00 | 0,27 | 1,00 | 0,12 | 2,01 | 3,87 | 897,48 |
| 1125 | 1732,47 | 0,00 | 427,98 | 0,00 | 0,29 | 0,86 | 0,05 | 1,45 | 1,97 | 898,15 |
| 1150 | 1711,55 | 0,00 | 470,38 | 0,00 | 0,30 | 0,81 | 0,02 | 1,18 | 0,91 | 898,47 |
| 1175 | 1690,23 | 0,00 | 513,12 | 0,00 | 0,30 | 0,82 | 0,01 | 1,07 | 0,41 | 898,60 |
| 1200 | 1668,72 | 0,00 | 555,90 | 0,00 | 0,30 | 0,88 | 0,00 | 1,04 | 0,19 | 898,64 |
| 1225 | 1647,27 | 0,00 | 598,38 | 0,00 | 0,29 | 0,97 | 0,00 | 1,07 | 0,11 | 898,61 |
| 1250 | 1626,07 | 0,00 | 640,23 | 0,00 | 0,29 | 1,12 | 0,00 | 1,15 | 0,07 | 898,53 |
| 1275 | 1605,27 | 0,00 | 681,18 | 0,00 | 0,28 | 1,30 | 0,00 | 1,27 | 0,05 | 898,41 |
| 1300 | 1585,03 | 0,00 | 720,89 | 0,00 | 0,27 | 1,54 | 0,00 | 1,46 | 0,04 | 898,22 |
| 1325 | 1565,47 | 0,00 | 759,18 | 0,00 | 0,26 | 1,85 | 0,00 | 1,70 | 0,04 | 897,98 |
| 1350 | 1546,63 | 0,00 | 795,92 | 0,00 | 0,25 | 2,23 | 0,00 | 2,02 | 0,04 | 897,66 |
| 1375 | 1528,54 | 0,00 | 831,07 | 0,00 | 0,24 | 2,69 | 0,00 | 2,42 | 0,04 | 897,26 |
| 1400 | 1511,27 | 0,00 | 864,51 | 0,00 | 0,23 | 3,27 | 0,00 | 2,93 | 0,03 | 896,74 |
| 1425 | 1494,78 | 0,00 | 896,30 | 0,00 | 0,22 | 3,97 | 0,00 | 3,56 | 0,03 | 896,11 |
| 1450 | 1479,06 | 0,00 | 926,48 | 0,00 | 0,21 | 4,82 | 0,00 | 4,36 | 0,04 | 895,31 |
| 1475 | 1464,12 | 0,00 | 955,08 | 0,00 | 0,21 | 5,84 | 0,00 | 5,33 | 0,04 | 894,34 |
| 1500 | 1449,94 | 0,00 | 982,15 | 0,00 | 0,20 | 7,07 | 0,00 | 6,52 | 0,04 | 893,14 |

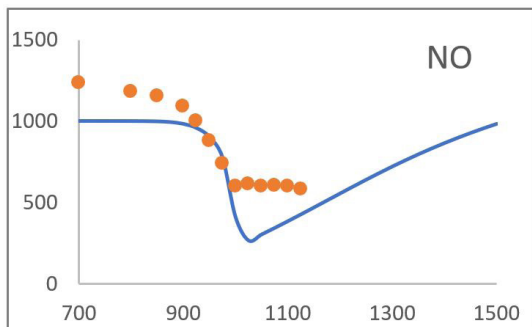
Las gráficas 77 a 87 muestran la comparación de resultados experimentales y computacionales para el experimento 3. Concentración en ppm frente a temperatura en grados centígrados.



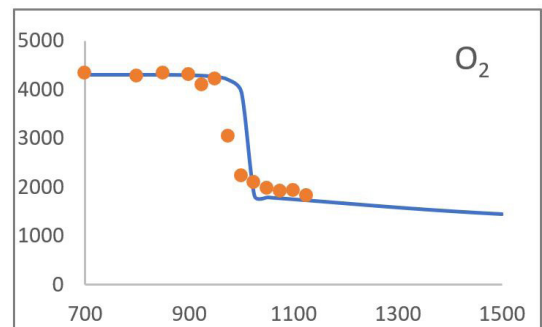
Gráfica 78



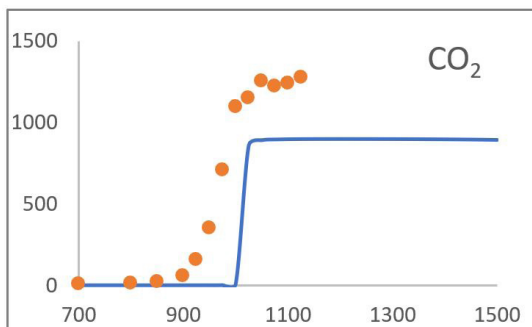
Gráfica 79



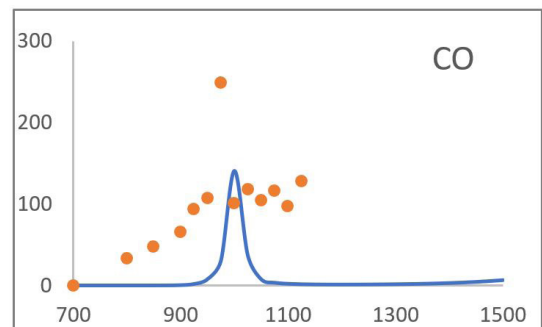
Gráfica 80



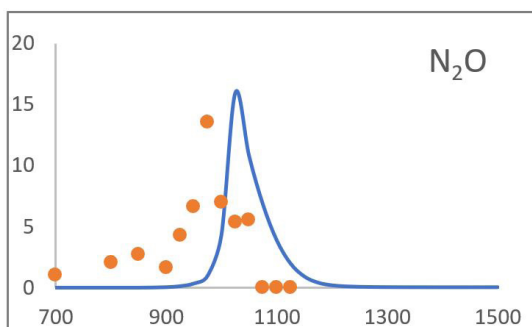
Gráfica 81



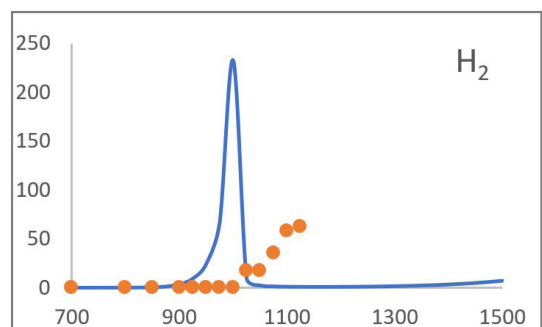
Gráfica 82



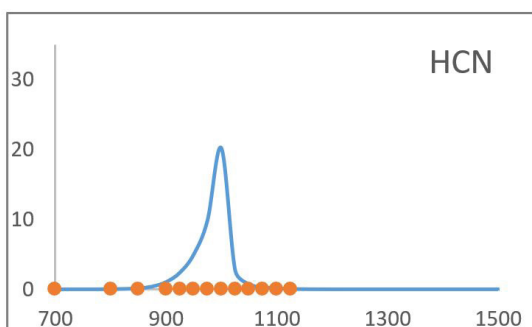
Gráfica 83



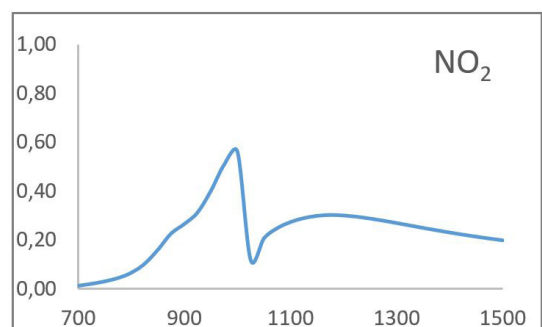
Gráfica 84



Gráfica 85



Gráfica 86



Gráfica 87

C.4. Experimento 4: $900[\text{NH}_3] + 400[\text{CH}_4] + 800[\text{NO}]; \lambda = 1,2$

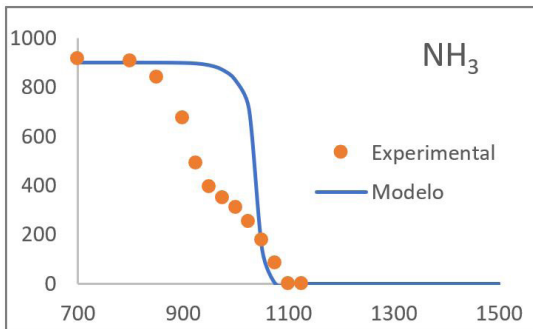
Tabla 27. Concentraciones en ppm en el modelado del experimento 4.

| | Concentración |
|---------------|---------------|
| NH_3 | 900 |
| CH_4 | 400 |
| NO | 800 |
| O_2 | 1800 |
| N_2 | 996100 |

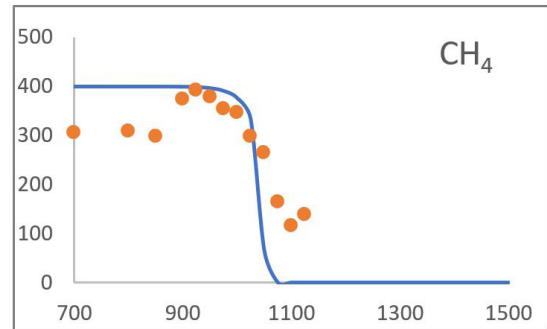
Tabla 28. Resultados del modelado del experimento 4. Concentraciones en ppm.

| T (°C) | O_2 | CH_4 | NO | NH_3 | NO_2 | H_2 | HCN | CO | N_2O | CO_2 |
|--------|--------------|---------------|-------------|---------------|---------------|--------------|--------------|-------------|----------------------|---------------|
| 700 | 1800,00 | 400,00 | 800,00 | 900,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 725 | 1800,00 | 400,00 | 799,99 | 900,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 750 | 1799,99 | 400,00 | 799,99 | 899,99 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 775 | 1799,99 | 399,99 | 799,97 | 899,98 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 800 | 1799,98 | 399,99 | 799,95 | 899,96 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 825 | 1799,96 | 399,97 | 799,89 | 899,91 | 0,01 | 0,02 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 850 | 1799,92 | 399,94 | 799,76 | 899,79 | 0,02 | 0,04 | 0,02 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 875 | 1799,81 | 399,86 | 799,43 | 899,51 | 0,04 | 0,10 | 0,04 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 900 | 1799,54 | 399,64 | 798,54 | 898,70 | 0,06 | 0,28 | 0,10 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 925 | 1798,71 | 398,95 | 795,84 | 896,21 | 0,09 | 0,85 | 0,28 | 0,02 | 0,00 | 0,00 |
| 950 | 1796,37 | 396,85 | 788,03 | 888,88 | 0,11 | 2,63 | 0,77 | 0,14 | 0,03 | 0,00 |
| 975 | 1790,41 | 391,22 | 768,19 | 870,12 | 0,12 | 7,65 | 1,92 | 0,85 | 0,10 | 0,01 |
| 1000 | 1775,85 | 376,76 | 721,68 | 825,65 | 0,14 | 21,25 | 4,27 | 4,13 | 0,30 | 0,07 |
| 1025 | 1733,60 | 334,19 | 604,08 | 710,76 | 0,16 | 62,75 | 8,93 | 18,41 | 0,93 | 0,53 |
| 1050 | 1228,10 | 65,79 | 184,62 | 138,50 | 0,04 | 308,53 | 30,30 | 230,93 | 21,11 | 31,06 |
| 1075 | 617,89 | 0,00 | 231,89 | 0,00 | 0,04 | 11,85 | 1,19 | 20,96 | 4,75 | 377,62 |
| 1100 | 596,98 | 0,00 | 258,46 | 0,00 | 0,06 | 5,50 | 0,37 | 7,68 | 2,51 | 391,78 |
| 1125 | 581,99 | 0,00 | 285,59 | 0,00 | 0,07 | 3,91 | 0,15 | 4,56 | 1,31 | 395,15 |
| 1150 | 567,85 | 0,00 | 312,95 | 0,00 | 0,07 | 3,38 | 0,06 | 3,43 | 0,67 | 396,39 |
| 1175 | 553,92 | 0,00 | 340,35 | 0,00 | 0,07 | 3,25 | 0,02 | 2,98 | 0,35 | 396,90 |
| 1200 | 540,19 | 0,00 | 367,52 | 0,00 | 0,07 | 3,37 | 0,01 | 2,86 | 0,21 | 397,04 |
| 1225 | 526,74 | 0,00 | 394,24 | 0,00 | 0,07 | 3,66 | 0,00 | 2,93 | 0,14 | 396,97 |
| 1250 | 513,60 | 0,00 | 420,41 | 0,00 | 0,07 | 4,10 | 0,00 | 3,15 | 0,11 | 396,76 |
| 1275 | 500,88 | 0,00 | 445,84 | 0,00 | 0,07 | 4,68 | 0,00 | 3,49 | 0,09 | 396,41 |
| 1300 | 488,66 | 0,00 | 470,36 | 0,00 | 0,06 | 5,42 | 0,00 | 3,97 | 0,08 | 395,94 |
| 1325 | 476,97 | 0,00 | 493,95 | 0,00 | 0,06 | 6,32 | 0,00 | 4,57 | 0,07 | 395,34 |
| 1350 | 465,86 | 0,00 | 516,54 | 0,00 | 0,06 | 7,39 | 0,00 | 5,31 | 0,06 | 394,59 |
| 1375 | 455,31 | 0,00 | 538,18 | 0,00 | 0,06 | 8,67 | 0,00 | 6,22 | 0,06 | 393,68 |
| 1400 | 445,36 | 0,00 | 558,83 | 0,00 | 0,05 | 10,15 | 0,00 | 7,30 | 0,05 | 392,60 |
| 1425 | 436,03 | 0,00 | 578,49 | 0,00 | 0,05 | 11,85 | 0,00 | 8,57 | 0,05 | 391,33 |
| 1450 | 427,28 | 0,00 | 597,27 | 0,00 | 0,05 | 13,80 | 0,00 | 10,06 | 0,05 | 389,84 |
| 1475 | 419,11 | 0,00 | 615,20 | 0,00 | 0,05 | 15,99 | 0,00 | 11,77 | 0,05 | 388,13 |
| 1500 | 411,53 | 0,00 | 632,28 | 0,00 | 0,05 | 18,46 | 0,00 | 13,72 | 0,05 | 386,17 |

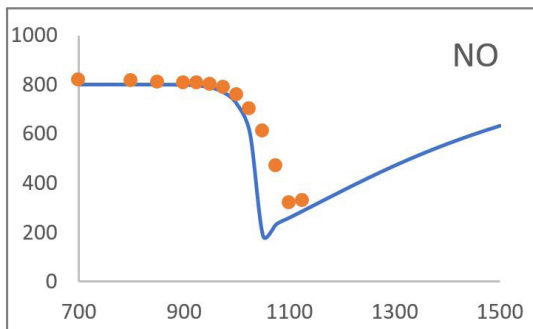
Las gráficas 88 a 97 muestran la comparación de resultados experimentales y computacionales para el experimento 4. Concentración en ppm frente a temperatura en grados centígrados.



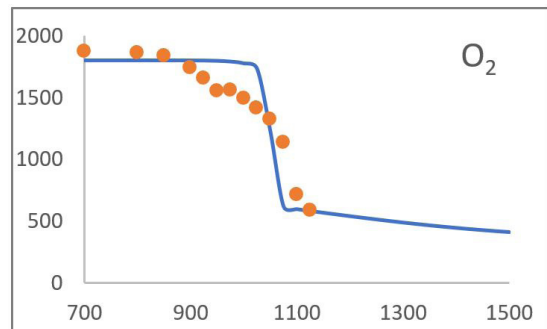
Gráfica 88



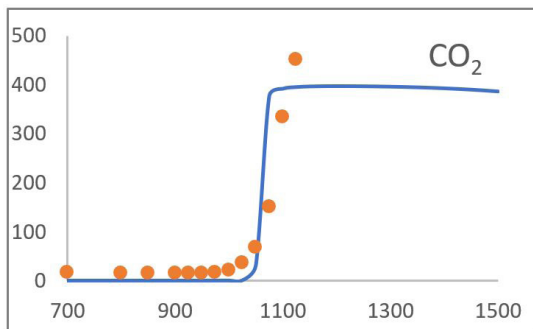
Gráfica 89



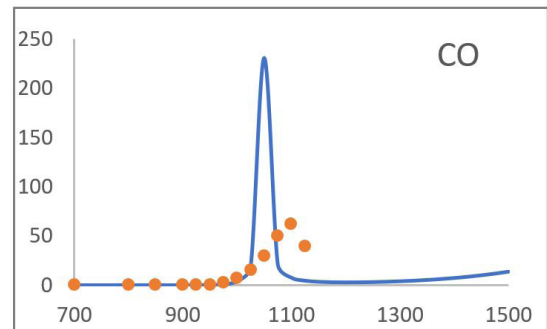
Gráfica 90



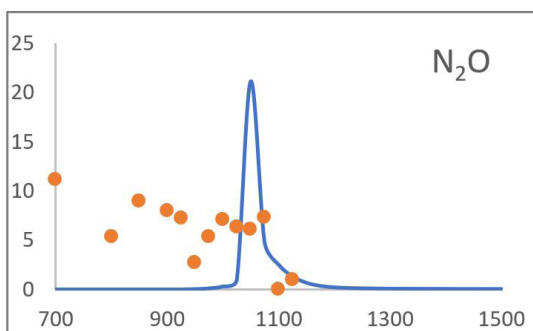
Gráfica 91



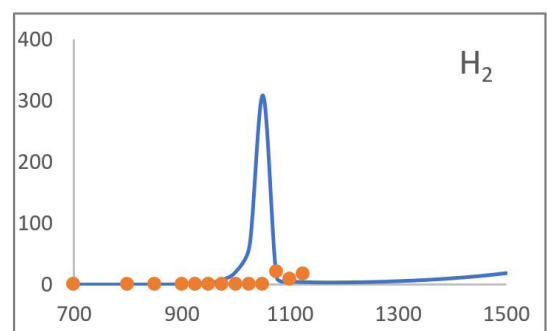
Gráfica 92



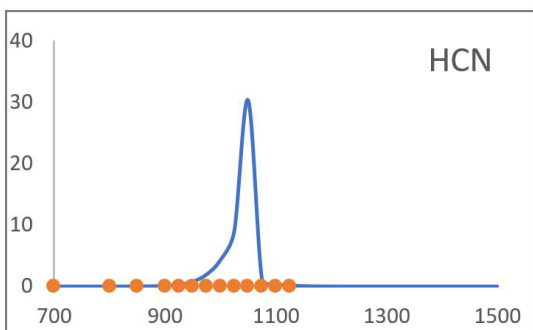
Gráfica 93



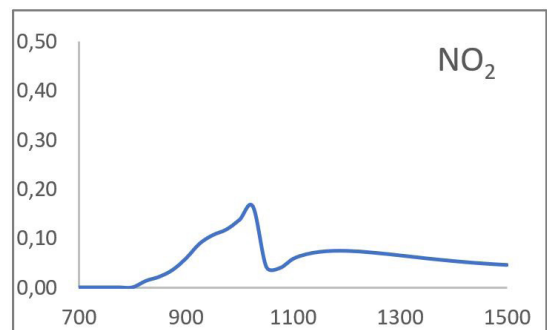
Gráfica 94



Gráfica 95



Gráfica 96



Gráfica 97

C.5. Experimento 5: $1000[\text{NH}_3] + 1400[\text{CH}_4] + 900[\text{NO}]; \lambda = 1,3$

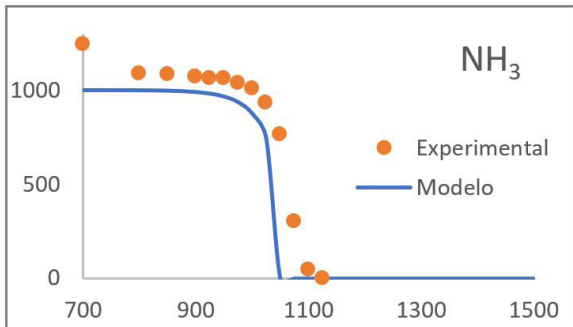
Tabla 29. Concentraciones en ppm en el modelado del experimento 5.

| | Concentración |
|---------------|---------------|
| NH_3 | 1000 |
| CH_4 | 1400 |
| NO | 900 |
| O_2 | 4700 |
| N_2 | 992000 |

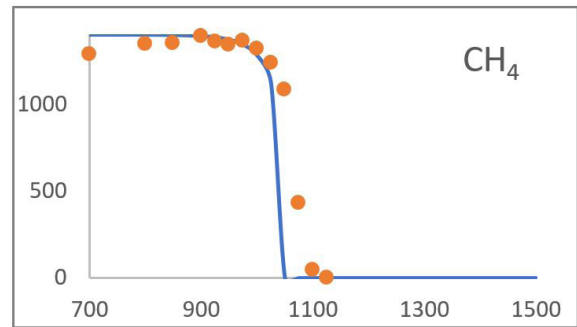
Tabla 30. Resultados del modelado del experimento 5. Concentraciones en ppm.

| T (°C) | O_2 | CH_4 | NO | NH_3 | NO_2 | H_2 | HCN | CO | N_2O | CO_2 |
|--------|--------------|---------------|-------------|---------------|---------------|--------------|--------------|-------------|----------------------|---------------|
| 700 | 4699,84 | 1399,90 | 899,79 | 999,89 | 0,10 | 0,03 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 725 | 4699,77 | 1399,83 | 899,69 | 999,82 | 0,12 | 0,05 | 0,01 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 750 | 4699,70 | 1399,76 | 899,59 | 999,73 | 0,12 | 0,07 | 0,02 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 775 | 4699,58 | 1399,65 | 899,43 | 999,60 | 0,13 | 0,10 | 0,04 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 800 | 4699,32 | 1399,39 | 899,07 | 999,29 | 0,15 | 0,17 | 0,07 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 825 | 4698,81 | 1398,88 | 898,35 | 998,67 | 0,17 | 0,32 | 0,15 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 850 | 4697,77 | 1397,80 | 896,87 | 997,36 | 0,20 | 0,65 | 0,30 | 0,03 | 0,00 | 0,00 |
| 875 | 4695,79 | 1395,70 | 894,03 | 994,82 | 0,21 | 1,32 | 0,58 | 0,11 | 0,00 | 0,00 |
| 900 | 4692,23 | 1391,78 | 888,85 | 990,15 | 0,22 | 2,63 | 1,11 | 0,37 | 0,02 | 0,00 |
| 925 | 4685,84 | 1384,56 | 879,51 | 981,73 | 0,25 | 5,25 | 2,02 | 1,14 | 0,04 | 0,00 |
| 950 | 4674,12 | 1370,91 | 862,60 | 966,40 | 0,30 | 10,73 | 3,60 | 3,42 | 0,10 | 0,03 |
| 975 | 4650,69 | 1342,85 | 830,08 | 936,62 | 0,39 | 23,47 | 6,43 | 10,50 | 0,22 | 0,09 |
| 1000 | 4600,07 | 1280,80 | 765,24 | 876,36 | 0,50 | 55,76 | 11,50 | 32,32 | 0,53 | 0,40 |
| 1025 | 4472,15 | 1123,46 | 627,58 | 744,81 | 0,57 | 145,99 | 20,52 | 98,98 | 1,38 | 2,34 |
| 1050 | 1745,87 | 0,00 | 312,49 | 0,00 | 0,02 | 128,44 | 18,58 | 514,45 | 15,21 | 865,43 |
| 1075 | 1431,52 | 0,00 | 343,07 | 0,00 | 0,12 | 7,65 | 0,35 | 16,84 | 2,99 | 1382,36 |
| 1100 | 1410,70 | 0,00 | 375,83 | 0,00 | 0,17 | 3,22 | 0,09 | 6,23 | 1,62 | 1393,29 |
| 1125 | 1393,27 | 0,00 | 409,27 | 0,00 | 0,19 | 2,20 | 0,03 | 3,80 | 0,87 | 1395,80 |
| 1150 | 1375,99 | 0,00 | 443,33 | 0,00 | 0,20 | 1,87 | 0,01 | 2,94 | 0,48 | 1396,69 |
| 1175 | 1358,49 | 0,00 | 477,95 | 0,00 | 0,21 | 1,79 | 0,00 | 2,61 | 0,29 | 1397,02 |
| 1200 | 1340,85 | 0,00 | 512,85 | 0,00 | 0,21 | 1,85 | 0,00 | 2,55 | 0,18 | 1397,09 |
| 1225 | 1323,11 | 0,00 | 547,93 | 0,00 | 0,20 | 2,01 | 0,00 | 2,65 | 0,13 | 1396,99 |
| 1250 | 1305,41 | 0,00 | 582,89 | 0,00 | 0,20 | 2,25 | 0,00 | 2,88 | 0,09 | 1396,76 |
| 1275 | 1287,89 | 0,00 | 617,46 | 0,00 | 0,19 | 2,59 | 0,00 | 3,24 | 0,07 | 1396,39 |
| 1300 | 1270,69 | 0,00 | 651,40 | 0,00 | 0,19 | 3,02 | 0,00 | 3,72 | 0,06 | 1395,91 |
| 1325 | 1253,95 | 0,00 | 684,41 | 0,00 | 0,18 | 3,55 | 0,00 | 4,35 | 0,05 | 1395,28 |
| 1350 | 1237,78 | 0,00 | 716,31 | 0,00 | 0,17 | 4,21 | 0,00 | 5,15 | 0,05 | 1394,48 |
| 1375 | 1222,26 | 0,00 | 746,95 | 0,00 | 0,17 | 5,02 | 0,00 | 6,15 | 0,05 | 1393,48 |
| 1400 | 1207,48 | 0,00 | 776,23 | 0,00 | 0,16 | 5,98 | 0,00 | 7,38 | 0,05 | 1392,25 |
| 1425 | 1193,46 | 0,00 | 804,10 | 0,00 | 0,15 | 7,13 | 0,00 | 8,88 | 0,04 | 1390,74 |
| 1450 | 1180,24 | 0,00 | 830,55 | 0,00 | 0,15 | 8,50 | 0,00 | 10,70 | 0,04 | 1388,92 |
| 1475 | 1167,85 | 0,00 | 855,57 | 0,00 | 0,14 | 10,10 | 0,00 | 12,88 | 0,04 | 1386,73 |
| 1500 | 1156,33 | 0,00 | 879,15 | 0,00 | 0,14 | 11,98 | 0,00 | 15,49 | 0,04 | 1384,12 |

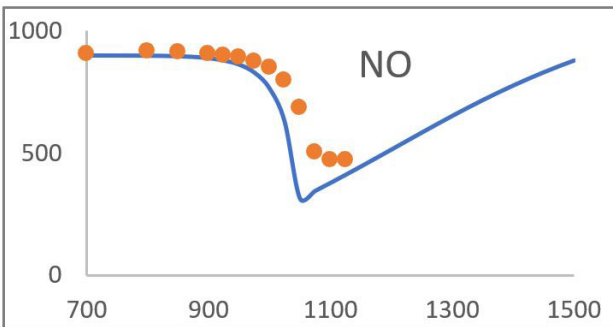
Las gráficas 98 a 107 muestran la comparación de resultados experimentales y computacionales para el experimento 5. Concentración en ppm frente a temperatura en grados centígrados.



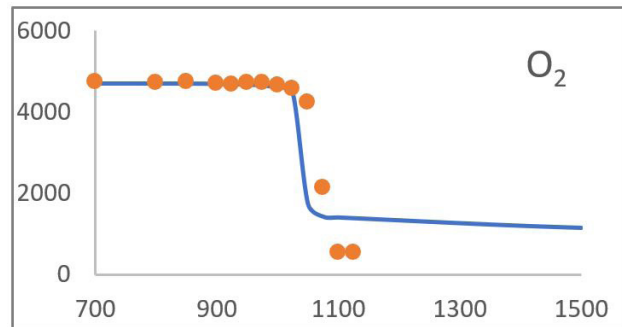
Gráfica 98



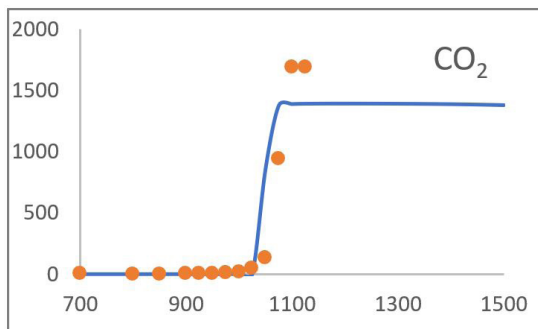
Gráfica 99



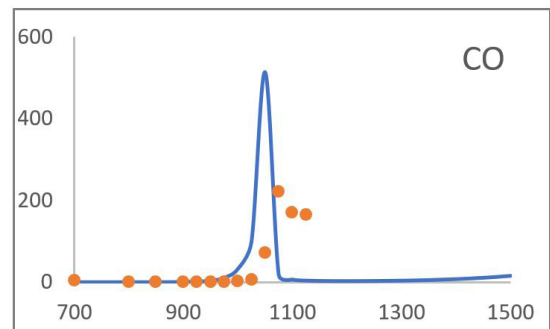
Gráfica 100



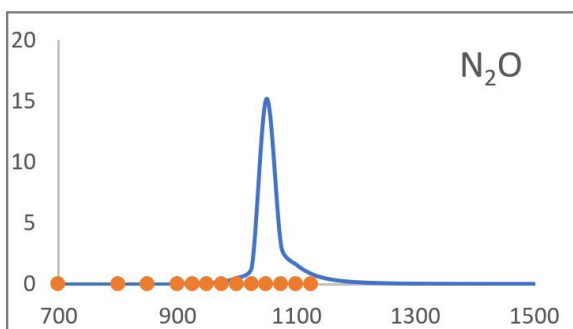
Gráfica 101



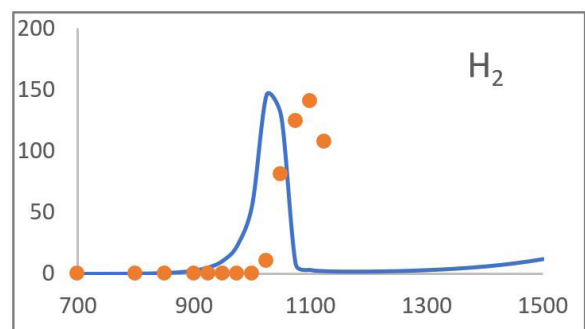
Gráfica 102



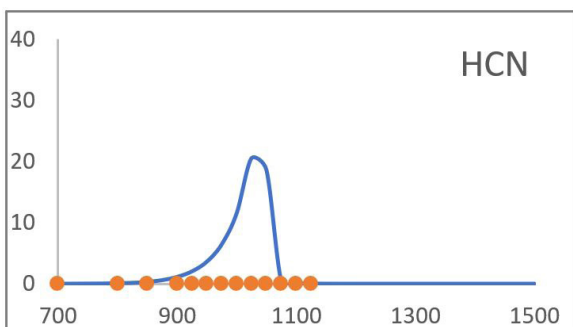
Gráfica 103



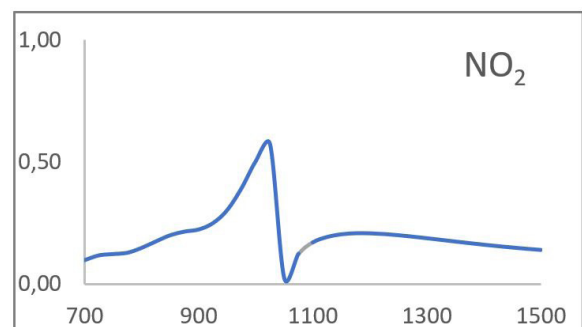
Gráfica 104



Gráfica 105



Gráfica 106



Gráfica 107

C.6. Experimento 6: $300[\text{NH}_3] + 700[\text{CH}_4] + 900[\text{NO}]; \lambda = 1,5$

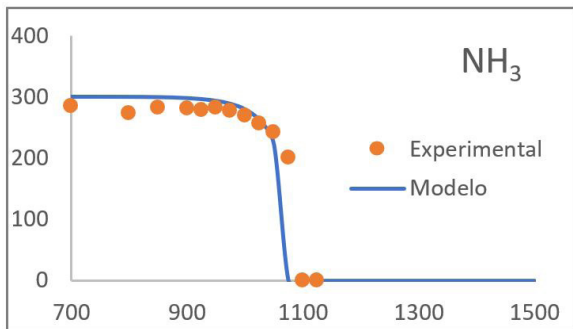
Tabla 31 Concentraciones en ppm en el modelado del experimento 6.

| | Concentración |
|---------------|---------------|
| NH_3 | 300 |
| CH_4 | 700 |
| NO | 900 |
| O_2 | 2400 |
| N_2 | 995700 |

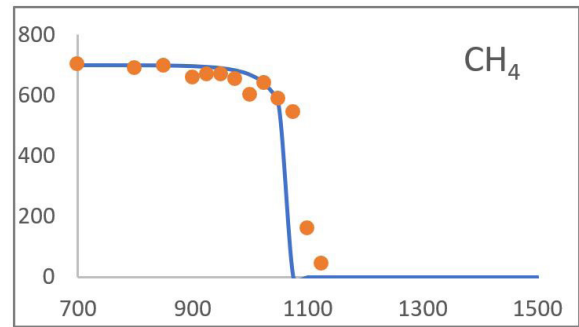
Tabla 32. Resultados del modelado del experimento 6. Concentraciones en ppm.

| T (°C) | O_2 | CH_4 | NO | NH_3 | NO_2 | H_2 | HCN | CO | N_2O | CO_2 |
|--------|--------------|---------------|-------------|---------------|---------------|--------------|--------------|-------------|----------------------|---------------|
| 700 | 2374,89 | 699,92 | 999,86 | 299,95 | 0,07 | 0,02 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 725 | 2374,86 | 699,88 | 999,83 | 299,92 | 0,07 | 0,03 | 0,02 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 750 | 2374,86 | 699,87 | 999,82 | 299,91 | 0,06 | 0,03 | 0,02 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 775 | 2374,81 | 699,81 | 999,76 | 299,87 | 0,06 | 0,04 | 0,04 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 800 | 2374,69 | 699,66 | 999,62 | 299,77 | 0,07 | 0,07 | 0,07 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 825 | 2374,55 | 699,48 | 999,44 | 299,64 | 0,08 | 0,11 | 0,12 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 850 | 2374,20 | 699,02 | 998,99 | 299,32 | 0,09 | 0,21 | 0,23 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 875 | 2373,62 | 698,24 | 998,25 | 298,78 | 0,10 | 0,38 | 0,42 | 0,03 | 0,00 | 0,00 |
| 900 | 2372,55 | 696,76 | 996,88 | 297,76 | 0,10 | 0,73 | 0,78 | 0,08 | 0,00 | 0,00 |
| 925 | 2370,82 | 694,29 | 994,62 | 296,09 | 0,10 | 1,34 | 1,36 | 0,22 | 0,00 | 0,00 |
| 950 | 2367,96 | 690,13 | 990,91 | 293,33 | 0,11 | 2,48 | 2,31 | 0,59 | 0,00 | 0,00 |
| 975 | 2362,83 | 682,54 | 984,37 | 288,43 | 0,12 | 4,79 | 3,92 | 1,62 | 0,01 | 0,02 |
| 1000 | 2353,17 | 668,07 | 972,54 | 279,45 | 0,15 | 9,88 | 6,73 | 4,52 | 0,03 | 0,06 |
| 1025 | 2332,56 | 637,22 | 949,30 | 261,47 | 0,18 | 22,74 | 11,92 | 13,20 | 0,08 | 0,23 |
| 1050 | 2280,72 | 561,94 | 900,02 | 222,18 | 0,23 | 59,64 | 21,79 | 40,20 | 0,26 | 1,17 |
| 1075 | 1192,09 | 0,17 | 691,92 | 0,17 | 0,04 | 85,28 | 36,93 | 468,79 | 16,34 | 192,81 |
| 1100 | 916,51 | 0,00 | 686,06 | 0,00 | 0,15 | 5,81 | 0,86 | 29,54 | 5,74 | 669,41 |
| 1125 | 902,27 | 0,00 | 698,17 | 0,00 | 0,21 | 2,32 | 0,25 | 10,56 | 2,88 | 689,07 |
| 1150 | 894,43 | 0,00 | 710,75 | 0,00 | 0,24 | 1,45 | 0,08 | 5,77 | 1,33 | 694,05 |
| 1175 | 887,48 | 0,00 | 723,59 | 0,00 | 0,26 | 1,13 | 0,03 | 3,91 | 0,57 | 695,99 |
| 1200 | 880,74 | 0,00 | 736,43 | 0,00 | 0,26 | 1,02 | 0,01 | 3,06 | 0,25 | 696,87 |
| 1225 | 874,02 | 0,00 | 749,35 | 0,00 | 0,25 | 1,02 | 0,00 | 2,66 | 0,13 | 697,28 |
| 1250 | 867,42 | 0,00 | 762,10 | 0,00 | 0,24 | 1,09 | 0,00 | 2,52 | 0,08 | 697,42 |
| 1275 | 860,84 | 0,00 | 774,81 | 0,00 | 0,23 | 1,22 | 0,00 | 2,55 | 0,06 | 697,39 |
| 1300 | 854,38 | 0,00 | 787,27 | 0,00 | 0,21 | 1,42 | 0,00 | 2,72 | 0,05 | 697,22 |
| 1325 | 848,08 | 0,00 | 799,41 | 0,00 | 0,20 | 1,69 | 0,00 | 3,02 | 0,04 | 696,93 |
| 1350 | 841,96 | 0,00 | 811,19 | 0,00 | 0,19 | 2,02 | 0,00 | 3,45 | 0,04 | 696,50 |
| 1375 | 836,05 | 0,00 | 822,56 | 0,00 | 0,17 | 2,44 | 0,00 | 4,02 | 0,04 | 695,92 |
| 1400 | 830,34 | 0,00 | 833,54 | 0,00 | 0,16 | 2,96 | 0,00 | 4,76 | 0,04 | 695,18 |
| 1425 | 824,88 | 0,00 | 844,06 | 0,00 | 0,15 | 3,58 | 0,00 | 5,68 | 0,04 | 694,26 |
| 1450 | 819,69 | 0,00 | 854,12 | 0,00 | 0,14 | 4,33 | 0,00 | 6,82 | 0,04 | 693,11 |
| 1475 | 814,77 | 0,00 | 863,72 | 0,00 | 0,13 | 5,22 | 0,00 | 8,21 | 0,04 | 691,73 |
| 1500 | 810,18 | 0,00 | 872,77 | 0,00 | 0,13 | 6,26 | 0,00 | 9,87 | 0,04 | 690,06 |

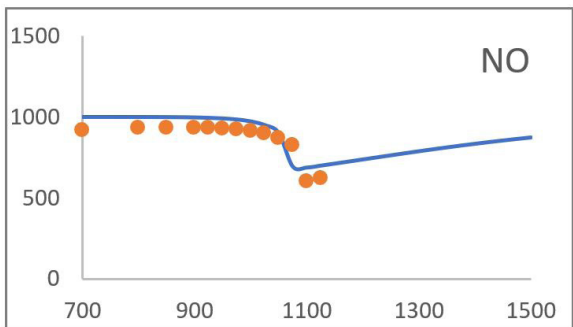
Las gráficas 108 a 117 muestran la comparación de resultados experimentales y computacionales para el experimento 6. Concentración en ppm frente a temperatura en grados centígrados.



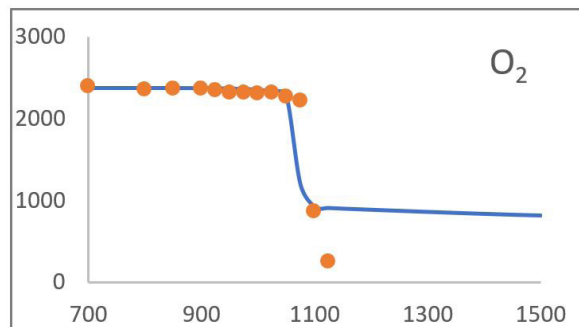
Gráfica 108



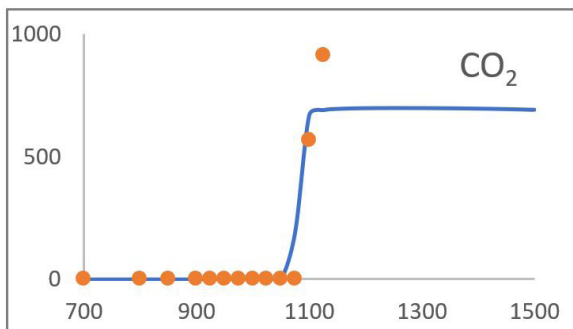
Gráfica 109



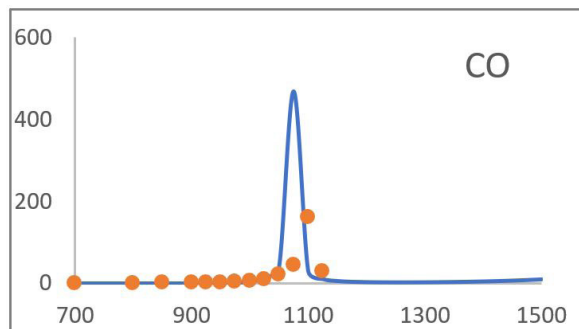
Gráfica 110



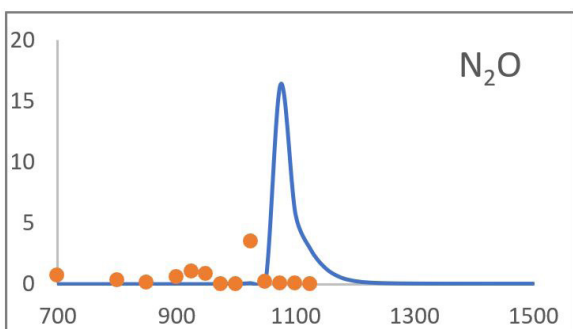
Gráfica 111



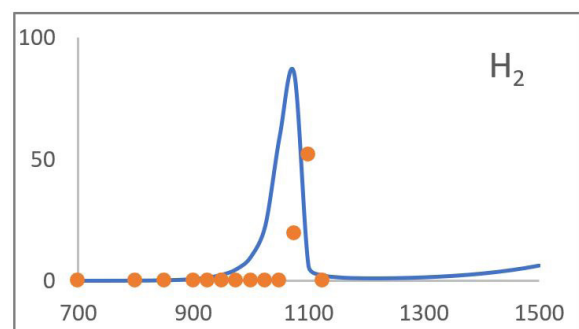
Gráfica 112



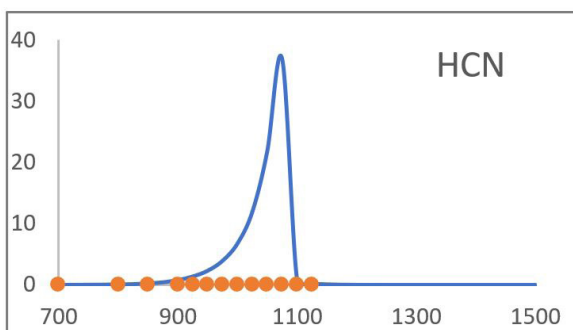
Gráfica 113



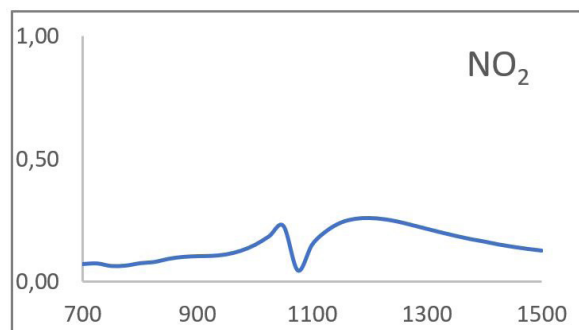
Gráfica 114



Gráfica 115



Gráfica 116



Gráfica 117

C.7. Experimento 7: $2300[\text{NH}_3] + 700[\text{CH}_4] + 900[\text{NO}]; \lambda = 1,1$

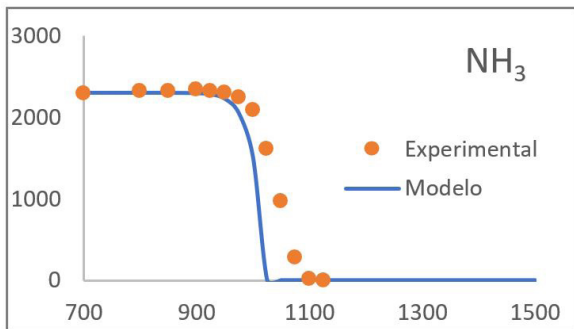
Tabla 31 Concentraciones en ppm en el modelado del experimento 7.

| | Concentración |
|---------------|---------------|
| NH_3 | 2300 |
| CH_4 | 700 |
| NO | 900 |
| O_2 | 3500 |
| N | 992600 |

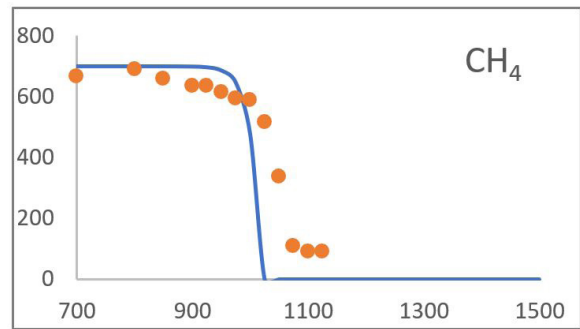
Tabla 32. Resultados del modelado del experimento 7. Concentraciones en ppm.

| T (°C) | O_2 | CH_4 | NO | NH_3 | NO_2 | H_2 | HCN | CO | N_2O | CO_2 |
|--------|--------------|---------------|-------------|---------------|---------------|--------------|--------------|-------------|----------------------|---------------|
| 700 | 3500,00 | 700,00 | 899,99 | 2299,99 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 725 | 3499,99 | 700,00 | 899,98 | 2299,98 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 750 | 3499,98 | 699,99 | 899,96 | 2299,97 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 775 | 3499,97 | 699,98 | 899,91 | 2299,93 | 0,01 | 0,01 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 800 | 3499,94 | 699,97 | 899,83 | 2299,86 | 0,02 | 0,03 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 825 | 3499,88 | 699,94 | 899,65 | 2299,69 | 0,04 | 0,06 | 0,01 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 850 | 3499,76 | 699,87 | 899,22 | 2299,30 | 0,06 | 0,13 | 0,03 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 875 | 3499,44 | 699,69 | 898,12 | 2298,27 | 0,10 | 0,35 | 0,06 | 0,00 | 0,00 | 0,00 |
| 900 | 3498,48 | 699,13 | 894,67 | 2295,00 | 0,16 | 1,06 | 0,17 | 0,01 | 0,02 | 0,00 |
| 925 | 3494,70 | 696,75 | 880,79 | 2281,56 | 0,22 | 4,15 | 0,59 | 0,15 | 0,10 | 0,00 |
| 950 | 3479,36 | 686,37 | 824,60 | 2226,65 | 0,28 | 17,94 | 2,12 | 1,82 | 0,47 | 0,01 |
| 975 | 3426,68 | 647,07 | 643,72 | 2047,32 | 0,35 | 69,90 | 5,92 | 14,89 | 1,92 | 0,18 |
| 1000 | 3208,18 | 476,54 | 143,78 | 1505,78 | 0,28 | 263,26 | 13,76 | 89,26 | 8,21 | 3,64 |
| 1025 | 909,15 | 0,00 | 206,70 | 0,01 | 0,01 | 105,70 | 39,06 | 222,69 | 25,33 | 436,57 |
| 1050 | 716,21 | 0,00 | 226,09 | 0,00 | 0,06 | 10,63 | 2,49 | 10,54 | 7,64 | 686,15 |
| 1075 | 699,23 | 0,00 | 250,40 | 0,00 | 0,07 | 5,34 | 0,78 | 4,14 | 3,92 | 694,45 |
| 1100 | 686,17 | 0,00 | 275,09 | 0,00 | 0,09 | 4,08 | 0,28 | 2,66 | 1,88 | 696,54 |
| 1125 | 673,13 | 0,00 | 300,85 | 0,00 | 0,08 | 3,74 | 0,10 | 2,19 | 0,86 | 697,26 |
| 1150 | 659,25 | 0,00 | 328,45 | 0,00 | 0,08 | 3,77 | 0,03 | 2,06 | 0,41 | 697,48 |
| 1175 | 644,27 | 0,00 | 358,30 | 0,00 | 0,08 | 4,07 | 0,01 | 2,13 | 0,22 | 697,44 |
| 1200 | 628,17 | 0,00 | 390,43 | 0,00 | 0,08 | 4,54 | 0,00 | 2,32 | 0,14 | 697,27 |
| 1225 | 611,14 | 0,00 | 424,52 | 0,00 | 0,08 | 5,18 | 0,00 | 2,61 | 0,10 | 696,98 |
| 1250 | 593,41 | 0,00 | 460,14 | 0,00 | 0,08 | 6,01 | 0,00 | 3,01 | 0,08 | 696,58 |
| 1275 | 575,29 | 0,00 | 496,67 | 0,00 | 0,08 | 7,04 | 0,00 | 3,53 | 0,07 | 696,06 |
| 1300 | 557,10 | 0,00 | 533,55 | 0,00 | 0,07 | 8,31 | 0,00 | 4,18 | 0,06 | 695,40 |
| 1325 | 539,05 | 0,00 | 570,38 | 0,00 | 0,07 | 9,82 | 0,00 | 4,99 | 0,05 | 694,60 |
| 1350 | 521,49 | 0,00 | 606,54 | 0,00 | 0,07 | 11,65 | 0,00 | 5,97 | 0,05 | 693,61 |
| 1375 | 504,56 | 0,00 | 641,80 | 0,00 | 0,07 | 13,81 | 0,00 | 7,17 | 0,04 | 692,42 |
| 1400 | 488,40 | 0,00 | 675,95 | 0,00 | 0,06 | 16,34 | 0,00 | 8,60 | 0,04 | 690,98 |
| 1425 | 473,14 | 0,00 | 708,78 | 0,00 | 0,07 | 19,29 | 0,00 | 10,30 | 0,04 | 689,28 |
| 1450 | 458,87 | 0,00 | 740,20 | 0,00 | 0,06 | 22,69 | 0,00 | 12,30 | 0,04 | 687,27 |
| 1475 | 445,65 | 0,00 | 770,16 | 0,00 | 0,06 | 26,58 | 0,00 | 14,64 | 0,04 | 684,93 |
| 1500 | 433,54 | 0,00 | 798,60 | 0,00 | 0,06 | 31,00 | 0,00 | 17,35 | 0,04 | 682,22 |

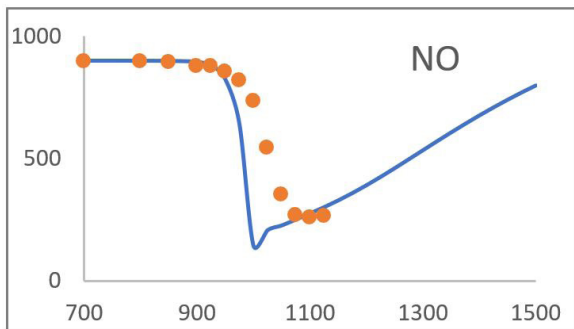
Las gráficas 118 a 127 muestran la comparación de resultados experimentales y computacionales para el experimento 7. Concentración en ppm frente a temperatura en grados centígrados.



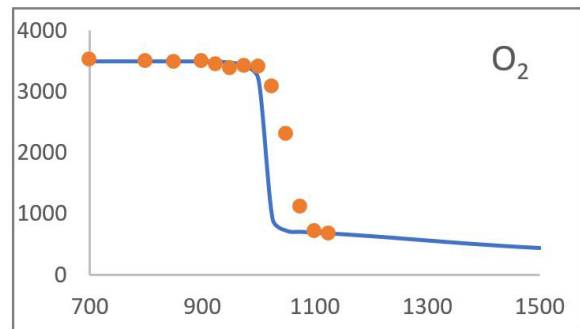
Gráfica 118



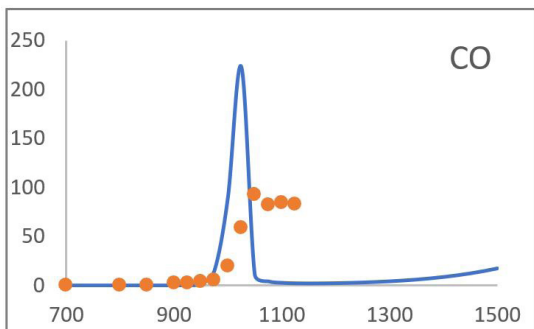
Gráfica 119



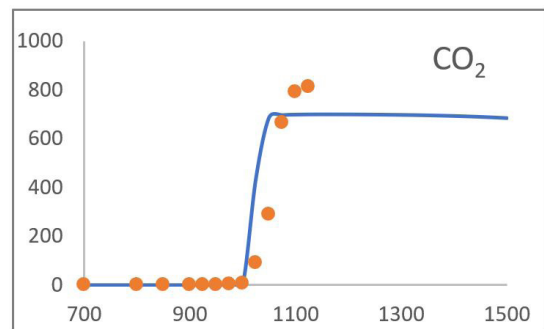
Gráfica 120



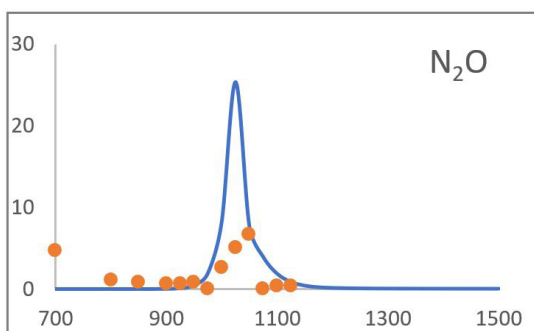
Gráfica 121



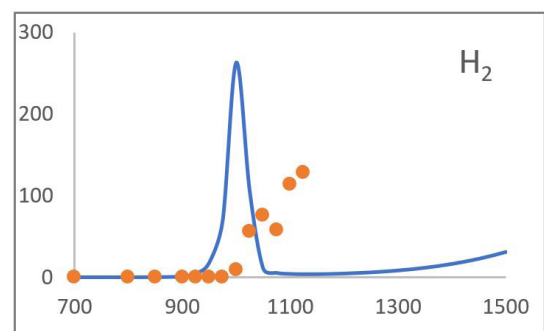
Gráfica 122



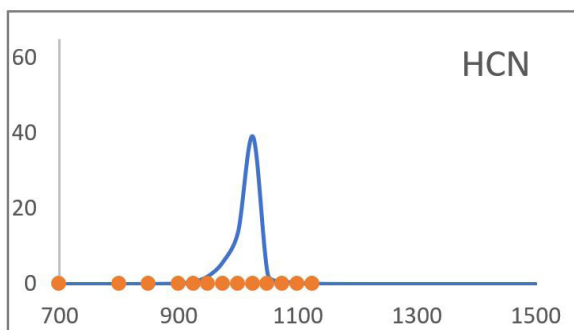
Gráfica 123



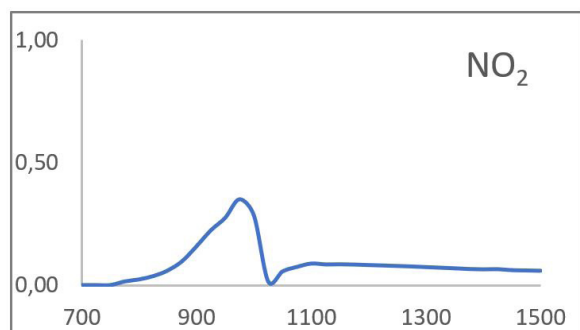
Gráfica 124



Gráfica 125



Gráfica 126



Gráfica 127

ANEXO D: INSTALACIÓN EXPERIMENTAL

Los experimentos realizados en este trabajo se han llevado a cabo en el laboratorio de Reacciones de Combustión del Grupo de Procesos Termoquímicos (GTP) del Instituto de Investigación en Ingeniería de Aragón (I3A).

La ilustración 8 muestra, de manera esquemática el conjunto de la instalación experimental y los aparatos que la componen.

Dicha instalación la componen tres bloques: el sistema de alimentación de gases (1 y 2), el sistema de reacción (3, 4 y 5) y el sistema de análisis de gases (6 y 7). Al final de este circuito se encuentra una campana extractora.

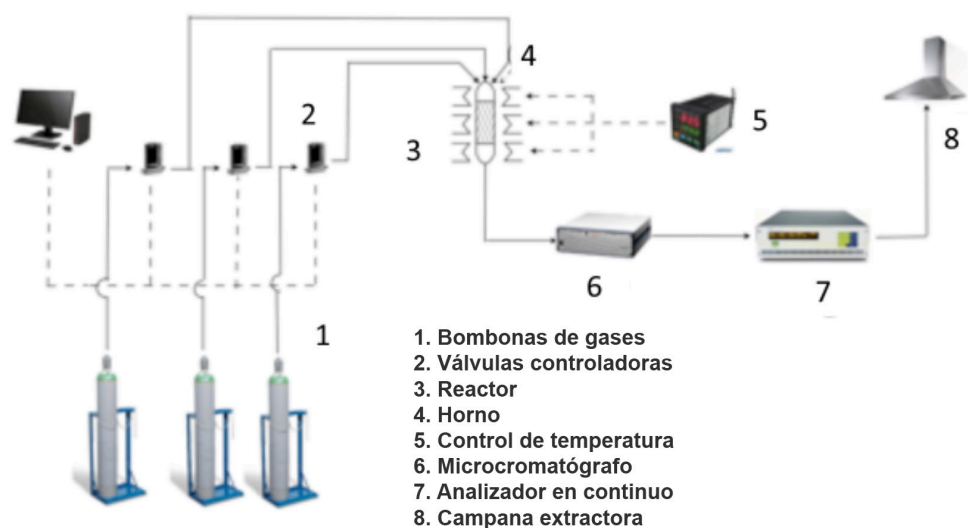


Ilustración 8. Esquema de la instalación utilizada.

D.1. Sistema de alimentación de gases

Lo constituyen las bombonas presurizadas, en las que se encuentran los gases, los controladores de flujo másico y el medidor de caudal. Este sistema es el que permite la entrada controlada de 1000ml/min de gas con la concentración deseada.

▪ **Botellas de gas:**

Los gases utilizados provienen de botellas presurizadas como las que se ven en la ilustración 9. Las botellas que se han utilizado contienen una mezcla del gas en concentración del 1% o similar y el resto de gas N_2 . Su boquilla se regula con dos manoreductores que permiten la salida controlada del gas.



Ilustración 9. Botellas de gas.

▪ **Válvulas controladoras de caudal:**

Los controladores de flujo másico se encargan de determinar con exactitud la cantidad de cada gas que entra a nuestro reactor y mantener dicho valor de manera constante. En nuestro caso utilizamos 4 controladores de flujo por cada componente, de 1000 mL/min de caudal máximo cada uno.

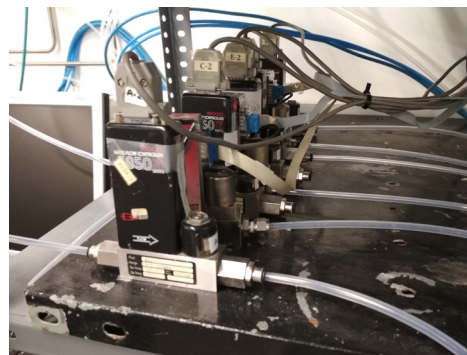


Ilustración 10. Válvulas controladoras de caudal.

El rango de funcionamiento óptimo de estos es de entre un 10 y un 90% de apertura de la válvula.

Los controladores de flujo másico son regulados mediante un software desarrollado por el Servicio de apoyo a la investigación de la universidad de Zaragoza. Dicho programa permite al usuario introducir el tanto por ciento de apertura deseado en cada uno de los controladores utilizados.

▪ **Medidor de caudal:**

El medidor de caudal es un burbujímetro digital. Se trata con un cilindro con una solución jabonosa en su interior. Al introducir un gas por su extremo se genera una burbuja, se mide la velocidad con la que se desplaza a lo largo del cilindro y con y la sección de estese calcula el caudal circulante con una precisión aproximada de 1 mL/min.

Utilizaremos este dispositivo para ajustar el porcentaje de apertura de la válvula necesario en cada controlador. Esto es necesario ya que estos controladores de flujo están calibrados utilizando únicamente nitrógeno. Como se trabaja además con diferentes gases, será necesario comprobar su caudal y ajustarlo manualmente, puesto que no se corresponderán con los teóricos.

El rango de medida de este dispositivo va de los 5 a los 5000 mL/min.

D.2. Sistema de reacción

Comprende los equipos necesarios para llevar a cabo la reacción, estos son: el reactor de cuarzo, el horno y el sistema de control de temperatura.

▪ Reactor de cuarzo:

El reactor utilizado en los experimentos es un reactor de flujo pistón fabricado en cuarzo. Se utiliza este material por las elevadas temperaturas de trabajo que resiste.

Como se ve en la ilustración, los gases se introducen por los puntos 2 y 3. El gas diluyente, de mayor caudal por la entrada lateral y cada uno de los reactivos entra por una de las tres entradas superiores. El gas introducido se precalienta en la zona 10, de ahí se pasa a la zona de mezcla de reactantes y de ahí entran en 1, que es la zona de reacción. Una vez reaccionados los gases pasan a la zona de refrigeración (6) y de ahí salen a los distintos equipos del sistema de análisis.

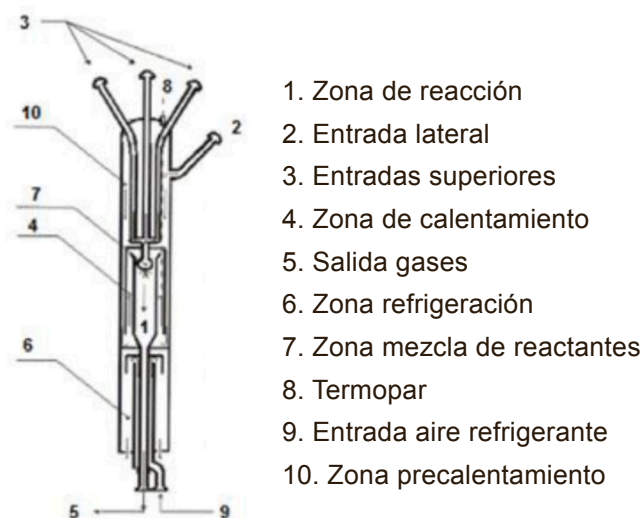


Ilustración 11. Dibujo esquemático del reactor y sus elementos

▪ **Horno:**

El horno constituye un encamisado alrededor del reactor de cuarzo, cuyo objetivo es elevar la temperatura de los reactivos de manera que sea uniforme en la zona de reacción. Para conseguir dicho perfil uniforme de temperaturas en la zona de reacción cuenta con tres zonas de resistencias cuyas temperaturas pueden ser ajustadas de manera individual.



Ilustración 12. Interior del horno.

Tiene una potencia de 20 kW y trabaja en un rango de temperaturas que va desde la temperatura ambiente hasta los 1125 °C.

Como aislantes se utilizará lana de cuarzo que se colocará en la parte superior e inferior del horno y un aislante de baja densidad que recubrirá el interior del horno.

▪ **Control de temperatura:**

La temperatura del horno se controla mediante un sistema de tres controladores de tipo PID los cuales permiten regular la temperatura en cada una de las zonas del reactor. Cuenta con un interruptor de alarma que en caso de sobrepasar la temperatura límite indicada, salta y apaga el horno de manera forzada.

Para conseguir la temperatura uniforme en el reactor se dispone de un perfil de temperaturas elaborado manualmente, introduciendo un termopar y ajustando centímetro a centímetro la temperatura de las resistencias hasta obtener una temperatura uniforme en toda la zona de reacción.

D.3. Sistema de análisis de gases

Al salir del reactor los gases se enfrían rápidamente con una corriente de aire para frenar la reacción, tras esto son conducidos al sistema de análisis de gases que en este caso está constituido por un micro cromatógrafo de gases, un analizador de NO en continuo y otro de CO/CO₂.

▪ **Micro cromatógrafo de gases:**

Se utilizó un cromatógrafo de Agilent, con cuatro columnas independientes:

MS5A de 10m, PPQ 10m, PPU 10m y CP Volamine 15m. Utilizando como gas portador helio y argón. En la ilustración 12 se muestra el dispositivo, que, en este trabajo tiene como objetivo cuantificar los siguientes compuestos: NH_3 , CO_2 , CO , H_2 , O_2 , N_2O y HCN .



Ilustración 12. Microcromatógrafo de gases

Las columnas son delicadas y no pueden entrar en ellas gases con humedad o partículas, de modo que a la salida del reactor se colocan un filtro y un condensador para recoger el agua formada.

El software utilizado para controlar el equipo es Soprane II, éste nos permite seleccionar tanto el número de pinchazos a realizar, así como el tratamiento de los mismos.

En el equipo se lleva a cabo el proceso de cuantificación de los componentes y este proceso se subdivide en tres subprocesos, inyección, separación y detección.

En el proceso de inyección se introduce la muestra en la cámara del microcromatógrafo, se regula la temperatura y se lleva al inyector, el cual la introduce en las columnas. En el proceso de separación, los analitos se desglosan. Por último, en la etapa de detección el gas portador fluye a través del detector de conductividad térmica. A este detector se alimenta por un lado gas portador puro y por el otro acompañado por los analitos, haciéndose pasar a cada uno de ellos por distintos filamentos calientes. La conductividad térmica de las moléculas de la muestra produce una variación en la resistencia eléctrica de los filamentos por donde transcurre la muestra en comparación con los filamentos por donde ha pasado el gas portador, este fenómeno produce una variación de temperatura que se traduce en un cambio en una señal eléctrica que es amplificada y registrada.

El equipo permite configurar la opción de realizar varios pinchazos para cada medida. En este caso se configura de modo que se toman 5 muestras en cada temperatura y luego se hace un promedio.

▪ **Analizador de NO en continuo:**

Para detectar el monóxido de nitrógeno se empleó un analizador de la marca ABB con convertidor

catalítico y sensor de quimiluminiscencia. Este equipo mediante una bomba introduce un caudal constante de gas reaccionado en la celda de análisis y devuelve por pantalla el valor de concentración en continuo.

▪ **Analizador de CO₂ y CO:**

Se dispone también de otro analizador en continuo de la marca ABB. Cuenta con un módulo de análisis por infrarrojos, un fotómetro con detectores optoneumáticos rellenos del gas a medir. Tiene un rango mínimo de medida de 0 a 10ppm para el CO y de 0 a 5ppm para el CO₂.



Ilustración 13. Analizador ABB serie AO2020 para CO y CO₂.

ANEXO E: CALIBRACIÓN DEL CROMATÓGRAFO

El primer paso es definir en qué columna aparecerá cada compuesto y con qué tiempo de retención. Los gases analizados en este proyecto se muestran en la tabla 35.

Tabla 35. Columnas del cromatógrafo y compuestos que identifican.

| Columna | Compuesto | Tiempo retención (s) |
|---------|------------------|----------------------|
| A | H ₂ | 25 |
| A | O ₂ | 31,2 |
| A | N ₂ | 33,8 |
| A | NO | 45,6 |
| A | CH ₄ | 50,09 |
| A | CO | 61,91 |
| C | CO ₂ | 38,5 |
| D | N ₂ O | 90 |
| D | NH ₃ | 92,5 |

A continuación, es necesario calibrar cada gas. Pasando una concentración conocida (usando una botella patrón o haciendo diluciones en el gas portador) se anota el área del pico dibujado. Al promedio de cinco medidas se le asigna la concentración conocida, de modo que ese punto se convierte en punto de calibrado.

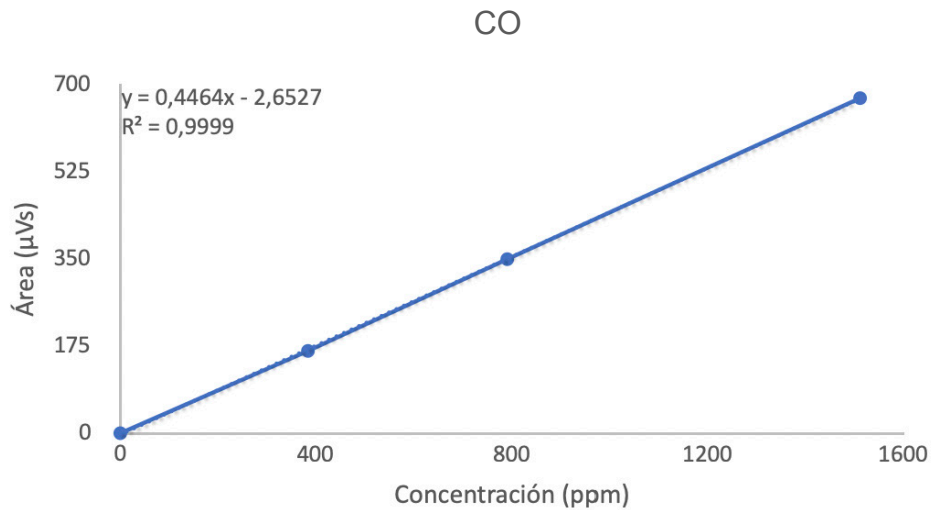
Se procura tomar de cada gas al menos tres puntos para formar una recta de calibrado, que como se verá ajusta razonablemente bien a un modelo lineal.

Las áreas y concentraciones de cada punto se muestran en la tabla 36. La recta dibujada, su ecuación de ajuste de regresión lineal y el coeficiente de correlación al cuadrado están en la gráfica de cada compuesto.

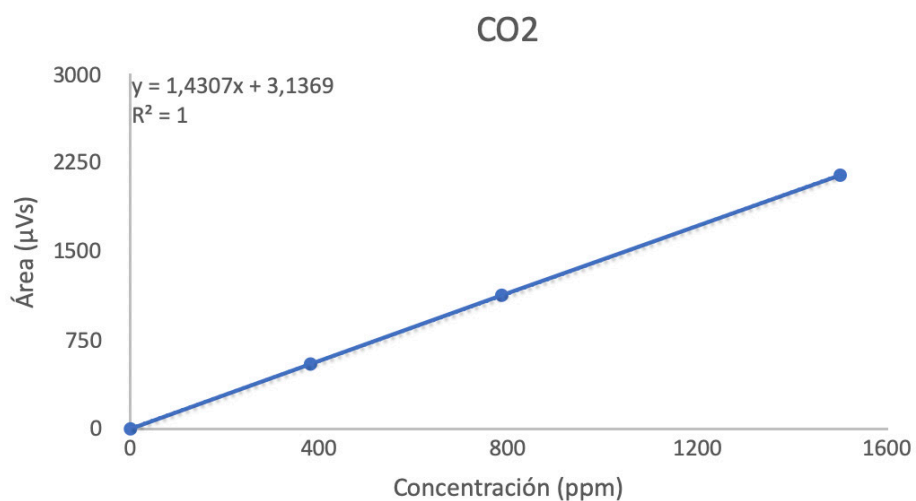
Tabla 36. Concentraciones medidas en la calibración.

| Compuesto | Área [μ Vs] | Concentración (ppm) |
|------------------|------------------|---------------------|
| CO | 673,4 | 1511,8 |
| CO | 349,8 | 790,8 |
| CO | 165,4 | 383,5 |
| CO | 0 | 0 |
| CO ₂ | 2148,4 | 1501,4 |
| CO ₂ | 1131,6 | 785,4 |
| CO ₂ | 549,2 | 380,9 |
| CO ₂ | 0 | 0 |
| H ₂ | 11026,0 | 2024,4 |
| H ₂ | 5783,5 | 1059,0 |
| H ₂ | 2830,3 | 513,6 |
| H ₂ | 0 | 0 |
| N ₂ | 192540,4 | 448137,0 |
| N ₂ | 82190,25 | 215443,3 |
| N ₂ | 7853,4 | 22859,7 |
| N ₂ | 4786,6 | 16245,5 |
| N ₂ | 2422,6 | 6924,2 |
| N ₂ | 0 | 0 |
| N ₂ O | 29715,8 | 6540,3 |
| N ₂ O | 9794 | 2411,7 |
| N ₂ O | 2884 | 591,6 |
| N ₂ O | 191 | 91,1 |
| N ₂ O | 0 | 0 |
| NH ₃ | 22510,4 | 8392,2 |
| NH ₃ | 14773,2 | 5639,8 |
| NH ₃ | 4528 | 1626,3 |
| NH ₃ | 1914,6 | 727,2 |
| NH ₃ | 0 | 0 |
| O ₂ | 10543,2 | 18000 |
| O ₂ | 5470,8 | 9162,8 |
| O ₂ | 3252,4 | 5416,9 |
| O ₂ | 1283,8 | 2209,9 |
| O ₂ | 0 | 0 |
| CH ₄ | 2504,4 | 2003,8 |
| CH ₄ | 1283,9 | 1048,2 |
| CH ₄ | 602,8 | 508,3 |
| CH ₄ | 0 | 0 |

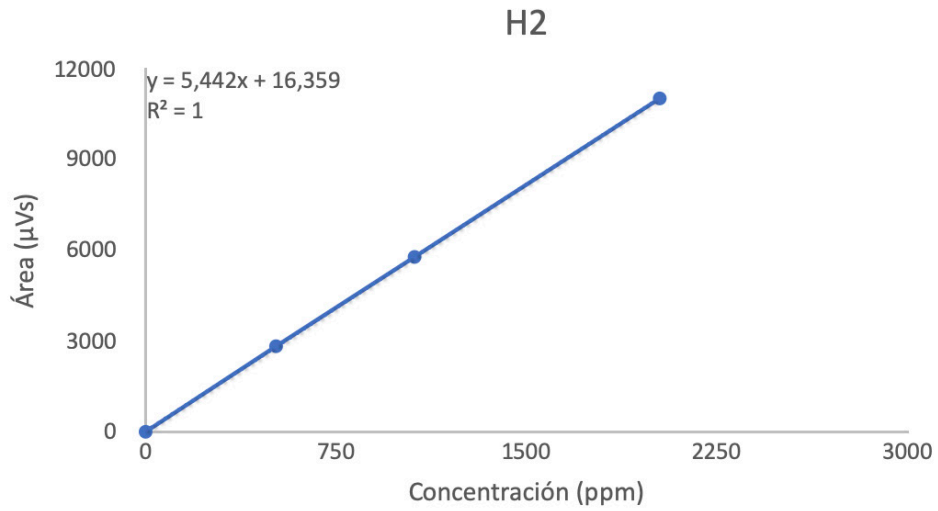
Se observa que los valores de R^2 son iguales a 1 o muy cercanos, lo que indica que el ajuste lineal es adecuado. Este parámetro es importante de conocer puesto que el software SOPRANE II permite realizar el ajuste de calibración con una función lineal, polinómica o exponencial. En este caso se ha seleccionado la opción lineal con paso por (0,0).



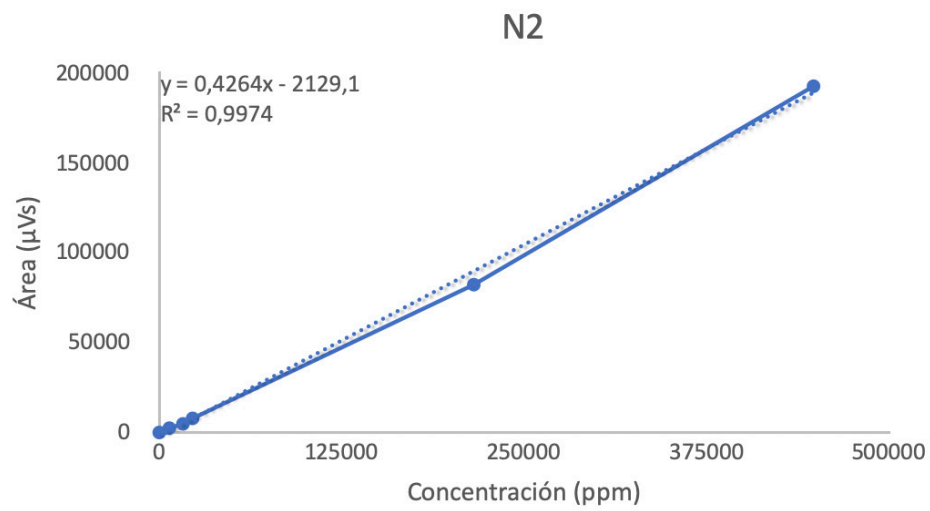
Gráfica 128. Calibración de CO_2 .



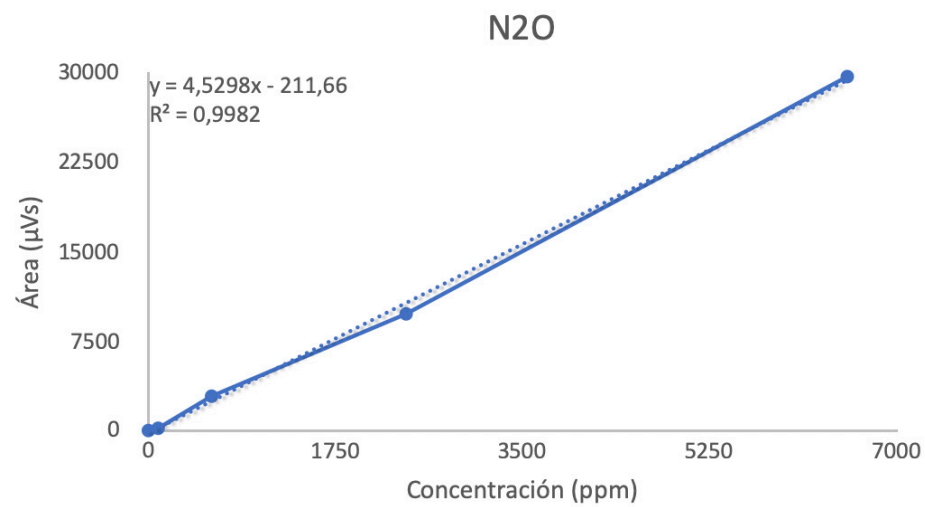
Gráfica 129. Calibración de CO_2 .



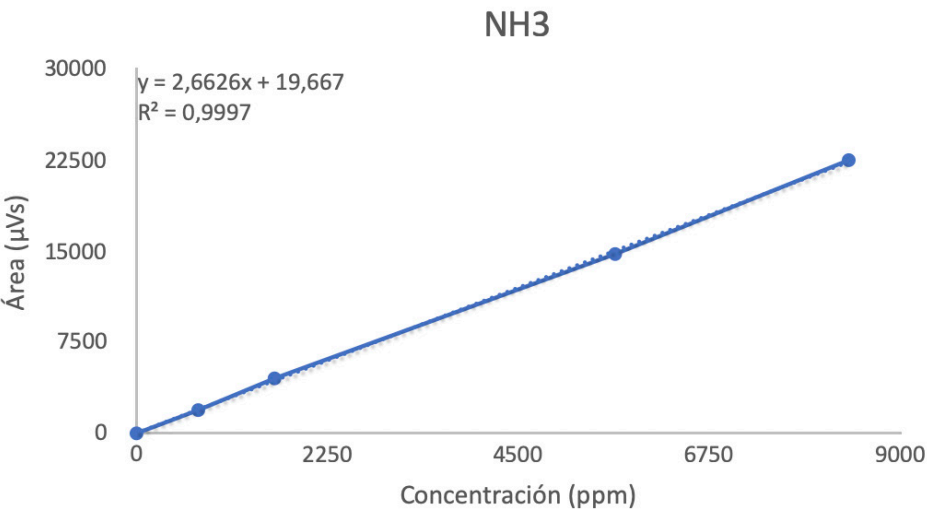
Gráfica 130. Calibración N₂.



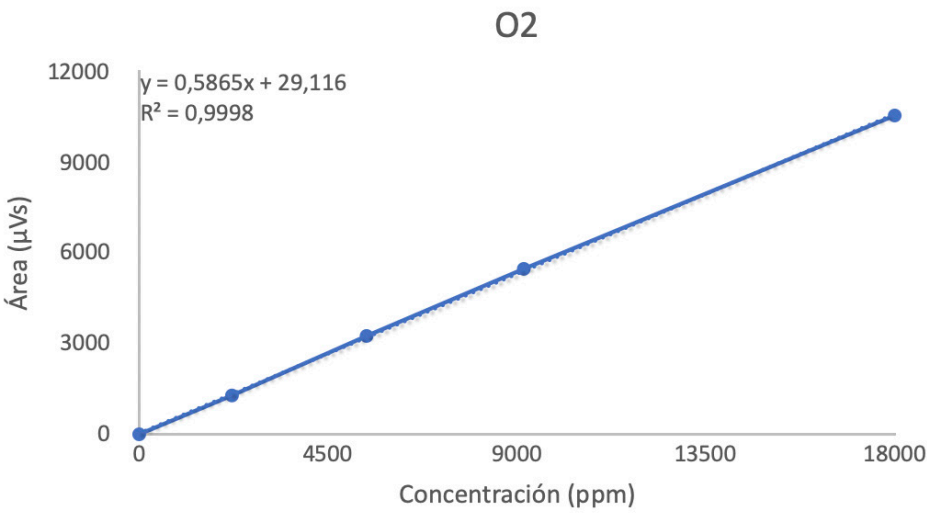
Gráfica 131. Calibración N₂.



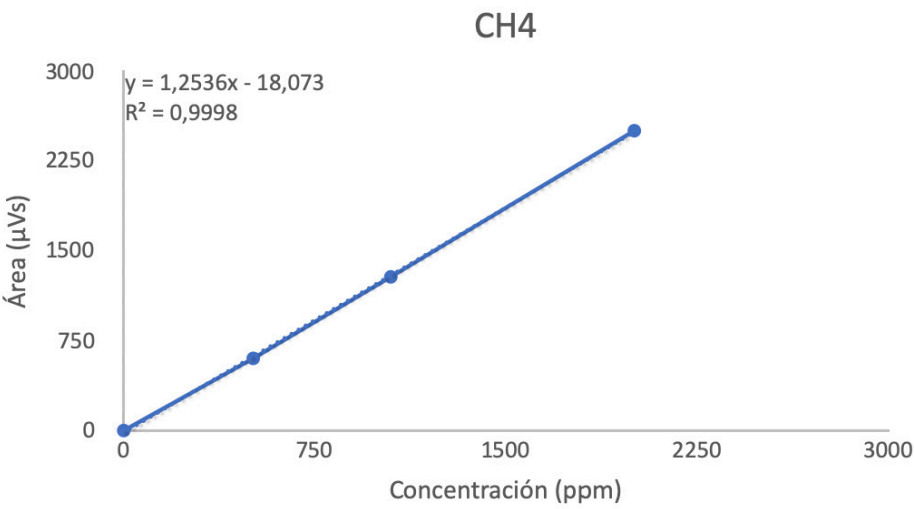
Gráfica 132. Calibración N₂O.



Gráfica 133. Calibración NH₃.



Gráfica 134 Calibración O₂.



Gráfica 135. Calibración CH₄.

