

## **SIMULACIÓN NUMÉRICA DE LA OXIDACIÓN PARCIAL DE LA MEZCLA METANO-AIRE EN PRESENCIA DE VAPOR DE AGUA EN MEDIOS POROSOS INERTES**

**Khriscia S. Utria, Freddy González, Mario G. Toledo**

*Departamento de Ingeniería Mecánica, Universidad Técnica Federico Santa María, Avenida España 1680, Valparaíso, Chile, khriscia.utria@usm.cl, freddy.gonzalez@usm.cl, mario.toledo@usm.cl*

**Palabras clave:** Metano, Vapor de Agua, Combustión, Medios Porosos Inertes

**Resumen.** Los procesos de oxidación parcial de combustibles fósiles se utilizan para generar gases reductores, principalmente compuestos por hidrógeno ( $H_2$ ) y monóxido de carbono (CO). En la presente investigación se realiza la simulación numérica de la combustión en medios porosos inertes de la mezcla rica de metano-aire en presencia de vapor de agua a través de la utilización del modelo matemático desarrollado en el estudio de Toledo et al., *Int. J. Hydrogen Energy*, 33: 1818–1827 (2009). El modelo unidimensional para un volumen de control considera que no hay equilibrio térmico local entre las fases sólidas (medio poroso) y gaseosa, y asume que la velocidad de propagación de la llama en el medio poroso es menor a la velocidad de filtración de la mezcla rica de metano-aire. Se obtienen los perfiles de temperatura del sólido y del gas, las velocidades de propagación de la llama y los principales productos de la combustión ( $H_2$ , CO) en un rango de relación de equivalencia desde la estequiometría hasta 2.4, para una velocidad de filtración de 12 cm/s. Los resultados numéricos muestran que los procesos de oxidación parcial en presencia de vapor de agua aumentan las temperaturas de combustión en ambas fases (sólida y gaseosa), aumentan la velocidad de propagación de la llama, obtienen una mayor producción de hidrógeno, manteniendo constante la de monóxido de carbono, en comparación con procesos de oxidación parcial sin presencia de vapor de agua. Se espera validar experimentalmente los resultados numéricos obtenidos.

Nomenclatura			
$\rho$	densidad del combustible [ $\text{g}/\text{m}^3$ ].	$W_k$	Peso molecular de las especies k
$\Phi$	relación de equivalencia.	$Y_k$	Fracción de masa de las especies k
$\lambda$	relación aire combustible.	x	coordenada axial
Vel	velocidad de filtración de la llama [cm/seg].	$\beta$	coeficiente efectivo de intercambio de calor con los alrededores
$T_c$	Temperatura de combustión.	$\varepsilon$	porosidad
$T_g$	Temperatura del gas	$\lambda$	conductividad efectiva térmica del medio poroso
$T_s$	Temperatura del sólido	$\rho$	densidad
$T_{ad}$	Temperatura adiabática	$\dot{\omega}$	tasa molar de la reacción de las especies k
$X_{O_2}$	Concentración de oxígeno en el aire.	k	Velocidad específica de reacción
C	Calor específico	A	Factor de frecuencia,
d	Diámetro de partícula	EA	Energía de activación
$D_{ax}$	Coeficiente de dispersión axial	R	Constante universal de los gases
F	factor de intercambio de radiación		
$h_k$	Entalpía específica de las especies k		
			Subíndices
k	Conductividad térmica	e	efectivo
$\dot{M}$	Flujo másico	g, s	gas, sólido
$\dot{Q}_{Aire}$	Caudal aire	k	índice de especies
$\dot{Q}_{C_2H_6}$	Caudal etano	R	radiante
T	Temperatura	0	inicial
V	Velocidad intersticial		
u	velocidad de propagación de la llama de combustión		
Vk	Velocidad de difusión de las especies k		

## 1 INTRODUCCIÓN

En los últimos años se ha incrementado el interés por el hidrógeno, debido a su alta densidad energética, a su baja emisión de gases contaminantes cuando es quemado, así como también la importancia que tiene como materia prima en la industria química, del petróleo y petroquímica (Avcı et al. (2001)). Una de las formas clásicas de obtener hidrógeno es a través del reformado de vapor de agua con gas natural. Este proceso endotérmico requiere de altas temperaturas para la conversión del metano, en un reactor convencional, demandando mucha energía (Yua et al. (2008)). Esto crea la necesidad de generar procesos más simples y eficientes para la producción del hidrógeno. La oxidación parcial de combustibles fósiles en medios porosos inertes (MPI) es uno de los procesos alternativos que se utiliza para generar gases reductores, compuestos principalmente por hidrógeno ( $H_2$ ) y monóxido de carbono (CO). La mezcla de gases obtenida a través de la oxidación parcial es conocida como gas de síntesis o *syngas* por sus siglas en inglés (synthetic gas). El *syngas* consiste principalmente en una mezcla que contiene una cantidad variada de monóxido de carbono, dióxido de carbono e hidrógeno.

La oxidación parcial en MPI consiste básicamente en un proceso de propagación de la zona de reacción química exotérmica de un gas a lo largo de un sólido químicamente inerte (Hunters et al. (1996)). En este proceso existe una participación tanto del medio poroso como

del gas reactante, en donde tres zonas características se pueden identificar dentro del medio poroso. Una primera zona se encuentra delante del frente de combustión, donde los gases reactantes se mezclan en forma natural y se precalientan aprovechando el calor desprendido por el medio poroso. La segunda zona es muy estrecha y representa la zona de reacción química, la que se mueve en la misma dirección o en contra de la entrada de la premezcla combustible-aire, y donde se libera una gran cantidad de entalpía, la que es absorbida por el medio poroso y conducida hacia la primera zona. En esta última zona, gracias a la inmensa superficie específica que tiene el medio poroso, la energía es cedida por ella al gas entrante y trasladada por convección hacia la zona de la reacción. De esta forma se realiza una regeneración del calor en el sistema lo que lleva al exceso de la entalpía en la zona de reacción química y un lento aumento de la temperatura en el frente, la que puede superar a la temperatura adiabática. La tercera zona, la que se encuentra detrás del frente, contiene los productos de la combustión, los que intercambian activamente el calor por convección con el medio poroso. Estos sistemas se caracterizan por la presencia en ellos de dos frentes dinámicos, el de generación de calor y el de altas temperaturas. Producto de la adecuada selección de los parámetros geométricos, fluidodinámicos y térmicos, ambas frentes pueden superponerse intensificándose mutuamente.

Se han publicado estudios en las últimas dos décadas donde describen la combustión de gases en medios porosos (Babkin VS, 1993; Cantarin et al(2003); Dobrego et al. (2000); Drayton et al (1998); Dharmarat et al. (2006); Kennedy et al. (2000); Vogel et al. (2005)). Se ha encontrado que la oxidación parcial se puede realizar a temperaturas superadiabáticas para mezclas ricas y ultraricas de combustible-aire (Kennedy et al. (2000)). Los trabajos de (Drayton et al. (1998)) y (Kennedy et al. (2000)) han demostrado que los quemadores de MPI poseen la característica de quemar mezclas excesivamente ricas en combustible. En el trabajo de (Toledo et al. (2009)) se estudiaron numéricamente y experimentalmente los procesos de oxidación parcial de metano, etano y propano, en un rango de la relación de equivalencia entre el estequiométrico ( $\Phi = 1$ ) hasta  $\Phi = 2.5$ . Para metano, se encontró que la temperatura experimental de combustión es de  $\sim 1350$  K en  $\phi = 1$ , aumenta hasta alcanzar un valor de  $\sim 1620$  K en  $\phi = 1.4$ , para luego permanecer constante hasta  $\phi < 2.3$ . En  $\phi = 1.9$  la temperatura de combustión excede la temperatura adiabática marcando el punto donde empieza el régimen superadiabático. Para la velocidad de propagación de llama obtuvieron un valor máximo de  $0.0063$  cm/s en  $\phi = 1.0$ , el régimen contracorriente y subadiabático se encontró entre una relación de equivalencia de  $1.0$  hasta  $1.9$  (numéricamente se muestra el mismo comportamiento). Además, el estudio muestra que la máxima obtención de hidrógeno es de  $\sim 16\%$  en  $\phi = 2.5$  y de monóxido de carbono  $\sim 13\%$  en  $\phi = 2.5$ . (Dobrego et al. (2008)) estudia la influencia de la adición de vapor en la oxidación parcial de la mezcla metano aire, encontrando que la concentración de hidrógeno en los productos de la combustión puede crecer entre  $0.5\%$  y  $1\%$ , y la conversión de metano en hidrógeno entre un  $10$  y  $15\%$ , a través de la adición de vapor de agua a la mezcla entrante. Muestran que las concentraciones de vapor de agua que optimizaron la producción de hidrógeno, se encuentran en un rango entre  $5\%$  y  $10\%$ , y para la conversión de metano en hidrógeno entre un  $20\%$  y  $50\%$ .

El presente trabajo tiene como objetivo principal, estudiar numéricamente el proceso de oxidación parcial de la mezcla metano-aire en Medios Porosos Inertes (MPI) en presencia de vapor de agua, a través de la utilización del programa PREMIX modificado, el cual resuelve el modelo matemático desarrollado en el estudio *Hydrogen production in ultrarich combustion of hydrocarbon fuels in porous media* (Toledo et al. (2009)). Se espera obtener un mayor porcentaje de generación de hidrógeno gracias a la presencia de vapor de agua.

## 2 MODELO MATEMÁTICO

El modelo utilizado para este trabajo fue desarrollado en el estudio *Hydrogen production in ultrarich combustion of hydrocarbon fuels in porous media* (Toledo et al. (2009)), en el cual, para un volumen de control se describe la combustión filtrada. El sistema es considerado isobárico y unidimensional. Se asume que la velocidad de propagación de la llama en el medio poroso ( $u$ ) es menor a la velocidad de filtración de la mezcla rica de metano-aire ( $v$ ), es decir,  $u \ll v$ . Un modelo matemático sin equilibrio térmico local entre las fases sólida (medio poroso) y gaseosa se presenta para describir completamente la combustión en MPI para un sistema de coordenadas que se mueve con la zona de reacción. El modelo describe al gas y al sólido como dos fases que interactúan por la dinámica de fluidos y por la transferencia de calor, y es limitado para describir la combustión en un régimen de bajas velocidades (Low Velocity Regime – LVR).

Las ecuaciones que describen el sistema son:

Ecuación de continuidad:

$$\frac{\partial(\dot{M})}{\partial x} = \frac{\partial(\varepsilon\rho v)}{\partial x} = 0 \quad (1)$$

Ecuación de energía de la fase gaseosa:

$$\varepsilon c_p \rho_g v \frac{\partial T_g}{\partial x} = \varepsilon \frac{\partial}{\partial x} \left( [k_g + (c_p \rho_g) D_{ax}] \frac{\partial T_g}{\partial x} \right) - \varepsilon \sum_k \dot{\omega}_k h_k W_k - \varepsilon \sum_k \rho_g Y_k V_k c_{pk} \frac{\partial T_g}{\partial x} - h_v (T_g - T_s) \quad (2)$$

Ecuación de energía de la fase sólida:

$$-(1-\varepsilon) c_s \rho_s u \frac{\partial T_s}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left( [k_e + k_R] \frac{\partial T_s}{\partial x} \right) - \beta (T_s - T_0) - h_v (T_g - T_s) \quad (3)$$

Ecuación de la conservación de especies:

$$\rho_g v \frac{dY_k}{dx} + \frac{d}{dx} (\rho_g Y_k V_k) = \dot{\omega}_k W_k \quad (4)$$

Asumiendo equilibrio térmico entre el gas y el sólido en los límites, las condiciones de fronteras son:

$$\text{En la entrada } x = 0 \quad T_g = T_s = T_0, \quad Y = Y_{k,0} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} & \partial Y_k / \partial x = 0; \quad T_g = T_s = T; \\ \text{Y en la salida } x = L & \quad \partial T / \partial x = \beta (T - T_0) / (\varepsilon c_p \rho_g v - (1-\varepsilon) c_s \rho_s u) \end{aligned} \quad (6)$$

Para la temperatura de la llama, las condiciones de frontera se obtienen de una solución analítica donde se asume que  $Y_k / \partial x = 0$ ;  $T_g = T_s = T$ ;  $\dot{\omega}_k = 0$  y la radiación no es considerada en la interface lejana a la zona de reacción.

## 3 PROGRAMA PREMIX

El programa PREMIX es utilizado como herramienta para el desarrollo de las simulaciones realizadas en la presente investigación. Este programa fue diseñado originalmente para simular procesos de combustión de pre-mezcla de una llama libre. Sin embargo, en el estudio

de (Toledo et al. (2009)) es modificado para la modelación de la combustión en MPI. En la Figura 1 se muestra el diagrama de la estructura del programa PREMIX modificado para el cual se utiliza el software FORTRAN Power Station 4.0.

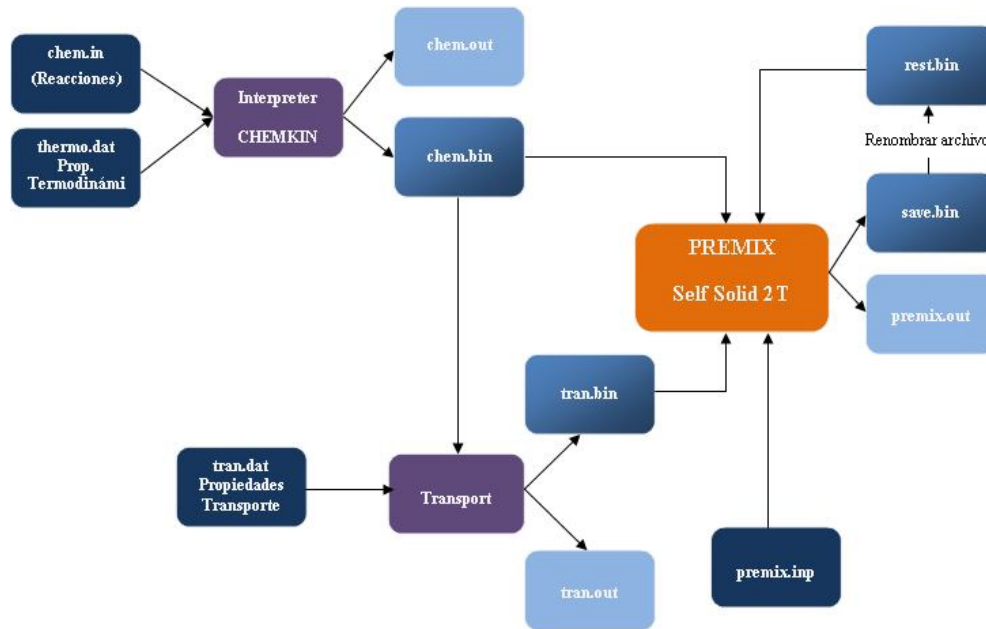


Figura 1. Diagrama del programa PREMIX modificado

Dentro del programa se desarrollaron varias subprogramas y subrutinas que ayudan a resolver el modelo. El Interpreter es uno de estos subprogramas que tiene como función generar las reacciones químicas en el formato CHEMKIN de acuerdo a los datos suministrados por el usuario, como son los archivos chem.inp y therm.dat. Las reacciones químicas que ocurren en el proceso de combustión a analizar se encuentran en el archivo chem.inp, las que dependen directamente de la ecuación de Arrhenius:

$$k = k(T) = AT^b \exp \frac{-E_A}{RT} \quad (7)$$

en donde  $k$  es la velocidad específica de reacción,  $T$  es la temperatura,  $A$  es el factor de frecuencia,  $E_A$  es la energía de activación y  $R$  es la constante universal de los gases.  $A$ ,  $b$  y  $E_A$  son constantes empíricas.

Las propiedades termodinámicas de los compuestos de la reacción química se encuentran en el archivo therm.dat. Al ejecutar el subprograma Interpreter se generan dos archivos que contienen las soluciones como son el chem.bin y chem.out. Chem.bin es un archivo que contiene los datos del chem.inp y tran.dat, en forma binaria. Estos últimos se emplean luego en el programa principal. La solución del subprograma es el archivo chem.out, el cual está en formato legible de manera de verificar la solución obtenido en este subprograma.

El otro subprograma es el Transport. Como su nombre lo indica genera los datos referentes a las propiedades de transporte de los compuestos, es decir, viscosidad, conductividad y difusividad. Se emplea el archivo tran.dat. Los archivos generados como solución por el

Transport son el tran.bin y tran.out, siendo el primero el binario y el segundo el legible. Luego que los archivos tran.bin y chem.bin son generados, se transportan a la carpeta del programa principal, que además debe contener el archivo rest.bin (solución binaria que se ejecuta antes de iniciar el programa). El programa Premix Self Solid 2T, simula el proceso de combustión en medios porosos inertes de forma unidimensional, transiente y sin considerar equilibrio térmico local entre el sólido y el gas, es decir,  $T_g \neq T_s$ . En el archivo premix.inp se colocan los parámetros específicos del caso a estudiar como son: los porcentajes en volumen de los componentes de la mezcla combustible-aire, la relación de equivalencia y los parámetros de diseño del reactor poroso. Luego de generados todos los archivos “.bin” e ingresados los parámetros específicos señalados se ejecuta el programa Premix Self Solid 2T, obteniéndose los archivos premix.out y save.bin. El primero es la solución que contiene las temperaturas, velocidades y productos del proceso de combustión en MPI. El segundo es la solución binaria.

#### 4 MECANISMO DE REACCIÓN

El mecanismo de reacción utilizado para la simulación numérica es el GRI-Mech 3.0 (e.g. [http://www.me.berkeley.edu/gri\\_mech/](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/)), el cual está diseñado para la combustión de gas natural, incluida la formación de NO. Este mecanismo es el sucesor de la versión 2.11. Este mecanismo contiene 325 reacciones (3 son duplicados) y 53 especies (incluido el argón).

#### 5 DISEÑO DEL REACTOR

El reactor consiste de un tubo de cuarzo relleno con un material poroso, formado por esferas de alúmina en su interior. El tubo tiene un diámetro interno de 38 mm, un espesor de pared, de 2 mm, y longitud de 40 cm. La superficie interna del tubo es cubierta con una capa de 2 mm de aislamiento. Para evitar pérdidas de calor y lograr perfiles cuasi-uniforme de temperatura, 30 mm de aislante se aplica en el diámetro exterior del reactor. Se utilizan esferas de 5.6 mm de diámetro, dando una porosidad del ~40%.

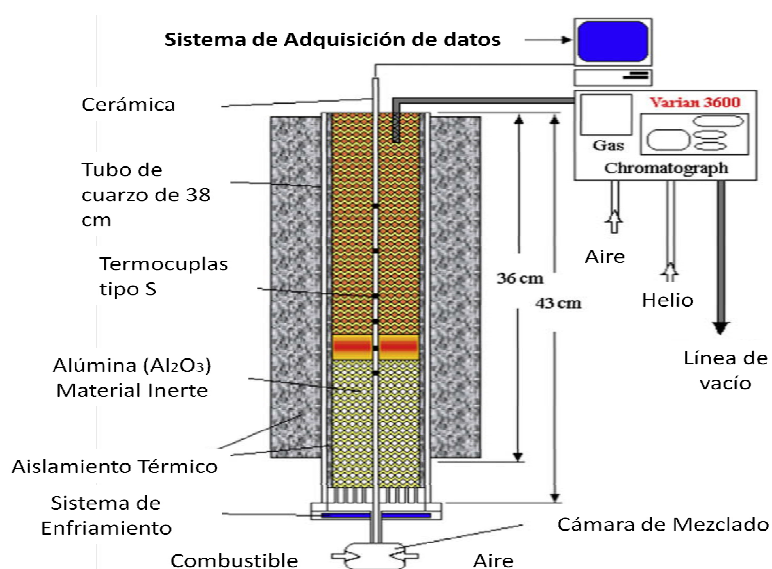


Figura 2. Diseño Reactor Poroso.

#### 6 PRESENTACIÓN Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS

Los datos de temperaturas, velocidades de propagación de llama y los principales



productos de la combustión son obtenidos para un rango de relación de equivalencia de 1.0 a 2.4, para una velocidad de filtración de 12 cm/s. Para la mezcla metano-aire se presentan los resultados sin presencia de vapor de agua en la mezcla, y con un 4%, 7%, 14% y 21% de vapor de agua en la mezcla.

Las variables consideradas para el estudio se explican como sigue:

- La relación de equivalencia indica cuantitativamente si la mezcla de combustible-oxidante es rica, pobre o estequiométrica. La mezcla estequiométrica es la cantidad de oxidante necesaria para quemar completamente una cantidad de combustible. Se define la relación de equivalencia ( $\phi$ ) como:

$$\phi = \frac{(A/F)_{stoic}}{(A/F)} = \frac{(F/A)}{(F/A)_{stoic}} \quad (9)$$

donde, F es la masa de combustible, A es el aire y stoic es la mezcla estequiométrica. Por lo tanto,  $\phi = 1$  es la estequiometría,  $\phi > 1$  es una mezcla rica, y  $\phi < 1$  es una mezcla pobre.

- La temperatura de flama adiabática o temperatura adiabática, se define como la temperatura a la cual una mezcla combustible – aire es quemada adiabáticamente. La presente investigación toma de referencia la temperatura de llama adiabática calculada a presión constante.
- La temperatura de combustión es la temperatura del sólido, la cual puede ser medida experimentalmente para futuras validaciones, y/o la temperatura del gas reactante. Se señala en las figuras presentadas.
- La velocidad de filtración es la velocidad del caudal de mezcla respecto del área transversal generada por el medio poroso.
- La velocidad de propagación de llama se define como la velocidad a la cual se desplaza el frente de combustión en el medio poroso. Experimentalmente se mide mediante termocuplas instaladas en el medio poroso.

### Temperaturas de combustión

La [Figura 3](#) muestra los resultados numéricos obtenidos para la temperatura de combustión con diferentes porcentajes de vapor de agua en la mezcla. En color rojo se presentan los resultados de mezclas sin presencia de vapor de agua. Se puede observar la tendencia al incremento de la temperatura conforme aumenta el porcentaje de vapor de agua en la mezcla para el rango de relación de equivalencia estudiado. La temperatura del proceso sin vapor de agua es menor que para los casos con presencia de vapor de agua. No obstante, las diferencias entre las mezclas con distintos porcentajes de adición de vapor no son muy significativas ([Smith et al. \(2010\)](#)). Las diferencias se encuentran para relaciones de equivalencia entre 1.0 y 1.3, teniendo un incremento de  $\sim 2\text{K}/\%\text{H}_2\text{O}$ , observándose el mismo comportamiento tanto para la temperatura de combustión del gas como la del sólido. Por su parte, para la mezcla sin presencia de vapor de agua las diferencias entre la temperatura del gas y del sólido es de  $\sim 200\text{ K}$ , en todo el rango de relación de equivalencia estudiado, mientras que para las mezclas con presencia de vapor de agua es de  $\sim 100\text{ K}$ .

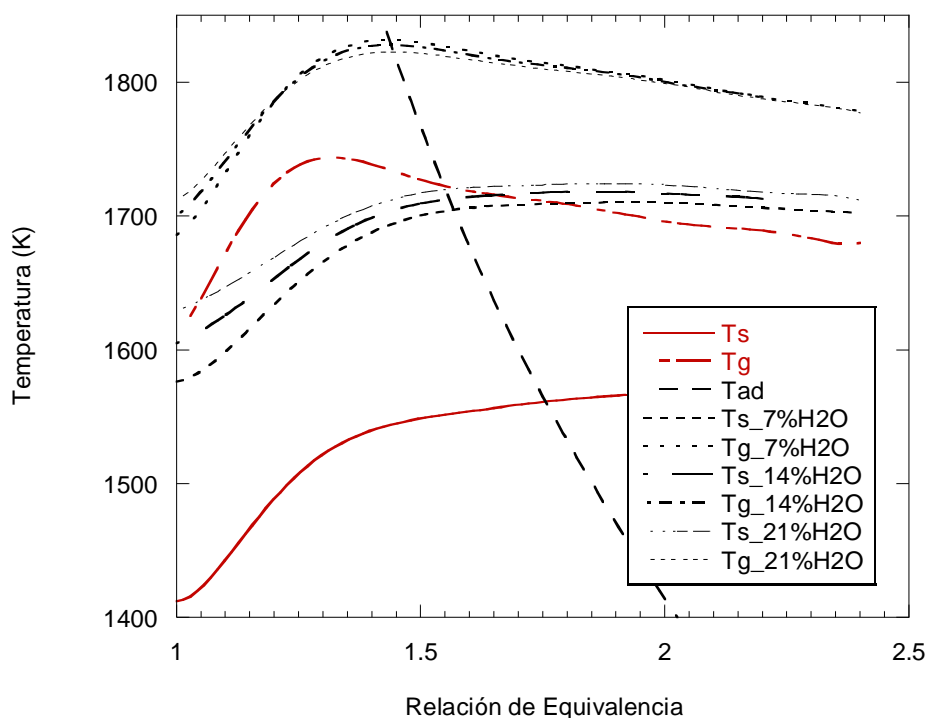


Figura 3. Temperaturas de combustión para diferentes porcentajes de vapor de agua en la mezcla.

A pesar que el vapor de agua lleva la mezcla al equilibrio para obtener la máxima producción de hidrógeno, al mismo tiempo disminuye la temperatura de combustión (Dobrego et al. (2008)). Sin embargo, en el rango trabajado de porcentajes de vapor de agua su influencia resulta ser insignificante en la temperatura de combustión.

### Velocidad de propagación de llama

En la Figura 4 se muestran los resultados numéricos para la velocidad de propagación del frente de combustión para diferentes porcentajes de vapor de agua en la mezcla. Los resultados muestran que para un  $\phi$  fijo las velocidades de propagación son mayores para las mezclas con menor porcentaje de vapor de agua, sobretodo en el rango subadiabático, ocurriendo lo contrario en el superadiabático. Las relaciones de equivalencia donde se encuentra la estabilidad de la llama son 1.5 para 7%, 1.4 para 14%, y 1.3 para 21%. En resumen para  $\phi < 1.3$  se encuentran velocidades contracorriente en todos los casos. Desde los puntos de estabilidad se empiezan a obtener temperaturas de combustión superadiabáticas. Cabe destacar, que en este punto las temperaturas de combustión no presentan diferencias significativas, como se señaló anteriormente.



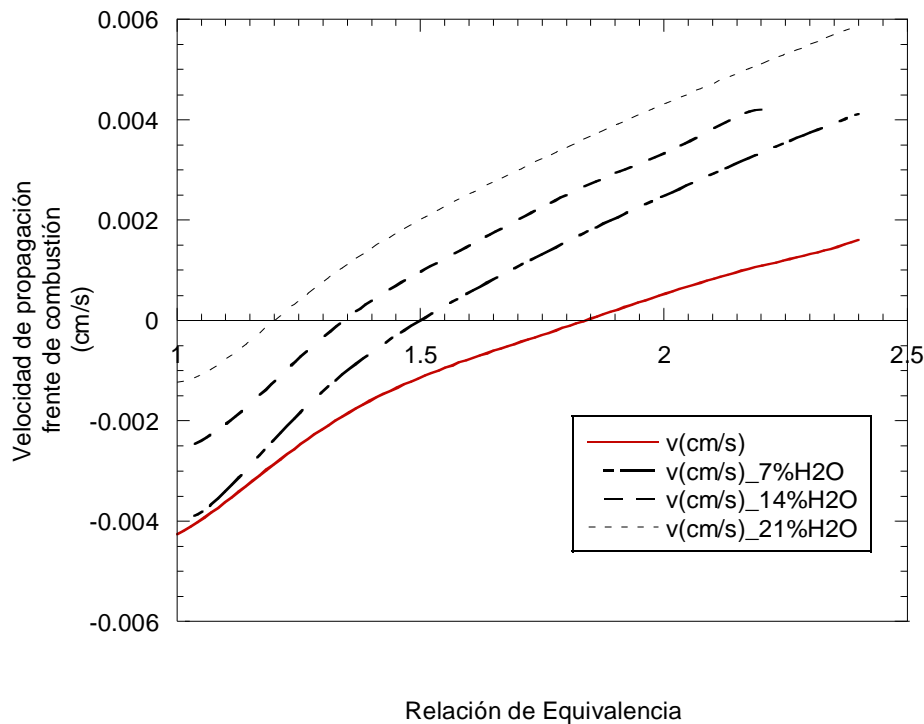


Figura 4. Velocidad de propagación del frente de combustión para diferentes porcentajes de vapor de agua en la mezcla.

### Productos de la combustión

La Figuras 5A y 5B, muestran las concentraciones de  $H_2$  y  $CO$ , respectivamente, obtenidas de la combustión de la mezcla metano-aire bajo la presencia de diferentes porcentajes de vapor de agua. La tendencia muestra que al introducir vapor de agua a la mezcla la producción de hidrógeno aumenta como se puede apreciar en la Figuras 5A, especialmente para una relación de equivalencia de 2.0 donde se encuentra la máxima concentración de  $H_2$  para todos los casos simulados. Las diferencias son considerables para relaciones de equivalencia mayores a 1.2 para una adición de 7% de vapor de agua. Ocurre lo contrario con el monóxido de carbono, de acuerdo a las reacciones químicas del proceso. En la Figura 5B se puede observar la disminución de producción de  $CO$  al estar presente el vapor de agua para el rango de relación de equivalencia estudiado. Estas tendencias se explican porque el vapor de agua hace que la reacción química llegue a un nivel de equilibrio, donde la concentración de hidrógeno se maximiza, no ocurriendo lo mismo con la de monóxido de carbono.

Por otra parte, se analizaron las concentraciones de  $CO_2$  y  $CH_4$  obtenidas para las diferentes relaciones de equivalencia trabajadas. Las tendencias son mostradas en la Figura 6, donde se puede observar que el  $CH_4$  durante el proceso de combustión va disminuyendo con el aumento de porcentaje de vapor de agua en la mezcla. Las mezclas sin vapor de agua muestran un mayor porcentaje de metano que las mezclas con presencia de vapor de agua. Debido a la naturaleza de la reacción química, con un incremento en la relación de equivalencia disminuye la producción de  $CO_2$  y aumenta la de  $CH_4$  (Toledo et al. (2009)).

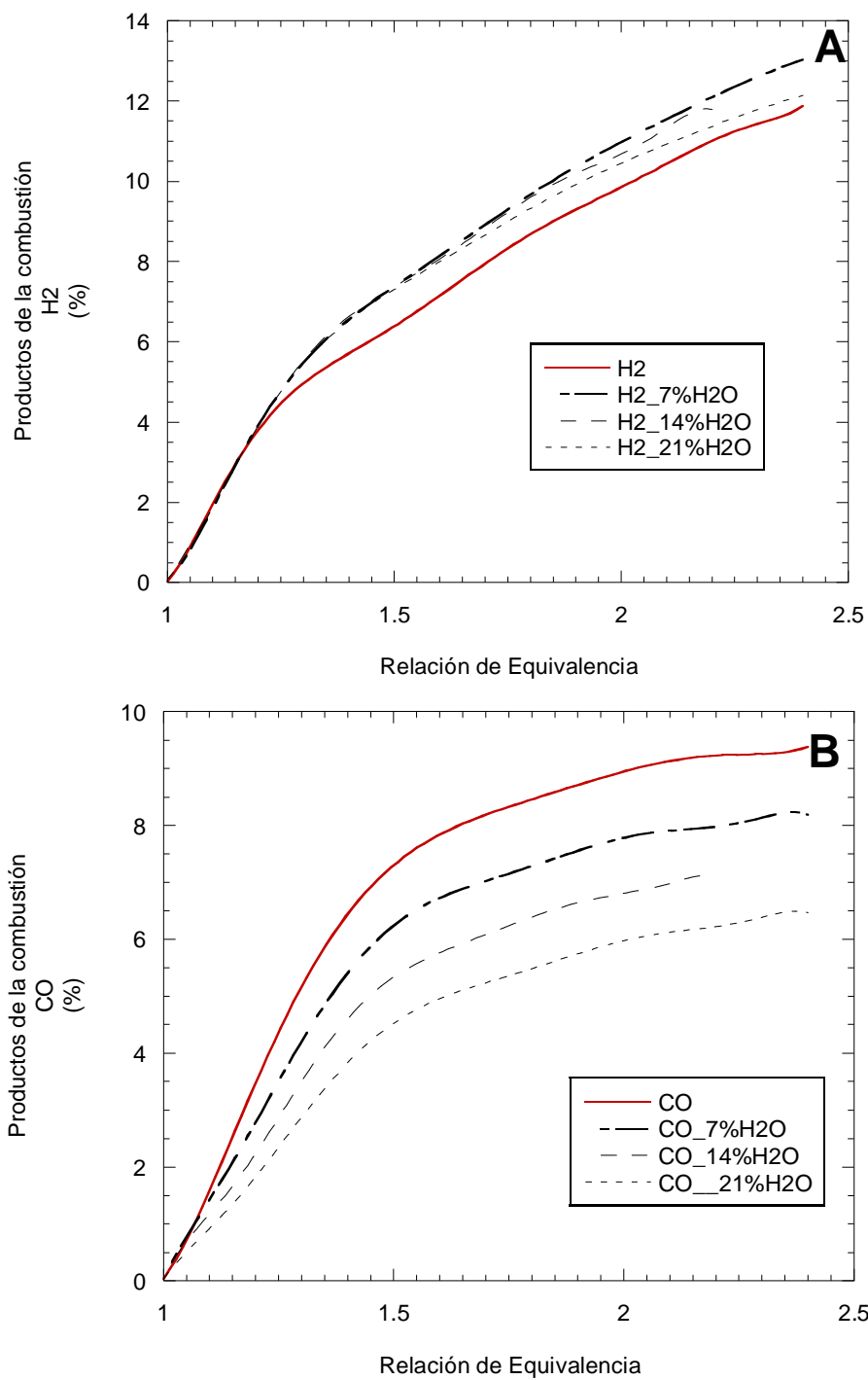


Figura 5. Principales productos de la combustión para diferentes porcentajes de vapor de agua en la mezcla: A. Hidrógeno B. Monóxido de Carbono

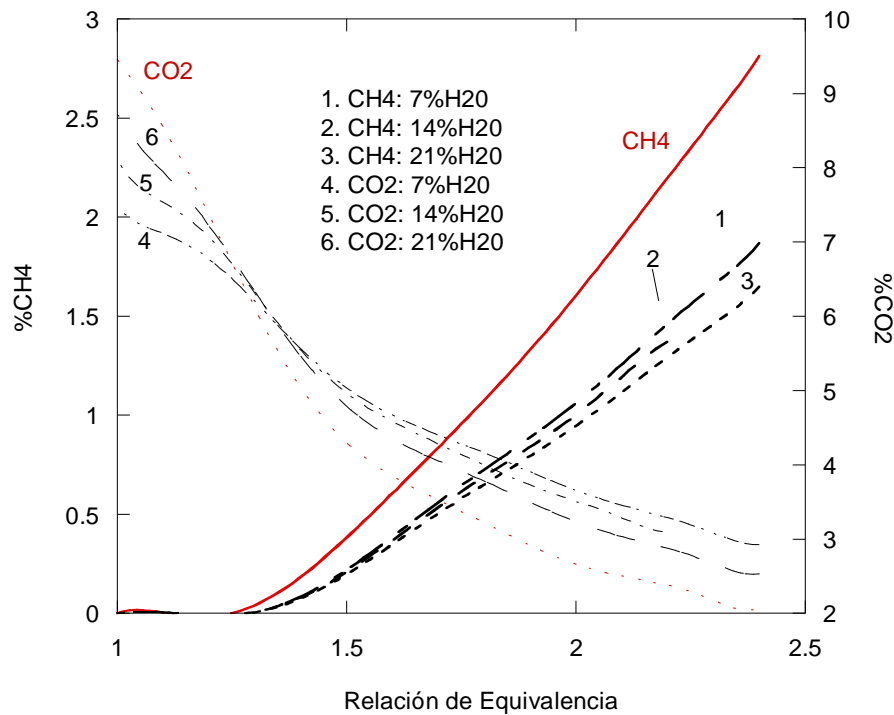


Figura 6. Principales productos de la combustión para diferentes porcentajes de vapor de agua en la mezcla: metano y dióxido de carbono.

### Porcentajes de Conversión de H<sub>2</sub> y CO

Se analizan los porcentajes de conversión de metano en hidrógeno y en monóxido de carbono (Figura 7) de acuerdo a la ecuación (10):

$$R_{\text{CH}_4\text{-H}_2} = \frac{X_{\text{H}_2}}{2X_{\text{CH}_4}} \frac{X_{\text{N}_2}^{\circ}}{X_{\text{N}_2}} \quad (10)$$

donde  $(X_{\text{N}_2}^{\circ}/X_{\text{N}_2})$ , es la relación de nitrógeno en la entrada y en la salida del reactor poroso (Dobrego et al.(2008)).

Al igual que la concentración de hidrógeno, la conversión de metano en hidrógeno aumentó en un ~6% con el incremento de vapor de agua en la mezcla, especialmente para relaciones de equivalencia superiores a 1.3. Para relaciones menores las diferencias no son importantes. Entre 14% y 21% de adición de vapor de agua la diferencia no es mayor al 2%. Por otra parte, con la conversión de metano en monóxido de carbono ocurrió lo contrario, disminuyendo en un 3% para relaciones de equivalencia mayores a 1.5. Entre  $\phi = 1.0$  y  $\phi = 1.3$  la disminución no es mayor al 2%. A su vez, se puede observar que para un 21% de adición de vapor de agua la disminución es más importante llegando al ~7%.

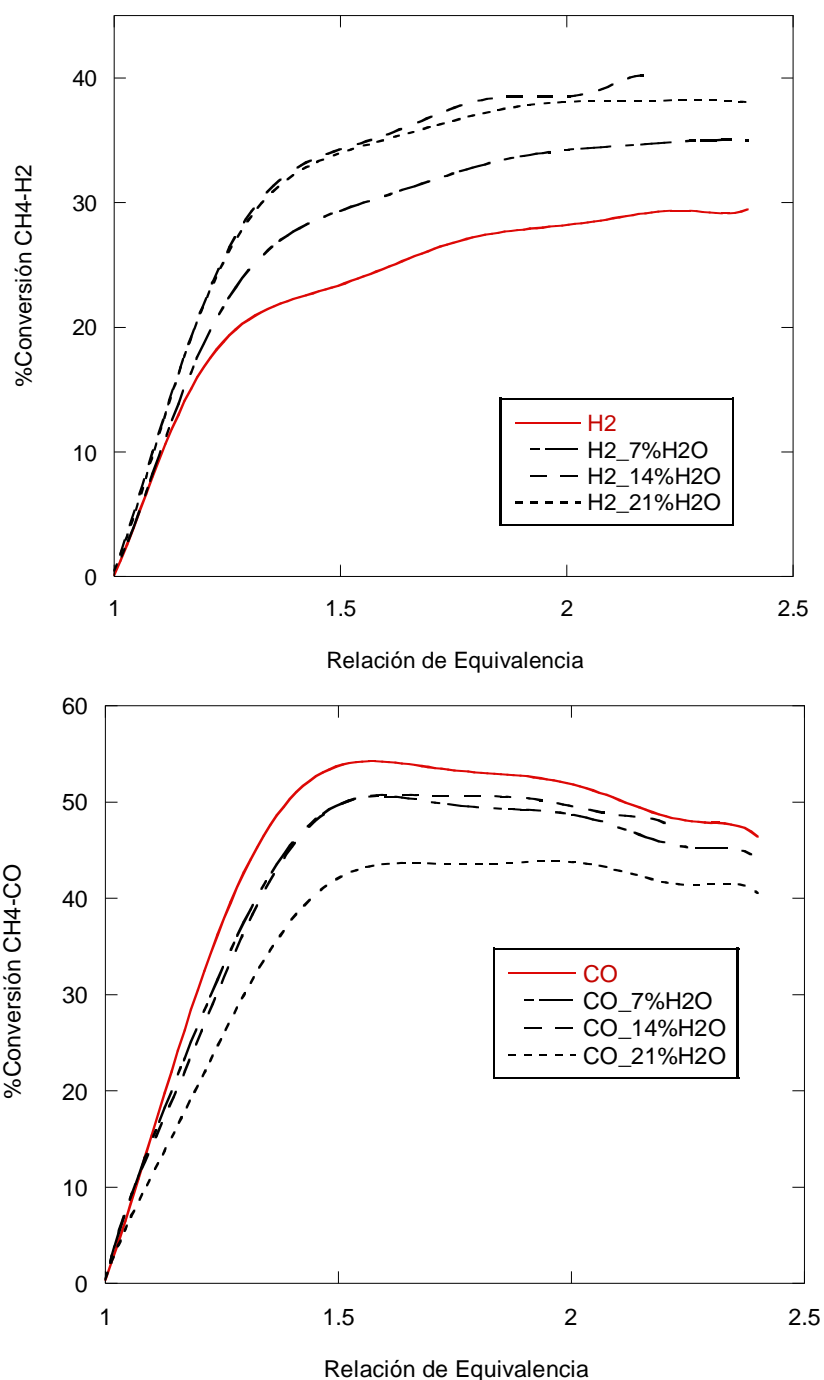


Figura 7. Porcentaje de conversión  $\text{CH}_4/\text{H}_2$  y  $\text{CH}_4/\text{CO}$  para diferentes porcentajes de vapor de agua en la mezcla.

## 7 CONCLUSIONES

Se estudió numéricamente el proceso de oxidación parcial de la mezcla metano-aire en MPI en presencia de vapor de agua a través de la utilización del modelo matemático desarrollado por Toledo et al. (2009). Se realizaron simulaciones para un rango de relación de equivalencia entre la estequiometría ( $\phi = 1.0$ ) y  $\phi = 2.4$ .

A través de la simulación se obtuvieron temperaturas subadiabáticas y superadiabáticas

para velocidades a contracorriente y co-corriente. Las tendencias obtenidos por el modelo y el uso del mecanismo GRI-Mech 3.0 muestran que al aumentar el porcentaje de vapor de agua en la mezcla las temperaturas del sólido y el gas tienen un aumento significativo respecto de la mezcla sin vapor de agua. Sin embargo, entre las mezclas con diferentes porcentajes de vapor, las temperaturas no muestran diferencias significativas.

La velocidad de propagación del frente de combustión disminuyó con el aumento del porcentaje de vapor de agua en la zona subadiabática-contracorriente y aumentó en la zona superadiabática-co-corriente.

Finalmente, la generación de hidrógeno aumentó al adicionar vapor de agua en la mezcla mientras que las de monóxido de carbono disminuyeron. La conversión de metano en hidrógeno aumentó de 31% (sin vapor de H<sub>2</sub>O) a 42% (con 14% de vapor de H<sub>2</sub>O en la mezcla). Por su parte la conversión en monóxido disminuyó en ~10% respecto de la mezcla sin vapor de H<sub>2</sub>O.

## AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen el soporte de CONICYT-Chile (BASAL FB0821 - FB/05MT/11).

## REFERENCIAS

- Avci AK., Trimm DL., Onsan ZI., Heterogeneous reactor modeling for simulation of catalytic oxidation and steam reforming of methane. *Chemical Engineering Science*, 56:641–9, 2001.
- Babkin VS. Filtration combustion of gases, present state of affairs and prospects. *Pure and Applied Chemistry*, 65:335–44, 1993.
- Contarin F, Saveliev AV, Fridman AA, Kennedy LA. A reciprocal flow filtration combustor with embedded heat exchangers: numerical study. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 46:946–61, 2003.
- Dhamrat RS, Ellzey JL. Numerical and experimental study of the conversion of methane to hydrogen in a porous media reactor. *Combustion and Flame*, 144:698–709, 2006.
- Dobrego K.V., Gnezdilov N.N., Lee S.H., Choi H.K., Partial oxidation of methane in a reverse flow porous media reactor. Water admixing optimization. *International Journal Of Hydrogen Energy*, 33:5535–5544, 2008.
- Dobrego KV, Zhdanok SA, Khanevich EI. Analytical and experimental investigation of the transition from low velocity to high-velocity regime of filtration combustion. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 21:9–16, 2000.
- Drayton MK, Saveliev AV, Kennedy LA, Fridman AA, Li YE. Syngas production using superadiabatic combustion of ultra-rich methane–air mixtures. *Proceedings of the Combustion Institute*, 26:1361–7, 1998.
- Hunters Tb., Litzinger Ta., Wang H., Frenklach M., Ethane oxidation at elevated pressures in the intermediate temperature regime: experiments and modeling. *Combustion and Flame*, 104:505–23, 1996.
- Kennedy LA, Bingue JP, Saveliev AV, Fridman AA, Foutko SI. Chemical structures of methane–air filtration combustion waves for fuel-lean and fuel-rich conditions. *Proceedings of the Combustion Institute*, 28:1431–8, 2000.
- Slimane RB, Lau FS, Khinkis M, Bingue JP, Saveliev AV, Kennedy LA. Conversion of hydrogen sulfide to hydrogen by superadiabatic partial oxidation: thermodynamic consideration. *International Journal Of Hydrogen Energy*, 29:1471, 2004.
- Smith C., Leahey D., Miller L., Ellzey J., Conversion of wet ethanol to syngas via filtration combustion: An experimental and computational investigation, *Proceedings of the Combustion Institute*, 33: 3317-3324, 2010.

Toledo M., Bubnovich V., Saveliev Al., Kennedy L., Hydrogen production in ultrarich combustion of hydrocarbon fuels in porous media, *International Journal Of Hydrogen Energy*, 33: 1818–1827, 2009.

Vogel BJ, Ellzey JL. Subadiabatic and superadiabatic performance of a two-section porous burner. *Combustion Science and Technology*, 177:1323–38, 2005.

Xu J, Froment GF. Methane steam reforming, methanation and water–gas shift: I. intrinsic kinetics. *AIChE Journal*, 35:88–96, 1989.

Yua W., Ohmori T., Kataoka S., Yamamoto T., Endo A., Nakaiwa M., Itoh N., A comparative simulation study of methane steam reforming in a porous ceramic membrane reactor using nitrogen and steam as sweep gases. *International Journal Of Hydrogen Energy*, 33:685– 692, 2008.