

PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DEL PERÚ
FACULTAD DE CIENCIAS E INGENIERÍA



**ANÁLISIS DE LA INFLUENCIA DEL DIÓXIDO DE CARBONO EN EL
BIOGAS DESARROLLANDO UNA METODOLOGÍA NUMÉRICA
CODIFICADA EN UN APLICATIVO EN MATLAB**

Tesis para obtener el título profesional de Ingeniero Mecánico

AUTOR:

Roberto Franco Cisneros Pazos

ASESOR:

Freddy Jesús Rojas Chávez, Ph.D.

Lima, Julio, 2025

Informe de Similitud

Yo, FREDDY JESÚS ROJAS CHÁVEZ.....,

docente de la Facultad de INGENIERÍA..... de la Pontificia

Universidad Católica del Perú, asesor(a) de la tesis/el trabajo de investigación titulado

ANÁLISIS DE LA INFLUENCIA DEL DIÓXIDO DE CARBONO EN EL BIOGAS DESARROLLANDO UNA
METODOLOGÍA NUMÉRICA CODIFICADA EN UN APLICATIVO EN MATLAB

.....,

del/de la autor(a)/ de los(as) autores(as)

Roberto Franco Cisneros Pazos.....,


.....,

.....,

dejo constancia de lo siguiente:

- El mencionado documento tiene un índice de puntuación de similitud de 12%. Así lo consigna el reporte de similitud emitido por el software *Turnitin* el 10/07/2025.
- He revisado con detalle dicho reporte y la Tesis o Trabajo de Suficiencia Profesional, y no se advierte indicios de plagio.
- Las citas a otros autores y sus respectivas referencias cumplen con las pautas académicas.

Lugar y fecha: Lima, 10 julio 2025.....

Apellidos y nombres del asesor / de la asesora: Rojas Chávez, Freddy Jesús	
DNI: 19990091	Firma 
ORCID: https://orcid.org/0000-0002-3338-0877	

DEDICATORIA

A mi familia por su constante apoyo en las diferentes etapas y momentos de mi carrera profesional y vida personal. A mis padres, muchos de mis logros se los debo a ellos gracias a que han sabido formarme con buenos sentimientos, hábitos y valores. A mis compañeros y amigos presentes y pasados, quiénes sin esperar nada a cambio compartieron conocimiento y experiencias enriquecedoras.



AGRADECIMIENTOS

A mi asesor, por darme la oportunidad de poder trabajar de la mano en la presente tesis y otros proyectos de investigación, los cuales me ayudaron a crecer profesionalmente. A todos mis amigos y personas que me brindaron ideas o sugerencias como aporte para la conclusión del presente trabajo.

RESUMEN

En el presente trabajo de tesis se realiza el análisis de los efectos del dióxido de carbono en los productos de combustión, temperatura de llama y velocidad de llama laminar del biogás, para ello, se desarrolla una metodología numérica empleando métodos numéricos (Newton Raphson, serie de Taylor y método de eliminación Gaussiana) para el cálculo y visualización de productos de combustión, la temperatura de llama y la velocidad de llama laminar, la cual es descrita y codificada en una aplicación desarrollada en MATLAB. Asimismo, la simulación en el software Ansys Chemkin es desarrollada, y se comparan los resultados obtenidos con los de otros autores. Todos los resultados fueron explicados y representados en gráficas, donde se encontró lo siguiente: (1) Los resultados indican que la presencia de CO₂ en el biogás reduce la velocidad y temperatura de llama de la reacción. (2) La influencia del CO₂ en las características de combustión estudiadas (velocidad de llama y temperatura de llama) según los resultados e investigaciones previamente realizadas son principalmente de carácter térmico. (3) Los productos de combustión generados en la reacción del biogás se disminuyen conforme se aumenta el porcentaje de CO₂, a excepción de solo el CO₂ para los casos de mezclas pobres, mientras que CO y CO₂ simultáneamente para los casos de mezclas ricas. (4) La metodología numérica codificada en el aplicativo desarrollado presentó concordancia con los resultados de la simulación en Ansys Chemkin e investigaciones de autores para las ratios 0.6 – 1.1 hasta el caso de 20% CO₂. (5) Para ratios mayores (1.3 a 1.7) y mayores porcentajes de CO₂ la diferencia entre las diversas fuentes se vio incrementada. (6) El aplicativo desarrollado permite el análisis de diversos combustibles y la implementación de nuevos en la misma.

ABSTRACT

In the present work, the analysis of the effects of carbon dioxide on the products of combustion, flame temperature, and laminar flame speed of Biogas is carried out, for this, a numerical methodology is developed using numerical methods (Newton Raphson, Taylor series and Gaussian elimination method) for the determination of combustion products, flame temperature and laminar flame velocity, which is described and codified in an application developed in MATLAB. Likewise, the simulation in the Ansys Chemkin software is carried out, and all the results are compared with those of other authors. The following was found: (1) The results indicate that CO₂ in the biogas reduces the reaction's burning velocity and flame temperature. (2) The influence of CO₂ on the combustion characteristics studied (flame speed and flame temperature) according to the results and previously carried out investigations are mainly thermal. (3) The combustion products generated in the biogas reaction decrease as the percentage of CO₂ increases, except for CO₂ for the cases of lean mixtures, while CO and CO₂ simultaneously for the cases of rich mixtures. (4) The numerical methodology coded in the MATLAB application agrees with the simulation results in Ansys Chemkin and investigations carried out by other authors for the ratios 0.6 - 1.1 up to the case of 20% CO₂. (5) The differences between the analyzed sources increased for higher ratios (1.3 to 1.7) and higher CO₂ percentages. (6) The MATLAB application allows the analysis of various fuels and the implementation of new ones.



PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DEL PERÚ
FACULTAD DE CIENCIAS E INGENIERÍA

TEMA DE TESIS PARA OPTAR EL TÍTULO DE INGENIERO MECÁNICO

TÍTULO : ANÁLISIS DE LA INFLUENCIA DEL DIÓXIDO DE CARBONO EN EL BIOGÁS DESARROLLANDO UNA METODOLOGÍA NUMÉRICA CODIFICADA EN UN APLICATIVO EN MATLAB

ÁREA : Energía

PROPUESTO POR : Ph. D. Freddy Jesús Rojas Chávez

ASESOR : Ph. D Freddy Jesús Rojas Chávez

TESISTA : Roberto Franco Cisneros Pazos

CÓDIGO : 20150535

FECHA : 30/08/2023

DESCRIPCIÓN Y OBJETIVOS:

En el presente trabajo de tesis se realiza el análisis de los efectos del dióxido de carbono en los productos de combustión, temperatura de llama y velocidad de llama laminar del biogás, simulado mediante la mezcla compuesta de gas Natural y CO₂, para ello, se desarrolla una metodología numérica para el cálculo y visualización de productos de combustión, la temperatura de llama y la velocidad de llama laminar, la cual es descrita y codificada en una aplicación desarrollada en MATLAB. Asimismo, la simulación en el software Ansys Chemkin es desarrollada, y se comparan los resultados obtenidos con los de otros autores.

Como objetivos específicos se plantean los siguientes: determinar la influencia de la cantidad de dióxido de carbono presente en el biogás en su velocidad de llama laminar; determinar la influencia de la cantidad de dióxido de carbono presente en el biogás en las fracciones molares de los productos de combustión; determinar la influencia de la cantidad de dióxido de carbono presente en el biogás en la temperatura de la llama; comparar los resultados correspondientes a la velocidad de llama laminar y fracciones molares obtenidas por medio del MATLAB, Ansys Chemkin y antecedentes; por último, determinar las diferencias absolutas y porcentuales de los resultados obtenidos mediante el aplicativo desarrollado en MATLAB y la simulación realizada en Ansys Chemkin.



**PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DEL PERÚ
FACULTAD DE CIENCIAS E INGENIERÍA**

**TEMA DE TESIS PARA OPTAR EL TÍTULO DE INGENIERO MECÁNICO
ANÁLISIS DE LA INFLUENCIA DEL DIÓXIDO DE CARBONO EN EL
BIOGAS DESARROLLANDO UNA METODOLOGÍA NUMÉRICA
CODIFICADA EN UN APLICATIVO EN MATLAB**

Introducción

Objetivos

1. Marco Teórico
2. Metodología numérica para la determinación de los productos de combustión, temperatura y velocidad de llama y desarrollo del aplicativo MATLAB
3. Cálculos y simulación numérica de la combustión del Biogás
4. Resultados y Análisis

Conclusiones

Bibliografía

Anexos

Freddy Jesús Rojas Chávez, Ph.D.

Asesor

ÍNDICE

RESUMEN	i
ABSTRACT.....	ii
ÍNDICE.....	v
ÍNDICE DE ANEXOS	vii
ÍNDICE DE FIGURAS.....	viii
ÍNDICE DE TABLAS	xii
LISTA DE ABREVIATURAS	xiv
INTRODUCCIÓN	1
OBJETIVOS	4
Objetivo General.....	4
Objetivos Específicos.....	4
Alcances.....	5
Justificación	5
Pregunta de investigación e hipótesis	5
Metodología.....	6
CAPÍTULO 1: MARCO TEÓRICO.....	7
1.1 Antecedentes	7
1.2 Combustión.....	23
1.3 Llama	25
1.3.1 Clasificación de las llamas.....	25
1.4 Velocidad de llama laminar	28
1.5 Temperaturas en la combustión	29
1.5.1 Temperatura de ignición.....	30
1.5.2 Temperatura de combustión.....	30
1.5.3 Temperatura de llama adiabática.....	30
1.6 Límites de inflamabilidad	30

1.7	Tasa de reacción.....	32
1.8	Ecuación de Arrhenius	33
1.9	Energía de activación	33
1.10	Métodos teóricos clásicos	34
1.10.1	La teoría de Mallard-Le Chateller.....	34
1.10.2	La teoría de Zeldovich, Frank-Kamenetskii, y Semenov.....	35
1.10.3	La teoría de Tanford y Pease.....	35
1.11	Métodos experimentales	36
1.11.1	Método del quemador Bunsen.....	36
1.11.2	Método de la bomba a volumen constante	38
1.11.3	Método de la bomba a presión constante (burbuja de jabón).....	39
1.11.4	Método del quemador de llama plana	39
1.12	Propiedades del gas natural, CO ₂ y biogás	40
CAPÍTULO 2: METODOLOGÍA NUMERICA PARA LA DETERMINACIÓN DE LOS PRODUCTOS DE COMBUSTIÓN, TEMPERATURA Y VELOCIDAD DE LLAMA Y DESARROLLO DEL APLICATIVO MATLAB		43
2.1	Descripción	43
2.2	Desarrollo del método.....	44
2.3	Primeras estimaciones.....	49
2.4	Determinación de la temperatura de llama adiabática	51
2.5	Determinación de la velocidad de llama mediante la teoría de Mallard-Le Chateller..	52
2.6	Desarrollo del aplicativo MATLAB	57
2.6.1	Archivo New_code.m	57
2.6.2	Archivo Fractions_Derivatives.m	58
2.6.3	Desarrollo de la aplicación en MATLAB en la interfaz MATLAB App Designer.....	59
CAPÍTULO 3: CÁLCULOS Y SIMULACIÓN NUMÉRICA DE LA COMBUSTIÓN DEL BIOGÁS.....		61
3.1	Cálculo numérico y ejemplificación de la metodología	61
3.2	Simulación numérica en Ansys Chemkin	77

CAPÍTULO 4: RESULTADOS Y ANÁLISIS	82
4.1 Productos de Combustión	82
4.2 Temperaturas de llama.....	91
4.2.1 Temperaturas de llama obtenidas mediante metodología numérica en aplicativo MATLAB	91
4.2.2 Temperaturas de llama obtenidas mediante simulación numérica en Ansys Chemkin	92
4.2.3 Comparativa de temperaturas de llama entre las fuentes de resultados.....	93
4.2.4 Comparativa de temperaturas de llama entre los resultados del presente trabajo y otros autores.....	96
4.3 Velocidad de llama	99
4.3.1 Velocidades de llama obtenidas mediante metodología numérica codificada en aplicativo desarrollado en MATLAB	99
4.3.2 Velocidades de llama laminar obtenidas mediante simulación en Ansys Chemkin	100
4.3.3 Comparativa de velocidades de llama entre la metodología empleada en el aplicativo desarrollado en MATLAB y simulación en Ansys Chemkin	101
4.3.4 Comparativa de velocidades de llama entre los resultados del presente trabajo y otros autores.....	104
CONCLUSIONES	108
BIBLIOGRAFÍA	110

ÍNDICE DE ANEXOS

ANEXO A. Constantes de equilibrio.....	113
ANEXO B. Derivadas parciales de las fracciones molares	114
ANEXO C. Elementos del sistema de ecuaciones no lineal de las fracciones molares.....	115
ANEXO D. Elementos del sistema de ecuaciones no lineal de las derivadas parciales	117
ANEXO E. Derivadas parciales de las fracciones molares restantes respecto de la temperatura, presión y ratio de equivalencia	120
ANEXO F. Valores de M, h y Cp para los productos de combustión	121
ANEXO G. Diagrama de flujo de la metodología para el cálculo de productos de combustión,	

temperatura de llama y velocidad de llama laminar	123
ANEXO H. Productos de combustión (fracciones molares) obtenidos empleando la metodología numérica codificada en el aplicativo desarrollado en MATLAB	126
ANEXO I. Productos de combustión (fracciones molares) obtenidos mediante simulación en Ansys Chemkin usando el mecanismo San Diego.....	135
ANEXO J. Productos de combustión (fracciones molares) obtenidos mediante simulación en Ansys Chemkin usando el mecanismo Gri-Mech 3.0.....	144

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1. Esquematización de metodología de investigación empleada en el presente trabajo.	6
Figura 2. (a) Velocidades de llama laminar determinadas experimental y numéricamente en función de la fracción molar del CO ₂ y ratio de equivalencia ϕ . (b) Variación de las velocidades de llama laminar determinadas numéricamente en función de la fracción molar del CO ₂ y ratio de equivalencia ϕ en vista 3D (Qin et al., 2001).....	8
Figura 3. Velocidades de llama laminar determinadas numéricamente en función de la fracción molar expresada en porcentaje de CO ₂ y ratio de equivalencia ϕ , usando SRM (Qin et al., 2001).	8
Figura 4. (a) Fracciones molares en función de la distancia desde el quemador para un valor de 0% de CO ₂ (Qin et al., 2001). (b) Fracciones molares en función de la distancia desde el quemador para un valor de 40% CO ₂ (Qin et al., 2001).	9
Figura 5. Fracción molar del NO _x determinado experimentalmente y numéricamente en función de la distancia desde el quemador para un valor de 40% CO ₂ y un ϕ de 0.7 (Qin et al., 2001).	9
.....	10
Figura 6. Fracciones molares del CH ₄ y H ₂ O en función de la distancia desde el quemador a distintos valores de % CO ₂ (Qin et al., 2001).	10
Figura 7. (a) Temperaturas de llama desde el plato superior del quemador a distintos valores de % CO ₂ . (b) Variación de la temperatura máxima de llama respecto a distintos valores de % CO ₂ , usando SRM, DRM y concepto de llama adiabática (Qin et al., 2001).	10
Figura 8. Efectos de los inhibidores en la velocidad de llama del biogás (Anggono et al., 2013).	11
Figura 9. Elementos principales del quemador de flujo de calor (Nonaka & Pereira, 2016). .	12
Figura 10. Efecto de la adición CO ₂ y el FCO ₂ en la velocidad de llama laminar para ϕ igual a 1 (Nonaka & Pereira, 2016).	13
Figura 11. Velocidades de llama laminar de mezclas CH ₄ /CO ₂ /Aire a 298K y 1atm (Nonaka & Pereira, 2016).	13

Figura 12. Composiciones estequiométricas para la mezcla metano/aire a diferentes niveles de dilución de CO ₂ (Mendieta Patiño et al., 2016).	15
Figura 13. (a) Evolutivo de las Fracciones másicas de los reactantes y productos de la mezcla metano-aire a 0.1MPa, 298K, ratio de equivalencia de 1 y 0% CO ₂ . (b) Evolutivo de las Fracciones másicas de los reactantes y productos de la mezcla metano-aire a 0.1MPa, 298K, ratio de equivalencia de 1 y 20% CO ₂ (Mendieta Patiño et al., 2016).	15
.....	16
Figura 14. Evolutivo de las Fracciones másicas de los reactantes y productos de la mezcla metano-aire a 0.1MPa, 298K, ratio de equivalencia 1 y 40% CO ₂ (Mendieta Patiño et al., 2016).	16
Figura 15. Efecto del CO ₂ en la velocidad de llama de la mezcla metano/aire a 0.1MPa y 298K (Mendieta Patiño et al., 2016).	16
Figura 16. (a) Efecto del CO ₂ en la máxima temperatura de llama de la mezcla metano/aire a 0.1MPa y 298K. (b) Efecto del CO ₂ en el perfil de temperatura de la mezcla metano/aire a 0.1MPa, 298K y ratio de equivalencia 1 (Mendieta Patiño et al., 2016).	17
Figura 17. Diagrama esquemático de la configuración experimental (Bai et al., 2019).....	18
Figura 18. Máximas velocidades de llama laminar de la mezcla metano-aire (0% de CO ₂) y biomasa-aire (20%, 40% y 60% de CO ₂) con diferentes concentraciones de CO ₂ y a 1atm de presión (Bai et al., 2019).....	18
Figura 19. Velocidad de llama laminar del metano-aire (0% de CO ₂) (a) y biomasa-aire (20%, 40% y 60% de CO ₂) (b, c, d) a distintos valores de ratio de equivalencia y diferentes temperaturas iniciales a una presión de 1atm (Bai et al., 2019).	19
Figura 20. Velocidades de llama laminar de las mezclas con CO ₂ y ratios de equivalencia (Xiang et al., 2019).	21
Figura 21. Efectos del CO ₂ en la velocidad de llama laminar (Xiang et al., 2019).	21
Figura 22. Temperatura de llama a diferentes contenidos de CO ₂ y ratios de equivalencia (Xiang et al., 2019).	21
Figura 23. Efectos del CO ₂ en la temperatura adiabática (Xiang et al., 2019).	22
Figura 24. (a) Perfil estructural de la llama con 0% de CO ₂ , $\phi=1.05$ y 1atm de presión. (b) Perfil estructural de la llama con 25% de CO ₂ , $\phi=1.05$ y 1atm de presión (Xiang et al., 2019).	22
Figura 25. Perfil estructural de la llama con 35% de CO ₂ , $\phi=1.05$ y 1atm de presión (Xiang et al., 2019).	22
Figura 26. (a) Efecto de la adición de CO ₂ en la generación del NO, $\phi=1.05$ y 1atm de presión. (b) Efecto de la adición de CO ₂ en la generación del NO ₂ , $\phi=1.05$ y 1atm de presión (Xiang et al., 2019).	23
Figura 27. Representación esquemática de las estructuras de la llama de difusión en función de la velocidad del flujo que muestra la transición de una llama laminar a una turbulenta. ...	26
Figura 28. Perfiles de concentración y temperatura asociados con una llama adiabática unidimensional, premezclada (Griffiths & Barnard, 1995)	27
Figura 29. Velocidades de llama y riqueza de mezcla de algunas mezclas (Griffiths & Barnard, 1995).	29

Figura 30. Límites de inflamabilidad de mezclas $C_3H_8+O_2$ en presencia de nitrógeno o dióxido de carbono añadido (Griffiths & Barnard, 1995).....	31
Figura 31. (a) Variación de la energía a lo largo de una reacción exotérmica. (b) Variación de la energía a lo largo de una reacción endotérmica (Kuo, 2005).	34
Figura 32. Diagrama esquemático típico de la variación de temperatura a través de una llama laminar (Glassman & Yetter, 2008).....	35
Figura 33. Representación del quemador desarrollado por Bunsen (Kuo, 2005).....	36
Figura 34. Esquema del flujo cerca de la boca del quemador (Kuo, 2005).....	37
Figura 35. Configuración experimental del método de la bomba a presión constante (Kuo, 2005).	39
Figura 36. Configuración del quemador de llama plana (Kuo, 2005).	40
Figura 37. Ventana de aplicativo e identificación de herramientas y funciones (R. F. Cisneros & Rojas, 2023).	60
Figura 38. Diagrama de flujo en software Ansys Chemkin.....	77
Figura 39. Ventana de pre-procesado de software Ansys Chemkin.	77
Figura 40. Ventana de parámetros de llama laminar de software Ansys Chemkin.	78
Figura 41. Configuración de mezcla de combustible para simulación en software Ansys Chemkin.....	78
.....	79
Figura 42. Configuración del ratio como parámetro de estudio en software Ansys Chemkin.	79
Figura 43. Configuración del oxidante en software Ansys Chemkin.	79
Figura 44. Configuración de los productos completos de combustión en software Ansys Chemkin.....	79
Figura 45. Configuración del solver en software Ansys Chemkin.	80
Figura 46. Ventana de ejecución de cálculos para cada condición en software Ansys Chemkin.....	80
Figura 47. Ventana de post-procesado en software Ansys Chemkin.....	81
Figura 48. Productos de Combustión ($X_1 - X_6$) a distintos porcentajes de CO_2 para una ratio equivalente (ϕ) de 0.9 (mezcla pobre).	83
Figura 49. Productos de Combustión ($X_7 - X_{12}$) a distintos porcentajes de CO_2 para una ratio equivalente (ϕ) de 0.9 (mezcla pobre).	84
Figura 50. Productos de Combustión ($X_1 - X_6$) a distintos porcentajes de CO_2 para una ratio equivalente (ϕ) de 1 (mezcla estequiométrica)	85
Figura 51. Productos de Combustión ($X_7 - X_{12}$) a distintos porcentajes de CO_2 para una ratio equivalente (ϕ) de 1 (mezcla estequiométrica).	86
Figura 52. Productos de Combustión ($X_1 - X_6$) a distintos porcentajes de CO_2 para una ratio equivalente (ϕ) de 1.1 (mezcla rica).	87
Figura 53. Productos de Combustión ($X_7 - X_{12}$) a distintos porcentajes de CO_2 para una ratio equivalente (ϕ) de 1.1 (mezcla rica).	88

Figura 54. Variación de la producción de NO por gramo de CH ₄ consumido respecto de la tasa de combustión en masa de CH ₄ (Qin et al., 2001).....	90
Figura 55. Temperaturas de llama determinadas por el aplicativo desarrollado en MATLAB a distintos porcentajes de CO ₂	91
Figura 56. Temperaturas de llama determinadas mediante simulación en Ansys Chemkin empleando el mecanismo San Diego.	92
Figura 57. Temperaturas de llama determinadas mediante simulación en Ansys Chemkin empleando el mecanismo de Gri-Mech 3.0.	93
Figura 58. Comparativa de resultados de temperaturas de llama laminar para todos los casos de %CO ₂ considerados.....	94
Figura 59. Comparativa de resultados de temperatura de llama laminar a distintos porcentajes de CO ₂ entre el presente trabajo y otros autores.	98
Figura 60. Velocidades de llama laminar determinadas por el aplicativo desarrollado en MATLAB a distintos porcentajes de CO ₂	99
Figura 61. Velocidades de llama laminar determinadas mediante simulación en Ansys Chemkin empleando el mecanismo San Diego.	100
Figura 62. Velocidades de llama laminar determinadas mediante simulación en Ansys Chemkin empleando el mecanismo de Gri-Mech 3.0.....	101
Figura 63. Comparativa de resultados de velocidades de llama laminar para todos los casos de %CO ₂ considerados.	102
Figura 64. Comparativa de resultados de velocidad de llama laminar a distintos porcentajes de CO ₂ entre el presente trabajo y otros autores.	106
Figura F1. Masa molar, entalpía específica y Calor a presión constante para cada uno de los productos de combustión codificados en FORTRAN (Olikara & Borman, 1975).....	122
Figura G1. Flujo de la metodología numérica implementada en el aplicativo desarrollado en MATLAB.....	125
Figura H1. Productos de combustión (X ₁ – X ₃) determinados por el aplicativo desarrollado en MATLAB para mezclas de gas natural con 0%, 10%, 20%, 30%, 40% y 50% de CO ₂	131
Figura H2. Productos de combustión (X ₄ – X ₆) determinados por el aplicativo desarrollado en MATLAB para mezclas de gas natural con 0%, 10%, 20%, 30%, 40% y 50% de CO ₂	132
Figura H3. Productos de combustión (X ₇ – X ₉) determinados por el aplicativo desarrollado en MATLAB para mezclas de gas natural con 0%, 10%, 20%, 30%, 40% y 50% de CO ₂	133
Figura H4. Productos de combustión (X ₁₀ – X ₁₂) determinados por el aplicativo desarrollado en MATLAB para mezclas de gas natural con 0%, 10%, 20%, 30%, 40% y 50% de CO ₂ . .	134
Figura I1. Productos de combustión (X ₁ – X ₃) determinados por el mecanismo San Diego para mezclas de gas natural con 0%, 10%, 20%, 30%, 40% y 50% de CO ₂	140
Figura I2. Productos de combustión (X ₄ – X ₆) determinados por el mecanismo San Diego para mezclas de gas natural con 0%, 10%, 20%, 30%, 40% y 50% de CO ₂	141
Figura I3. Productos de combustión (X ₇ – X ₉) determinados por el mecanismo San Diego para mezclas de gas natural con 0%, 10%, 20%, 30%, 40% y 50% de CO ₂	142

Figura I4. Productos de combustión ($X_{10} - X_{12}$) determinados por el mecanismo San Diego para mezclas de gas natural con 0%, 10%, 20%, 30%, 40% y 50% de CO_2 .	143
Figura J1. Productos de combustión ($X_1 - X_3$) determinados por el mecanismo Gri-Mech 3.0 para mezclas de gas natural con 0%, 10%, 20%, 30%, 40% y 50% de CO_2 .	149
Figura J2. Productos de combustión ($X_4 - X_6$) determinados por el mecanismo Gri-Mech 3.0 para mezclas de gas natural con 0%, 10%, 20%, 30%, 40% y 50% de CO_2 .	150
Figura J3. Productos de combustión ($X_7 - X_9$) determinados por el mecanismo Gri-Mech 3.0 para mezclas de gas natural con 0%, 10%, 20%, 30%, 40% y 50% de CO_2 .	151
Figura J4. Productos de combustión ($X_{10} - X_{12}$) determinados por el mecanismo Gri-Mech 3.0 para mezclas de gas natural con 0%, 10%, 20%, 30%, 40% y 50% de CO_2 .	152

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1: Límites de inflamabilidad de algunos combustibles con aire.	31
Tabla 2: Composición química del gas natural de Camisea	41
Tabla 3: Características del gas natural	41
Tabla 4: Propiedades del dióxido de carbono (CO_2)	41
Tabla 5: Propiedades del biogás	42
Tabla 6: Herramientas disponibles en la aplicación desarrollada en MATLAB.	59
Tabla 7: Fracciones volumétricas en el biogás	61
Tabla 8: Cálculo de los subíndices del combustible $C_n + H_m + O_l + N_k$	61
Tabla 9: Cálculo de AVM y C_p del biogás con 10% de CO_2 .	61
Tabla 10: Cálculo de H_f del biogás con 10% de CO_2 .	62
Tabla 11: Cálculo de AVM y H_{298} del Aire	62
Tabla 12: Errores absoluto y relativo de las temperaturas de llama calculadas por el aplicativo desarrollado en Matlab respecto de las simulaciones en Ansys Chemkin.	95
Tabla 13: Especificaciones de investigaciones a comparar para análisis de temperatura de llama.	97
Tabla 14: Errores absoluto y relativo de las velocidades de llama laminar calculadas por el aplicativo desarrollado en Matlab respecto de las simulaciones en Ansys Chemkin.	103
Tabla 15: Especificaciones de investigaciones a comparar para análisis de velocidad de llama laminar.	105
Tabla A1: Constantes para el equilibrio termodinámico	113
Tabla H1: Fracciones molares de X_1H (hidrógeno) empleando el aplicativo.	126
Tabla H2: Fracciones molares de X_2O (oxígeno) empleando el aplicativo.	126
Tabla H3: Fracciones molares de X_3N (nitrógeno) empleando el aplicativo.	127
Tabla H4: Fracciones molares de X_4H_2 (hidrógeno) empleando el aplicativo.	127
Tabla H5: Fracciones molares de X_5OH (hidróxido) empleando el aplicativo.	127

Tabla H6: Fracciones molares de X_6CO (monóxido de carbono) empleando el aplicativo. .128	128
Tabla H7: Fracciones molares de X_7NO (óxido de nitrógeno) empleando el aplicativo.....128	128
Tabla H8: Fracciones molares de X_8O_2 (oxígeno) empleando el aplicativo.129	129
Tabla H9: Fracciones molares de X_9H_2O (óxido de dihidrógeno) empleando el aplicativo. 129	129
Tabla H10: Fracciones molares de $X_{10}CO_2$ (dióxido de carbono) empleando el aplicativo. 129	129
Tabla H11: Fracciones molares de $X_{11}N_2$ (nitrógeno) empleando el aplicativo.....130	130
Tabla H12: Fracciones molares de $X_{12}AR$ (argón) empleando el aplicativo.....130	130
Tabla I1: Fracciones molares de X_1H (hidrógeno) empleando el mecanismo de San Diego.135	135
Tabla I2: Fracciones molares de X_2O (oxígeno) empleando el mecanismo de San Diego. ..135	135
Tabla I3: Fracciones molares de X_3N (nitrógeno) empleando el mecanismo de San Diego. 136	136
Tabla I4: Fracciones molares de X_4H_2 (hidrógeno) empleando el mecanismo de San Diego.136	136
Tabla I5: Fracciones molares de X_5OH (hidróxido) empleando el mecanismo de San Diego.136	136
Tabla I6: Fracciones molares de X_6CO (monóxido de carbono) empleando el mecanismo de San Diego.....137	137
Tabla I7: Fracciones molares de X_7NO (óxido de nitrógeno) empleando el mecanismo de San Diego.....137	137
Tabla I8: Fracciones molares de X_8O_2 (oxígeno) empleando el mecanismo de San Diego. .138	138
Tabla I9: Fracciones molares de X_9H_2O (óxido de dihidrógeno) empleando el mecanismo de San Diego.....138	138
Tabla I10: Fracciones molares de $X_{10}CO_2$ (dióxido de carbono) empleando el mecanismo de San Diego.....138	138
Tabla I11: Fracciones molares de $X_{11}N_2$ (nitrógeno) empleando el mecanismo de San Diego.139	139
Tabla I12: Fracciones molares de $X_{12}AR$ (argón) empleando el mecanismo de San Diego. 139	139
Tabla J1: Fracciones molares de X_1H (hidrógeno) empleando el mecanismo Gri-Mech 3.0.144	144
Tabla J2: Fracciones molares de X_2O (oxígeno) empleando el mecanismo Gri-Mech 3.0...144	144
Tabla J3: Fracciones molares de X_3N (nitrógeno) empleando el mecanismo Gri-Mech 3.0.145	145
Tabla J4: Fracciones molares de X_4H_2 (hidrógeno) empleando el mecanismo Gri-Mech 3.0.145	145
Tabla J5: Fracciones molares de X_5OH (hidróxido) empleando el mecanismo Gri-Mech 3.0.145	145
Tabla J6: Fracciones molares de X_6CO (monóxido de carbono) empleando el mecanismo Gri-Mech 3.0.146	146
Tabla J7: Fracciones molares de X_7NO (óxido de nitrógeno) empleando el mecanismo Gri-Mech 3.0.146	146

Tabla J8: Fracciones molares de X_8O_2 (oxígeno) empleando el mecanismo Gri-Mech 3.0..	147
Tabla J9: Fracciones molares de X_9H_2O (óxido de hidrógeno) empleando el mecanismo Gri-Mech 3.0.....	147
Tabla J10: Fracciones molares de $X_{10}CO_2$ (dióxido de carbono) empleando el mecanismo Gri-Mech 3.0.....	147
Tabla J11: Fracciones molares de $X_{11}N_2$ (nitrógeno) empleando el mecanismo Gri-Mech 3.0.....	148
Tabla J12: Fracciones molares de $X_{12}AR$ (argón) empleando el mecanismo Gri-Mech 3.0.	148

LISTA DE ABREVIATURAS

Símbolo	Descripción
ϕ :	Ratio de equivalencia
n:	Coefficiente del carbono (C) del combustible
m:	Coefficiente del hidrógeno (H) del combustible
l:	Coefficiente del oxígeno (O) del combustible
k:	Coefficiente del nitrógeno (N) del combustible
X_1 :	Fracción molar del hidrógeno (H) en los productos
X_2 :	Fracción molar del oxígeno (O) en los productos
X_3 :	Fracción molar del nitrógeno (N) en los productos
X_4 :	Fracción molar del hidrógeno (H_2) en los productos
X_5 :	Fracción molar del hidróxido (OH) en los productos
X_6 :	Fracción molar del monóxido de carbono (CO) en los productos
X_7 :	Fracción molar del óxido nitroso (NO) en los productos
X_8 :	Fracción molar del oxígeno (O_2) en los productos
X_9 :	Fracción molar del óxido de hidrógeno (H_2O) en los productos
X_{10} :	Fracción molar del dióxido de carbono (CO_2) en los productos
X_{11} :	Fracción molar del nitrógeno (N_2) en los productos
X_{12} :	Fracción molar del Argón (Ar) en los productos
X_{13} :	Número de moles de combustible que produce 1 mol de productos
K_i :	Constante a presión parcial de una reacción química
p:	Presión
f_j :	Sistema de ecuaciones con 4 variables (X_4, X_6, X_8 and X_{11})
X_i^* :	Valor real de la solución fracción molar real en la serie de Taylor
$X_i^{(1)}$:	Valor aproximado de la fracción molar a la real usado en la serie de Taylor
ΔX_i :	Diferencia entre la fracción molar real y la aproximada
df_j/dX_i :	Derivada del sistema de ecuaciones respecto de las fracciones molares (X_4, X_6, X_8 y X_{11})
$X_i^{(2)}$:	Fracción molar Mejorada después de la primera iteración

h_r :	Entalpía de los reactantes
h :	Entalpía de los productos
p_o :	Presión inicial
T_o :	Temperatura inicial
T :	Temperatura de llama
T_n :	Primera temperatura asumida ($n=1$) o temperatura en una iteración n ($n>1$)
T_{n+1} :	Temperatura mejorada después de una iteración empleando el método de Newton Raphson
$(dh/dT)_n$:	Derivada de la entalpía respecto de la temperatura en una iteración n
M :	Masa molar de la mezcla
dh_i/dT :	Calor específico a presión constante de un determinado elemento.
C_{p_i} :	Calor específico a presión constante de un determinado elemento.
dX_i/dT :	Derivada parcial de una fracción molar respecto de la temperatura.
dM/dT :	Derivada parcial de la masa molar de la mezcla respecto de la temperatura
S_L :	Velocidad de llama laminar.
E_a :	Energía de Activación.
R_u :	Constante de gas universal.

Fuente: Determination of 12 Combustion Products, Flame Temperature and Laminar Burning Velocity of Saudi LPG Using Numerical Methods Coded in a MATLAB Application. Energies (R. F. Cisneros & Rojas, 2023)

INTRODUCCIÓN

En los últimos años, el planeta está pasando por un cambio sustancial y tangible en cuanto al uso de energías se refiere, desde empezar a tener una producción mucho mayor de automóviles eléctricos, hasta el empleo de células solares de bajo costo de producción y bajo riesgo de toxicidad. Sin embargo, el uso de combustibles fósiles sigue dominando en muchas ramas de la industria y cuyo consumo pese a la tendencia actual por lo eléctrico, se ha ido incrementado en la última década (IEA, 2019).

De acuerdo a la Red Iberoamericana de Aprovechamiento de Residuos orgánicos en producción de energía (2014), uno de los tipos de bioenergía más usado y rentable es el biogás, el cual es un tipo de combustible que se obtiene a partir de un proceso biológico denominado digestión anaerobia, donde materiales orgánicos se degradan a través de un conjunto de microorganismos que se desarrollan en un ambiente con ausencia de oxígeno y una parte se convierte principalmente en gas metano CH_4 y otra en dióxido de carbono CO_2 (Barón Moreno & Contreras García, 2021). El biogás será el combustible a analizar en este trabajo, pero haciendo uso de una mezcla similar compuesta de gas Natural y CO_2 .

Para el análisis científico y tecnológico del proceso de combustión de distintas mezclas, se emplean los métodos numéricos, los cuales actualmente constituyen una herramienta valiosa (Delgado, 2013). El desarrollo de las computadoras ha permitido su aplicación directa para la resolución de problemas de gran complejidad, desde la simulación de un fenómeno o dispositivo, hasta el estudio de sistemas más complejos (Delgado, 2013). Gracias a estas evoluciones constantes, su funcionalidad permitirá el estudio del proceso de combustión, y sus propiedades de interés, como lo es, la velocidad de llama laminar.

La velocidad de llama laminar y su estudio es de vital importancia puesto que este concepto abarca información fundamental sobre la difusividad, la reactividad y la exotermidad

de una determinada mezcla y, por lo tanto, se utiliza comúnmente para caracterizar las llamas (Khudhair & Shahad, 2017). Los estudios relacionados a la determinación de la velocidad de la llama datan desde el año 1855, cuando Bunsen diseñó un quemador especial para uso en laboratorio mediante el cual logró medir velocidades de llama laminar. Más adelante, en 1883, Mallard-Le Chateller desarrollaron el primer método netamente teórico basado en conceptos térmicos cuya característica era asumir una temperatura de ignición (Glassman & Yetter, 2008). Luego, en 1949, Powling desarrolló un quemador de llama plana logrando una mayor precisión, pero únicamente para mediciones de velocidad de llama menores a 20 cm/s. Posteriormente, en 1951 Smenov logró una de las mejoras más destacables en las teorías térmicas al incluir que la energía de difusión de las moléculas es igual a la del calor (Glassman & Yetter, 2008). En el mismo año, Dugger emplearía esta teoría para él estudió de los efectos de la temperatura inicial en las velocidades de llama de mezclas de Metano-Aire, Propano-Aire y Etileno-Aire (Dugger, 1951). Luego, en el año 1954, Botha y Spalding lograrían ampliar el método de llama plana desarrollado por Powling mediante el uso de un disco poroso refrigerado por agua, logrando medir velocidades de la llama de mayor magnitud (Botha & Spalding, 1954). En investigaciones más recientes, se emplearon distintos programas y simuladores computacionales, en donde se vio involucrado la aplicación de métodos numéricos con la finalidad de realizar una comparación de la precisión del tipo de método empleado.

En el ámbito del uso de softwares relacionados a la simulación y análisis de reacciones químicas, los más populares son CANTERA, NASA LEWIS y Ansys Chemkin. Por un lado, CANTERA tiene como principal cualidad el ser un programa de libre acceso y cuenta con la posibilidad de visualizar y editar toda la secuencia algorítmica que se requiere para resolver un determinado problema. Por otro lado, NASA LEWIS es un programa que requiere de licencia para su uso y cuenta con resoluciones (procedimientos/secuencias de cálculo) ya establecidas para determinadas variables de interés. Finalmente, Ansys Chemkin es otro programa que

requiere de licencia para su uso, pero cuenta con una versión estudiantil que será útil para realizar las simulaciones que se emplearán como parte de la validación del presente trabajo.

Por otro lado, en el campo de los lenguajes de programación, existen distintas alternativas, como C++, Python, MATLAB, que permiten la codificación y generación de procedimientos numéricos para distintas aplicaciones. Debido a que se realizará la resolución matricial de distintos grupos de elementos (productos de combustión, derivadas parciales, resolución de múltiples ecuaciones), y se emplearán métodos numéricos, el uso del lenguaje MATLAB ofrece mayores ventajas para el desarrollo del presente trabajo. Además, mediante el uso del MATLAB App Designer, se desarrollará una aplicación donde la metodología numérica estará incorporada, y cuyos resultados serán validados con los obtenidos de la simulación en Ansys Chemkin y trabajos de otros autores.

En el primer punto, se plantean los objetivos, alcance, justificación y metodología. Más adelante, en el capítulo correspondiente al Marco Teórico, se explica toda la teoría y nomenclatura necesaria para el entendimiento de los principales parámetros que influyen en el proceso de combustión. Posterior a eso, se desarrolla la metodología para el cálculo de los productos de combustión, la temperatura de llama, y la velocidad de llama laminar del biogás empleando métodos numéricos y la teoría de Mallard-Le Chateller junto con un ejemplo de cálculo. Asimismo, se hace mención de las partes que involucra el desarrollo del aplicativo. Luego, con el objetivo de comparar y validar los resultados de la metodología numérica obtenidas por medio de la aplicación desarrollada, se simula la combustión de la mezcla en Ansys Chemkin. Posteriormente, se realiza el análisis y comparación de los resultados obtenidos mediante la metodología numérica codificada en la aplicación desarrollada en MATLAB, la simulación en Ansys Chemkin y resultados experimentales de otros autores. Finalmente, se desarrollan las conclusiones sobre lo realizado y los hallazgos encontrados del presente trabajo.

OBJETIVOS

Objetivo General

Determinar la influencia del dióxido de carbono en las características de la combustión del biogás (productos de combustión, temperatura de llama y velocidad de llama) mediante el desarrollo de una metodología numérica codificada en un aplicativo desarrollado en MATLAB.

Objetivos Específicos

- Realizar la revisión y análisis de la bibliografía relacionada a productos de combustión, temperatura de llama y velocidad de llama del biogás.
- Desarrollar la metodología numérica aplicando métodos numéricos (Newton Raphson, serie de Taylor, método de eliminación Gaussiana) para el cálculo de los productos de combustión, la temperatura de llama y velocidad de llama laminar para su codificación en un aplicativo desarrollado en MATLAB.
- Determinar la influencia del porcentaje de dióxido de carbono presente en el biogás en los productos de combustión, la temperatura de llama y velocidad de llama laminar usando los resultados obtenidos de la metodología numérica codificada en un aplicativo desarrollado en MATLAB y la simulación en Ansys Chemkin.
- Realizar el análisis comparativo de los resultados correspondientes a los productos de combustión, temperatura de llama y velocidad de llama laminar obtenidas por medio del aplicativo desarrollado en MATLAB, simulación en Ansys Chemkin e investigaciones de otros autores, determinando los valores de las diferencias en magnitud y porcentuales de los resultados entre las distintas fuentes.

Alcance

Para el análisis de la influencia del porcentaje de dióxido de carbono en la combustión del biogás, se realizará el estudio empleando una mezcla de gas natural y CO_2 donde se determinarán las fracciones molares de los productos de combustión, la temperatura de llama y la velocidad de llama laminar, desarrollando una metodología numérica codificada en un aplicativo desarrollado en MATLAB, simulación en el software Ansys Chemkin e investigaciones previamente realizadas por otros autores, para mezclas de gas natural con 0%, 10%, 20%, 30%, 40% y 50% de CO_2 o biogás con estos porcentajes respectivamente.

Justificación

Debido a la necesidad que se presenta en la actualidad sobre combustibles y fuentes de energía alternativas, se desarrolla un estudio específico de la mezcla de biogás a distintos niveles de CO_2 , con lo cual se pretende dar un aporte a la comunidad científica que está involucrada en el estudio y caracterización de este tipo de combustibles. Asimismo, presentar un aplicativo desarrollado en MATLAB como aporte a la comunidad, siendo una herramienta útil para la visualización y análisis de los resultados del proceso de combustión de diversos combustibles.

Pregunta de investigación e hipótesis

La principal pregunta a resolver es ¿Cómo afecta el porcentaje de CO_2 presente en la composición del biogás a su combustión? Como preguntas secundarias: ¿El porcentaje de CO_2 aumenta o disminuye la velocidad de llama laminar?, ¿el porcentaje de CO_2 incrementa o disminuye la temperatura de llama?, por último, ¿cómo varían las fracciones molares a medida que se incrementa el porcentaje de CO_2 ? Como hipótesis se plantea que el CO_2 disminuye la temperatura de llama y por ende la velocidad de llama laminar.

Metodología

Como principal herramienta para el desarrollo de todos los pasos, se empleó una computadora con un procesador de la especificación AMD Ryzen 7 5700G with Radeon Graphics 3.80 GHz, con memoria RAM de 32 GB y sistema operativo Windows 11 Enterprise. En primer lugar, se realizó la búsqueda de la bibliografía correspondiente a cálculos y ensayos previos, teniendo como principales fuentes las publicadas en las plataformas del SAE, ScienceDirect y ASME. Luego, se desarrolla la metodología numérica para el cálculo de los productos de combustión, la temperatura de llama y la velocidad de llama laminar haciendo uso de métodos numéricos (Newton Raphson, serie de Taylor, método de eliminación Gaussiana), asimismo, su codificación en el software MATLAB versión R2021b y el posterior desarrollo de una aplicación en el MATLAB App Designer. Más adelante, se simulará en el software Ansys Chemkin versión R2 2022 la combustión del biogás cuyos resultados se incluirán en el aplicativo desarrollado en MATLAB. Después, los resultados de la simulación se emplearán junto con el de otros autores para realizar el análisis comparativo respecto a los obtenidos por medio del aplicativo desarrollado, determinando las diferencias en magnitudes y porcentuales. Finalmente, se desarrollarán las conclusiones de esta investigación. La metodología descrita se puede visualizar de manera esquemática en la Figura 1.



Figura 1. Esquematización de metodología de investigación empleada en el presente trabajo.

CAPÍTULO 1:

MARCO TEÓRICO

1.1 Antecedentes

En el año 2000, W. Qin, T.T. Tsotsis del departamento de Ingeniería Química de la University of Southern California, y F.N. Egolfopoulos del departamento de Ingeniería Mecánica y Aeroespacial de la University of Southern California, determinaron de manera experimental y numérica la velocidad de llama laminar, la temperatura y los perfiles de los productos de combustión para el biogás (LFG por sus siglas en inglés), con el objetivo de desarrollar y dar a conocer más información sobre sus propiedades como combustible (Qin et al., 2001). El biogás empleado era resultado de la descomposición biológica de los desechos municipales y su composición consistía principalmente de cantidades iguales de CO_2 y CH_4 , como también de pequeños porcentajes de otra variedad de compuestos orgánicos (Qin et al., 2001). Para la metodología experimental, se empleó una configuración de flujo de estancamiento, que permite simular los experimentos utilizando la descripción completa de los mecanismos cinéticos y las propiedades de transporte molecular detallados en el GRI-Mech 2.11. Para la metodología numérica, se empleó el código Premix desarrollado en Fortran. Asimismo, se utilizaron dos modelos de transferencia de calor por radiación: modelo simple de radiación (SRM por sus siglas en inglés), y el modelo de radiación detallado (DRM por sus siglas en inglés), el cual incluye la subrutina RADCAL que sirve para determinar los productos de combustión. Los modelos ayudaron a determinar los valores de velocidad de llama laminar y temperatura de llama máxima (Qin et al., 2001). Los resultados de velocidad de llama laminar obtenidos experimentalmente y mediante la simulación numérica se presentan en la Figura 2a. Adicionalmente, una gráfica en 3D que se presenta en la Figura 2b, muestra la variación de la velocidad de llama laminar respecto del porcentaje de CO_2 de los resultados numéricos.

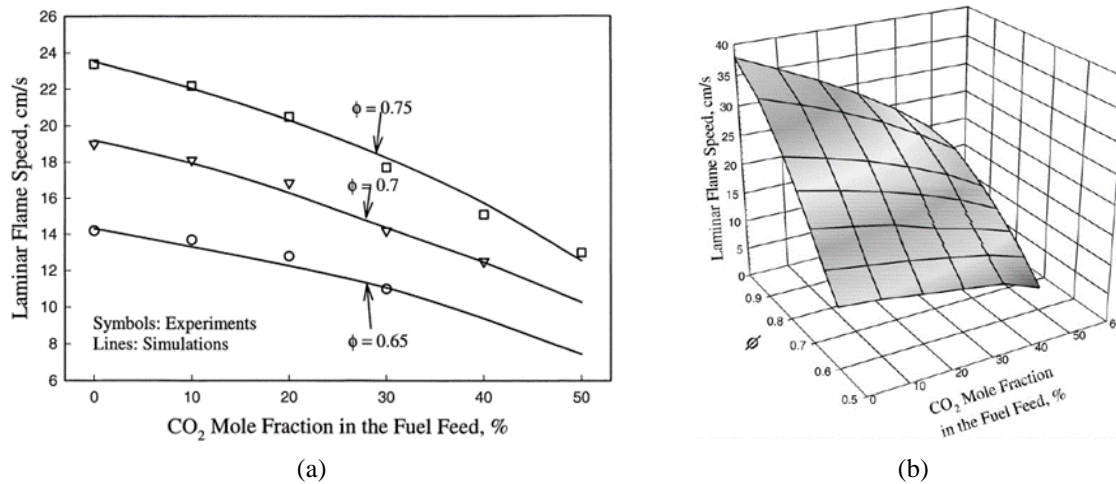


Figura 2. (a) Velocidades de llama laminar determinadas experimental y numéricamente en función de la fracción molar del CO₂ y ratio de equivalencia ϕ . (b) Variación de las velocidades de llama laminar determinadas numéricamente en función de la fracción molar del CO₂ y ratio de equivalencia ϕ en vista 3D (Qin et al., 2001).

Haciendo uso del SRM, lograron determinar los valores de velocidad de llama laminar a distintas fracciones molares expresadas en porcentaje de CO₂ y ratio, los cuales se presentan en la Figura 3.

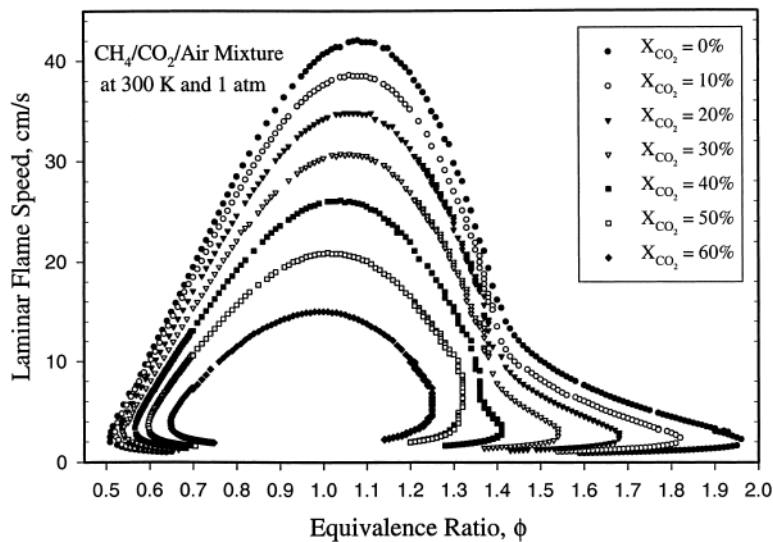


Figura 3. Velocidades de llama laminar determinadas numéricamente en función de la fracción molar expresada en porcentaje de CO₂ y ratio de equivalencia ϕ , usando SRM (Qin et al., 2001).

Para la determinación de los productos de combustión, se tomó como variable adicional la distancia desde el ingreso hacia la salida del quemador. Los resultados que obtuvieron para las fracciones molares del H₂, CH₄, H₂O, O₂ y CO₂ con ratio de equivalencia de 0.8 se muestran en la Figura 4.

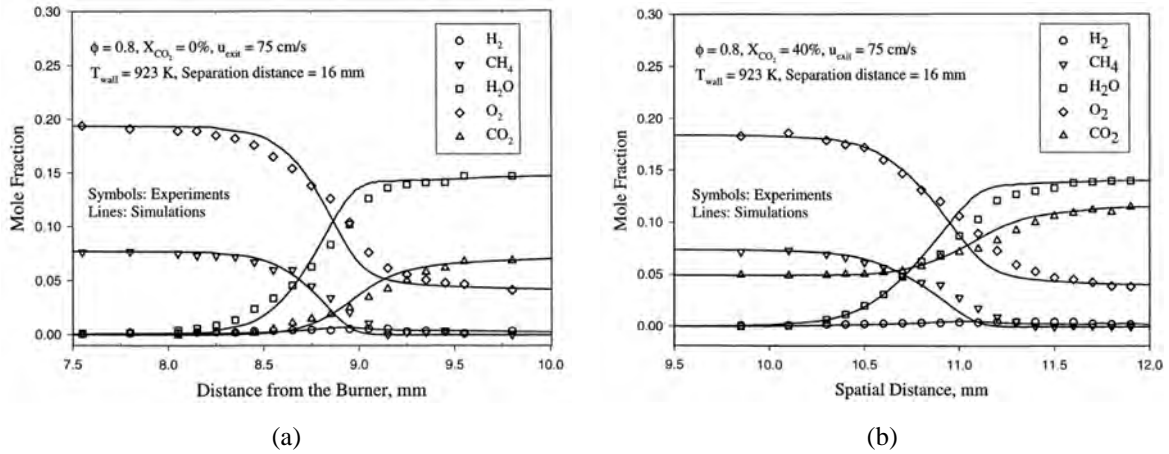


Figura 4. (a) Fracciones molares en función de la distancia desde el quemador para un valor de 0% de CO₂ (Qin et al., 2001). (b) Fracciones molares en función de la distancia desde el quemador para un valor de 40% CO₂ (Qin et al., 2001).

Para el caso de la fracción molar del NO_x a una ratio de equivalencia de 0.7 se presenta en la Figura 5. Asimismo, realizaron la gráfica de los valores de las fracciones molares del CH₄ y H₂O para ratio de equivalencia de 0.8 y distintos valores de fracción molar expresada en porcentaje de CO₂ en la mezcla combustible en función de la distancia al quemador. Estos resultados se muestran en la Figura 6.

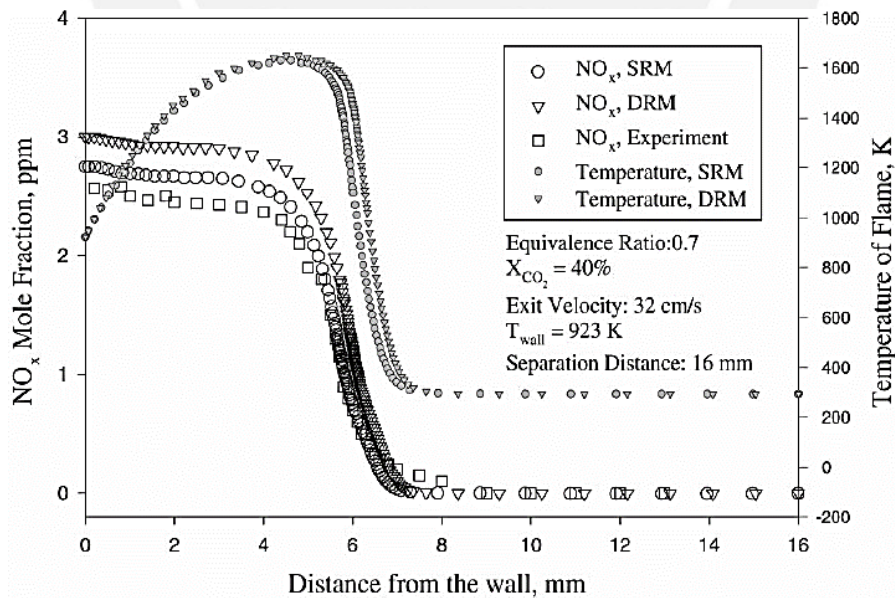


Figura 5. Fracción molar del NO_x determinado experimentalmente y numéricamente en función de la distancia desde el quemador para un valor de 40% CO₂ y un ϕ de 0.7 (Qin et al., 2001).

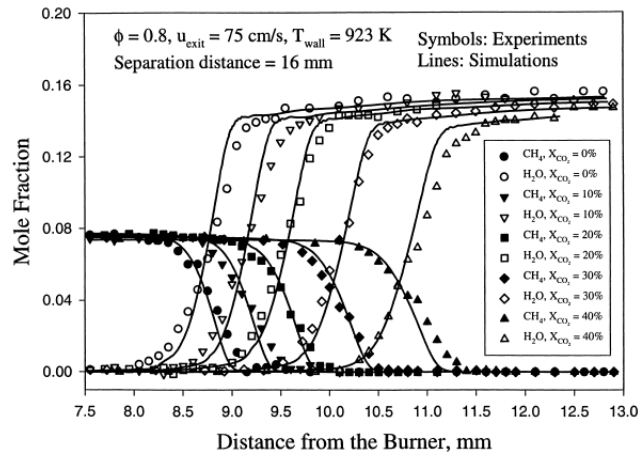


Figura 6. Fracciones molares del CH₄ y H₂O en función de la distancia desde el quemador a distintos valores de % CO₂ (Qin et al., 2001).

Por otro lado, los resultados obtenidos para la temperatura de llama se pueden visualizar en la Figura 7.

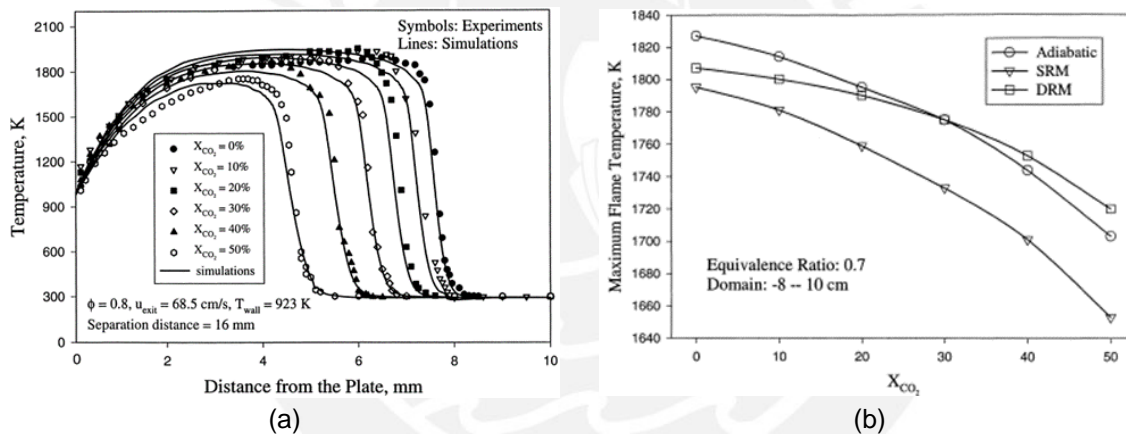


Figura 7. (a) Temperaturas de llama desde el plato superior del quemador a distintos valores de % CO₂. (b) Variación de la temperatura máxima de llama respecto a distintos valores de % CO₂, usando SRM, DRM y concepto de llama adiabática (Qin et al., 2001).

Las conclusiones determinadas por los autores fueron las siguientes: Las características de la combustión del biogás estudiado fueron experimentalmente cuantificadas en la configuración de flujo por estancamiento para condiciones de relevancia en combustiones prácticas. Además, el efecto de la adición de CO₂ en el CH₄ fue numéricamente analizado. Los resultados experimentales indicaron que la presencia de CO₂ en el flujo de alimentación resultó en una reducción substancial en las velocidades de llama laminar en comparación del caso de CH₄ puro (Qin et al., 2001). Asimismo, el efecto del CO₂ en la combustión fue principalmente

de naturaleza térmica, ya que la mezcla fue diluida por el CO_2 inerte que también es un eficiente disipador de calor (Qin et al., 2001). El análisis numérico de la estructura de la llama y sus reacciones revelaron que el CO_2 solo participa en la reacción con el $\text{CH}_2(\text{S})$ que, sin embargo, tiene un efecto menor en la dinámica y estructura de la llama (Qin et al., 2001). Asimismo, las simulaciones mostraron lo siguiente: la adición de CO_2 incrementa las emisiones de NO por gramo de CH_4 consumido; genera que la ratio de equivalencia requerida para alcanzar el mismo consumo de CH_4 se incremente, ocasionando que el NO empiece a producirse de manera inmediata y resultando en mayores concentraciones de este producto (Qin et al., 2001).

Más adelante, en el año 2013, Willyanto Anggono et al., desarrollaron una investigación con el objetivo de determinar los efectos de los inhibidores en la velocidad de llama laminar y los límites de flamabilidad del biogás (Anggono et al., 2013). El biogás que emplearon estaba compuesto de 50% a 70% de CH_4 y 30% a 50% de inhibidores (CO_2 y N_2), asimismo, contenía pequeños porcentajes de otros gases. Para la experimentación emplearon una cámara de combustión de alta presión, en donde realizaron las mediciones de la velocidad de llama laminar (Anggono et al., 2013). Los resultados obtenidos para los ensayos correspondientes al biogás con y sin inhibidores, a presión atmosférica y presión reducida, y a diferentes ratios de equivalencia se muestra en la Figura 8.

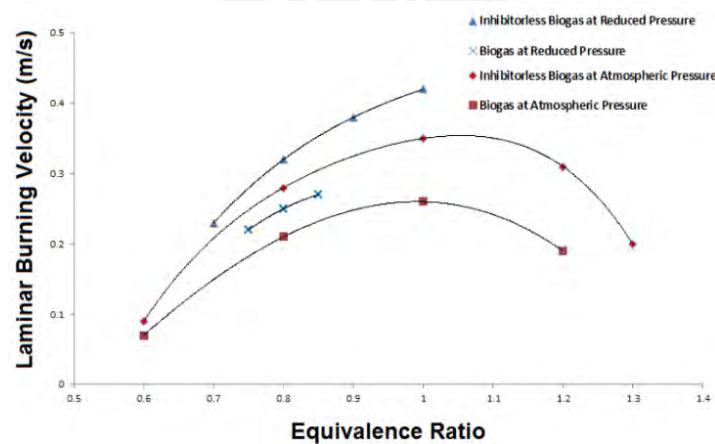


Figura 8. Efectos de los inhibidores en la velocidad de llama del biogás (Anggono et al., 2013).

Las conclusiones determinadas por los autores fueron las siguientes: En el biogás con inhibidores (CO_2 y N_2) se visualizó un decremento de las velocidades de llama laminar en comparación al caso del biogás sin inhibidores (Anggono et al., 2013). Por un lado, los inhibidores diluyen las proporciones de inflamabilidad en las mezclas aire-combustible para una determinada ratio de equivalencia lo cual induce en una ratio de reacción química menor de las reacciones bimoleculares del proceso de oxidación. Por otro lado, los inhibidores del biogás absorben cierta cantidad de calor producido, disminuyendo la temperatura de la llama, y generando menor eficiencia de ciertas reacciones de oxidación (Anggono et al., 2013).

Tres años después, H.O.B. Nonaka y F. M. Pereira del departamento de Ingeniería Mecánica de la Federal University of Rio Grande do Sul, realizaron un estudio experimental y numérico con el objetivo de determinar los efectos del contenido de CO_2 en la velocidad de llama laminar del biogás (Nonaka & Pereira, 2016). Para el desarrollo de la experimentación, emplearon el método de flujo de calor cuya configuración consiste en un quemador en conjunto con una camisa refrigerante, una camisa calentadora y un plato superior, como se muestra en la Figura 9. Según los autores, este método tiene como principal ventaja la de poder estabilizar llamas unidimensionales cercanas a condiciones adiabáticas.

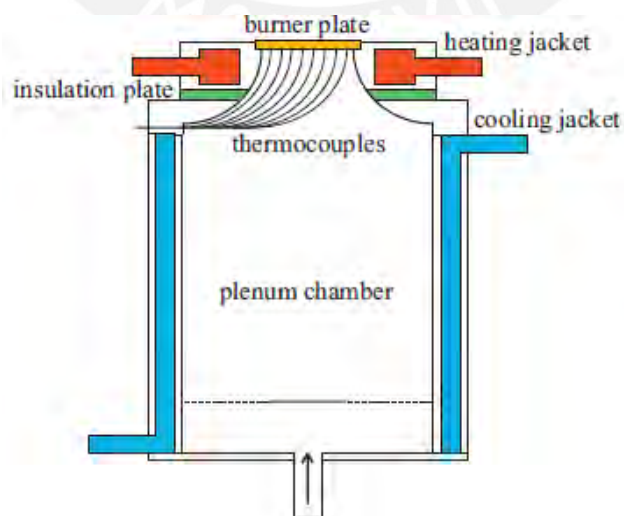


Figura 9. Elementos principales del quemador de flujo de calor (Nonaka & Pereira, 2016).

Para la parte numérica, se empleó el código Chem1D para poder predecir la velocidad de llama adiabática. Asimismo, se realizó el estudio haciendo uso de 4 mecanismos: San Diego, GRI-Mech 3.0, USC Mech II y Konnov. Además, con el objetivo de asolar la dilución y los efectos en la reacción que se pueda dar, es que se crea una nueva especie FCO₂ para que se comporte como un gas inerte perfecto, por ello, FCO₂ no tiene relación directa con los mecanismos de reacción (Nonaka & Pereira, 2016). Los resultados que obtuvieron son los presentados en las Figuras 10 y 11 en conjunto con la de otros autores.

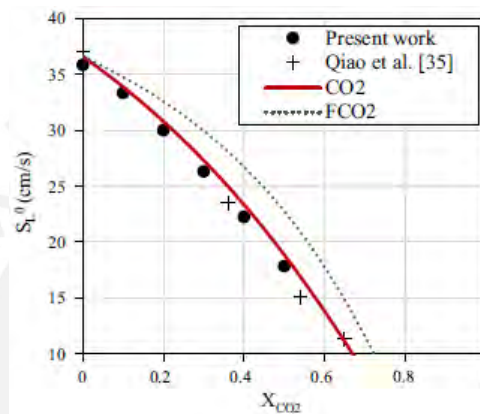


Figura 10. Efecto de la adición CO₂ y el FCO₂ en la velocidad de llama laminar para ϕ igual a 1 (Nonaka & Pereira, 2016).

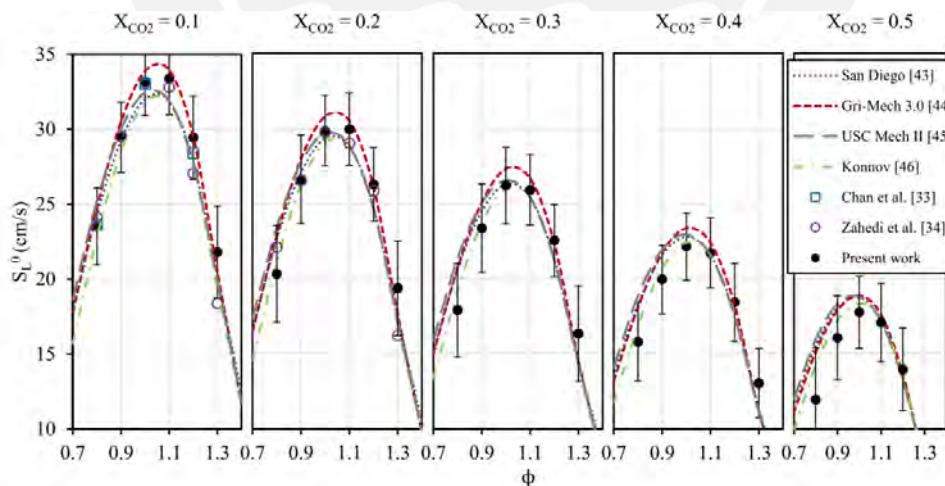


Figura 11. Velocidades de llama laminar de mezclas CH₄/CO₂/Aire a 298K y 1atm (Nonaka & Pereira, 2016).

Las conclusiones del presente trabajo fueron: Por un lado, los resultados experimentales mostraron una coincidencia razonable con la data experimental y correlaciones disponibles de la literatura. Para la configuración empleada, la principal fuente de discrepancia eran los errores

de lectura de la termocupla debido a su inestabilidad durante las mediciones (Nonaka & Pereira, 2016). A mayor dilución de CO₂ la velocidad de llama laminar se ve reducida y el valor de velocidad de llama máxima cambia a posicionarse en mezclas más pobres (ϕ menores). Las mayores reducciones de velocidad de llama que se observaron para mezclas estequiométricas fueron en el rango de 6.9% a 50.2% para porcentajes de CO₂ del 10% a 50% respectivamente. Por otro lado, las predicciones numéricas estuvieron dentro del rango de incertidumbre de los datos experimentales: las velocidades de llama medidas disminuían con el CO₂ diluido para todos los mecanismos empleados en el estudio (Nonaka & Pereira, 2016). Los resultados del mecanismo Gri-Mech 3.0 fueron idénticos para todas las mezclas estudiadas y mostraron la mejor concordancia con las mediciones del 10% y 20% de CO₂. Para el 30%, 40% y 50% de contenido de CO₂, el mecanismo de Konnov presentó la mejor concordancia. Finalmente, la investigación numérica mostró que la participación directa del CO₂ en la reacción $\text{CO} + \text{OH} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}$ fue determinante para la estructura de la llama, y consecuentemente en el cambio de la máxima velocidad de llama hacia mezclas más pobres (Nonaka & Pereira, 2016).

En el mismo de año, Mendieta Patiño et al., realizaron una investigación de carácter numérico de las llamas laminares premezcladas de mezclas metano-aire y el dióxido de carbono como dilución. El objetivo principal era extender el trabajo desarrollado por Chan et al., quienes estudiaron los efectos de la dilución de CO₂ en la combustión de las mezclas metano-aire para porcentajes de 0–15% en volumen (Chan et al., 2015). El nuevo alcance del estudio fue del 0-50% en volumen (Mendieta Patiño et al., 2016). El biogás empleado estaba compuesto principalmente de CH₄ y CO₂, con pequeñas cantidades de sulfuro de Hidrógeno (H₂S), humedad y siloxanos (Mendieta Patiño et al., 2016). Para el estudio numérico, el modelo cinético para la oxidación del metano en una llama de premezcla con un grado de libertad fue empleado en el paquete REGATH, reduciendo la complejidad del problema al solo necesitarse resolver un sistema de ecuaciones con una variable independiente. El modelo toma en

consideración los detalles cinéticos y los fenómenos correspondientes al transporte (transferencia de masa y calor) a través del código 1D-PREMIXED, asimismo, se consideró la simulación definiendo un tubo de 2000mm en una escala de -1000mm a 1000mm donde la combustión inicia en 0mm (Mendieta Patiño et al., 2016). Para los ensayos, la dilución se expresó como la fracción de la mezcla del combustible, por ello, se presenta en la Figura 12, las composiciones estequiométricas para la mezcla metano-aire a diferentes niveles de CO₂. Asimismo, en los resultados obtenidos para las fracciones máscas durante la combustión, se muestran en las Figuras 13 y 14.

CH ₄ (%vol)	CO ₂ dilution(%vol)	CH ₄	CO ₂	O ₂	N ₂
100	0	0.095	0.000	0.190	0.715
90	10	0.094	0.010	0.188	0.707
80	20	0.093	0.023	0.186	0.698
70	30	0.091	0.039	0.183	0.687
60	40	0.089	0.060	0.179	0.672
50	50	0.087	0.087	0.174	0.653

Figura 12. Composiciones estequiométricas para la mezcla metano/aire a diferentes niveles de dilución de CO₂ (Mendieta Patiño et al., 2016).

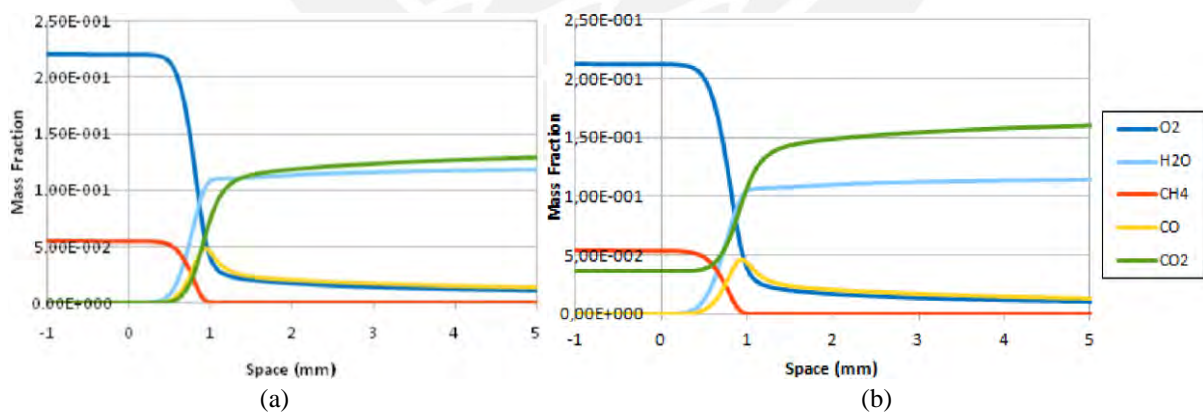


Figura 13. (a) Evolutivo de las Fracciones máscas de los reactantes y productos de la mezcla metano-aire a 0.1MPa, 298K, ratio de equivalencia de 1 y 0% CO₂. (b) Evolutivo de las Fracciones máscas de los reactantes y productos de la mezcla metano-aire a 0.1MPa, 298K, ratio de equivalencia de 1 y 20% CO₂ (Mendieta Patiño et al., 2016).

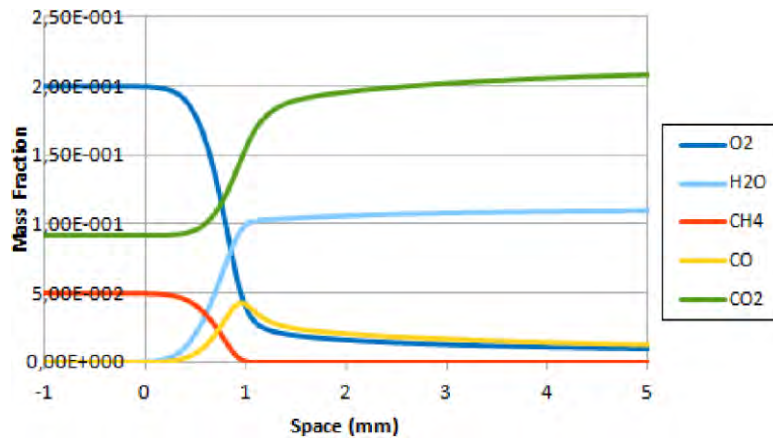


Figura 14. Evolutivo de las Fracciones másicas de los reactantes y productos de la mezcla metano-aire a 0.1MPa, 298K, ratio de equivalencia 1 y 40% CO₂ (Mendieta Patiño et al., 2016).

Los resultados de a la velocidad de llama laminar de la mezcla metano-aire respecto al ratio de equivalencia y los efectos del contenido de CO₂, se presentan en la Figura 15.

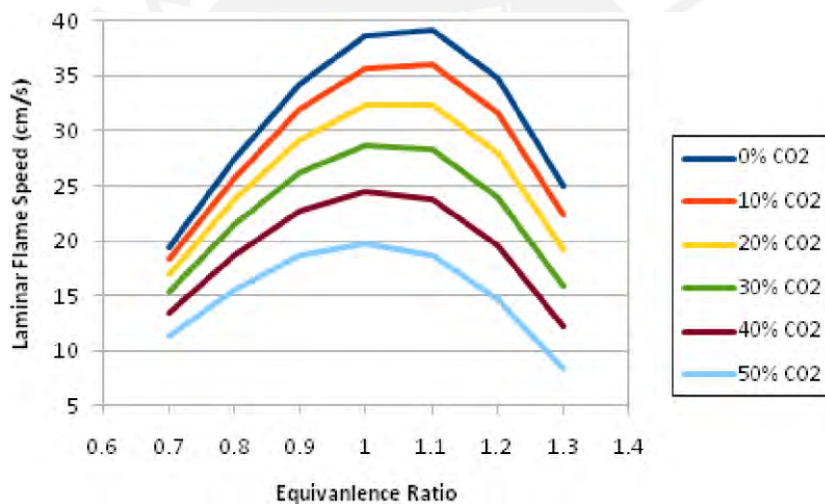


Figura 15. Efecto del CO₂ en la velocidad de llama de la mezcla metano/aire a 0.1MPa y 298K (Mendieta Patiño et al., 2016).

De manera similar, los resultados correspondientes a la variación de la máxima temperatura de llama y los valores de temperatura a lo largo del tubo para los distintos valores de %CO₂ en la mezcla combustible, se presentan en la Figura 16.

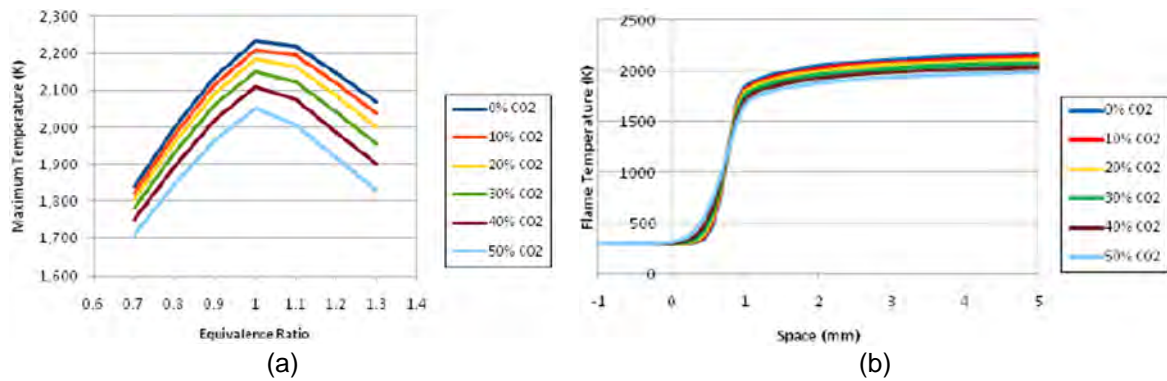


Figura 16. (a) Efecto del CO₂ en la máxima temperatura de llama de la mezcla metano/aire a 0.1MPa y 298K. (b) Efecto del CO₂ en el perfil de temperatura de la mezcla metano/aire a 0.1MPa, 298K y ratio de equivalencia 1 (Mendieta Patiño et al., 2016).

Las conclusiones de los autores fueron: el estudio numérico de la combustión del metano-aire con CO₂ diluido en llamas con propagación de un grado de libertad fue desarrollado mediante la presentación y análisis de una estructura de llama típica de premezcla (Mendieta Patiño et al., 2016). La influencia del CO₂ diluido en la velocidad de llama laminar de la mezcla metano-aire se determinó para ratios equivalentes desde 0.7 a 1.3 y para un porcentaje del 0% a 50% de CO₂ (Mendieta Patiño et al., 2016). Se mostró que para un porcentaje de 30% en volumen de CO₂, la velocidad de llama está muy alejada de los resultados sin dilución de CO₂, lo que indica que el porcentaje de CO₂ debe ser limitado a pequeñas cantidades (Mendieta Patiño et al., 2016). Además, para ratios equivalentes mayores a 1, la diferencia entre las llamas con dilución (desde 30% en volumen de CO₂) y sin dilución eran mayores. Finalmente, la temperatura máxima de llama de la mezcla metano-aire para ratios desde 0.7 a 1.3 y diferentes valores de CO₂ (0-50% en vol. de CO₂) también fue presentada. Se identificó que a partir de 30% de volumen de CO₂, las máximas temperaturas de llama eran considerablemente menores al de la mezcla sin dilución (Mendieta Patiño et al., 2016).

En 2019, Bai et al., estudiaron las propiedades fundamentales de la llama biomasa-aire y su velocidad de llama laminar. El objetivo del estudio fue analizar los efectos de las adiciones de CO₂ a la llama de premezcla de biomasa-aire y sus velocidades de llama laminar con cuatro diferentes porcentajes de concentración (0%, 20%, 40% y 60%) (Bai et al., 2019). Las

velocidades de llama laminar se midieron para un rango de temperaturas iniciales de 300-661 K, presiones desde 0.5 – 6.9 atm, ratios de equivalencia desde 0.8 a 1.2. Las velocidades medidas se compararon con simulaciones realizadas usando el mecanismo GRI-Mech 3.0 y data obtenida de bibliografía existente (Bai et al., 2019). Los experimentos fueron realizados en una cámara de combustión cilíndrica con ignición central, donde se empleó una cámara de alta velocidad con sensor CMOS (Complementary Metal-Oxide-Semiconductor), con la capacidad para tomar fotografías de 40000 frames/s para estudiar la morfología de la parte frontal de la llama (Bai et al., 2019). En la Figura 17, se puede observar el esquema de la configuración experimental empleada para esta investigación. Asimismo, los resultados obtenidos para las máximas velocidades de llama laminar son los presentados en la Figura 18.

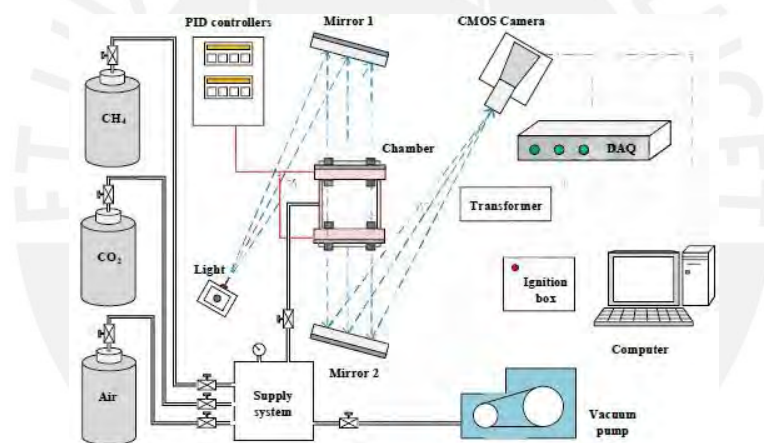


Figura 17. Diagrama esquemático de la configuración experimental (Bai et al., 2019).

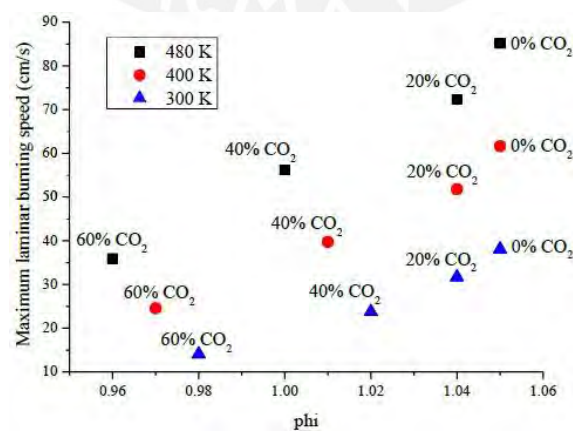


Figura 18. Máximas velocidades de llama laminar de la mezcla metano-aire (0% de CO₂) y biomasa-aire (20%, 40% y 60% de CO₂) con diferentes concentraciones de CO₂ y a 1atm de presión (Bai et al., 2019).

Además, los resultados para las velocidades de llama laminar a diferentes ratios de equivalencia y distintas temperaturas iniciales se presentan en la Figura 19.

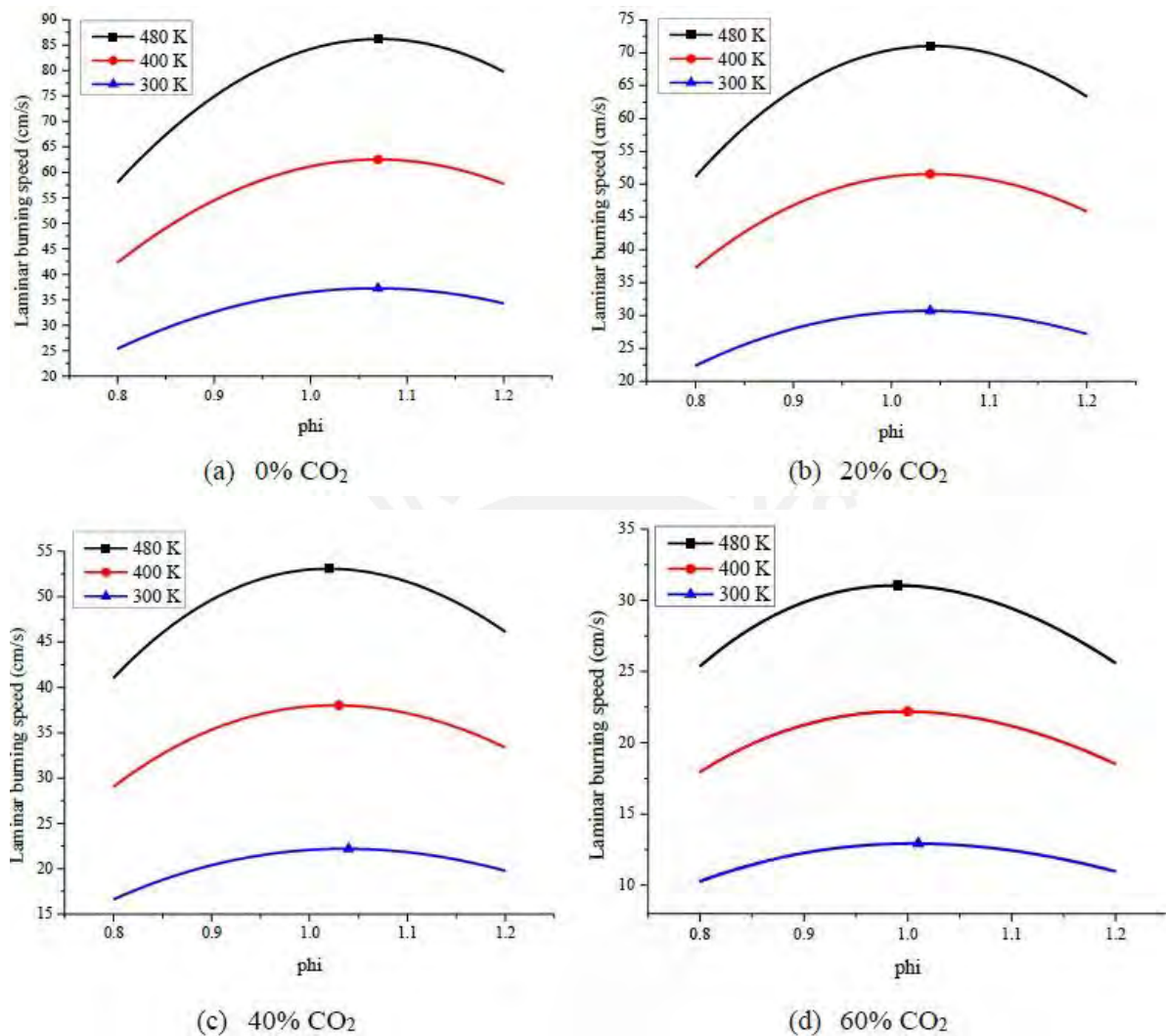


Figura 19. Velocidad de llama laminar del metano-aire (0% de CO₂) (a) y biomasa-aire (20%, 40% y 60% de CO₂) (b, c, d) a distintos valores de ratio de equivalencia y diferentes temperaturas iniciales a una presión de 1atm (Bai et al., 2019).

Las conclusiones de los autores para esta investigación fueron: La concentración de CO₂ presentó un efecto negativo en la velocidad de llama laminar, caso contrario, la temperatura inicial afecta de manera positiva a la velocidad de llama laminar (Bai et al., 2019). Asimismo, para la ratio de equivalencia, existe un valor pico para cada porcentaje de concentración de CO₂, siendo las ratios de equivalencia relacionados al máximo valor de velocidad de llama laminar los cuales pasan a ser mezclas pobres ($\phi < 1$) conforme se da el aumento de la concentración de CO₂. También se encontró que las ratios de equivalencia de los picos de

velocidades de llama con poca concentración de CO₂ (0%-20%) no varían. Mientras que para concentraciones mayores (40%-60%) las ratios de equivalencia para las máximas velocidades cambian hacia mezclas más pobres con el aumento de la temperatura inicial (Bai et al., 2019).

Durante el mismo año, Longkai Xiang, Huaqiang Chu, Fei Ren y Mingyan Gu de la Escuela de Energía y Medio Ambiente de la Anhui University of Technology en Maanshan, China, realizaron una investigación con el objetivo de explorar el efecto químico de diferentes contenidos de CO₂ (0-0.35 en fracción molar) y ratios de equivalencia (0.7-1.3) en las llamas laminar de premezcla de las mezclas (CH₄+CO₂)-aire a presión atmosférica y temperatura ambiente haciendo uso del código PREMIX (Xiang et al., 2019). Para este trabajo se obtuvieron las velocidades de llama laminar, la temperatura adiabática de la llama, la concentración de NO_x y las concentraciones molares y ratios de reacción netos de las principales reacciones del CH₃, OH, H y O (Xiang et al., 2019). Se hizo uso del código PREMIX para calcular las características de una combustión laminar unidimensional de premezcla de las mezclas (CH₄+CO₂)-aire con diferentes contenidos de CO₂ y ratios de equivalencia, y en la simulación se consideró temperatura ambiental inicial y presión atmosférica para todo el proceso (Xiang et al., 2019). Asimismo, con el propósito de investigar especialmente tres efectos de CO₂ en las características de la combustión del biogás (dilución, difusión térmica, y efectos químicos), se introdujeron dos sustancias especiales, FCO₂ y FN₂, que tienen las mismas propiedades de transporte y difusión térmica que el CO₂ y N₂ respectivamente, pero que no participan en el proceso de reacción química (Xiang et al., 2019). El contenido de CO₂ en el biogás está definido como $X_{CO_2} = n_{CO_2} / (n_{CO_2} + n_{CH_4})$, donde n_{CO_2} y n_{CH_4} son las fracciones molares de dióxido de carbono y metano en la mezcla biogás-aire (Xiang et al., 2019). El rango empleado de X_{CO_2} fue de 0 a 0.35 para los cálculos realizados. Asimismo, con el objetivo de seleccionar el mecanismo de reacción apropiado, y de acuerdo a investigaciones realizadas anteriormente, se seleccionaron tres mecanismos reconocidos de reacciones químicas: GRI-Mech 3.0, USC-

Mech y San Diego-Mech (Xiang et al., 2019). A continuación, en la Figura 20 se presentan los resultados obtenidos para la velocidad de llama laminar, y en la Figura 21, se presentan los tres efectos del CO₂ (dilución, térmico y químico) en la velocidad de llama laminar.

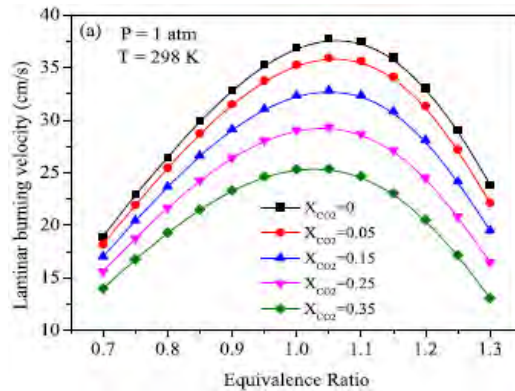


Figura 20. Velocidades de llama laminar de las mezclas con CO₂ y ratios de equivalencia (Xiang et al., 2019).

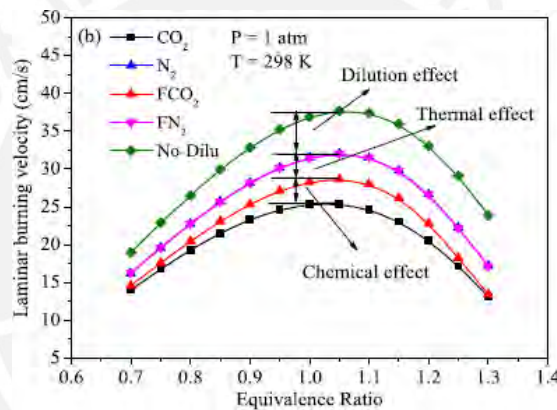


Figura 21. Efectos del CO₂ en la velocidad de llama laminar (Xiang et al., 2019).

De igual manera para la temperatura adiabática de la llama, se presentan en las Figuras 22 y 23, los valores de temperatura con diferentes contenidos de CO₂ y ratios de equivalencia, y los tres efectos del CO₂, respectivamente.

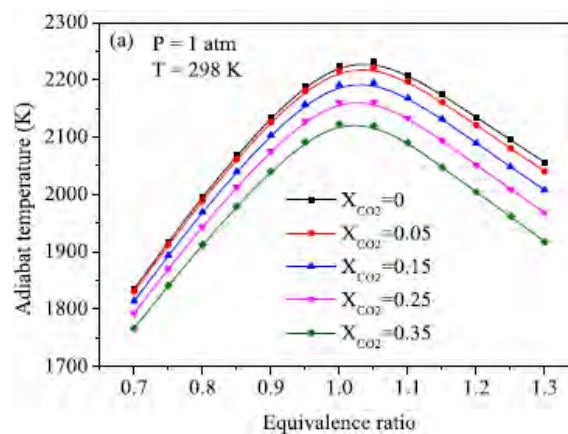


Figura 22. Temperatura de llama a diferentes contenidos de CO₂ y ratios de equivalencia (Xiang et al., 2019).

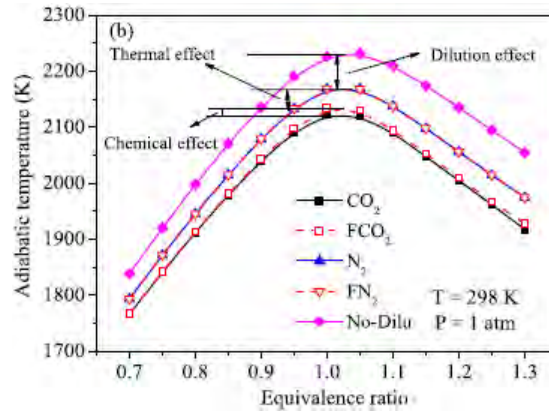


Figura 23. Efectos del CO₂ en la temperatura adiabática (Xiang et al., 2019).

Para las fracciones molares de los reactantes y productos (perfil estructural de la llama), sus valores respecto de la distancia de la llama se presentan en las Figuras 24 y 25. Para el caso de las fracciones molares del NO_x (NO y NO₂), sus resultados se presentan en la Figura 26.

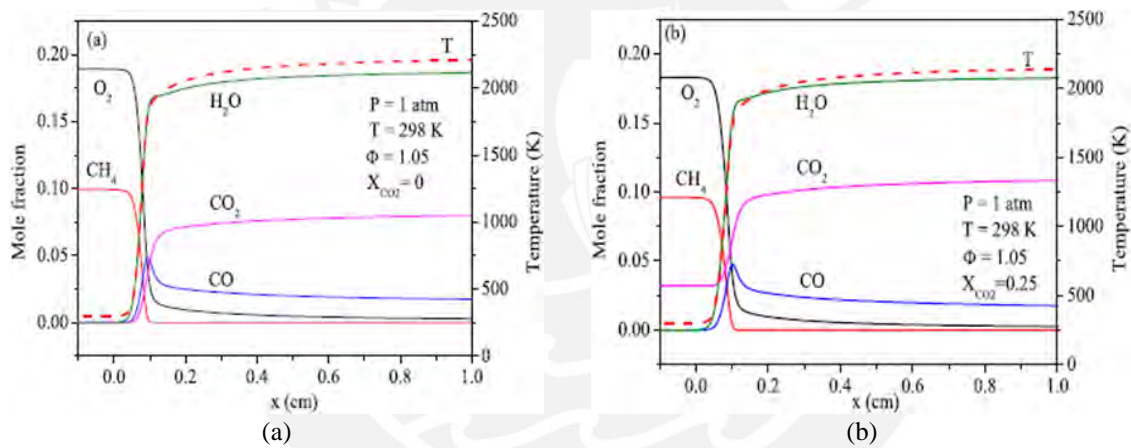


Figura 24. (a) Perfil estructural de la llama con 0% de CO₂, $\phi=1.05$ y 1atm de presión. (b) Perfil estructural de la llama con 25% de CO₂, $\phi=1.05$ y 1atm de presión (Xiang et al., 2019).

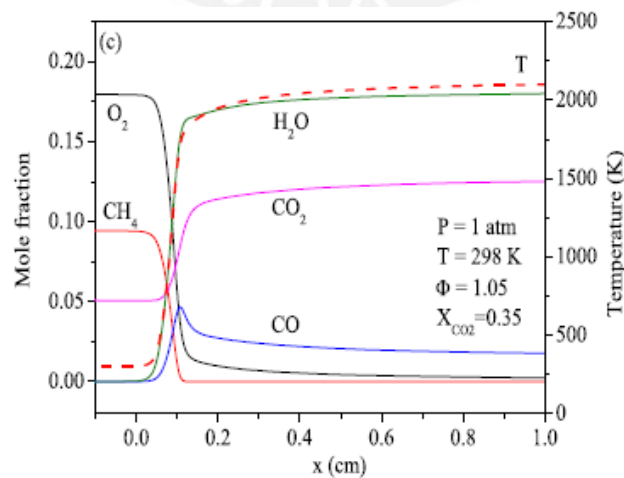


Figura 25. Perfil estructural de la llama con 35% de CO₂, $\phi=1.05$ y 1atm de presión (Xiang et al., 2019).

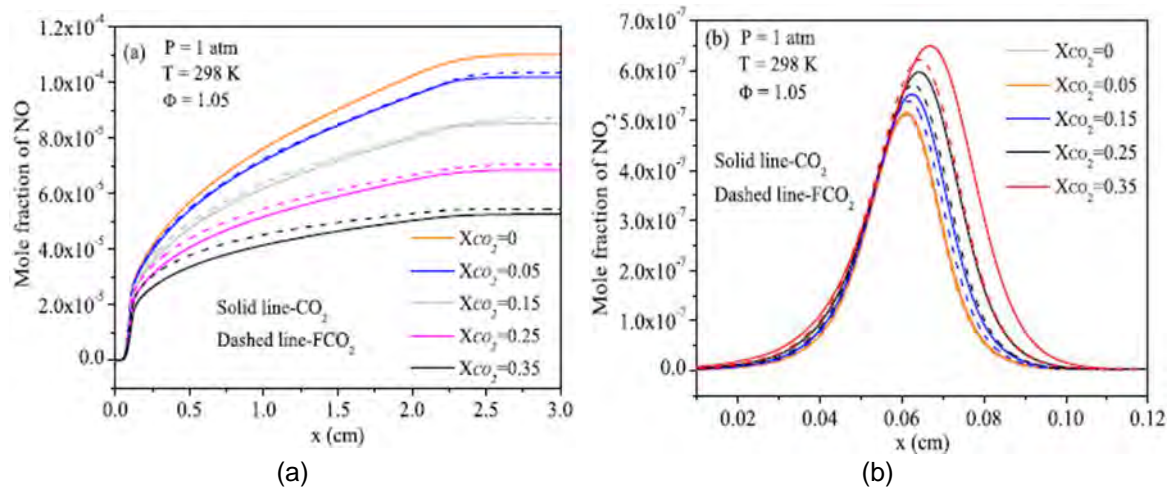


Figura 26. (a) Efecto de la adición de CO₂ en la generación del NO, $\phi=1.05$ y 1atm de presión. (b) Efecto de la adición de CO₂ en la generación del NO₂, $\phi=1.05$ y 1atm de presión (Xiang et al., 2019).

Las conclusiones realizadas por los autores son las siguientes: Con el incremento de la ratio de equivalencia, la velocidad de llama laminar y la temperatura adiabática aumenta al inicio y luego disminuye para todos los casos de contenido de X_{CO₂} (Xiang et al., 2019). Los valores máximos de estas propiedades se encuentran cerca de la ratio equivalencia de 1.05 (Xiang et al., 2019). Con el incremento de X_{CO₂}, la velocidad de llama laminar y la temperatura adiabática disminuyen gradualmente debido a los efectos químicos del CO₂ (Xiang et al., 2019). Asimismo, con el incremento de X_{CO₂}, la fracción molar de H₂O en los productos disminuye, la fracción del CO₂ como producto aumenta de manera significativa y la fracción del CO disminuye ligeramente (Xiang et al., 2019). Los efectos químicos del CO₂ pueden suprimir la formación de NO y promueven la formación del NO₂. Finalmente, con el incremento de X_{CO₂}, las fracciones molares de los productos OH, CH₃, H y O disminuyen (Xiang et al., 2019).

1.2 Combustión

Se define como combustión a la reacción química entre sustancias, que por lo general incluye oxígeno, y suele ir acompañada de la generación de calor y luz en forma de llama (Kondratiev, 2020). Las sustancias participes de la reacción química generalmente son dos:

combustible y oxidante (usualmente aire), estas denominaciones son debido al papel que desempeña cada parte en la reacción (Griffiths & Barnard, 1995). Por otro lado, para conseguir que la reacción de combustión se mantenga en el tiempo, se requieren de 3 componentes: las sustancias principales mencionadas anteriormente (combustible y oxidante) y una fuente de calor (Griffiths & Barnard, 1995). El proceso de combustión concluirá si en algún momento se elimina alguno de estos 3 componentes (Griffiths & Barnard, 1995).

Los combustibles empleados son muy variados y pueden ser empelados en estado sólido (carbón, pulverizados, etc.), líquido (derivados del petróleo, etanol, etc.) y gas (gas natural, etc.), dependiendo de su proceso de obtención (Griffiths & Barnard, 1995). Cada combustible tiene sus propias propiedades y características (por ejemplo: poder calorífico, densidad, temperatura de ignición, límites de inflamabilidad, etc.) las cuales influirán directamente en el proceso de combustión (Griffiths & Barnard, 1995). Por otro lado, el oxidante o también conocido como comburente, es principalmente aire u oxígeno puro (O_2) para los diversos procesos de combustión (Griffiths & Barnard, 1995). Mientras más porcentaje de O_2 exista en el comburente, más eficiente y limpio será el proceso de combustión, puesto que se emplea la fuente de comburente en mayor totalidad. y al contener menos proporción de otros elementos como el nitrógeno, no se producen gases contaminantes los cuales destruyen el ozono atmosférico como los óxidos del mismo (NO_x) (Griffiths & Barnard, 1995).

Para que se dé la combustión, se requiere de ciertos parámetros mínimos, como cierta presión y temperatura. Por ejemplo, la reacción de combustión se da cuando los dos componentes gaseosos premezclados se introducen en un espacio confinado el cual está lo suficientemente caliente y se encuentra a una temperatura uniforme, y si el calor producido por la reacción se transporta con suficiente rapidez a las paredes del recipiente por conducción y convección, se mantiene una reacción estable (o estacionaria) (Griffiths & Barnard, 1995).

1.3 Llama

Llama es definido como un fenómeno luminoso el cual se produce por la incandescencia de los gases, conocidos como reactantes, durante el proceso de combustión (EcuRed contributors, 2019b). A continuación, se presenta su clasificación de acuerdo al movimiento de los fluidos y de acuerdo a como arriban los gases que participarán del proceso de combustión.

1.3.1 Clasificación de las llamas.

La clasificación de las llamas es según el tipo de movimiento de los fluidos que intervienen, que generan llamas laminares y turbulentas (Brizuela & Romano, 2003b). También se diferencian las llamas en las que los gases reactantes arriban separados (llamas de difusión) o perfectamente mezclados (llamas premezcladas) (Brizuela & Romano, 2003b). Esto, permite la correcta caracterización y anticipación de las propiedades de combustión.

1.3.1.1 Llama laminar.

Las llamas laminares se caracterizan por tener números de Reynolds bajos, inferiores a 2000, aproximadamente. Se presentan comúnmente en quemadores físicamente muy pequeños (orificios de gas) (Brizuela & Romano, 2003b). Las deflagraciones, o llamas laminares, constituyen el problema central de la teoría de la combustión en al menos dos aspectos, por un lado, para las llamas laminares se tuvo en consideración simultánea los fenómenos de transporte y de la cinética química, por otro lado, el conocimiento de los conceptos desarrollados y los resultados obtenidos en la teoría de la llama laminar es esencial para muchos otros estudios sobre combustión (Williams, 1985).

1.3.1.2 Llama turbulenta.

Las llamas turbulentas son aquellas que tienen números de Reynolds altos, superiores a 2000. Este tipo de llamas se presentan en la combustión en motores Diesel, turbinas a gas,

muchos hornos industriales, e incendios, donde es esencialmente no-premezclada y altamente turbulenta (Brizuela & Romano, 2003a).

1.3.1.3 Llamas laminares de difusión.

Estas llamas se caracterizan por mezclar los reactantes por el proceso físico de difusión molecular. El frente de llama se ubica en la zona donde la mezcla es aproximadamente estequiométrica, aunque la zona de mayor luminosidad (que es lo que generalmente se considera llama) está ubicada en una capa ligeramente rica respecto al frente de llama (Brizuela & Romano, 2003b). Las llamas de difusión laminares ocurren cuando aire y combustibles arriban separados y cuando el número de Reynolds del flujo es suficientemente bajo para no permitir la aparición de turbulencia. Los ejemplos de tales llamas incluyen fugas de gas de muy pequeño diámetro, llamas alrededor de gotas, la llama de una vela y de quemadores de mecha (Brizuela & Romano, 2003b). En la Figura 27 se muestra la representación esquemática de las estructuras de la llama de difusión en función de la velocidad del flujo, asimismo, se muestra la transición de una llama laminar a una turbulenta (Griffiths & Barnard, 1995).

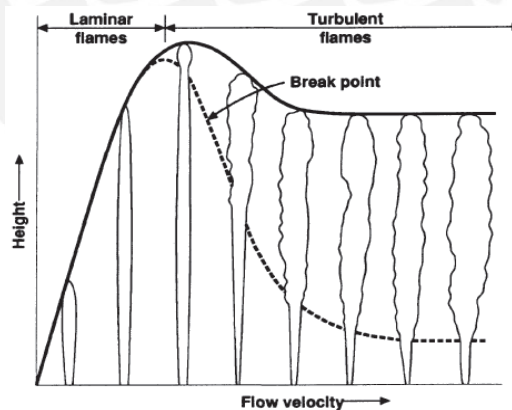


Figura 27. Representación esquemática de las estructuras de la llama de difusión en función de la velocidad del flujo que muestra la transición de una llama laminar a una turbulenta.

1.3.1.4 Llamas laminares de premezcla

La combustión de llama es más prominente con combustibles que han sido premezclados con un oxidante, ya sea oxígeno o un compuesto que proporcione, para la reacción (EcuRed contributors, 2019b). La reacción química en tales llamas ocurre dentro de una zona estrecha de varios micrómetros de espesor, generalmente llamada frente de llama (EcuRed contributors, 2019b). Una llama laminar de premezcla típica tiene dos propiedades muy importantes, la velocidad de combustión, S_u , y la temperatura de la llama adiabática (Griffiths & Barnard, 1995). Si los reactivos premezclados se ven obligados a fluir hacia el frente de la llama y su velocidad es igual a la velocidad a la que la llama se propagaría en gas estancado, es decir, la velocidad de combustión o velocidad de llama, la propia llama se detendría, esto se pone en práctica en aplicaciones de combustión que involucran quemadores, ya que el diseño del aparato está dirigido a mantener la llama en una posición y hacerla estable frente a pequeñas perturbaciones (Griffiths & Barnard, 1995). En la siguiente figura (Figura 28), se presentan los perfiles de concentración y temperatura en una llama laminar de premezcla.

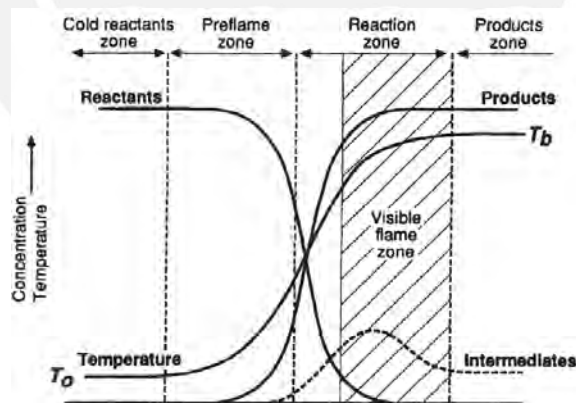


Figura 28. Perfiles de concentración y temperatura asociados con una llama adiabática unidimensional, premezclada (Griffiths & Barnard, 1995)

Como se puede apreciar en la Figura 28, la temperatura de la mezcla aumenta conforme se va acercando a la zona de reacción. Por un lado, se observa que las concentraciones y las temperaturas de los productos aumentan de manera similar. Por otro lado, las concentraciones de oxidantes y combustible van disminuyendo. La parte visible de la llama se encuentra en la

zona de reacción y la emisión se debe en gran parte a especies excitadas electrónicamente, como CH, CN, C₂, CHO y también CO₂ que emiten luz, cuando vuelven a su estado fundamental (Griffiths & Barnard, 1995).

Un elemento del gas que fluye puede recibir calor de dos maneras, ya sea por reacciones químicas que ocurren en su interior o por conducción del gas más caliente que tiene delante (Griffiths & Barnard, 1995). Entonces, con lo anterior mencionado, se reconocen dos zonas, la zona de pre llama y la zona de reacción, las cuales están separadas por un punto de inflexión en el perfil de temperatura (Griffiths & Barnard, 1995). Comenzando a bajas temperaturas, para cualquier sección transversal dada, el flujo de calor hacia la región más fría se da debido a la conducción, la cual es mayor que la pérdida de calor porque el gradiente es más pronunciado en el lado de alta temperatura (Griffiths & Barnard, 1995). Pasado el punto de inflexión ocurrirá lo contrario a lo anterior explicado; es decir, la tasa de pérdida de calor será mayor que la tasa de ganancia de calor (Griffiths & Barnard, 1995). Sin embargo, a esta temperatura más alta, la velocidad de reacción ya ha aumentado lo suficiente y lo necesario como para que se produzca una cantidad significativa de calor por reacción química, por tanto, la temperatura sigue aumentando a través de la llama, aunque a un ritmo progresivamente más lento (Griffiths & Barnard, 1995).

1.4 Velocidad de llama laminar

La velocidad de la llama laminar, también denominada velocidad de combustión, velocidad de combustión normal o solo velocidad de la llama, se define como la velocidad a la que los gases no quemados se mueven a través de la onda de combustión en la dirección normal a la superficie de la onda (Glassman & Yetter, 2008). En un supuesto caso, cuando se tiene una mezcla de gas combustible en reposo, pero contenida en un tubo abierto, y se enciende por una chispa en un extremo del tubo, se podrá apreciar una onda de combustión la cual se propaga a

través del gas, siempre y cuando el tubo no sea demasiado corto y la energía eléctrica liberada por la chispa no sea mucho mayor que la energía mínima requerida para la ignición (Williams, 1985). A menudo se observa que la onda de combustión es casi plana y viaja aproximadamente a una velocidad constante entre (muy aproximadamente) dos y diez diámetros de tubo de la chispa, a esta velocidad constante se le conoce como velocidad de combustión laminar empírica o velocidad de llama, la cual es característica de la mezcla combustible (Williams, 1985).

Esta propiedad depende también de otros parámetros, los cuales influyen directamente en su magnitud, como la presión de trabajo, la temperatura de ignición, la relación aire-combustible, la transmisión de calor entre la llama y las zonas aledañas, es decir, la zona de gases quemados y gases no quemados. En la Figura 29 se pueden observar algunas velocidades de llama laminar correspondientes a ciertos gases, a condiciones atmosféricas ($P=1\text{atm}$ y $T=300\text{K}$) y su variación en función a la relación estequiométrica.

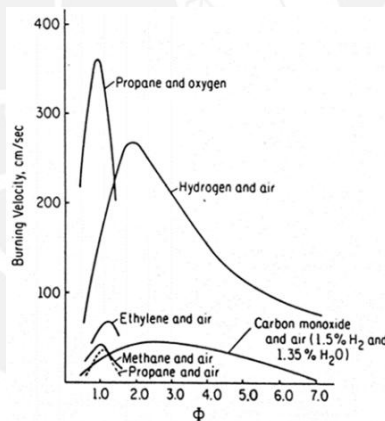


Figura 29. Velocidades de llama y riqueza de mezcla de algunas mezclas (Griffiths & Barnard, 1995).

Según la Figura 29, para las distintas mezclas se tiene un punto donde la velocidad de combustión es máxima que se encuentra teóricamente en la relación ideal de aire combustible.

1.5 Temperaturas en la combustión

En el proceso de combustión se pueden distinguir tres conceptos claros de temperatura: la temperatura de ignición, temperatura de combustión y temperatura de llama adiabática. Cada uno de ellos, representa una fase o estado presente durante el proceso de combustión.

1.5.1 Temperatura de ignición.

Es la temperatura mínima requerida para que se inicie la combustión de una determinada mezcla, es decir, temperatura mínima necesaria para que los vapores generados por un combustible comiencen a arder (EcuRed contributors, 2019a).

1.5.2 Temperatura de combustión.

Se define como temperatura de combustión a la temperatura máxima consigue alcanzar la llama durante el proceso de combustión. En algunos casos, se suele asumir una temperatura de llama adiabática para simplificar cálculos, ya que se analiza la combustión en condiciones ideales y este valor usualmente es muy cercano cerca a la temperatura de combustión. Es importante mencionar que esto no se cumple para todos los procesos de combustión.

1.5.3 Temperatura de llama adiabática.

Se denomina temperatura de llama adiabática a la temperatura máxima obtenida durante la combustión de una mezcla estequiométrica, es decir, donde se emplea la cantidad necesaria de aire para que se produzca la combustión (Bisso Carrasco, 2015).

1.6 Límites de inflamabilidad

Se conoce como límite de inflamabilidad a la capacidad que tiene una determinada proporción de mezcla de poder generar la combustión. Estas proporciones de mezcla son denominadas “mezclas pobres” cuando existe mayor cantidad de aire requerido para hacer reaccionar una cierta cantidad de combustible, y caso contrario, son denominadas “mezclas ricas” cuando hay un exceso de combustible en la mezcla. Las concentraciones más magras y ricas que serán capaces de sostener una llama se denominan límites de inflamabilidad inferior y superior, respectivamente (Glassman & Yetter, 2008).

El factor principal que determina el límite de inflamabilidad es la competencia entre la velocidad de generación de calor, que está controlada por la velocidad de reacción y el calor de reacción para la mezcla límite, y la velocidad externa de pérdida de calor por la llama (Glassman & Yetter, 2008). En la Tabla 1 se presentan algunos límites de inflamabilidad de algunos combustibles con el aire como comburente, asimismo, se muestra su relación estequiométrica, en porcentaje de volumen de combustible.

Tabla 1: Límites de inflamabilidad de algunos combustibles con aire.

Combustible	Inferior (Pobre)	Superior (Rica)	Estequiométrica
Metano	5	15	9.47
Heptano	1	6.7	1.87
Hidrogeno	4	75	29.2
Monóxido de carbono	12.5	74.2	29.5
Óxido de etileno	3.6	100	7.7
Acetileno	2.5	100	7.7
Disulfuro de carbono	1.3	50	7.7

Fuente: *Combustion* (Fourth Edition). ELSEVIER. (Glassman & Yetter, 2008).

Además, la literatura también reporta límites de inflamabilidad para el oxígeno, en los cuales, para el caso específico del límite de inflamabilidad inferior, usualmente no difiere con el del aire, ya que el exceso de oxígeno en la condición de magro tiene las mismas propiedades termo físicas que el nitrógeno (Glassman & Yetter, 2008). En la Figura 30 se muestran los límites de inflamabilidad correspondiente a mezclas de $C_3H_8+O_2$, así como la línea correspondiente a la mezcla estequiométrica.

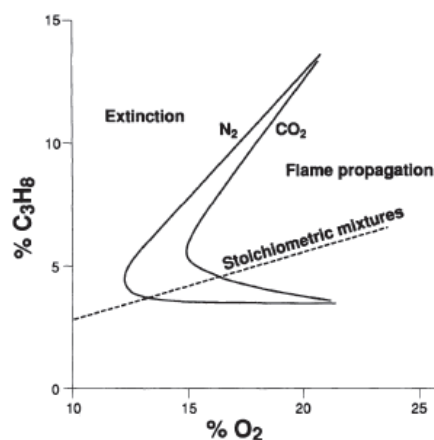


Figura 30. Límites de inflamabilidad de mezclas $C_3H_8+O_2$ en presencia de nitrógeno o dióxido de carbono añadido (Griffiths & Barnard, 1995).

1.7 Tasa de reacción

La combustión como toda reacción química se da en una tasa definida el cual depende de ciertas condiciones, algunas de las más importantes son: concentración química de los compuestos, temperatura, presión, presencia de un catalizador o inhibidor y efectos de radiación (Kuo, 2005). La ratio o tasa de reacción puede ser expresado en términos de la concentración de cualquier reactante como la tasa de disminución de la concentración de ese reactante (tasa de consumo del reactante), asimismo, puede ser expresado en términos de la concentración de un producto como la tasa de incremento de la concentración de dicho producto (Kuo, 2005). La unidad convencional para la tasa de reacción (RR por sus siglas en inglés) es mol/m³-s. La ley de masas, establece que, para una reacción química debe existir proporción entre las tasas de reacción de los reactantes y los productos. Según esta última definición, la tasa de reacción se puede expresar por la Ecuación 1.

$$RR = \frac{dC_{producto}}{dt} = \frac{dC_{reactante}}{dt} = k * \prod_{i=1}^N (C_{Mi})^{v_i} \quad (1)$$

El coeficiente k es la constante proporcional denominada constante específica de tasa de reacción, además, para una determinada reacción química, k es independiente de las concentraciones C_{Mi} y depende solo de la temperatura (Kuo, 2005). La constante k se expresa según la Ecuación 2.

$$k = AT^b e^{-\frac{Ea}{RuT}} \quad (2)$$

Donde AT^b representa la frecuencia de colisión de las moléculas y el término exponencial es el denominado factor de Boltzman, que especifica la fracción de las colisiones que tienen niveles de energía mayores a la energía de activación Ea (Kuo, 2005). Es importante mencionar que los valores de A , b y Ea , dependen netamente de la naturaleza de la reacción, y no están relacionados con las concentraciones o la temperatura.

1.8 Ecuación de Arrhenius

El químico y físico sueco Svante Arrhenius estableció que solo las moléculas que poseen energía mayor a una cierta cantidad (Ea) reaccionarán, y de las cuales se obtendrán los productos, asimismo, como Arrhenius fue el primer científico en 1889 en introducir el factor de Boltzmann para calcular las ratios de reacción química, se denominó a la expresión presentada en la Ecuación 3 como la ecuación de Arrhenius (Kuo, 2005).

$$k = A * e^{-\frac{Ea}{RuT}} \quad (3)$$

De la Ecuación 3 se puede decir que el parámetro A corresponde a los productos AT^b , asimismo, la ecuación de Arrhenius es aplicable a reacciones de todos los órdenes.

1.9 Energía de activación

Gracias a las colisiones entre moléculas y bajo condiciones favorables, éstas dan origen a la formación de especies químicas transitorias y que dan lugar a los productos de una reacción. Estas especies transitorias son denominadas complejo activado, cuyo símbolo es X^\ddagger (Kuo, 2005). Por ende, en una determinada reacción se cumple lo expresado en la Ecuación 4.



El complejo activado, se encuentra localizado en el punto de más alta energía en el camino más favorable para la reacción, y la energía de activación E por molécula es la requerida para formar X^\ddagger . Es decir, para el camino más favorable de reacción, X^\ddagger tiene una menor energía total por encima de los reactantes ($Ea = N * E$) que cualquier otra ruta en la reacción (Kuo, 2005). En la Figura 31, se observan el complejo activado y la energía de activación requerida para reacciones de tipo exotérmicas (liberan energía, caso de la combustión) y endotérmicas (absorben energía).

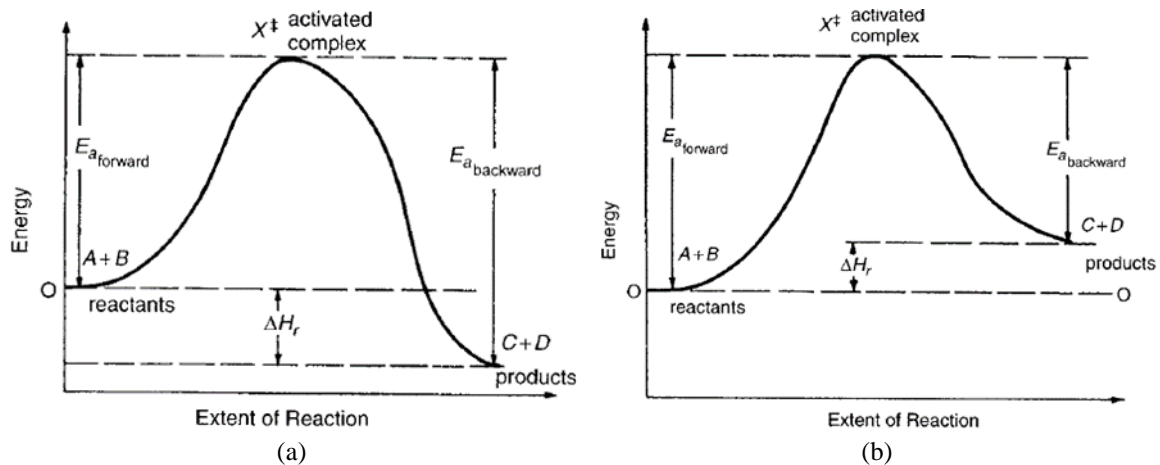


Figura 31. (a) Variación de la energía a lo largo de una reacción exotérmica. (b) Variación de la energía a lo largo de una reacción endotérmica (Kuo, 2005).

De la Figura 31, E_a es la energía de activación y ΔH_r es la energía liberada para una reacción exotérmica (ΔH_r negativa), caso contrario para una reacción endotérmica donde existe una absorción de calor ΔH_r es positiva (Kuo, 2005). En resumen, la energía de activación es la energía requerida para se dé la reacción, es decir, la energía necesaria para mover los reactantes sobre la barrera de energía requerida para iniciar la combustión (Kuo, 2005).

1.10 Métodos teóricos clásicos

1.10.1 La teoría de Mallard-Le Chateller.

La teoría de Mallard-Le Chateller es reconocida como el primer análisis teórico realizado para poder determinar la velocidad de llama laminar y data del año 1883 (Seitzman, 2012). En esta teoría se propuso que el control de la propagación de la llama se realiza mediante la propagación del calor a través de las diferentes capas de gas. Además, esquematizó la llama en dos zonas separadas por el punto donde ocurre la ignición, es decir, estableció que el calor que es conducido desde la zona II es equivalente al calor requerido para elevar la temperatura de los gases no quemados a la temperatura de ignición, dicha esquematización se presenta en la Figura 32 (Glassman & Yetter, 2008).

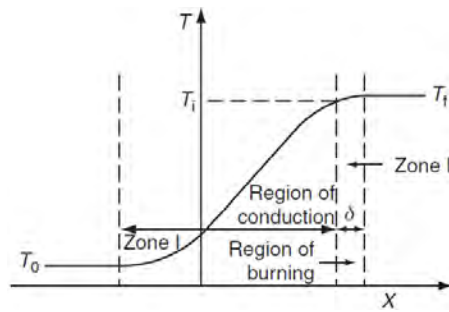


Figura 32. Diagrama esquemático típico de la variación de temperatura a través de una llama laminar (Glassman & Yetter, 2008).

1.10.2 La teoría de Zeldovich, Frank-Kamenetskii, y Semenov.

En el año 1940 los investigadores rusos Zeldovich, Frank-Kamenetskii, y Semenov realizaron sus investigaciones para determinar la velocidad de llama laminar tomando como base el estudio ya realizado por Mallard-Le Chateller (Seitzman, 2012). Al igual que en la teoría de Mallard-Le Chateller se requiere establecer una temperatura de ignición de la llama, en este caso, se asumió una temperatura de ignición muy cercana en magnitud a la temperatura de la llama, basándose en que por encima de la temperatura de ignición ocurre casi toda la reacción, logrando así eliminar la incógnita de la temperatura de ignición (Glassman & Yetter, 2008). Asimismo, en este método se asumió que la presión y el número de moles es constante en toda la reacción, que el C_p y λ son constantes y que la llama siempre es estable y unidimensional (Kuo, 2005). Esta teoría tiene como desventaja la menor precisión en resultados, pero permite dar una predicción de la tendencia de los valores de velocidad (Kuo, 2005). La diferencia fundamental entre la teoría de Mallard-Le Chateller y la de Semenov, es que esta última tiene su grado de reacción basado en la temperatura de la llama (Kuo, 2005).

1.10.3 La teoría de Tanford y Pease

En el año 1947 los investigadores Tanford y Pease propusieron la teoría de difusión de partículas en la cual se define que la propagación de la llama es controlada por la difusión de especies entre las zonas de los reactantes y la zona de reacción (Seitzman, 2012). En esta teoría se asumió la difusión de los elementos radicales en la mezcla de gases sin quemar como la más

importante para la propagación de la llama, es decir, para ciertas reacciones en llamas laminares, la velocidad de difusión de los radicales activos en el gas no quemado gobierna sobre la magnitud de la velocidad de la llama (Kuo, 2005). A diferencia de las teorías térmicas, estas varían en el concepto físico, sin embargo, las ecuaciones empleadas para la difusión de masa son las mismas en ambos casos (Bisso Carrasco, 2015). De las metodologías comentadas, es importante destacar que, en esos años, los científicos e investigadores no contaban con computadoras ni programas numéricos avanzados para la resolución de distintas ecuaciones del tipo diferenciales no lineales, justificando las asunciones asumidas (Kuo, 2005). En la actualidad, realizar asunciones como las de Tanford y Pease, ya no son válidas, puesto que existen distintos programas que toman en consideración diversos factores, como las presiones, las temperaturas, la reacción química, la estructura del combustible; resultando suficiente y de carácter preciso para la determinación de la velocidad de llama laminar (Kuo, 2005).

1.11 Métodos experimentales

1.11.1 Método del quemador Bunsen

En el año 1855, el investigador Bunsen, inventó un quemador de premezcla para uso en laboratorio, cuya representación se muestra en la Figura 33.

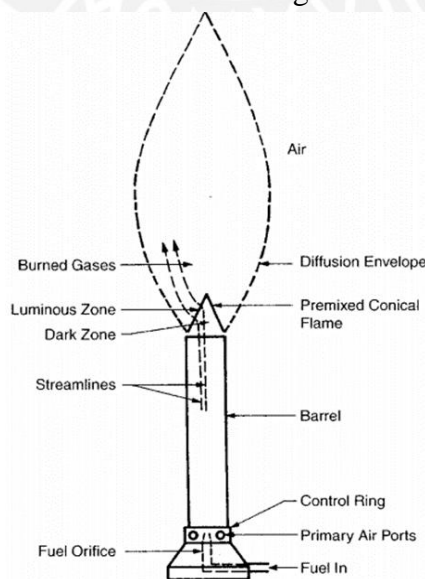


Figura 33. Representación del quemador desarrollado por Bunsen (Kuo, 2005).

De la Figura 33, gracias a los denominados “puertos de aire primarios”, ubicados en la parte inferior del quemador, el aire conseguirá ingresar al quemador por medio de la inducción producida por la velocidad del flujo de combustible gaseoso, la cual es mucho mayor. En consecuencia, tanto el aire como el combustible viajarán a través de la longitud y se mezclarán de forma homogénea hasta su llegada a la parte superior del quemador (Kuo, 2005). Gracias a esta configuración, se puede conseguir una llama premezclada. Por otro lado, el anillo de control, controlará el flujo de aire de ingreso al quemador. Para poder determinar la velocidad de llama laminar haciendo uso del método del quemador Bunsen, se aplica la Ecuación 5.

$$S_L = V_t * \frac{A_t}{A_f} \quad (5)$$

Donde:

S_L : velocidad de llama laminar

A_t : área de la superficie cónica del cono más interno

A_f : área de la sección transversal del tubo

V_t : velocidad promedio del flujo en el tubo

A continuación, se presenta en la Figura 34. un esquema de la representación de cada variable indicada en la Ecuación 5.

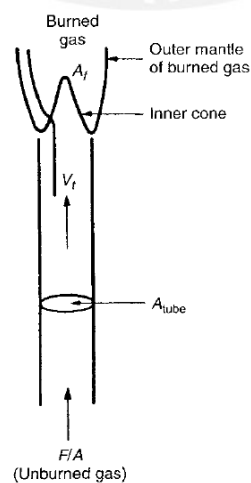


Figura 34. Esquema del flujo cerca de la boca del quemador (Kuo, 2005).

De la Ecuación 5, a primera vista es una expresión de fácil resolución, sin embargo, la dificultad radica en la determinación del área de la superficie cónica del cono más interno, ya que esta dependerá directamente del método óptico que se emplee, de acuerdo a esto, se puede obtener una de las superficies de las zonas que se muestran en la Figura 33. (Kuo, 2005). De lo anterior mencionado, ya se puede observar una posible fuente de error en relación a este método, una mala o deficiente configuración óptica influirá notablemente en el resultado de la velocidad de combustión laminar. Otra fuente de error que se puede destacar, es la pérdida de calor a través de las paredes del quemador, ya que estas jamás se podrán eliminar por completo (Glassman & Yetter, 2008). Asimismo, para este método se requiere de una fuente constante de suministro del gas a emplear, lo cual para los casos donde se requiera experimentar con gases raros o puros, es de difícil adquisición (Bisso Carrasco, 2015). Esta metodología tiene como precisión la medición de la velocidad de llama laminar un orden del $\pm 20\%$ (Kuo, 2005).

1.11.2 Método de la bomba a volumen constante

En el método de la bomba a volumen constante, la llama laminar estará circulando alrededor de una cámara esférica, es decir, no será de carácter estacionario, pero no perderá su característica laminar (Kuo, 2005). Como indica el nombre de este método, su principal instrumentación consiste en una cámara esférica que suele tener un diámetro de alrededor de 30 cm, en cuyo centro se da la ignición de la mezcla (Kuo, 2005). Asimismo, para conseguir visualizar las características físicas de la llama, la cámara esférica tiene ventanas acopladas a la cámara (Kuo, 2005). En este método se asume que existe equilibrio completo por detrás del frente de llama (una primera fuente de error), y si a esto se le agrega el comportamiento no estacionario de la llama, resulta en un proceso complicado para obtener una precisión exacta de los valores de velocidad de llama laminar, los cuales suelen ser menores que los valores reales (Kuo, 2005).

1.11.3 Método de la bomba a presión constante (burbuja de jabón)

En este método, la mezcla de gases está contenida en una burbuja de jabón y se enciende en el centro por medio de un par de electrodos que generan una chispa de modo que se produce una llama esférica la cual se propagara radialmente a través de la mezcla (Glassman & Yetter, 2008). El nombre de bomba a presión constante se le atribuye debido a que el gas está encerrado en una película de jabón, lo cual permitirá que la presión permanezca constante, sin embargo, los principales problemas de este método radican en que no se puede aplicar a todo tipo de mezclas, específicamente no se puede aplicar a mezclas secas (Kuo, 2005). Esto principalmente porque este tipo de mezclas pueden ganar humedad debido a la evaporación de solución de la pompa de jabón (Kuo, 2005). Otros problemas a destacar son: la existencia de pérdidas de calor en los electrodos, el frente de llama para el caso de llamas lentas no puede permanecer de forma esférica y el ancho de la zona de reacción se vuelve más largo (Kuo, 2005). En la Figura 35, se puede apreciar el método explicado.

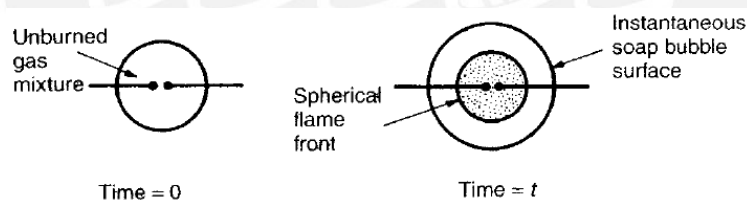


Figura 35. Configuración experimental del método de la bomba a presión constante (Kuo, 2005).

1.11.4 Método del quemador de llama plana

El método del quemador de llama plana se le atribuye al investigador Powling, por lo cual también se le conoce como “método del quemador Powling”. Este método consiste en conseguir que el frente de llama sea plano, esto por medio de la regulación de la mezcla gaseosa hasta lograr tener velocidades de igual magnitud de los gases de salida y la velocidad de llama laminar. En caso de no conseguir el frente de llama plano, la llama adoptará una geometría de carácter cónico o en el peor de los casos se apagará (Bisso Carrasco, 2015). Para lograr conseguir el frente de llama plano, se emplea un disco metálico de superficie porosa, o, una

serie de tubos pequeños de 1mm de diámetro o menos, todos estos ubicados a la salida del tubo más largo de flujo (Kuo, 2005). Gracias a que el frente de llama es plano, solo se tiene una zona para medir, a diferencia de las distintas zonas mostradas en la Figura 33, en consecuencia, se tendrá una mayor precisión en la determinación de la velocidad de llama. Sin embargo, este método solo sirve a bajas velocidades de llama, de hasta aproximadamente 15cm/s, con lo cual su rango de aplicación en otras sustancias o con diferentes parámetros a establecer es bastante limitado. Por otro lado, investigadores como Botha y Spalding lograron conseguir aumentar su rango operativo mediante el enfriamiento del disco poroso (Kuo, 2005). En la Figura 36, se muestra una representación de la configuración que emplea este método.

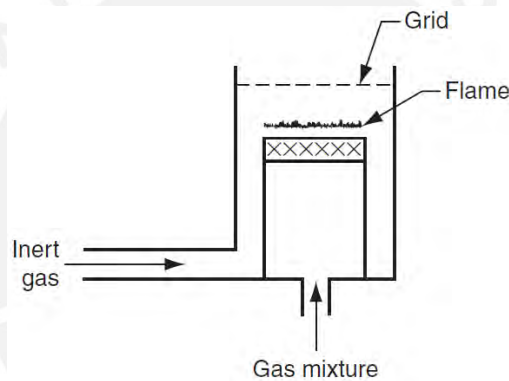


Figura 36. Configuración del quemador de llama plana (Kuo, 2005).

1.12 Propiedades del gas natural, CO₂ y biogás

Se ensayará un biogás simulado con distintas composiciones de gas natural de Camisea y CO₂. Las propiedades químicas como físicas del gas natural varían de acuerdo a la composición de la mezcla particular que tenga este combustible, es decir, dependiendo de la cantidad de metano y etano, los cuales son los principales componentes del gas natural, se tendrá diferentes características y propiedades. En las Tablas 2 y 3, se presenta la composición química y las características o propiedades del gas natural que se empleó, respectivamente.

Tabla 2: Composición química del gas natural de Camisea

Componente	Fórmula	Porcentaje
Metano	CH ₄	88.54
Etano	C ₂ H ₆	10.32
Propano	C ₃ H ₈	0.02
Nitrógeno	N ₂	0.54
Dióxido de Carbono	CO ₂	0.58

Fuente: Camisea.

Tabla 3: Características del gas natural

Propiedad	Condición	Valor
Masa Molecular	-	17.7
Gravedad Específica	-	0.61
Densidad (kg/m ³)	-	0.7442
Factor Z	15.6 °C y 101.325 kPa	0.9971
Factor Z	15.6 °C y 10 000 kPa	0.7644
Factor Z	15.6 °C y 15 000 kPa	0.7262
Viscosidad	15.6 °C y 101.325 kPa	0.0109
Calor Específico (kJ/kg °C)	15.6 °C y 101.325 kPa	0.9971
Poder Calorífico Superior (MJ/Nm ³)	-	39.93
Poder Calorífico Inferior (MJ/Nm ³)	-	36.04
Índice de Wobbe (MJ/Nm ³)	-	46 a 56
Punto de rocío para hidrocarburos	De 1 a 35 MPa	-10

Fuente: Camisea

Para el caso del CO₂ (dióxido de carbono) a emplear, sus propiedades químicas se presentan en la Tabla 4. Asimismo, para tener una referencia del biogás sus propiedades se presentan en la Tabla 5.

Tabla 4: Propiedades del dióxido de carbono (CO₂)

Propiedades (a 20°C y 101.325 kPa)	Cantidad	Unidad
Peso Molecular	44.009	kg/mol
Densidad	1.8417	kg/m ³
Constante individual del gas	0.189	kJ/kg K
Calor específico a presión constante	0.858	kJ/kg K
Calor específico a volumen constante	0.660	kJ/kg K
Entalpía de formación (a 25°C y 100 kPa)	-393522	kJ/kmol
Cambio de Fase		
Sublimación (a 1 atm)	163.9	K
Punto de ebullición	194.7	K
Presión de Vapor (a 293 K)	57.3	bar
Punto Triple	216.58	K

	5.18	bar
Punto crítico		
Temperatura crítica	304.18	K
Presión crítica	73.8	bar
Densidad crítica	478.78	kg/m ³
Factor de compresibilidad	0.268	-

Fuente: CO₂ adsorption by conventional and nanosized zeolites. (Bakhtyari et al., 2020) y Flujo de fluidos, Crane (Tabla a-7a).

Tabla 5: Propiedades del biogás

Propiedad	Valor	Unidad
Volumen de dióxido de carbono	1	m ³ _{co2} / m ³ _{gas}
%Máximo de dióxido de carbono	18.14	% vol.
Poder calorífico inferior (PCI)	20.35	MJ/m ³ _{gas}
Poder calorífico superior (PCS)	22.64	MJ/m ³ _{gas}
Densidad relativa	0.94	-
Volumen teórico de aire	5.712	m ³ _{aire} / m ³ _{gas}
Volumen de humos secos	6.715	m ³ _{hs} / m ³ _{gas}
Volumen de humos húmedos	5.512	m ³ _{hh} / m ³ _{gas}
Volumen de agua	1.2	m ³ _{agua} / m ³ _{gas}

Fuente: ESTUDIO EXPERIMENTAL DE LA ESTABILIDAD DE LLAMA DE BIOGÁS EN UN SISTEMA DE PREMEZCLA. Energética (39), 35–42. (Díaz González et al., 2008)

CAPÍTULO 2:

METODOLOGÍA NUMERICA PARA LA DETERMINACIÓN DE LOS PRODUCTOS DE COMBUSTIÓN, TEMPERATURA Y VELOCIDAD DE LLAMA Y DESARROLLO DEL APLICATIVO MATLAB

2.1 Descripción

Para la determinación de los productos de combustión y sus respectivas fracciones molares, se empleó una metodología matemática basada en el uso de métodos numéricos (expansión de series de Taylor, Newton Raphson y eliminación Gaussiana), la cual fue desarrollada en la Universidad de Wisconsin (Olikara & Borman, 1975). En principio, aplicando la termodinámica de equilibrio y considerando que el combustible de acuerdo a David R. Lide (1990-1991) tiene una composición de C_n, H_m, O_l, N_k , y se mezcla con el aire a una relación de equivalencia ϕ , al reaccionar este sistema se forman los productos a una determinada temperatura T, y a una presión P en estado de equilibrio (López et al., 2003). Como consideración se tiene que los valores de n y m no pueden ser cero, pero si lo pueden ser l y k . Asimismo, de acuerdo a Stephen R. Turns, (2000) cuando existe la disociación por la alta temperatura se forman hasta 12 productos de la combustión. Con esto mencionado se plantea la Ecuación 6 correspondiente a la reacción de combustión.

$$x_{13} \left[C_n + H_m + O_l + N_k + \frac{n + \frac{m}{4} - \frac{l}{2}}{\phi} (O_2 + 3.7274N_2 + 0.0444Ar) \right] \quad (6)$$
$$\rightarrow x_1H + x_2O + x_3N + x_4H_2 + x_5OH + x_6CO + x_7NO + x_8O_2$$
$$+ x_9H_2O + x_{10}CO_2 + x_{11}N_2 + x_{12}Ar$$

Donde:

$x_1 \rightarrow x_{12}$: fracciones molares de cada especie correspondiente a los productos

x_{13} : moles de combustible que dan 1 mol de productos

Vale destacar, que para mezclas ricas en combustible el valor de ϕ es mayor a 1, y para mezclas pobres de combustible, ϕ es menor a 1. Asimismo, para una mezcla estequiométrica ϕ es equivalente a 1.

2.2 Desarrollo del método

En primer lugar, la parte izquierda de la Ecuación 6 se puede escribir como la Ecuación 7 presentada a continuación.

$$x_{13}[nC + mH + rO_2 + r'N_2 + r''Ar] \quad (7)$$

Donde los valores de r, r', r'', r_o , se presentan en las ecuaciones 8 - 11 respectivamente:

$$r = \frac{l}{2} + r_o \quad (8)$$

$$r' = \frac{k}{2} + 3.7274 r_o \quad (9)$$

$$r'' = 0.0444 r_o \quad (10)$$

$$r_o = \frac{n + \frac{m}{4} - \frac{l}{2}}{\phi} \quad (11)$$

Con lo anterior definido, se realiza el balance de átomos para cada elemento.

Balance C:

$$x_6 + x_{10} = nx_{13} \quad (12)$$

Balance H:

$$x_1 + 2x_4 + x_5 + 2x_9 = mx_{13} \quad (13)$$

Balance O:

$$x_2 + x_5 + x_6 + x_7 + 2x_8 + x_9 + 2x_{10} = 2rx_{13} \quad (14)$$

Balance N:

$$x_3 + x_7 + 2x_{11} = 2r'x_{13} \quad (15)$$

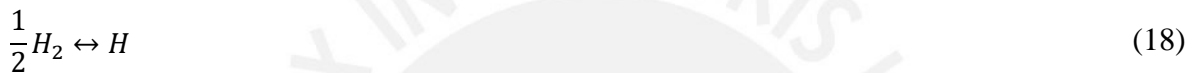
Balance Ar:

$$x_{12} = r''x_{13} \quad (16)$$

Además, se tiene como condición que todas las fracciones molares deben sumar la unidad, lo cual se traduce en la Ecuación 17.

$$x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_5 + x_6 + x_7 + x_8 + x_9 + x_{10} + x_{11} + x_{12} = 1 \quad (17)$$

De las anteriores ecuaciones definidas, se puede observar que se cuenta con 6 ecuaciones (ecuaciones 12, 13, 14, 15, 16 y 17) y 13 incógnitas ($x_1 \rightarrow x_{13}$), por lo cual, se requieren de 7 ecuaciones adicionales que permita la solución total del sistema. Con el objetivo de resolver el sistema de ecuaciones, se presentan 7 reacciones químicas que se pueden dar en la combustión y que se seleccionaron para que se dé el equilibrio en los productos.



Asimismo, cada una de estas reacciones (ecuaciones 18 - 24) cuenta con una constante de equilibrio a presión parcial, que se definen las ecuaciones 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, respectivamente.

$$K_1 = \frac{x_1 * p^{\frac{1}{2}}}{x_4^{\frac{1}{2}}} \quad (25)$$

$$K_2 = \frac{x_2 * p^{\frac{1}{2}}}{x_8^{\frac{1}{2}}} \quad (26)$$

$$K_3 = \frac{x_3 * p^{\frac{1}{2}}}{x_{11}^{\frac{1}{2}}} \quad (27)$$

$$K_5 = \frac{x_5}{x_4^{\frac{1}{2}} * x_8^{\frac{1}{2}}} \quad (28)$$

$$K_7 = \frac{x_7}{x_8^{\frac{1}{2}} * x_{11}^{\frac{1}{2}}} \quad (29)$$

$$K_9 = \frac{x_9}{x_4 * x_8^{\frac{1}{2}} * p^{\frac{1}{2}}} \quad (30)$$

$$K_{10} = \frac{x_{10}}{x_6 * x_8^{\frac{1}{2}} * p^{\frac{1}{2}}} \quad (31)$$

Debido a que las condiciones de trabajo son a presión constante a 1atm de presión, la presión no influye en los valores de las constantes de equilibrio de cada una de las reacciones. Por otro lado, las constantes de equilibrio fueron ajustadas por el método de mínimos cuadrados tomando datos de JANAF Thermochemical Tables (1985) en el rango de 600 K a 4000 K (Chase et al., 1985). Asimismo, estudios teóricos sugieren la Ecuación 32 como las constantes de equilibrio en función de la temperatura (Klotz, 1964).

$$\log(K_p) = A * \ln(T) + \frac{B}{T} + C + DT + ET^2 \quad (32)$$

Donde:

T : temperatura absoluta

A, B, C, D, E : constantes

Esta ecuación servirá para determinar los valores de cada K_p correspondiente a cada una de las reacciones. Las constantes para cada reacción se encuentran en el Anexo A. Con las

ecuaciones 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, se pueden expresar todos los productos de combustión en términos de x_4 , x_6 , x_8 y x_{11} , los cuales son las fracciones molares de H_2 , CO , O_2 y N_2 respectivamente. Estas expresiones están definidas en las ecuaciones 33, 34, 35, 36, 37, 38, 39.

$$x_1 = C_1 * x_4^{\frac{1}{2}} \quad \text{donde: } C_1 = K_1/p^{\frac{1}{2}} \quad (33)$$

$$x_2 = C_2 * x_8^{\frac{1}{2}} \quad \text{donde: } C_2 = K_2/p^{\frac{1}{2}} \quad (34)$$

$$x_3 = C_3 * x_{11}^{\frac{1}{2}} \quad \text{donde: } C_3 = K_3/p^{\frac{1}{2}} \quad (35)$$

$$x_5 = C_5 * x_4 * x_8^{\frac{1}{2}} \quad \text{donde: } C_5 = K_5 \quad (36)$$

$$x_7 = C_7 * x_8^{\frac{1}{2}} * x_{11}^{\frac{1}{2}} \quad \text{donde: } C_7 = K_7 \quad (37)$$

$$x_9 = C_9 * x_4 * x_8^{\frac{1}{2}} \quad \text{donde: } C_9 = K_9 * p^{\frac{1}{2}} \quad (38)$$

$$x_{10} = C_{10} * x_6 * x_8^{\frac{1}{2}} \quad \text{donde: } C_{10} = K_{10} * p^{\frac{1}{2}} \quad (39)$$

Con estas expresiones definidas, se prosigue a disminuir el número de ecuaciones. En primer lugar, la Ecuación 8 se puede reescribir como la Ecuación 40 presentada a continuación:

$$x_{13} = \frac{x_6 + x_{10}}{n} \quad (40)$$

Asimismo, usando las ecuaciones 16 y 40, se obtiene la Ecuación 41.

$$x_{12} = r''x_{13} = \frac{r''(x_6 + x_{10})}{n} \quad (41)$$

Se emplean las ecuaciones 40 y 41 para eliminar x_{12} y x_{13} de las ecuaciones de los balances (12, 13, 14, 15 y 16) y la ecuación 17 para obtener las ecuaciones 42, 43, 44, 45.

$$x_1 + 2x_4 + x_5 + 2x_9 - \frac{m}{n}(x_6 + x_{10}) = 0 \quad (42)$$

$$x_2 + x_5 + x_6 + x_7 + x_9 + 2x_{10} - \frac{2r}{n}(x_6 + x_{10}) = 0 \quad (43)$$

$$x_3 + x_7 + 2x_{11} - \frac{2r'}{n}(x_6 + x_{10}) = 0 \quad (44)$$

$$\sum_{i=1}^{11} x_i + \frac{r''}{n} (x_6 + x_{10}) - 1 = 0 \quad (45)$$

Ahora las ecuaciones correspondientes a las constantes de equilibrio de cada reacción (25, 26, 27, 28, 29, 30 y 31) se pueden emplear en las ecuaciones 42, 43, 44 y 45 para eliminar las variables y obtener 4 expresiones en función de x_4 , x_6 , x_8 y x_{11} . El resultado sería 4 ecuaciones no lineales con 4 incógnitas, las cuales se pueden expresar simbólicamente como la Ecuación 46:

$$f_j(x_4, x_6, x_8, x_{11}) = 0, \quad j = 1, 2, 3, 4 \quad (46)$$

A continuación, se emplea la serie de Taylor con el objetivo de linealizar las ecuaciones representadas en la Ecuación 46. En primer lugar, se debe conocer un vector cercano a la solución verdadera. Asumiendo que se conoce dicho vector, el cual se encuentra cerca del vector solución, expresado de la siguiente manera:

$$[x_4^{(1)}, x_6^{(1)}, x_8^{(1)}, x_{11}^{(1)}]$$

Donde el vector solución es:

$$[x_4^*, x_6^*, x_8^*, x_{11}^*]$$

Las funciones del lado izquierdo de las ecuaciones (Ecuación 46), pueden ser expandidas alrededor del vector solución como una serie de Taylor. Se define la ecuación 47:

$$\Delta x_i = x_i^* - x_i^{(1)}, \quad i = 4, 6, 8, 11 \quad (47)$$

Ignorando las derivadas parciales de orden 2 en adelante, se obtienen una serie de ecuaciones lineales expresadas de manera general en la Ecuación 48:

$$f_j + \frac{\partial f_j}{\partial x_4} \Delta x_4 + \frac{\partial f_j}{\partial x_6} \Delta x_6 + \frac{\partial f_j}{\partial x_8} \Delta x_8 + \frac{\partial f_j}{\partial x_{11}} \Delta x_{11} \cong 0, \quad j = 1, 2, 3 \quad (48)$$

Con ello, las derivadas parciales son evaluadas en el vector conocido. Posteriormente, esta serie de ecuaciones ya linealizadas se pueden resolver haciendo uso de un método de

eliminación de Gauss, de donde se obtendrían los valores de $\Delta x_4, \Delta x_6, \Delta x_8, \Delta x_{11}$. Luego, con el objetivo de acercarse más al vector solución, se mejoran los valores obtenidos haciendo uso de la ecuación 49:

$$x_i^{(2)} = x_i^{(1)} + \Delta x_i, \quad i = 4, 6, 8, 11 \quad (49)$$

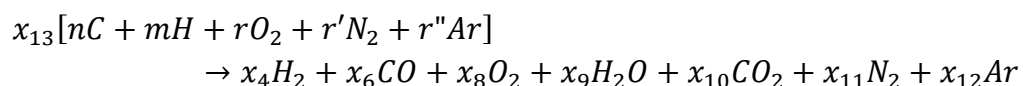
El vector mejorado vuelve a ingresar a cada una de las derivadas parciales y sus funciones. De esta manera se vuelve un proceso iterativo hasta que cada Δx_i sea menor o igual a 0.0001, valor definido para obtener una buena precisión para cada fracción molar. Las funciones y las fracciones molares (Ecuación 46) dependen también de la temperatura, presión y ratio de equivalencia, por ejemplo, si se obtienen todas las derivadas de cada ecuación respecto de la temperatura se obtienen 4 ecuaciones lineales con 4 incógnitas, como se observa en la Ecuación 50 (Olikara & Borman, 1975).

$$\frac{\partial f_j}{\partial T} + \frac{\partial f_j}{\partial x_4} \frac{\partial x_4}{\partial T} + \frac{\partial f_j}{\partial x_6} \frac{\partial x_6}{\partial T} + \frac{\partial f_j}{\partial x_8} \frac{\partial x_8}{\partial T} + \frac{\partial f_j}{\partial x_{11}} \frac{\partial x_{11}}{\partial T} \cong 0, \quad j = 1, 2, \quad (50)$$

Para la matriz de ecuaciones correspondiente a la presión y ratio de equivalencia se aplica la misma ecuación (Ecuación 50), reemplazando la variable T por p o F según corresponda.

2.3 Primeras estimaciones

Para poder iniciar el proceso iterativo anteriormente descrito, se requiere de un vector conocido cercano al vector solución. Para este caso, se asume una reacción donde los productos de combustión son solamente $H_2, CO, O_2, H_2O, CO_2, N_2$ y Ar . Por lo cual, se obtendría una ecuación de reacción de combustión de la siguiente forma:



Del balance de C (Ecuación 12) y la Ecuación 36, se obtiene la Ecuación 51:

$$x_6 = \frac{n * (x_{13})}{1 + C_{10} * x_8^{\frac{1}{2}}} \quad (51)$$

Del balance de H (Ecuación 13) y la Ecuación 38, se obtiene la Ecuación 52:

$$x_4 = \frac{0.5 * m * (x_{13})}{1 + C_9 * x_8^{\frac{1}{2}}} \quad (52)$$

De los balances de N (Ecuación 15), Ar (Ecuación 16) y O (Ecuación 14), se obtienen las ecuaciones 53, 54 y 55:

$$x_{11} = r'x_{13} \quad (53)$$

$$x_{12} = r''x_{13} \quad (54)$$

$$x_6 + 2x_8 + x_9 + 2x_{10} = 2rx_{13} \quad (55)$$

Sustituyendo en las anteriores ecuaciones por x_6 , x_9 y x_{10} , reagrupando términos y dividiendo entre x_{13} se obtiene la Ecuación 56.

$$\frac{2C_{10}nx_8^{\frac{1}{2}} + n}{1 + C_{10} * x_8^{\frac{1}{2}}} + \frac{0.5C_9m(x_8^{\frac{1}{2}})}{1 + C_9 * x_8^{\frac{1}{2}}} + \frac{2x_8}{x_{13}} - 2r = 0 \quad (56)$$

Por otro lado, la cantidad x_{13} puede ser estimada con una buena aproximación de la condición de que las fracciones molares deben sumar la unidad, como se muestra en la Ecuación 57.

$$x_4 + x_6 + \sum_{i=8}^{12} x_i = 1 \quad (57)$$

Asimismo, por un lado, para valores de ϕ menores o iguales a 1, una buena estimación de x_{13} sería la Ecuación 58.

$$x_{13} = \frac{1}{\frac{m}{4} + r + r' + r''} \quad (58)$$

Por otro lado, para valores ϕ mayores a 1, una buena estimación de x_{13} sería la Ecuación 59.

$$x_{13} = \frac{1}{n + \frac{m}{2} + r' + r''} \quad (59)$$

Sustituyendo la estimación de x_{13} , dependiendo del valor de ϕ , en la ecuación 56 se obtiene una ecuación con una única incógnita (x_8), la cual se resuelve aplicando el método de Newton Raphson. Una vez obtenido el valor de x_8 , los otros valores desconocidos se pueden obtener mediante reemplazo directo de x_8 en las ecuaciones 53, 54 y 55. Con este primer vector estimado ($x_4^{(1)}, x_6^{(1)}, x_8^{(1)}, x_{11}^{(1)}$), el cual se encuentra cerca al vector solución, se puede dar inicio al proceso iterativo anteriormente descrito.

2.4 Determinación de la temperatura de llama adiabática

Para calcular la temperatura de llama adiabática, se aplica la igualdad entre las entalpías de los reactantes y los productos, las cuales están en función de la temperatura, presión y ratio de equivalencia (Ecuación 60).

$$h(T, p_o, F_o) - h_r(T_o, p_o, F_o) = 0 \quad (60)$$

Aplicando el método de Newton (ecuación 61):

$$T_{n+1} = T_n - \frac{h(T_n, p_o, F_o) - h_r}{(\partial h / \partial T)_n} \quad (61)$$

De la Ecuación 61, es posible definir a T_n como la primera estimación de la temperatura de llama adiabática, es decir, el valor de temperatura que se asume para empezar todo el procedimiento de cálculo, este valor puede ser cualquier número razonable, pero de preferencia mayor al resultado esperado (Olikara & Borman, 1975). Asimismo, se define a T_{n+1} como el valor mejorado del estimado. Para determinar T_{n+1} , el valor de T_n es el asumido, h_r se obtiene de las condiciones iniciales a las cuales ingresan los reactantes, $h(T_n, p_o, F_o)$ se obtiene una vez calculado los productos de combustión a la temperatura T_n asumida. Finalmente $(\partial h / \partial T)_n$ proviene del desarrollo de la Ecuación 62.

$$h(T_n, p_o, F_o) = \sum_{i=1}^{12} x_i h_i / M \quad (62)$$

Derivando respecto a la temperatura se obtiene la Ecuación 63.

$$\frac{\partial h}{\partial T} = \frac{1}{M} \left[\sum_{i=1}^{12} \left(x_i \frac{dh_i}{dT} + \frac{dx_i}{dT} h_i \right) - \frac{\partial M}{\partial T} h(T_n, p_o, F_o) \right] \quad (63)$$

De la ecuación 63, se define a $\frac{\partial M}{\partial T}$ como el valor de la masa molar de la mezcla respecto de la temperatura, la cual se determina mediante la Ecuación 64.

$$\frac{\partial M}{\partial T} = \sum_{i=1}^{12} \frac{\partial x_i}{\partial T} M_i \quad (64)$$

Asimismo, hay que notar que $\frac{dh_i}{dT} = Cp_i$, es decir, el calor específico de las especies a presión constante. Por otro lado, $\frac{dx_i}{dT}$ se determina a partir de las ecuaciones 33 – 39. El proceso iterativo concluirá cuando se cumpla la Ecuación 65:

$$\frac{h(T_n, p_o, F_o) - h_r}{(\partial h / \partial T)_n} \leq 1 \quad (65)$$

Las derivadas parciales presentes en el procedimiento, se encuentran en los Anexos 2, 3, 4 y 5.

2.5 Determinación de la velocidad de llama mediante la teoría de Mallard-Le Chateller

Para la determinación de la velocidad de llama laminar haciendo uso de asunciones y ecuaciones netamente teóricas, se empleará como método la teoría térmica de Mallard-Le Chateller. Según lo mencionado anteriormente en el Marco Teórico desarrollado, esta teoría tiene como principal idea el asumir que el control de la propagación de la llama se realiza mediante la propagación del calor a través de las diferentes capas de gas (Glassman & Yetter,

2008). A continuación, se describe la secuencia e ideas asumidas por este método. En primer lugar, Mallar-Le Chateller afirmaron que el calor conducido desde la zona II (Ver Figura 5.) es igual al necesario para conseguir que la temperatura de los gases no quemados sea igual a la temperatura de ignición, es decir, en el límite de las zonas I y II (Ver Figura 5) (Glassman & Yetter, 2008). Si se asume que la pendiente de la curva de temperatura es lineal, la pendiente puede aproximarse mediante la Ecuación 66. (Glassman & Yetter, 2008).

$$(T_f - T_i)/\delta \tag{66}$$

Donde:

T_f : temperatura final de la llama

T_i : temperatura de ignición

δ : ancho de la zona de reacción

Empleando la Ecuación 66, se puede plantear la Ecuación 67 correspondiente al equilibrio de entalpías de las zonas I y II:

$$\dot{m} * C_p(T_i - T_o) = \lambda * \frac{T_f - T_i}{\delta} * A \tag{67}$$

Donde:

\dot{m} : flujo másico de la mezcla de gas no quemado en la onda de combustión

T_o : temperatura de los gases no quemados

λ : coeficiente de conductividad térmica

A : área de la sección transversal tomada como unidad

Además, como se trata de un caso unidimensional, el flujo másico de la mezcla de gas no quemado en la onda de combustión se puede expresar mediante la Ecuación 68, mostrada a continuación:

$$\dot{m} = \rho * A * u \tag{68}$$

Donde:

ρ : densidad

u : velocidad de los gases no quemados

Al ser un caso unidimensional, la variable u correspondiente a la velocidad de los gases no quemados tendrá una dirección normal respecto a la onda de combustión. Empleando esto último mencionado y recordando la definición de velocidad de llama laminar, u se expresa de acuerdo a la Ecuación 69:

$$u = S_L \quad (69)$$

Donde:

S_L : velocidad de llama laminar

Empleando las ecuaciones 67 y 68, se prosigue a reemplazarlas en el balance de entalpías (Ecuación 67) correspondiente a la reacción de combustión (Ecuación 70):

$$\rho * A * S_L * C_p(T_i - T_o) = \lambda * \frac{T_f - T_i}{\delta} * A \quad (70)$$

Al despejar S_L , queda expresado según la Ecuación 71 mostrada a continuación:

$$S_L = \frac{\lambda}{\rho} * \frac{T_f - T_i}{\delta * C_p(T_i - T_o)} \quad (71)$$

La Ecuación 71 es la expresión obtenida por Mallard-Le Chateller para determinar la velocidad de llama laminar. Sin embargo, para poder realizar el cálculo de la velocidad de llama mediante esta expresión, no se cuenta con el valor del ancho de la zona de reacción (δ), por lo cual, se relaciona δ con la velocidad de llama mediante la Ecuación 72.

$$\delta = S_L * T \quad (72)$$

Donde:

T : tiempo de reacción

El tiempo de reacción, está relacionado con la tasa de reacción mediante la Ecuación 73:

$$\delta = S_L * \frac{1}{RR} \quad (73)$$

Donde:

RR : tasa de reacción

Se despeja δ en la ecuación correspondiente a la obtenida por Mallard-Le Chateller (Ecuación 74):

$$\delta = \frac{\lambda}{\rho} * \frac{T_f - T_i}{S_L * C_p(T_i - T_o)} \quad (74)$$

Se pasa a relacionar las ecuaciones 73 y 74, se despeja S_L y se muestra a continuación la Ecuación 75:

$$S_L = \left(\frac{\lambda}{\rho} * \frac{T_f - T_i}{C_p(T_i - T_o)} * RR \right)^{1/2} \sim (\alpha * RR)^{1/2} \quad (75)$$

Donde:

α : difusividad térmica

De la Ecuación 75, se puede afirmar que la velocidad de llama laminar depende directamente de la tasa de reacción (RR) y la difusividad térmica (α). La difusividad térmica (α) es la propiedad de un material que caracteriza la velocidad a la cual el calor se difunde a través de él, representando su capacidad para conducir energía térmica en relación con su capacidad para almacenarla, y se define como el cociente entre la conductividad térmica y el producto de la densidad y la capacidad calorífica a presión constante (Hahn & Necati Özişik, 2012). Por otro lado, Mallard-Le Chatelier no especifican a que temperatura la tasa de reacción debe ser calculada (Kuo, 2005). Asimismo, la tasa de reacción depende de diversas variables,

como el grado de reacción y la presión. En la Ecuación 76, se presenta la ecuación correspondiente a la tasa de reacción:

$$RR = k * \varepsilon^n p^{n-1} \quad (76)$$

Donde:

k : constante de rapidez

ε : progreso de reacción

n : grado de reacción

p : presión

Se tiene por conocimiento que a medida que la temperatura aumenta, el valor de la velocidad de reacción aumentará, ya que se está incrementando la energía cinética de las moléculas presentes en la reacción. Este efecto se describe mediante la ecuación de Arrhenius, la cual, si es reemplazada en la Ecuación 76, se obtiene la Ecuación 77 correspondiente a la tasa de reacción desarrollada:

$$RR = A * e^{-\frac{E_a}{R_u T}} * \varepsilon^n p^{n-1} \quad (77)$$

Reemplazando la Ecuación 77 en la Ecuación 75, obtenemos la ecuación 78:

$$S_L = (\alpha * A * e^{-\frac{E_a}{R_u T}} * \varepsilon^n p^{n-1})^{1/2} \quad (78)$$

Como ya está desarrollada la ecuación correspondiente a la tasa de reacción, queda por analizar las variables dadas en la ecuación 78. En primer lugar, se puede afirmar que la velocidad de llama laminar es independiente de la presión para las reacciones de segundo orden, y como la mayoría de reacciones de hidrocarburos son de segundo orden, la presión quedaría fuera de la ecuación (Kuo, 2005). Además, la dependencia de la temperatura en la velocidad de llama es dominada por la exponencial. Con todo lo anterior mencionado, se puede asumir la ecuación 79 proveniente de la ecuación 78:

$$S_L = (e^{-\frac{E_a}{R_u T}})^{1/2} \quad (79)$$

Donde la temperatura T sería la temperatura de llama adiabática, ya que todas las reacciones químicas tienen lugar a ese valor de temperatura (Kuo, 2005). El valor de E_a para los cálculos se considera del promedio de dos valores: el primero fue establecido por Kuo, quien afirmó que, para la mayoría de las reacciones de hidrocarburos, la energía de activación es aproximadamente de 120 kJ/mol (Kuo, 2005); y el segundo de Markatou et al., quien estudió la oxidación de metano-aire y determinó una energía de activación de aproximadamente 130 kJ/mol (Markatou et al., 1993), por ende, el promedio es 125 kJ/mol o 29675.7 cal/mol. La Ecuación 79 será la expresión que se empleará para determinar la velocidad de llama.

2.6 Desarrollo del aplicativo MATLAB

2.6.1 Archivo New_code.m

La metodología numérica descrita en las secciones 4 y 5, fue codificada en MATLAB R2021b y desarrollada en un aplicativo empleando el MATLAB App Designer para obtener los productos de combustión, temperatura de llama adiabática y velocidad de llama laminar directamente seleccionando el combustible, y en caso aplique, el diluyente (CO₂) con su respectivo porcentaje en la mezcla.

La primera parte que compone al grupo de archivos de código MATLAB es denominada New_code.m, el cual es el primero en ejecutarse cuando se inicia el aplicativo. En este archivo se establece el combustible seleccionado, las ratios de equivalencia a calcular, la temperatura inicial asumida, y el diluyente (CO₂) con su respectivo porcentaje caso aplique (R. F. Cisneros & Rojas, 2023). Por otro lado, los índices correspondientes a los elementos del combustible (C, H, O, N) se encuentran almacenados en el archivo Reactants_Enthalpy.xlsx y los correspondientes al diluyente están en el archivo Reactants_Diluents.xlsx (R. F. Cisneros &

Rojas, 2023). Con estos datos, se determina la entalpía de los reactantes (h_r), considerando 298 K como temperatura inicial y 1 atm.

Posteriormente, se da paso a un bucle iterativo para obtener los productos de combustión haciendo uso del código del archivo `Fractions_Derivatives.m`, que luego permitirá realizar el primer ajuste de la temperatura de llama asumida inicialmente (R. F. Cisneros & Rojas, 2023). Empleando la Ecuación 54 o DELTA que es el nombre de la variable que se emplea en el código, se determina si su valor es menor o igual a 1, y se procede a determinar la velocidad de llama laminar empleando la Ecuación 67, concluyendo de esta manera el proceso iterativo. En caso DELTA no sea menor o igual a 1, el bucle continúa ajustando los productos de combustión y la temperatura de llama (R. F. Cisneros & Rojas, 2023).

2.6.2 Archivo `Fractions_Derivatives.m`

El archivo `Fractions_Derivatives.m`, permite calcular los 12 productos de combustión mediante el planteamiento de un sistema de ecuaciones matricial y resolviéndolo empleando el método de eliminación Gaussiana usando intercambio de filas, es decir, emplea las ecuaciones 8 – 11 para simplificar los elementos de la reacción de combustión; las ecuaciones 12 – 17 para el balance de los elementos, y las ecuaciones 25 – 31 para realizar el planteamiento de todas las fracciones molares en términos de x_4 , x_6 , x_7 y x_{11} empleando las 7 reacciones químicas como punto de partida (ecuaciones 18 - 24) (R. F. Cisneros & Rojas, 2023). Asimismo, en esta parte se realiza la linealización de la Ecuación 46 mediante la expansión de la serie de Taylor, y posterior resolución mediante el método de eliminación Gaussiana. Este método se aplica nuevamente para la resolución del sistema de ecuaciones matricial de cada fracción molar respecto de la temperatura, ratio de equivalencia y presión (Ecuación 50), usando la estrategia de máximo pivoteo (R. F. Cisneros & Rojas, 2023).

Una vez ajustadas las fracciones molares, se determinan la entalpía de los productos, la derivada de la entalpía respecto de la temperatura (Ecuación 63). Luego, estas tres variables son enviadas como resultados de la primera iteración a New_code.m, que emplea el método de Newton Raphson en el balance de entalpías (Ecuación 61) y obtiene una nueva temperatura ajustada.

2.6.3 Desarrollo de la aplicación en MATLAB en la interfaz MATLAB App Designer

El aplicativo MATLAB integra las funciones descritas en las secciones 2.6.1 y 2.6.2 respectivamente, cuyo desarrollo fue realizado en la interfaz del App Designer. La secuencia de codificación y los diagramas de flujo de la lógica de cada uno de los archivos mencionados anteriormente y la aplicación, se desarrollaron en el artículo “MATLAB Application for Determination of 12 Combustion Products, Adiabatic Temperature and Laminar Burning Velocity: Development, Coding and Explanation” (R. F. Cisneros & Rojas, 2024). Asimismo, una guía y breve explicación de sus de herramientas se pueden encontrar en el artículo “MATLAB Application for Determination of 12 Combustion Products, Adiabatic Temperature and Laminar Burning Velocity” (R. Cisneros & Rojas, 2024). En la Figura 37, se presenta la interfaz del aplicativo y sus herramientas principales. La Tabla 6 detalla un resumen de la información relacionada a las herramientas disponibles.

Tabla 6: Herramientas disponibles en la aplicación desarrollada en MATLAB.

Letra Figura 37	Nombre de Herramienta	Descripción	Tipo de Selección
A	Lista de combustibles	Lista de combustibles disponibles para el cálculo en la aplicación	Única
B	Lista de fracciones molares	Lista de las fracciones molares disponibles para graficar	Única
C	Lista de diluentes	Lista de diluentes disponibles para uso en el cálculo	Única
D	Barra de porcentaje de diluyente	Porcentaje de diluyente por volumen considerado en el cálculo	Única
E	Lista de resultados	Resultados de las fuentes disponibles para mostrar en la gráfica	Multiselección
F	Lista de gráficas	Tipo de gráfica para presentar en la ventana	Única

G	Medidor de velocidad de llama laminar	Presenta el valor de la velocidad de llama laminar correspondiente al valor del mando de ratio de equivalencia	NA
H	Medidor de temperatura de llama	Presenta el valor de la temperatura de llama correspondiente al valor del mando de ratio de equivalencia seleccionado	NA
I	Mando de ratio de equivalencia	Mando que muestra los valores de velocidad de llama laminar y temperatura de llama en sus respectivos medidores	Única

Fuente: Determination of 12 Combustion Products, Flame Temperature and Laminar Burning Velocity of Saudi LPG Using Numerical Methods Coded in a MATLAB Application. Energies (R. F. Cisneros & Rojas, 2023).

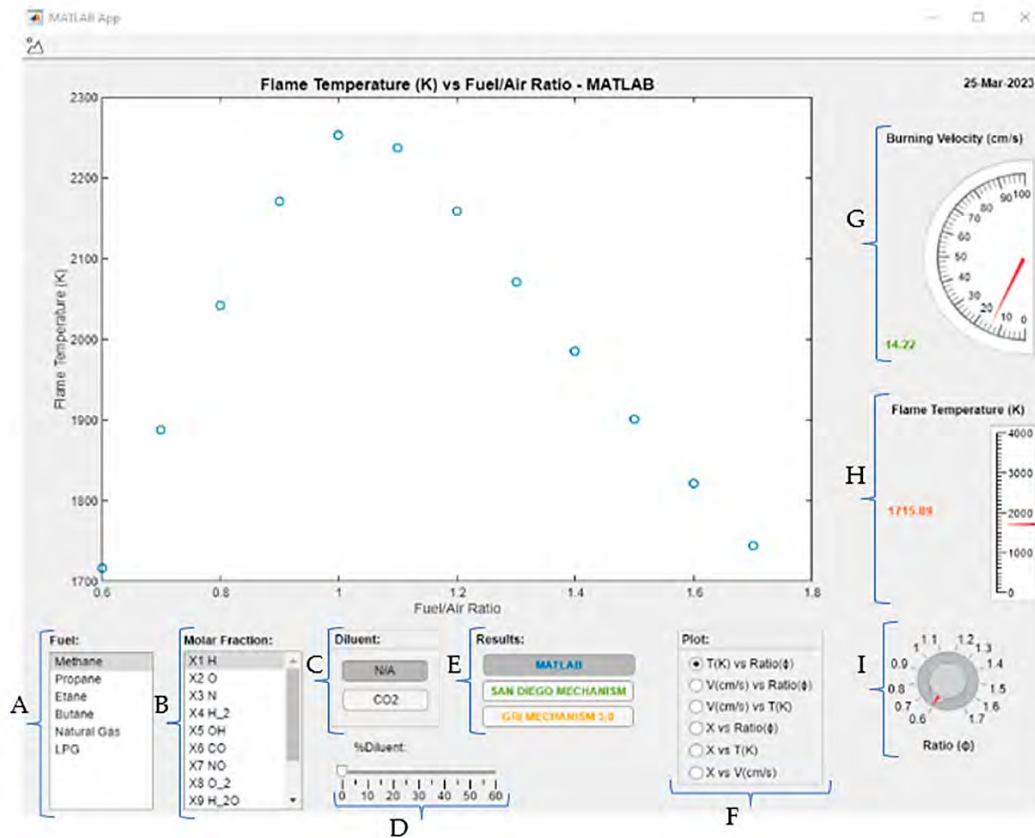


Figura 37. Ventana de aplicativo e identificación de herramientas y funciones (R. F. Cisneros & Rojas, 2023).

CAPÍTULO 3:

CÁLCULOS Y SIMULACIÓN NUMÉRICA DE LA COMBUSTIÓN DEL BIOGÁS

3.1 Cálculo numérico y ejemplificación de la metodología

Aplicando la metodología numérica para el cálculo de los productos, temperatura de llama y la teoría de Mallard-Le Chateller descrita en el Capítulo 2, y según la lógica del programa, se desarrolla como ejemplo de cálculo el de la mezcla estequiométrica para el biogás con 10% de CO₂ (gas Natural 90% y 10% de CO₂). En primer lugar, asumiendo como recomendación de Olikara (Olikara & Borman, 1975) una temperatura de 3333 K (6000 Rankine) como punto de inicio, se determinan las fracciones volumétricas de cada componente del biogás (Tabla 7). Con estos resultados, se pueden calcular los subíndices numéricos n , m , l , k de la mezcla (Tabla 8), la masa molar (AVM) y el C_p de la mezcla (Tabla 9).

Tabla 7: Fracciones volumétricas en el biogás

Componentes del gas natural de Camisea	Fórmula	Fracción en gas natural	Fracción en 90% de gas natural	Fracción en biogás
Metano	CH ₄	0.8854	0.79686	0.79686
Etano	C ₂ H ₆	0.1032	0.09288	0.09288
Nitrógeno	N ₂	0.0054	0.00486	0.00486
Propano	C ₃ H ₈	0.0002	0.00018	0.00018
Dióxido de Carbono	CO ₂	0.0058	0.00522	0.10522
Total	-	1	0.9	1

Tabla 8: Cálculo de los subíndices del combustible $C_n + H_m + O_l + N_k$

Componentes del biogás	Fórmula	n	m	l	k	Fracción	n	m	l	k
Metano	CH ₄	1	4	0	0	0.79686	0.79686	3.18744	0	0
Etano	C ₂ H ₆	2	6	0	0	0.09288	0.18576	0.55728	0	0
Nitrógeno	N ₂	0	0	0	2	0.00486	0	0	0	0.00972
Propano	C ₃ H ₈	3	8	0	0	0.00018	0.00054	0.00144	0	0
Dióxido de Carbono	CO ₂	1	0	2	0	0.10522	0.10522	0	0.21044	0
Totales	-	-	-	-	-	1	1.08838	3.74616	0.21044	0.00972

Tabla 9: Cálculo de AVM y C_p del biogás con 10% de CO₂

Componentes del biogás	Fórmula	Fracción	Masa Molar (kg/kmol)	Fracción * Masa Molar	y_i	C_p	C_p*y_i
Metano	CH ₄	0.79686	16.04276	12.7838	0.62815	2.0967	1,31704
Etano	C ₂ H ₆	0.09288	30.07	2.7929	0.13723	1.7662	0,24238
Nitrógeno	N ₂	0.00486	28.0134	0.13614	0.00668	1.0385	0,00694
Propano	C ₃ H ₈	0.00018	44.09	0.0079	0.00038	1.6794	0,00065

Dióxido de Carbono	CO ₂	0.10522	44.0098	4.63071	0.22753	0.7139	0,16243
			AVM biogás	20.3515	1	Cp biogás	1.7295

Con las fracciones de cada uno de los componentes, en la Tabla 10, se determina la entalpía de formación del biogás tomando como valor de referencia 0 K. Luego, en la ecuación 67, se calcula el calor sensible a 298 K, la cual es la temperatura real inicial de los reactantes.

Tabla 10: Cálculo de H_f del biogás con 10% de CO₂

Componente del biogás	Fórmula	Fracción	$H_f 0^\circ$ (kJ/mol)	H_f * Fracción
Metano	CH ₄	0.79686	-66.911	-53.3186
Etano	C ₂ H ₆	0.09288	-68.4	-6.3529
Nitrógeno	N ₂	0.00486	0	0
Propano	C ₃ H ₈	0.00018	-82.4	-0.0148
Dióxido de Carbono	CO ₂	0.10522	-393.151	-41.3673
			H_f biogás	-101.0538

$$H_{biogás\ 298K} = AVM * C_p * \frac{T}{1000} = 20.3515 * 1.72946 * \frac{298}{1000} = 10.4887 \frac{kJ}{mol} \quad (67)$$

Para determinar la entalpía de los reactantes, la cual es uno de los inputs necesarios para iniciar el cálculo, se calcula el coeficiente del aire mencionado en la Ecuación 6, haciendo uso de la Ecuación 68, en este caso ϕ será equivalente a 1, ya que es mezcla estequiométrica.

$$\begin{aligned} \text{Coeficiente del aire} &= \frac{n + \frac{m}{4} - \frac{l}{2}}{\phi} = \frac{1.0884 + \frac{3.7462}{4} - \frac{0.2104}{2}}{1} \\ &= 1.9197 \end{aligned} \quad (68)$$

Con el coeficiente del aire, se procede a determinar la masa molar del aire en la tabla 11. La entalpía del aire a 298 K se obtiene directamente del JANAF Thermochemical Tables (1985) (Chase Jr. M. W. et al., 1979), mediante la suma de las entalpías de sus componentes multiplicadas por su coeficiente de la ecuación química.

Tabla 11: Cálculo de AVM y H_{298} del Aire

Componentes del Aire	Fórmula	Masa Molar (kg/kmol)	Coeficiente en ecuación	Coeficiente en ecuación * Coeficiente del aire * Masa Molar
Oxígeno	O ₂	32	1	61.4304
Nitrógeno	N ₂	28.01	3.7274	200.4253
Argón	Ar	39.94	0.0444	3.4043
			AVM aire	265.2599

$$\begin{aligned}
 H_{aire\ 298K} &= H_{O_2\ 298K} * 1 + H_{N_2\ 298K} * 3.7274 + H_{Ar\ 298K} * 0.0444 \\
 &= 8.683 + 8.67 * 3.7274 + 6.197 * 0.0444 = 79.2351 \frac{kJ}{mol}
 \end{aligned}$$

Con las entalpías calculadas, se emplea la Ecuación 69 para determinar la entalpía de los reactantes.

$$\begin{aligned}
 HR &= \frac{(H_{biogás\ 298K} + H_f\ biogás) + (H_{aire\ 298K} + H_f\ aire)}{AVM_{biogás} + AVM_{aire}} * 1000 \quad (69) \\
 HR &= \frac{(10.4887 + (-101.0538)) + (79.2351 + 0)}{20.3515 + 265.2599} * 1000 = -39.6689 \frac{kJ}{mol}
 \end{aligned}$$

Como los coeficientes desarrollados que ajustan las constantes de equilibrio a presión parcial K_p y demás propiedades termodinámicas de los elementos extraídos a partir del JANAF y del artículo publicado por Olikara y Borman en 1979, se encuentran en el sistema inglés internacional, el procedimiento expuesto empleará dicho sistema, pero los resultados finales se pasarán al sistema internacional. Se procede a calcular los coeficientes (r, r', r'', r_o) correspondientes a los reactantes de la ecuación de reacción simplificada:

$$\begin{aligned}
 x_{13}[nC + mH + rO_2 + r'N_2 + r''Ar] \\
 \rightarrow x_4H_2 + x_6CO + x_8O_2 + x_9H_2O + x_{10}CO_2 + x_{11}N_2 + x_{12}Ar \\
 r_o = \frac{n + \frac{m}{4} - \frac{l}{2}}{\phi} = \frac{1.0884 + \frac{3.7462}{4} - \frac{0.2104}{2}}{1} = 1.9197 \\
 r = \frac{l}{2} + r_o = \frac{0.2104}{2} + 1.9197 = 2.0249 \\
 r' = \frac{k}{2} + 3.7274 r_o = \frac{0.00972}{2} + 3.7274 * 1.9197 = 7.1603 \\
 r'' = 0.0444 r_o = 0.0444 * 1.9197 = 0.0852
 \end{aligned}$$

Se procede a determinar los valores de cada constante de reacción de cada elemento según lo presentado en el Anexo A y en las ecuaciones 22 a 28, la temperatura y presión empleadas para el cálculo de cada constante son 6000 Rankine y 14.696. Los resultados son:

$$C_1 = 0.3958; C_2 = 0.3148; C_3 = 9.621 e - 5; C_5 = 1.3388; C_7 = 0.1751; C_9 = 7.9806; C_{10} = 1.0280$$

Con los valores de las constantes, se pueden determinar las primeras estimaciones, según lo presentado en las ecuaciones del punto 4. Como se trata de una mezcla estequiométrica, se emplea la Ecuación 46:

$$x_{13} = \frac{1}{\frac{m}{4} + r + r' + r''} = \frac{1}{\frac{3.7462}{4} + 2.0249 + 7.1603 + 0.08521} = 0.098$$

Para determinar la Ecuación 44 correspondiente al balance de la ecuación de reacción simplificada, primero se escribe la ecuación con todas las variables ya obtenidas:

$$\frac{2(1.028)(1.0884)x_8^{\frac{1}{2}} + 1.0884}{1 + 1.028 * x_8^{\frac{1}{2}}} + \frac{0.5 * 7.9806 * 3.7462 * (x_8^{\frac{1}{2}})}{1 + 7.9806 * x_8^{\frac{1}{2}}} + \frac{2x_8}{0.098} - 2 * 2.0249 = 0$$

Se denomina a la ecuación f_{ox} debido a que está solo en función de x_8 que corresponde a la fracción molar del oxígeno.

$$f_{ox} = \frac{2.2377 * x_8^{\frac{1}{2}} + 1.0884}{1 + 1.028 * x_8^{\frac{1}{2}}} + \frac{14.9484 * (x_8^{\frac{1}{2}})}{1 + 7.9806 * x_8^{\frac{1}{2}}} + 20.4141x_8 - 4.0498 = 0$$

Para encontrar el valor de la primera estimación de x_8 , se emplea el método de Newton Raphson ya que se debe determinar el cero de la ecuación.

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f_{ox}}{f_{ox}'}$$

Se determina la derivada de la ecuación y se inicia la iteración asumiendo x_8 equivalente a 1, que es el mayor valor que podría tomar al ser una fracción molar.

$$fox' = \frac{1.11889}{x_8^{\frac{1}{2}}(1.028x_8^{\frac{1}{2}}+1)} - \frac{59.649}{(7.9806x_8^{\frac{1}{2}}+1)^2} + \frac{7.4742}{x_8^{\frac{1}{2}}(7.9806x_8^{\frac{1}{2}}+1)} - \frac{0.51399(2.2377x_8^{\frac{1}{2}}+1.0884)}{x_8^{\frac{1}{2}}(1.028x_8^{\frac{1}{2}}+1)^2} +$$

$$20.414$$

$$fox(x_8 = 1) = 19.6688$$

$$fox'(x_8 = 1) = 20.6428$$

$$x_2 = 1 - \frac{19.6688}{20.6428} = 0.0472$$

Una vez se realiza cada iteración, se validó que el siguiente valor ajustado no sea menor que cero, sino se tendrá que reducir el valor inicialmente asumido (x_8 equivalente a 1). Posterior a ello, se verificó que la diferencia entre el valor anterior y el nuevo encontrado sea menor o igual a 0.000001, tolerancia seleccionada por conveniencia para prevenir alguna matriz singular durante la resolución matricial. En caso de no cumplir la tolerancia, se vuelve a realizar un ajuste. En la iteración número 5, se obtiene el valor final de x_8 .

$$x_8 = 0.0712$$

Se determinaron los valores de x_4 , x_6 y x_{11} reemplazando x_8 en las Ecuaciones 40, 39 y 41 respectivamente.

$$x_4 = \frac{0.5 * m * (x_{13})}{1 + C_9 * x_8^{\frac{1}{2}}} = \frac{0.5 * 3.7462 * (0.098)}{1 + 7.9806 * 0.0712^{\frac{1}{2}}} = 0.0586$$

$$x_6 = \frac{n * (x_{13})}{1 + C_{10} * x_8^{\frac{1}{2}}} = x_6 = \frac{1.0884 * (0.098)}{1 + 1.028 * 0.0712^{\frac{1}{2}}} = 0.0837$$

$$x_{11} = r^{x_{13}} = 7.1603 * 0.098 = 0.7015$$

Con las Ecuaciones 22 – 28, se determinaron las otras fracciones molares ($x_1, x_2, x_3, x_5, x_7, x_9, x_{10}$)

$$x_1 = C_1 * x_4^{\frac{1}{2}} = 0.3958 * 0.0586^{\frac{1}{2}} = 0.0958$$

$$x_2 = C_2 * x_8^{\frac{1}{2}} = 0.3148 * 0.0712^{\frac{1}{2}} = 0.0840$$

$$x_3 = C_3 * x_{11}^{\frac{1}{2}} = 9.621 e - 5 * 0.7015^{\frac{1}{2}} = 8.0587 * 10^{-5}$$

$$x_5 = C_5 * x_4 * x_8^{\frac{1}{2}} = 1.3388 * 0.0586 * 0.0712^{\frac{1}{2}} = 0.0865$$

$$x_7 = C_7 * x_8^{\frac{1}{2}} * x_{11}^{\frac{1}{2}} = 0.1751 * 0.0712^{\frac{1}{2}} * 0.7015^{\frac{1}{2}} = 0.0391$$

$$x_9 = C_9 * x_4 * x_8^{\frac{1}{2}} = 7.9806 * 0.0586 * 0.0712^{\frac{1}{2}} = 0.1249$$

$$x_{10} = C_{10} * x_6 * x_8^{\frac{1}{2}} = 1.0280 * 0.0837 * 0.0712^{\frac{1}{2}} = 0.0229$$

Con las fracciones molares calculadas ($x_1 \rightarrow x_{11}$) se determinaron los valores de las derivadas parciales de cada fracción molar. Las ecuaciones de las derivadas parciales y su desarrollo se presentan en el Anexo B.

$$T_{14} = 0.8171, T_{28} = 0.5899, T_{311} = 5.7438 * 10^{-5}, T_{54} = 0.7374, T_{58} = 0.6077, T_{78} = 0.2749$$

$$T_{711} = 0.0279, T_{94} = 2.129, T_{98} = 0.8773, T_{106} = 0.2742, T_{108} = 0.1612$$

Una vez se determinaron las derivadas parciales de las fracciones molares, se calculan los elementos pertenecientes al sistema de ecuaciones no lineal (Ecuación 37) los cuales se desarrollan en el Anexo C. Se arma el sistema de ecuaciones matricial lineal.

$$[A][\Delta x] = [B]$$

$$\begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & A_{14} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & A_{24} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & A_{34} \\ A_{41} & A_{42} & A_{43} & A_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x_4 \\ \Delta x_6 \\ \Delta x_8 \\ \Delta x_{11} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B_1 \\ B_2 \\ B_3 \\ B_4 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 7.8214 & -4.3859 & 1.8072 & 0 \\ 2.8663 & -3.1929 & 4.0723 & 0.0279 \\ 0 & -16.7661 & -1.8466 & 2.0279 \\ 4.6835 & 1.3740 & 3.5236 & 1.0279 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x_4 \\ \Delta x_6 \\ \Delta x_8 \\ \Delta x_{11} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.1823 \\ -0.2096 \\ -0.0392 \\ -0.3767 \end{bmatrix}$$

Se emplea el método de eliminación Gaussiana hasta encontrar todas las variables, en este caso se buscó formar una matriz triangular superior. Se divide $A(2,1)$ entre $A(1,1)$, el resultado lo multiplicamos a la primera fila y le restamos a la segunda fila.

$$v = \frac{A_{2,1}}{A_{1,1}} = 0.3664$$

$$A_2 = A_2 - A_1 * v = [0 \quad -1.5856 \quad 3.41 \quad 0.0279]$$

$$B_2 = B_2 - B_1 * v = -0.1428$$

Se obtiene un nuevo sistema de ecuaciones:

$$\begin{bmatrix} 7.8214 & -4.3859 & 1.8072 & 0 \\ 0 & -1.5856 & 3.41 & 0.0279 \\ 0 & -16.7661 & -1.8466 & 2.0279 \\ 4.6835 & 1.3740 & 3.5236 & 1.0279 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x_4 \\ \Delta x_6 \\ \Delta x_8 \\ \Delta x_{11} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.1823 \\ -0.1428 \\ -0.0392 \\ -0.3767 \end{bmatrix}$$

Ahora se divide $A(4,1)$ entre $A(1,1)$, el resultado lo multiplicamos a la primera fila y le restamos a la cuarta fila.

$$v = \frac{A_{4,1}}{A_{1,1}} = 0.5988$$

$$A_4 = A_4 - A_1 * v = [0 \quad 4.0003 \quad 2.4414 \quad 1.0279]$$

$$B_4 = B_4 - B_1 * v = -0.2675$$

$$\begin{bmatrix} 7.8214 & -4.3859 & 1.8072 & 0 \\ 0 & -1.5856 & 3.41 & 0.0279 \\ 0 & -16.7661 & -1.8466 & 2.0279 \\ 0 & 4.0003 & 2.4414 & 1.0279 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x_4 \\ \Delta x_6 \\ \Delta x_8 \\ \Delta x_{11} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.1823 \\ -0.1428 \\ -0.0392 \\ -0.2675 \end{bmatrix}$$

Se procede a dividir $A(3,2)$ entre $A(4,2)$, el resultado lo multiplicamos a la cuarta fila y le restamos a la tercera fila.

$$v = \frac{A_{3,2}}{A_{4,2}} = -4.1912$$

$$A_3 = A_3 - A_4 * v = [0 \quad 0 \quad 8.386 \quad 6.336]$$

$$B_3 = B_3 - B_4 * v = -1.1605$$

$$\begin{bmatrix} 7.8214 & -4.3859 & 1.8072 & 0 \\ 0 & -1.5856 & 3.41 & 0.0279 \\ 0 & 0 & 8.386 & 6.336 \\ 0 & 4.0003 & 2.4414 & 1.0279 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x_4 \\ \Delta x_6 \\ \Delta x_8 \\ \Delta x_{11} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.1823 \\ -0.1428 \\ -1.1605 \\ -0.2675 \end{bmatrix}$$

Luego se divide $A(4,2)$ entre $A(2,2)$, el resultado lo multiplicamos a la segunda fila y le restamos a la cuarta fila.

$$v = \frac{A_{4,2}}{A_{2,2}} = -2.5229$$

$$A_4 = A_4 - A_2 * v = [0 \quad 0 \quad 11.0445 \quad 1.0983]$$

$$B_4 = B_4 - B_2 * v = -0.6278$$

$$\begin{bmatrix} 7.8214 & -4.3859 & 1.8072 & 0 \\ 0 & -1.5856 & 3.41 & 0.0279 \\ 0 & 0 & 8.386 & 6.336 \\ 0 & 0 & 11.0445 & 1.0983 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x_4 \\ \Delta x_6 \\ \Delta x_8 \\ \Delta x_{11} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.1823 \\ -0.1428 \\ -1.1605 \\ -0.6278 \end{bmatrix}$$

Finalmente, se divide $A(4,3)$ entre $A(3,3)$, el resultado lo multiplicamos a la tercera fila y le restamos a la cuarta fila.

$$v = \frac{A_{4,3}}{A_{3,3}} = 1.317$$

$$A_4 = A_4 - A_3 * v = [0 \quad 0 \quad 0 \quad -7.2464]$$

$$B_4 = B_4 - B_3 * v = 0.9006$$

$$\begin{bmatrix} 7.8214 & -4.3859 & 1.8072 & 0 \\ 0 & -1.5856 & 3.41 & 0.0279 \\ 0 & 0 & 8.386 & 6.336 \\ 0 & 0 & 0 & -7.2464 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x_4 \\ \Delta x_6 \\ \Delta x_8 \\ \Delta x_{11} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.1823 \\ -0.1428 \\ -1.1605 \\ 0.9006 \end{bmatrix}$$

Con la matriz triangular superior obtenida, se determinan los valores de $\Delta x_4, \Delta x_6, \Delta x_8, \Delta x_{11}$.

$$-7.2464 * \Delta x_{11} = 0.9006 \rightarrow \Delta x_{11} = -0.1242$$

$$8.386 * \Delta x_8 + 6.336 * \Delta x_{11} = -1.1605 \rightarrow \Delta x_8 = -0.0445$$

$$-1.5856 * \Delta x_6 + 3.41 * \Delta x_8 + 0.0279 * \Delta x_{11} = -0.1428 \rightarrow \Delta x_6 = -0.0078$$

$$7.8214 * \Delta x_4 - 4.3859 * \Delta x_6 + 1.8072 * \Delta x_8 = -0.1823 \rightarrow \Delta x_4 = -0.0174$$

Los valores de $\Delta x_4, \Delta x_6, \Delta x_8, \Delta x_{11}$ se agregan a los anteriormente calculados x_4, x_6, x_8, x_{11} y obtenemos nuevos valores para estos mismos.

$$x_{4(2)} = x_4 + \Delta x_4 = 0.0586 - 0.0174 = 0.0412$$

$$x_{6(2)} = x_6 + \Delta x_6 = 0.0837 - 0.0078 = 0.0759$$

$$x_{8(2)} = x_8 + \Delta x_8 = 0.0712 - 0.0445 = 0.0267$$

$$x_{11(2)} = x_{11} + \Delta x_{11} = 0.7015 - 0.1243 = 0.5772$$

Se verifica que los nuevos valores cumplan con la tolerancia establecida, en este caso, se trabajó con 10^{-3} definido en el código original de FORTRAN de Olikara y Borman, que equivaldría al 0.1% del cambio relativo en todas las variables lo cual es indicador de que el proceso a convergido con soluciones estables.

$$\frac{|\Delta x_4|}{x_{4(2)}} < 10^{-3} \rightarrow \frac{0.0174}{0.0412} = 0.4223 < 10^{-3} \quad (\text{Falso})$$

$$\frac{|\Delta x_6|}{x_{6(2)}} < 10^{-3} \rightarrow \frac{0.0078}{0.0759} = 0.1027 < 10^{-3} \quad (\text{Falso})$$

$$\frac{|\Delta x_8|}{x_{8(2)}} < 10^{-3} \rightarrow \frac{0.0445}{0.0267} = 1.6666 < 10^{-3} \quad (\text{Falso})$$

$$\frac{|\Delta x_{11}|}{x_{11(2)}} < 10^{-3} \rightarrow \frac{0.1243}{0.5772} = 0.2172 < 10^{-3} \quad (\text{Falso})$$

Debido a que se tiene que cumplir la condición para los cuatro casos, nuevamente se determinan los valores de $x_1, x_2, x_3, x_5, x_7, x_9, x_{10}$ empleando los valores de $x_{4(2)}, x_{6(2)}, x_{8(2)}, x_{11(2)}$. Este procedimiento se repite las veces que sea necesaria hasta que se encuentre por debajo de la tolerancia establecida. Los resultados de las fracciones molares para esta primera iteración correspondiente a este ejemplo de cálculo son los siguientes:

$$x_1 = 0.0788, x_2 = 0.0533, x_3 = 7.3358 * 10^{-5}, x_4 = 0.0396, x_5 = 0.0451, x_6 = 0.0767, \\ x_7 = 0.0226, x_8 = 0.0286, x_9 = 0.0535, x_{10} = 0.0134, x_{11} = 0.5813, x_{12} = 0.0071, \\ x_{13} = 0.0828$$

Con los resultados de las fracciones molares se recalculan las derivadas parciales de las fracciones molares (Anexo B) y los elementos del sistema de ecuaciones no lineal (Anexo C) ya que se emplearán para los siguientes pasos (matriz A actualizada). Luego, se plantea el nuevo sistema de ecuaciones respecto de la temperatura, presión y ratio de equivalencia (Ver Ecuación 39 y Anexo D).

Respecto de la temperatura:

$$\frac{\partial f_j}{\partial T} + \frac{\partial f_j}{\partial x_4} \frac{\partial x_4}{\partial T} + \frac{\partial f_j}{\partial x_6} \frac{\partial x_6}{\partial T} + \frac{\partial f_j}{\partial x_8} \frac{\partial x_8}{\partial T} + \frac{\partial f_j}{\partial x_{11}} \frac{\partial x_{11}}{\partial T} \cong 0, \quad j = 1, 2, 3, 4$$

$$\frac{\partial c_1}{\partial T} = 1.0916 * 10^{-4}, \quad \frac{\partial c_2}{\partial T} = 88.2342 * 10^{-5}, \quad \frac{\partial c_3}{\partial T} = 2.1321 * 10^{-7}, \quad \frac{\partial c_5}{\partial T} = 9.4755 * 10^{-6},$$

$$\frac{\partial c_7}{\partial T} = 1.2165 * 10^{-5}, \quad \frac{\partial c_9}{\partial T} = -8.1608 * 10^{-5}, \quad \frac{\partial c_{10}}{\partial T} = -2.1762 * 10^{-5}$$

Se obtienen los siguientes valores:

$$\frac{\partial f_1}{\partial T} = -3.0322 * 10^{-5}, \quad \frac{\partial f_2}{\partial T} = -5.9826 * 10^{-5}, \quad \frac{\partial f_3}{\partial T} = -2.9872 * 10^{-4}, \quad \frac{\partial f_4}{\partial T} = -1.0828 * 10^{-4}$$

Respecto de la presión:

$$\frac{\partial f_j}{\partial p} + \frac{\partial f_j}{\partial x_4} \frac{\partial x_4}{\partial p} + \frac{\partial f_j}{\partial x_6} \frac{\partial x_6}{\partial p} + \frac{\partial f_j}{\partial x_8} \frac{\partial x_8}{\partial p} + \frac{\partial f_j}{\partial x_{11}} \frac{\partial x_{11}}{\partial p} \cong 0, \quad j = 1, 2, 3, 4$$

$$\frac{\partial c_1}{\partial p} = -0.0027, \quad \frac{\partial c_2}{\partial p} = -0.0018, \quad \frac{\partial c_3}{\partial p} = -2.4959 * 10^{-6}, \quad \frac{\partial c_9}{\partial p} = 0.0018, \quad \frac{\partial c_{10}}{\partial p} = 4.5424 * 10^{-4}$$

Se obtiene:

$$\frac{\partial f_1}{\partial p} = 6.0295 * 10^{-4}, \quad \frac{\partial f_2}{\partial p} = 7.7417 * 10^{-4}, \quad \frac{\partial f_3}{\partial p} = 0.0060, \quad \frac{\partial f_4}{\partial p} = 0.0022$$

Respecto del ratio de equivalencia:

$$\frac{\partial f_j}{\partial F} + \frac{\partial f_j}{\partial x_4} \frac{\partial x_4}{\partial F} + \frac{\partial f_j}{\partial x_6} \frac{\partial x_6}{\partial F} + \frac{\partial f_j}{\partial x_8} \frac{\partial x_8}{\partial F} + \frac{\partial f_j}{\partial x_{11}} \frac{\partial x_{11}}{\partial F} \cong 0, \quad j = 1, 2, 3, 4$$

$$\frac{\partial d_4}{\partial F} = -0.0071$$

Se obtiene:

$$\frac{\partial f_1}{\partial F} = 0, \frac{\partial f_2}{\partial F} = -0.3178, \frac{\partial f_3}{\partial F} = -1.1845, \frac{\partial f_4}{\partial F} = 0.0071$$

Para la temperatura:

$$[A] \left[\frac{\partial x}{\partial T} \right] = [B_T]$$

$$\begin{bmatrix} 6.2653 & -4.0408 & 1.8524 & 0 \\ 1.9201 & -3.0204 & 4.8833 & 0.0194 \\ 0 & -15.4472 & -2.6715 & 2.0195 \\ 3.9145 & 1.2659 & 4.5355 & 1.0195 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial x_4}{\partial T} \\ \frac{\partial x_6}{\partial T} \\ \frac{\partial x_8}{\partial T} \\ \frac{\partial x_{11}}{\partial T} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3.0322 * 10^{-5} \\ -5.9826 * 10^{-5} \\ -2.9872 * 10^{-4} \\ -1.0828 * 10^{-4} \end{bmatrix}$$

Para la presión:

$$[A] \left[\frac{\partial x}{\partial p} \right] = [B_p]$$

$$\begin{bmatrix} 6.2653 & -4.0408 & 1.8524 & 0 \\ 1.9201 & -3.0204 & 4.8833 & 0.0194 \\ 0 & -15.4472 & -2.6715 & 2.0195 \\ 3.9145 & 1.2659 & 4.5355 & 1.0195 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial x_4}{\partial p} \\ \frac{\partial x_6}{\partial p} \\ \frac{\partial x_8}{\partial p} \\ \frac{\partial x_{11}}{\partial p} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6.0295 * 10^{-4} \\ 7.7417 * 10^{-4} \\ 0.0060 \\ 0.0022 \end{bmatrix}$$

Para la ratio de equivalencia:

$$[A] \left[\frac{\partial x}{\partial F} \right] = [B_F]$$

$$\begin{bmatrix} 6.2653 & -4.0408 & 1.8524 & 0 \\ 1.9201 & -3.0204 & 4.8833 & 0.0194 \\ 0 & -15.4472 & -2.6715 & 2.0195 \\ 3.9145 & 1.2659 & 4.5355 & 1.0195 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial x_4}{\partial F} \\ \frac{\partial x_6}{\partial F} \\ \frac{\partial x_8}{\partial F} \\ \frac{\partial x_{11}}{\partial F} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -0.3178 \\ -1.1845 \\ 0.0071 \end{bmatrix}$$

En general:

$$[A] \left[\frac{\partial x}{\partial T} \quad \frac{\partial x}{\partial p} \quad \frac{\partial x}{\partial F} \right] = [B_T \quad B_p \quad B_F]$$

$$\begin{bmatrix} 6.2653 & -4.0408 & 1.8524 & 0 \\ 1.9201 & -3.0204 & 4.8833 & 0.0194 \\ 0 & -15.4472 & -2.6715 & 2.0195 \\ 3.9145 & 1.2659 & 4.5355 & 1.0195 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial x_4}{\partial T} & \frac{\partial x_4}{\partial p} & \frac{\partial x_4}{\partial F} \\ \frac{\partial x_6}{\partial T} & \frac{\partial x_6}{\partial p} & \frac{\partial x_6}{\partial F} \\ \frac{\partial x_8}{\partial T} & \frac{\partial x_8}{\partial p} & \frac{\partial x_8}{\partial F} \\ \frac{\partial x_{11}}{\partial T} & \frac{\partial x_{11}}{\partial p} & \frac{\partial x_{11}}{\partial F} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3.0322 * 10^{-5} & 6.0295 * 10^{-4} & 0 \\ -5.9826 * 10^{-5} & 7.7417 * 10^{-4} & -0.3178 \\ -2.9872 * 10^{-4} & 0.0060 & -1.1845 \\ -1.0828 * 10^{-4} & 0.0022 & 0.0071 \end{bmatrix}$$

De manera similar al primer sistema de ecuaciones de las fracciones molares resuelto, se aplica el método de eliminación Gaussiana el cual permite resolver estos 3 sistemas. Para este caso se buscó formar una matriz triangular superior. Se divide A(2,1) entre A(1,1), el resultado lo multiplicamos a la primera fila y le restamos a la segunda fila.

$$v = \frac{A_{2,1}}{A_{1,1}} = 0.3064$$

$$A_2 = A_2 - A_1 * v = [0 \quad -1.782 \quad 4.3156 \quad 0.0194]$$

$$B_2 = B_2 - B_1 * v = [-5.0533 * 10^{-5} \quad 0.0006 \quad -0.3178]$$

Se obtiene un nuevo sistema de ecuaciones.

$$\begin{bmatrix} 6.2653 & -4.0408 & 1.8524 & 0 \\ 0 & -1.782 & 4.3156 & 0.0194 \\ 0 & -15.4472 & -2.6715 & 2.0195 \\ 3.9145 & 1.2659 & 4.5355 & 1.0195 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial x_4}{\partial T} & \frac{\partial x_4}{\partial p} & \frac{\partial x_4}{\partial F} \\ \frac{\partial x_6}{\partial T} & \frac{\partial x_6}{\partial p} & \frac{\partial x_6}{\partial F} \\ \frac{\partial x_8}{\partial T} & \frac{\partial x_8}{\partial p} & \frac{\partial x_8}{\partial F} \\ \frac{\partial x_{11}}{\partial T} & \frac{\partial x_{11}}{\partial p} & \frac{\partial x_{11}}{\partial F} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3.0322 * 10^{-5} & 6.0295 * 10^{-4} & 0 \\ -5.0533 * 10^{-5} & 0.0006 & -0.3178 \\ -2.9872 * 10^{-4} & 0.0060 & -1.1845 \\ -1.0828 * 10^{-4} & 0.0022 & 0.0071 \end{bmatrix}$$

Ahora se divide A(4,1) entre A(1,1), el resultado lo multiplicamos a la primera fila y le restamos a la cuarta fila.

$$v = \frac{A_{4,1}}{A_{1,1}} = 0.6248$$

$$A_4 = A_4 - A_1 * v = [0 \quad 3.7906 \quad 3.3781 \quad 1.0195]$$

$$B_4 = B_4 - B_1 * v = [-8.9335 * 10^{-5} \quad 0.0018 \quad 0.0071]$$

$$\begin{bmatrix} 6.2653 & -4.0408 & 1.8524 & 0 \\ 0 & -1.782 & 4.3156 & 0.0194 \\ 0 & -15.4472 & -2.6715 & 2.0195 \\ 0 & 3.7906 & 3.3781 & 1.0195 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial x_4}{\partial T} & \frac{\partial x_4}{\partial p} & \frac{\partial x_4}{\partial F} \\ \frac{\partial x_6}{\partial T} & \frac{\partial x_6}{\partial p} & \frac{\partial x_6}{\partial F} \\ \frac{\partial x_8}{\partial T} & \frac{\partial x_8}{\partial p} & \frac{\partial x_8}{\partial F} \\ \frac{\partial x_{11}}{\partial T} & \frac{\partial x_{11}}{\partial p} & \frac{\partial x_{11}}{\partial F} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3.0322 * 10^{-5} & 6.0295 * 10^{-4} & 0 \\ -5.0533 * 10^{-5} & 0.0006 & -0.3178 \\ -2.9872 * 10^{-4} & 0.0060 & -1.1845 \\ -8.9335 * 10^{-5} & 0.0018 & 0.0071 \end{bmatrix}$$

Se procede a dividir A(3,2) entre A(4,2), el resultado lo multiplicamos a la cuarta fila y le restamos a la tercera fila.

$$v = \frac{A_{3,2}}{A_{4,2}} = -4.0751$$

$$A_3 = A_3 - A_4 * v = [0 \quad 0 \quad 11.0947 \quad 6.1741]$$

$$B_3 = B_3 - B_4 * v = [-0.0007 \quad 0.0134 \quad -1.1556]$$

$$\begin{bmatrix} 6.2653 & -4.0408 & 1.8524 & 0 \\ 0 & -1.782 & 4.3156 & 0.0194 \\ 0 & 0 & 11.0947 & 6.1741 \\ 0 & 3.7906 & 3.3781 & 1.0195 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial x_4}{\partial T} & \frac{\partial x_4}{\partial p} & \frac{\partial x_4}{\partial F} \\ \frac{\partial x_6}{\partial T} & \frac{\partial x_6}{\partial p} & \frac{\partial x_6}{\partial F} \\ \frac{\partial x_8}{\partial T} & \frac{\partial x_8}{\partial p} & \frac{\partial x_8}{\partial F} \\ \frac{\partial x_{11}}{\partial T} & \frac{\partial x_{11}}{\partial p} & \frac{\partial x_{11}}{\partial F} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3.0322 * 10^{-5} & 6.0295 * 10^{-4} & 0 \\ -5.0533 * 10^{-5} & 0.0006 & -0.3178 \\ -0.0007 & 0.0134 & -1.1556 \\ -8.9335 * 10^{-5} & 0.0018 & 0.0071 \end{bmatrix}$$

Luego se divide A(4,2) entre A(2,2), el resultado lo multiplicamos a la segunda fila y le restamos a la cuarta fila.

$$v = \frac{A_{4,2}}{A_{2,2}} = -2.1271$$

$$A_4 = A_4 - A_2 * v = [0 \quad 0 \quad 12.5579 \quad 1.0608]$$

$$B_4 = B_4 - B_2 * v = [-0.0002 \quad 0.0031 \quad -0.6689]$$

$$\begin{bmatrix} 6.2653 & -4.0408 & 1.8524 & 0 \\ 0 & -1.782 & 4.3156 & 0.0194 \\ 0 & 0 & 11.0947 & 6.1741 \\ 0 & 0 & 12.5579 & 1.0608 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial x_4}{\partial T} & \frac{\partial x_4}{\partial p} & \frac{\partial x_4}{\partial F} \\ \frac{\partial x_6}{\partial T} & \frac{\partial x_6}{\partial p} & \frac{\partial x_6}{\partial F} \\ \frac{\partial x_8}{\partial T} & \frac{\partial x_8}{\partial p} & \frac{\partial x_8}{\partial F} \\ \frac{\partial x_{11}}{\partial T} & \frac{\partial x_{11}}{\partial p} & \frac{\partial x_{11}}{\partial F} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3.0322 * 10^{-5} & 6.0295 * 10^{-4} & 0 \\ -5.0533 * 10^{-5} & 0.0006 & -0.3178 \\ -0.0007 & 0.0134 & -1.1556 \\ -0.0002 & 0.0031 & -0.6689 \end{bmatrix}$$

Finalmente, se divide A(4,3) entre A(3,3), el resultado lo multiplicamos a la tercera fila y le restamos a la cuarta fila.

$$v = \frac{A_{4,3}}{A_{3,3}} = 1.1319$$

$$A_4 = A_4 - A_3 * v = [0 \quad 0 \quad 0 \quad -5.9276]$$

$$B_4 = B_4 - B_3 * v = [0.0006 \quad -0.0121 \quad 0.6391]$$

$$\begin{bmatrix} 6.2653 & -4.0408 & 1.8524 & 0 \\ 0 & -1.782 & 4.3156 & 0.0194 \\ 0 & 0 & 11.0947 & 6.1741 \\ 0 & 0 & 0 & -5.9276 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial x_4}{\partial T} & \frac{\partial x_4}{\partial p} & \frac{\partial x_4}{\partial F} \\ \frac{\partial x_6}{\partial T} & \frac{\partial x_6}{\partial p} & \frac{\partial x_6}{\partial F} \\ \frac{\partial x_8}{\partial T} & \frac{\partial x_8}{\partial p} & \frac{\partial x_8}{\partial F} \\ \frac{\partial x_{11}}{\partial T} & \frac{\partial x_{11}}{\partial p} & \frac{\partial x_{11}}{\partial F} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3.0322 * 10^{-5} & 6.0295 * 10^{-4} & 0 \\ -5.0533 * 10^{-5} & 0.0006 & -0.3178 \\ -0.0007 & 0.0134 & -1.1556 \\ 0.0006 & -0.0121 & 0.6391 \end{bmatrix}$$

Con la matriz triangular superior obtenida, se determinan los valores de las derivadas parciales, respecto de la temperatura:

$$-5.9276 * \frac{\partial x_{11}}{\partial T} = 0.0006 \rightarrow \frac{\partial x_{11}}{\partial T} = -9.3353 * 10^{-5}$$

$$11.0947 * \frac{\partial x_8}{\partial T} + 6.1741 * \frac{\partial x_{11}}{\partial T} = -0.0007 \rightarrow \frac{\partial x_8}{\partial T} = -7.7874 * 10^{-6}$$

$$-1.782 * \frac{\partial x_6}{\partial T} + 4.3156 * \frac{\partial x_8}{\partial T} + 0.0194 * \frac{\partial x_{11}}{\partial T} = -5.0533 * 10^{-5} \rightarrow \frac{\partial x_6}{\partial T} = 8.4801 * 10^{-6}$$

$$6.2653 * \frac{\partial x_4}{\partial T} - 4.0408 * \frac{\partial x_6}{\partial T} + 1.8524 * \frac{\partial x_8}{\partial T} = -3.0322 * 10^{-5} \rightarrow \frac{\partial x_4}{\partial T} = 2.9321 * 10^{-6}$$

Respecto de la presión:

$$-5.9276 * \frac{\partial x_{11}}{\partial p} = -0.0121 \rightarrow \frac{\partial x_{11}}{\partial p} = 0.0020$$

$$11.0947 * \frac{\partial x_8}{\partial p} + 6.1741 * \frac{\partial x_{11}}{\partial p} = 0.0134 \rightarrow \frac{\partial x_8}{\partial p} = -7.2142 * 10^{-5}$$

$$-1.782 * \frac{\partial x_6}{\partial p} + 4.3156 * \frac{\partial x_8}{\partial p} + 0.0194 * \frac{\partial x_{11}}{\partial p} = 0.0006 \rightarrow \frac{\partial x_6}{\partial p} = -1.3387 * 10^{-4}$$

$$6.2653 * \frac{\partial x_4}{\partial p} - 4.0408 * \frac{\partial x_6}{\partial p} + 1.8524 * \frac{\partial x_8}{\partial p} = 6.0295 * 10^{-4} \rightarrow \frac{\partial x_4}{\partial p} = -1.1432 * 10^{-5}$$

Respecto del ratio de equivalencia:

$$-5.9276 * \frac{\partial x_{11}}{\partial F} = 0.6391 \rightarrow \frac{\partial x_{11}}{\partial F} = -0.1078$$

$$11.0947 * \frac{\partial x_8}{\partial F} + 6.1741 * \frac{\partial x_{11}}{\partial F} = -1.1556 \rightarrow \frac{\partial x_8}{\partial F} = -0.0442$$

$$-1.782 * \frac{\partial x_6}{\partial F} + 4.3156 * \frac{\partial x_8}{\partial F} + 0.0194 * \frac{\partial x_{11}}{\partial F} = 0.0006 \rightarrow \frac{\partial x_6}{\partial F} = 0.0702$$

$$6.2653 * \frac{\partial x_4}{\partial p} - 4.0408 * \frac{\partial x_6}{\partial p} + 1.8524 * \frac{\partial x_8}{\partial p} = 0 \rightarrow \frac{\partial x_4}{\partial p} = 0.0583$$

Para culminar la resolución de las derivadas parciales, se calculan las derivadas restantes (ver Anexo E), respecto de la temperatura:

$$\frac{\partial x_1}{\partial T} = 1.1207 * 10^{-4}, \frac{\partial x_2}{\partial T} = 7.3237 * 10^{-5}, \frac{\partial x_3}{\partial T} = 2.0732 * 10^{-7}, \frac{\partial x_5}{\partial T} = 5.0158 * 10^{-6},$$

$$\frac{\partial x_7}{\partial T} = 7.2791 * 10^{-6}, \frac{\partial x_9}{\partial T} = -8.4918 * 10^{-5}, \frac{\partial x_{10}}{\partial T} = -2.2101 * 10^{-5}, \frac{\partial x_{12}}{\partial T} = -1.0667 * 10^{-6}$$

Respecto de la presión:

$$\frac{\partial x_1}{\partial p} = -0.0027, \frac{\partial x_2}{\partial p} = -0.0017, \frac{\partial x_3}{\partial p} = -2.3676 * 10^{-6}, \frac{\partial x_5}{\partial p} = -5.0270 * 10^{-5},$$

$$\frac{\partial x_7}{\partial p} = 6.7954 * 10^{-5}, \frac{\partial x_9}{\partial p} = 0.0019, \frac{\partial x_{10}}{\partial p} = 4.4776 * 10^{-4}, \frac{\partial x_{12}}{\partial p} = 2.4582 * 10^{-5}$$

Respecto del ratio de equivalencia:

$$\frac{\partial x_1}{\partial F} = 0.0580, \frac{\partial x_2}{\partial F} = -0.0516, \frac{\partial x_3}{\partial F} = -6.8047 * 10^{-6}, \frac{\partial x_5}{\partial F} = -0.0015,$$

$$\frac{\partial x_7}{\partial F} = -0.0195, \frac{\partial x_9}{\partial F} = 0.0376, \frac{\partial x_{10}}{\partial F} = 0.0019, \frac{\partial x_{12}}{\partial F} = -0.0014$$

Con el objetivo de encontrar la entalpía específica del sistema, se determina la masa promedio de la mezcla, el Calor específico a presión constante (Cp) y la entalpía, para ello se emplea el Anexo F que corresponde a la base de datos de las masas moleculares de los gases, las entalpías de los productos a distintas temperaturas tomando como referencia 0 grados Kelvin, y su valor de calor específico a distintas temperaturas. Para este paso se usó la misma base de datos del autor Olikara y Borman (Olikara & Borman, 1975), cuya fuente fue el JANAF Thermochemical Tables (Chase Jr. M. W. et al., 1979).

$$AVM = 28.99$$

$$H = 4073.94$$

Se procede a determinar las derivadas parciales de la masa molar respecto de la temperatura (Ecuación 64) y la derivada parcial de la entalpia respecto de la temperatura (Ecuación 63).

$$\frac{\partial M}{\partial T} = -0.0121$$

$$\frac{\partial h}{\partial T} = 4.398$$

Posteriormente se determina el DELTA (Ecuación 65):

$$DELTA = \frac{h(T_n, p_o, F_o) - h_r}{(\partial h / \partial T)_n}$$

$$DELTA = \frac{4073.94 - -39,67}{4.398}$$

$$DELTA = 935.258$$

Ajustamos la temperatura:

$$T_{nueva} = T - DELTA$$

$$T_{nueva} = 6000 - 935.258$$

$$T_{nueva} = 5064.74 \text{ Rankine} \langle \rangle 2813.76 \text{ K}$$

Debido a que el DELTA no fue menor o igual a 1, se procede a ingresar nuevamente con la nueva temperatura ajustada T_{nueva} a la función Fractions_Derivatives y se repite todo el procedimiento de cálculo. Finalmente, para este ejemplo **se requirió realizar 6 iteraciones** y los resultados fueron:

$$T_{llama} = 2199.7 \text{ K}$$

$$S_L = 33.55 \text{ cm/s}$$

$$x_1 = 3.1036 * 10^{-4}, x_2 = 1.7693 * 10^{-4}, x_3 = 1.0333 * 10^{-8}, x_4 = 0.0031, x_5 = 0.0025, x_6 = 0.0087, x_7 = 0.0018, x_8 = 0.0044, x_9 = 0.1778, x_{10} = 0.0972, x_{11} = 0.6958, x_{12} = 0.0083, x_{13} = 0.0973$$

En el Anexo G, se presenta el flujo correspondiente a la metodología empleada en la sección 3.1.

3.2 Simulación numérica en Ansys Chemkin

Iniciamos con la apertura del programa y mediante el uso de la paleta de modelos se selecciona: la fuente de ingreso, llama laminar y producto; como se muestra en la Figura 38.

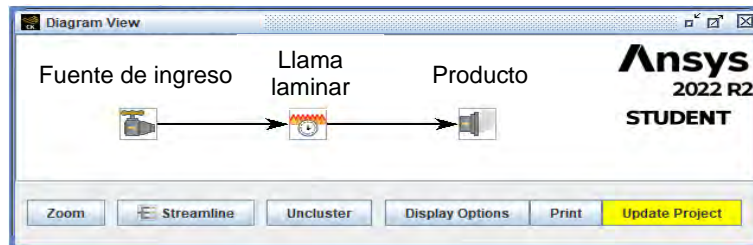


Figura 38. Diagrama de flujo en software Ansys Chemkin.

Se seleccionan los archivos de propiedades termodinámicas, transporte y mecanismos de reacción, los cuales definirán la precisión y características de los resultados a obtener, y esto depende del número de reacciones y especies que se consideren. Para este trabajo, se emplearon los archivos de la Universidad de California, denominado “The San Diego Mechanism”, de donde se utilizaron los archivos de la sección “Complete San Diego Mechanism” denominados “Chemkin”, “Thermo Data” y “Transport Data” con fecha de subida el 14 de diciembre de 2016. Estos se ingresaron al programa como se muestra en la Figura 39.

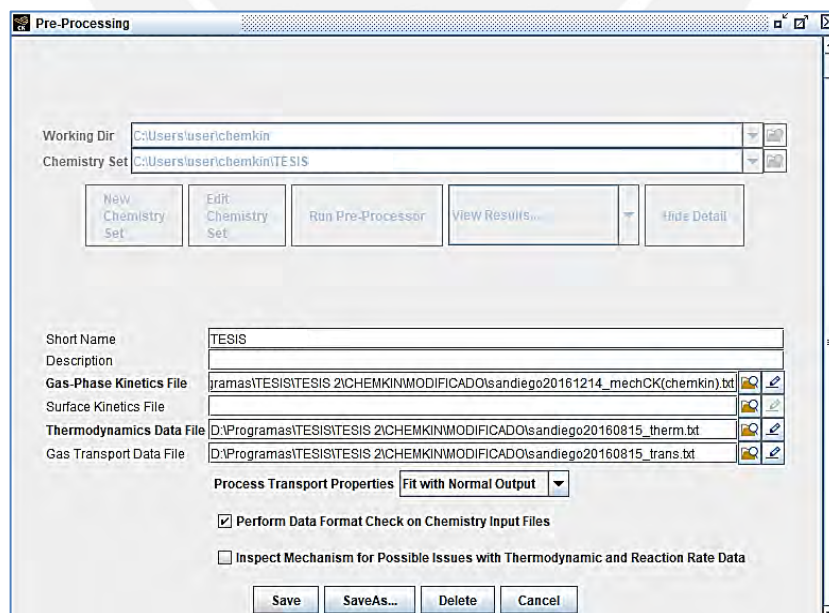


Figura 39. Ventana de pre-procesado de software Ansys Chemkin.

De manera adicional, se emplearon los archivos de la sección “Nitrogen Chemistry” denominados “Chemkin”, “Thermo Data” y “Transport Data” con fecha de subida el 23 de julio de 2018, ya que los de la sección “Complete San Diego Mechanism” no contenían ningún tipo de reacción correspondiente a la obtención de N ni NO, los cuales son objeto de estudio. En la siguiente sección correspondiente a la velocidad de llama laminar, se configuran la temperatura del gas y su presión, en los cuales, se colocan las condiciones iniciales de estudio (298 K, 1atm) como se presenta en la Figura 40.

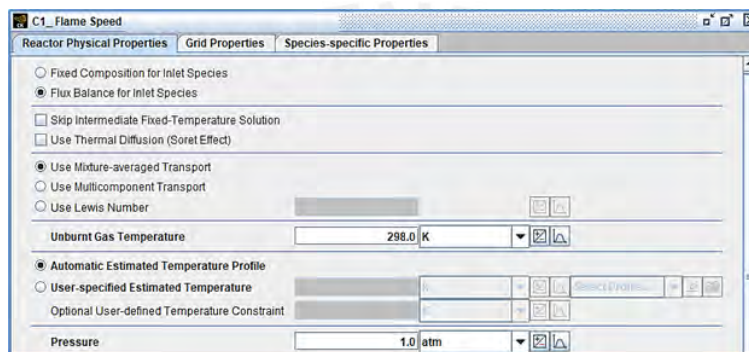


Figura 40. Ventana de parámetros de llama laminar de software Ansys Chemkin.

Luego, se colocan los porcentajes correspondiente a una condición de biogás (70% propano y 30% butano, 0% CO₂), de manera similar se realiza para las otras variantes de biogás con cierto porcentaje de CO₂. Asimismo, se configuran los puntos de análisis correspondientes a las ratios de 0.6 a 1.7, con un incremento de 0.1, esta parametrización se presenta en las figuras 41 y 42 respectivamente.

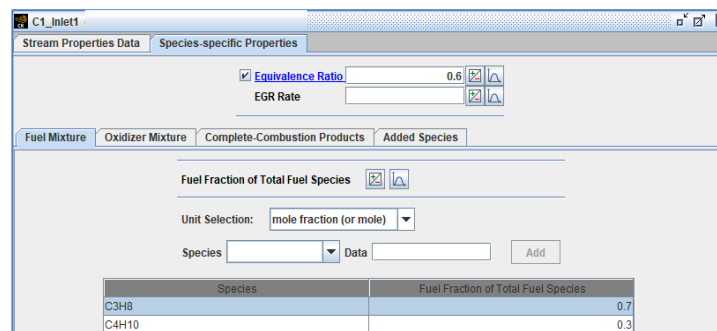


Figura 41. Configuración de mezcla de combustible para simulación en software Ansys Chemkin

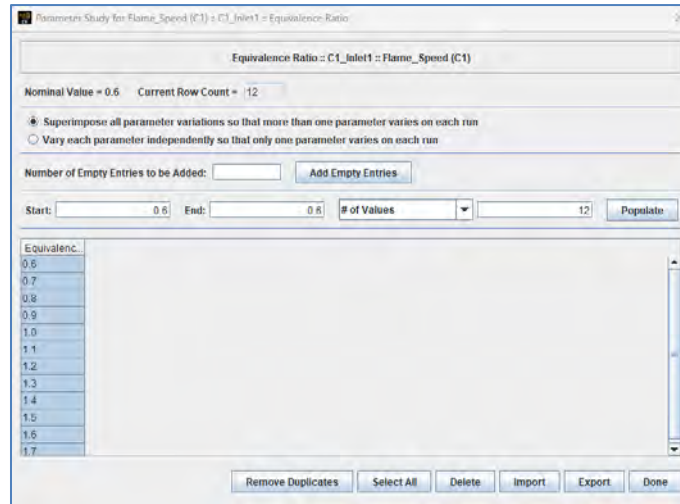


Figura 42. Configuración del ratio como parámetro de estudio en software Ansys Chemkin.

Luego, se procede a la pestaña de configuración del oxidante a emplear, para este caso, se considera el aire una mezcla de 78% de nitrógeno, 21% oxígeno y 1% argón, y los productos completos de combustión CO_2 , H_2O , N_2 y Ar , como se presenta en las figuras 43 y 44.

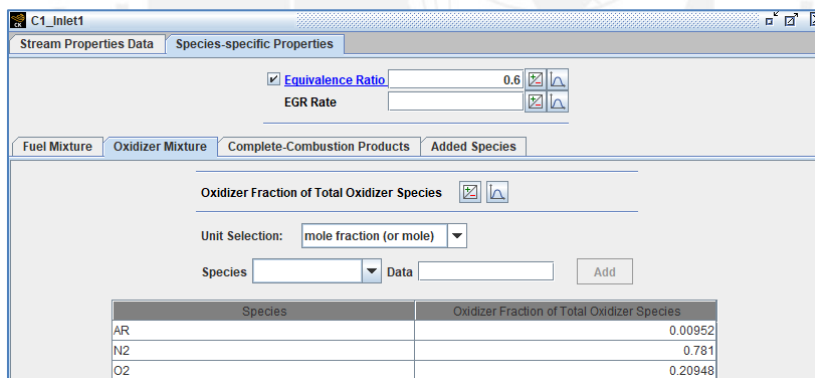


Figura 43. Configuración del oxidante en software Ansys Chemkin.

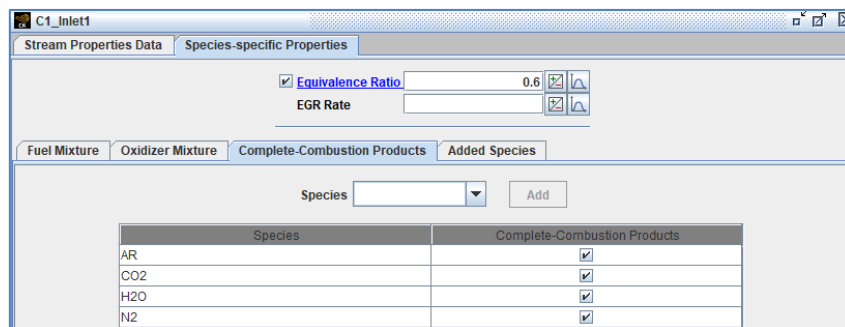


Figura 44. Configuración de los productos completos de combustión en software Ansys Chemkin.

El siguiente paso corresponde a la configuración de las iteraciones y tiempo por iteración que se le asignará al programa. En este caso, se configura un tiempo de 0.000001 segundos para lograr ajustar la temperatura y la ecuación de balance de energía. Vale destacar, que este tiempo puede variar para los distintos puntos de ensayo requeridos, donde para no obtener error se aumenta el tiempo por iteración lo cual conlleva a una demora en la simulación. Este paso se presenta en la Figura 45.

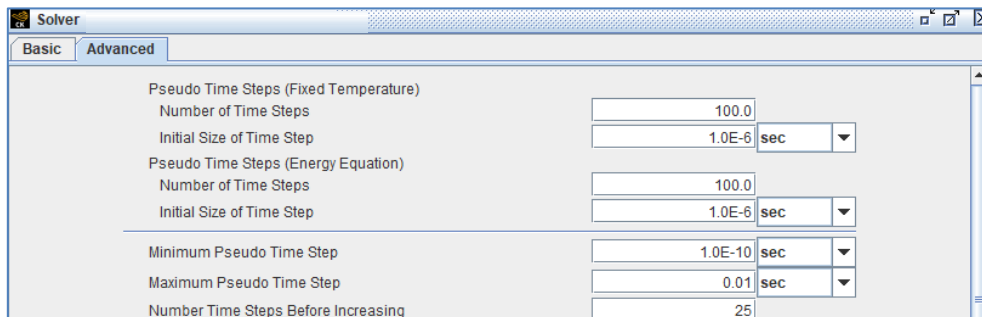


Figura 45. Configuración del solver en software Ansys Chemkin.

Luego, se inicia la simulación de cada condición y aparecerá la ventana de cálculos que presentará el estado de cada caso de estudio como se muestra en la Figura 46.

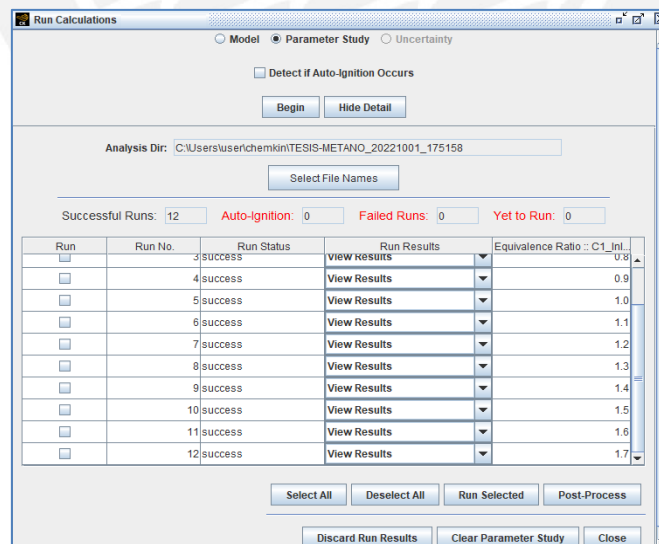


Figura 46. Ventana de ejecución de cálculos para cada condición en software Ansys Chemkin.

Finalmente, se realiza el post procesado que consiste en seleccionar las variables a analizar, en este caso se seleccionan, la temperatura de llama, velocidad de llama y cada uno

de los elementos presentes en nuestros productos (Ar , CO , CO_2 , H , H_2 , H_2O , N , N_2 , NO , O , O_2 y OH), los cuáles serán obtenidos mediante un archivo Excel como se muestra en la Figura 47.

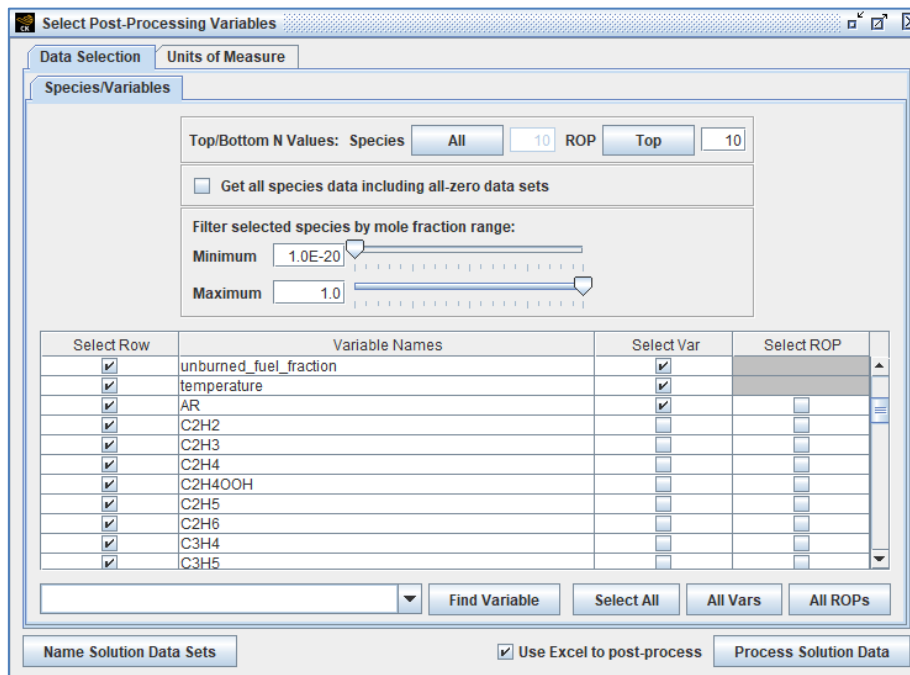


Figura 47. Ventana de post-procesado en software Ansys Chemkin.

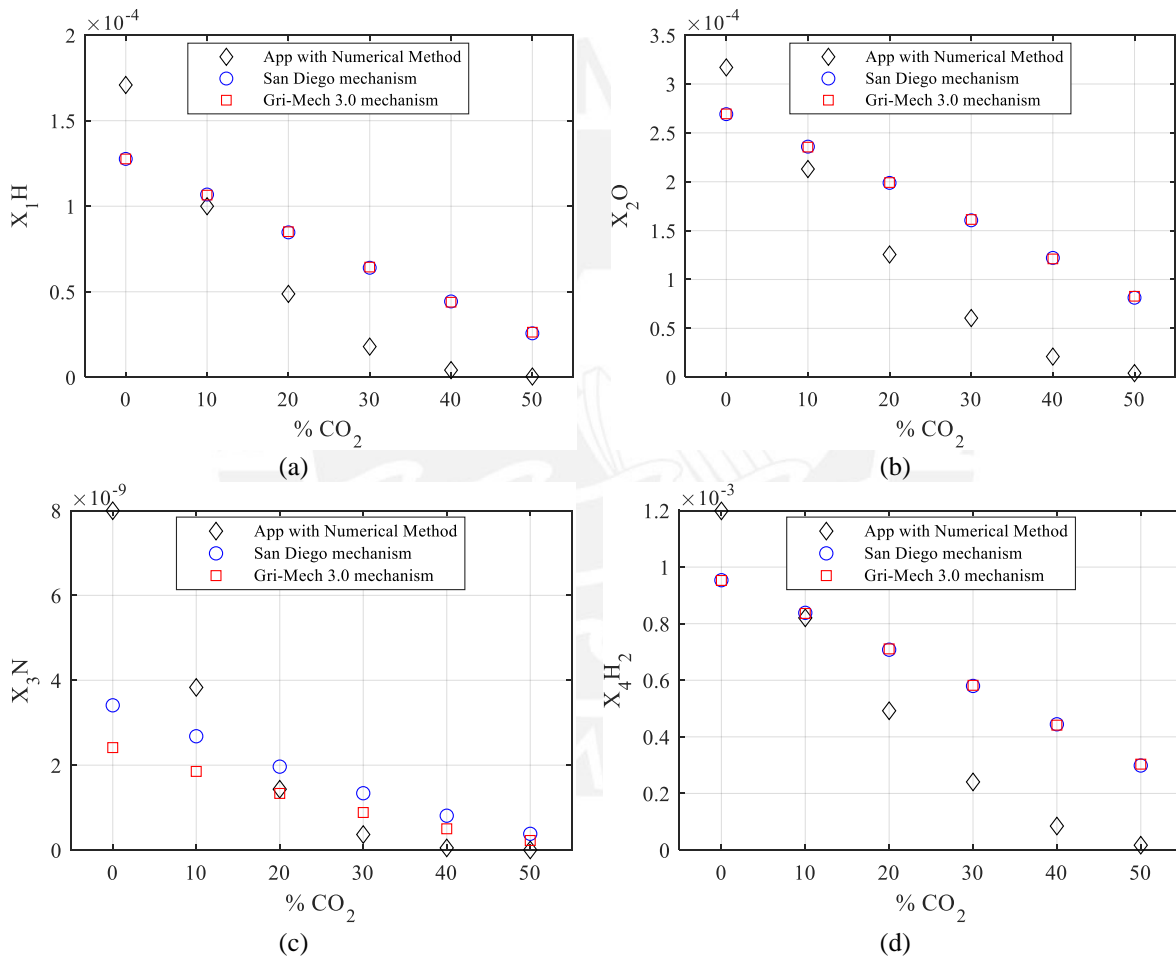
De esta misma forma se obtienen los resultados para el análisis del biogás a distintos porcentajes de CO_2 .

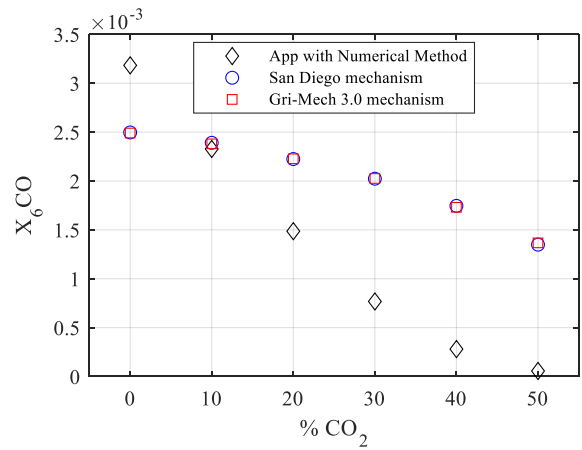
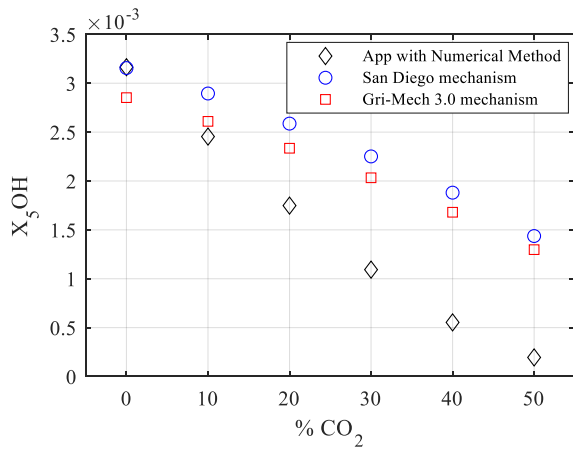
CAPÍTULO 4:

RESULTADOS Y ANÁLISIS

4.1 Productos de Combustión

Con el objetivo de comparar los resultados obtenidos mediante las 3 fuentes (Metodología numérica del aplicativo desarrollado en MATLAB y simulaciones en Ansys Chemkin, primero, se presentan los resultados para una ratio de 0.9 en las Figuras 48 y 49.

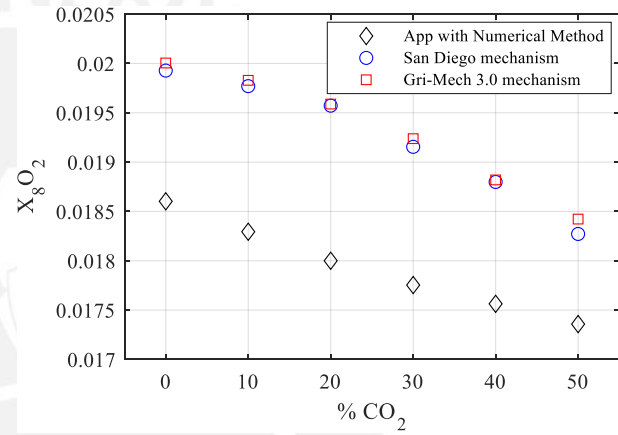
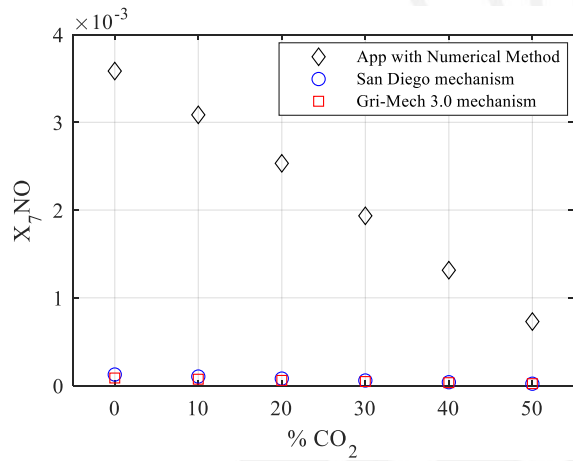




(e)

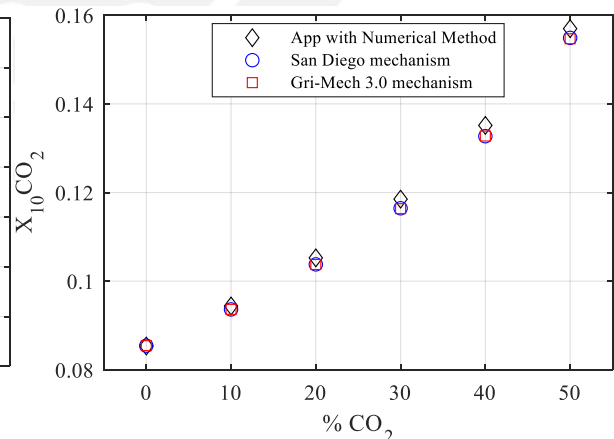
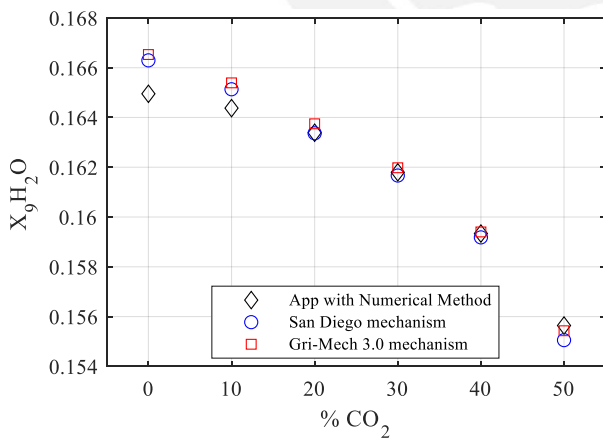
(f)

Figura 48. Productos de Combustión ($X_1 - X_6$) a distintos porcentajes de CO_2 para una ratio equivalente (ϕ) de 0.9 (mezcla pobre).



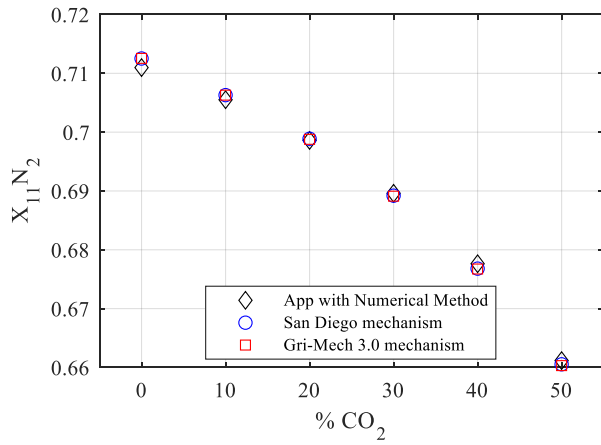
(a)

(b)

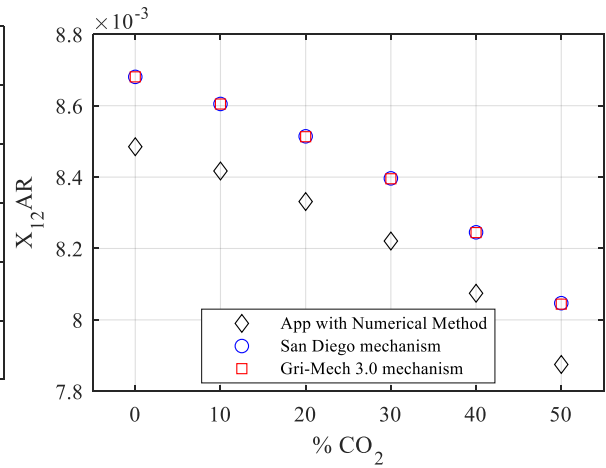


(c)

(d)



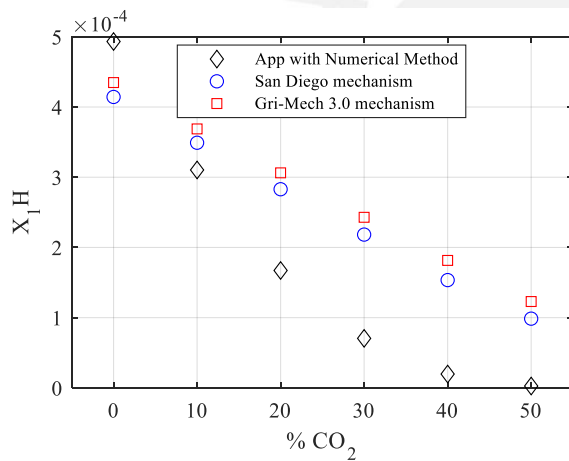
(e)



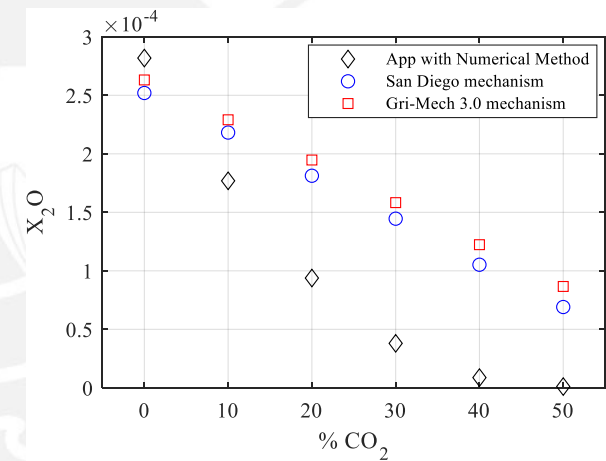
(f)

Figura 49. Productos de Combustión ($X_7 - X_{12}$) a distintos porcentajes de CO_2 para una ratio equivalente (ϕ) de 0.9 (mezcla pobre).

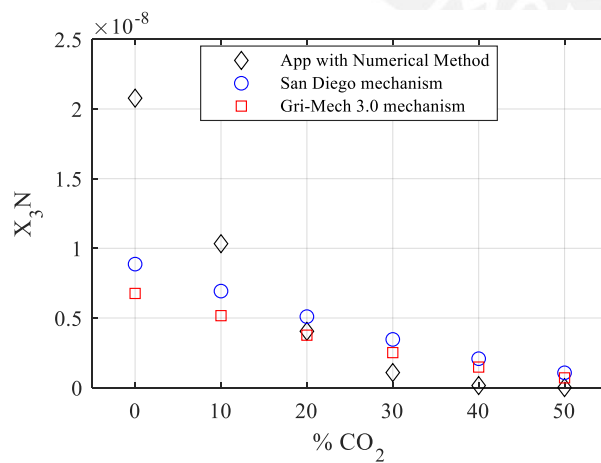
En segundo lugar, se presentan los resultados para una ratio de 1 (Figuras 50 y 51).



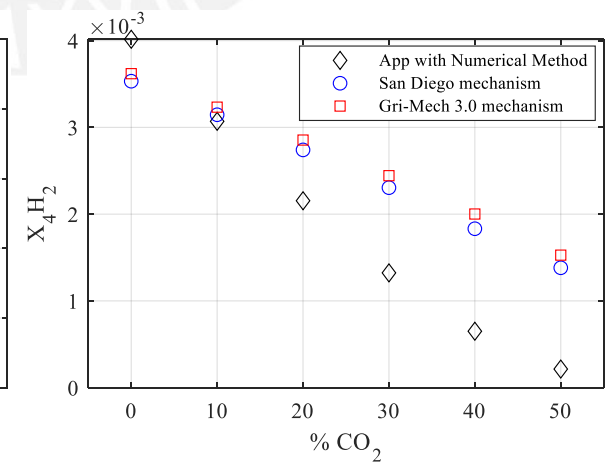
(a)



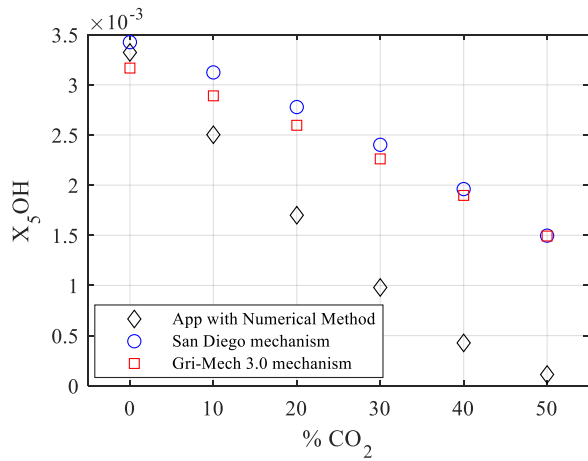
(b)



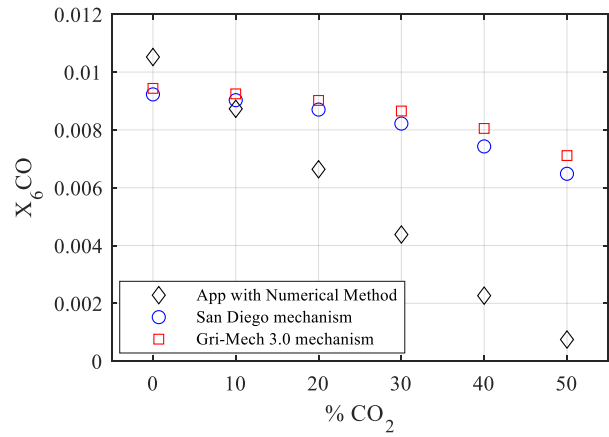
(c)



(d)

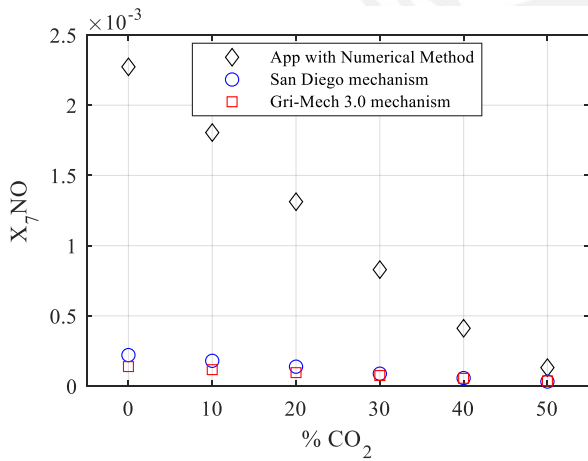


(e)

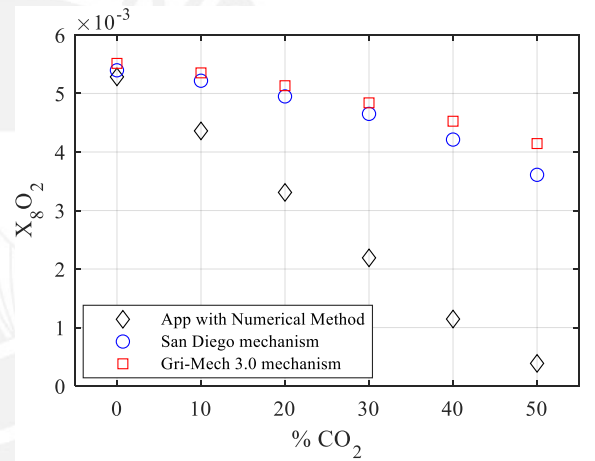


(f)

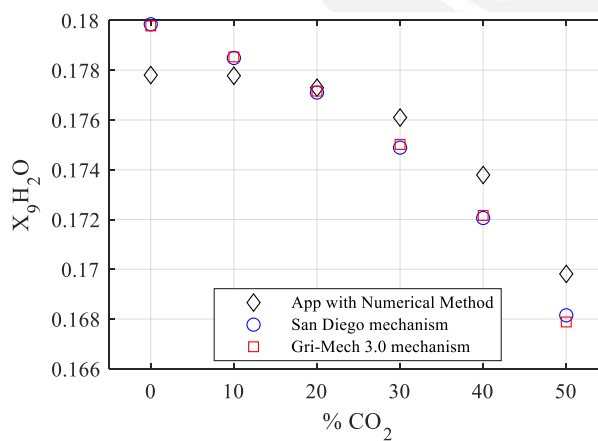
Figura 50. Productos de Combustión ($X_1 - X_6$) a distintos porcentajes de CO_2 para una ratio equivalente (ϕ) de 1 (mezcla estequiométrica)



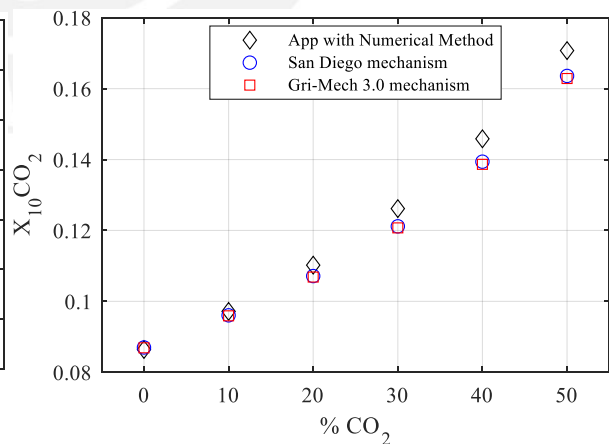
(a)



(b)



(c)



(d)

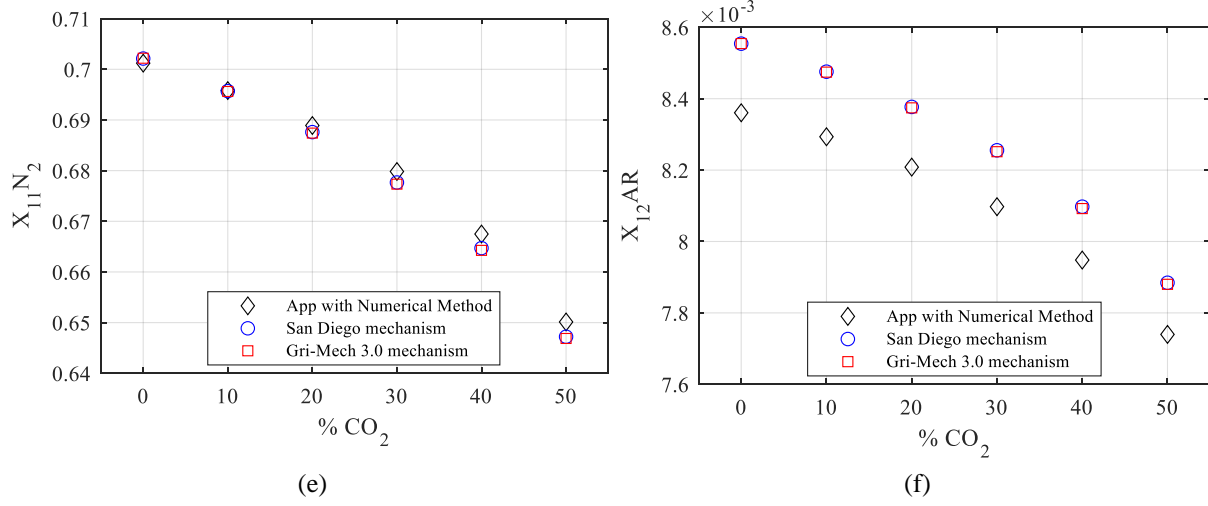
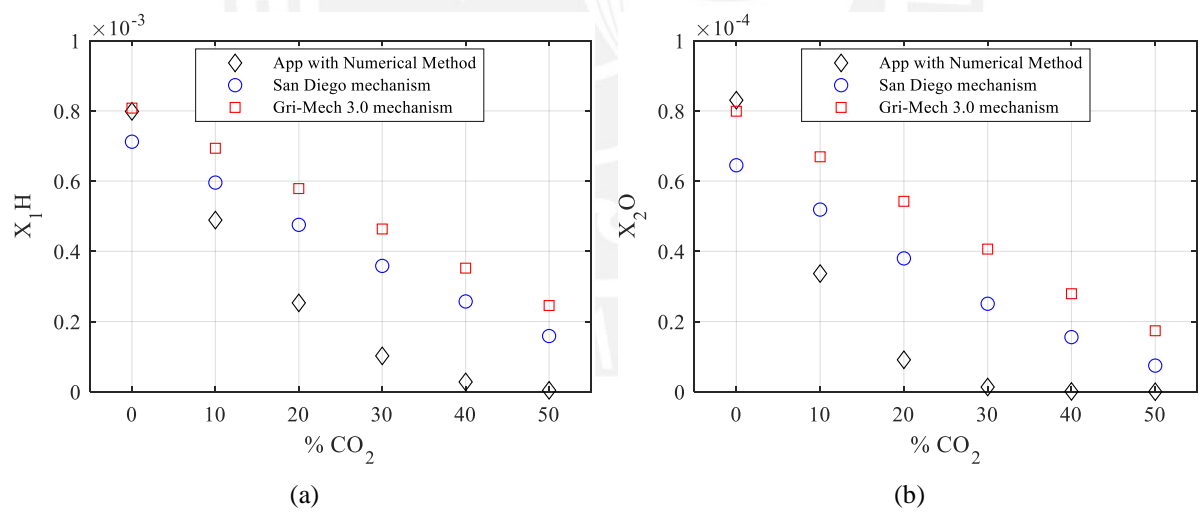
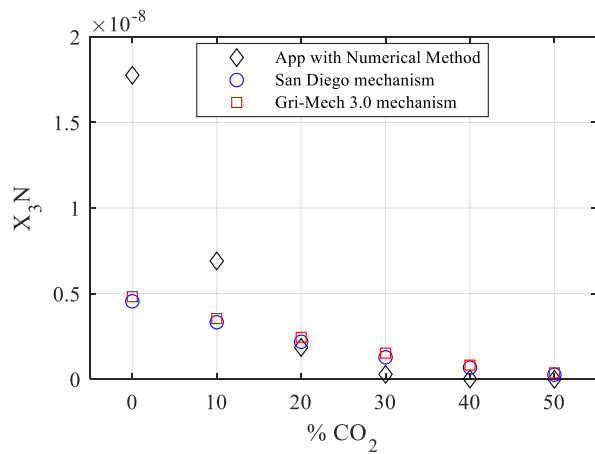


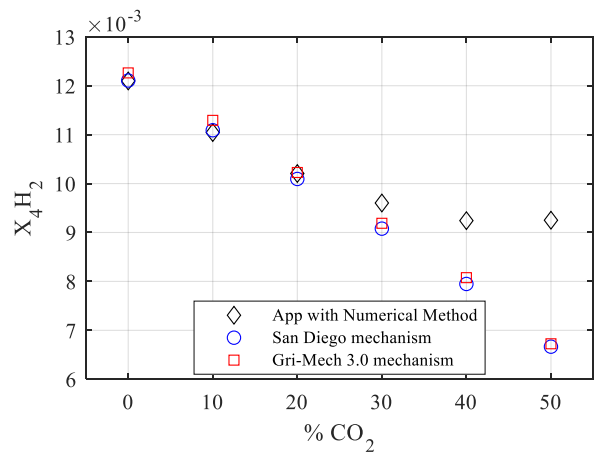
Figura 51. Productos de Combustión ($X_7 - X_{12}$) a distintos porcentajes de CO_2 para una ratio equivalente (ϕ) de 1 (mezcla estequiométrica).

En tercer lugar, se presentan los resultados para una ratio de equivalencia 1.1 (Figuras 52 y 53), de esta manera, haciendo uso de las Figuras 48 - 53 se puede realizar el análisis del comportamiento de todas las fracciones para los 3 tipos de mezcla (pobre, estequiométrica y rica en combustible).

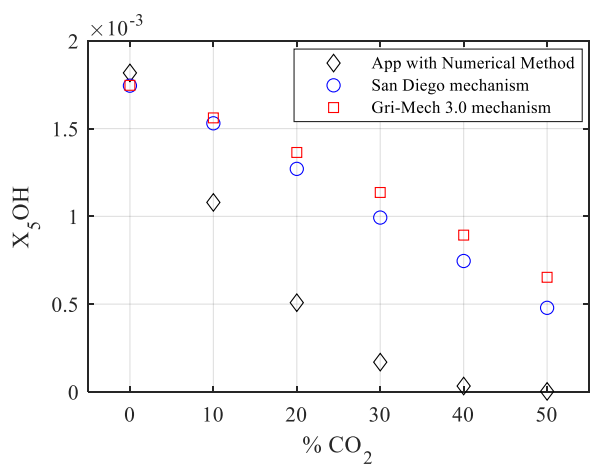




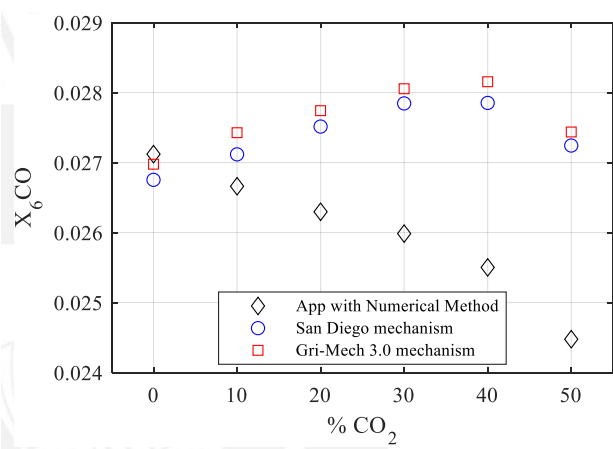
(c)



(d)

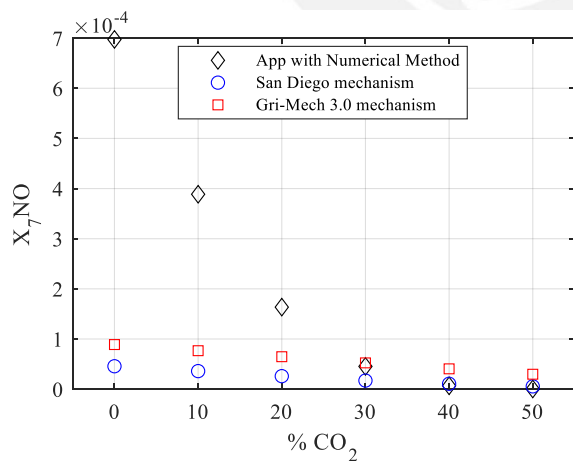


(e)

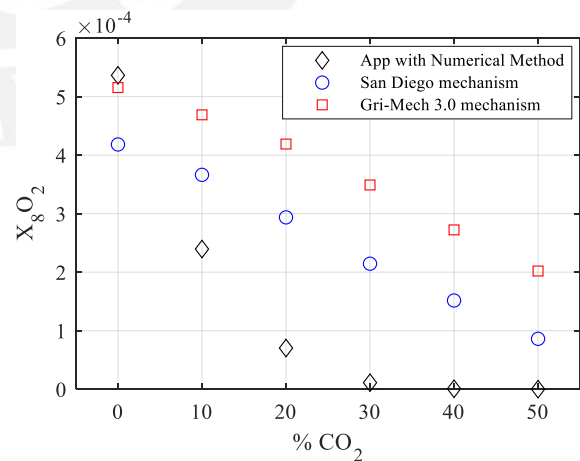


(f)

Figura 52. Productos de Combustión ($X_1 - X_6$) a distintos porcentajes de CO_2 para una ratio equivalente (ϕ) de 1.1 (mezcla rica).



(a)



(b)

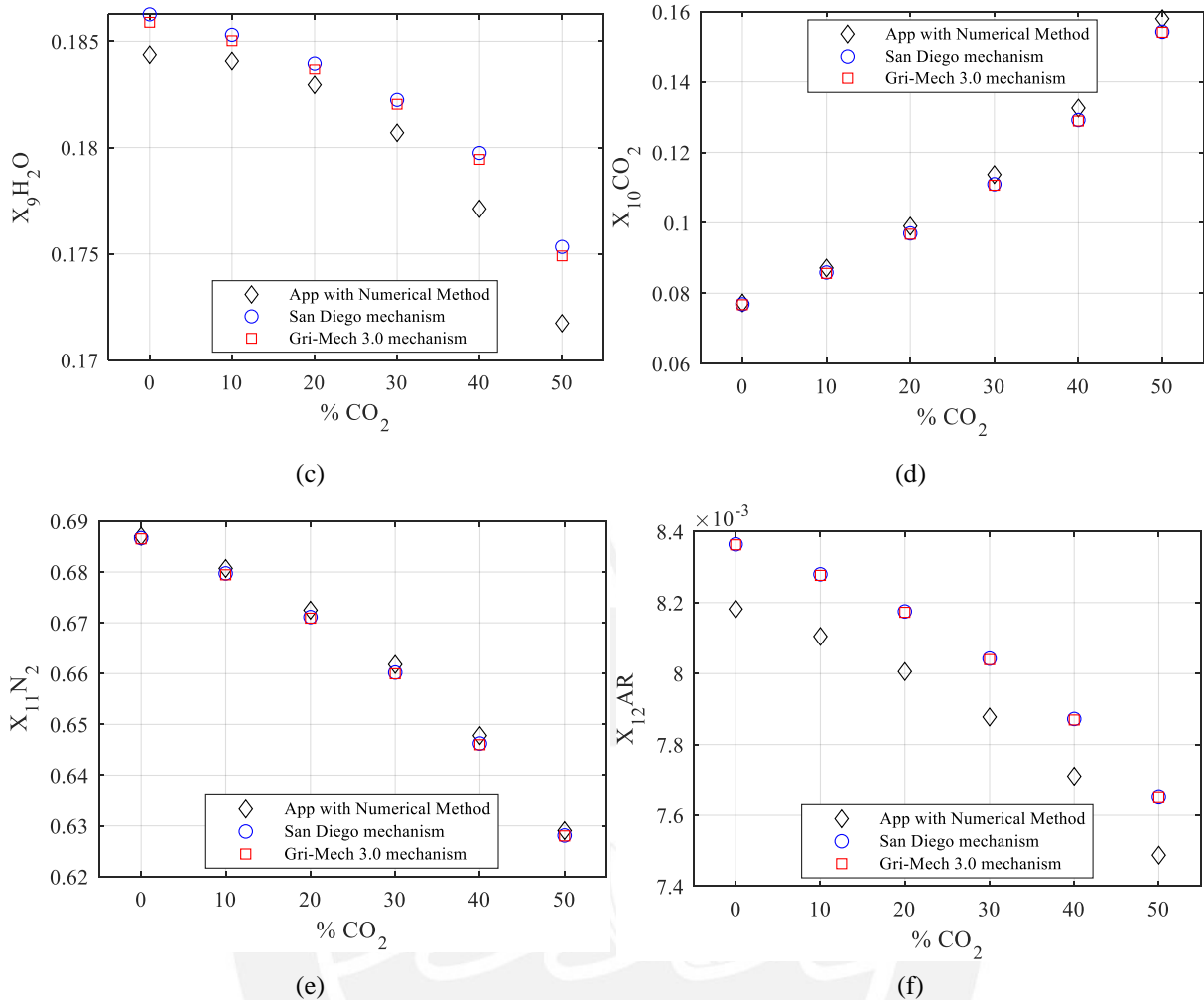


Figura 53. Productos de Combustión ($X_7 - X_{12}$) a distintos porcentajes de CO_2 para una ratio equivalente (ϕ) de 1.1 (mezcla rica).

De las Figuras 48 a 53, se puede afirmar que para las tres ratios presentadas (0.9, 1, 1.1) en los tres métodos de cálculo (metodología numérica en aplicativo MATLAB, simulación en Ansys Chemkin usando los mecanismos de San Diego y Gri-Mech 3.0) a medida que se aumenta el porcentaje de CO_2 en la mezcla, las cantidades de hidrógeno (X_1H), oxígeno (X_2O), nitrógeno (X_3N), hidrógeno (X_4H_2), hidróxido (X_5OH), oxígeno (X_8O_2), óxido de dihidrógeno (X_9H_2O), nitrógeno ($X_{11}N_2$) y argón ($X_{12}AR$) disminuyen.

Considerando las reacciones presentadas en la metodología numérica del aplicativo desarrollado, a medida que el porcentaje de CO_2 aumenta el porcentaje de gas natural se ve reducido en volumen, por ende, se tiene menor cantidad de Hidrógeno involucrado en la

reacción de combustión (disminuye X_1H , X_4H_2 , X_5OH , X_9H_2O). Asimismo, conforme el CO_2 va incrementando, la cantidad de moléculas de oxígeno que contiene influye en la ratio de la mezcla, lo cual para mantenerse causa que la cantidad de aire ingresante sea menor, en consecuencia, disminuya el O_2 , N_2 y AR presentes en él y que empiece a disminuir las fracciones X_2O , X_3N , X_8O_2 , $X_{11}N_2$, $X_{12}AR$. Esta última afirmación se puede validar visualizando la Ecuación 6 correspondiente a la reacción química de combustión.

Respecto de X_7NO (óxido de nitrógeno), se puede observar para los tres casos de mezcla (ratios 0.9, 1, 1.1) los resultados obtenidos mediante la metodología numérica empleada en el aplicativo desarrollado en MATLAB presentan una disminución conforme aumenta el porcentaje de CO_2 . De manera distinta, los resultados obtenidos por simulación en Ansys Chemkin, son más constantes y presentan un menor decremento en su valor conforme aumenta el porcentaje de CO_2 . Por un lado, la disminución de X_7NO conforme aumenta el porcentaje de CO_2 tiene como explicación la disminución de la temperatura de llama durante la combustión, ya que los NO_x se forman mayoritariamente a altas temperaturas, esta afirmación se validará posteriormente analizando las temperaturas de llama obtenidas en el siguiente apartado de resultados. Por otro lado, respecto a la diferencia entre los resultados del aplicativo desarrollado y la simulación en Ansys Chemkin, esta radica principalmente en que la simulación de Ansys Chemkin considera un mayor número de reacciones y especies de elementos en comparación de la metodología numérica empleada en el aplicativo (el mecanismo San Diego contiene 57 especies versus las 12 del aplicativo), por ende la diferencia correspondería a fracciones molares de estructura NO_x o que contengan nitrógeno y oxígeno en su composición. Además, conforme se aumentó la ratio de equivalencia, el valor de X_7NO se incrementó para todos los casos. Adicionalmente a estos resultados, Qin W, Egolfopoulos F, Tsotsis T, analizaron que, si se aumenta el porcentaje de CO_2 en la mezcla y se desea mantener el consumo del biogás, la ratio de equivalencia requerida será mayor (Qin et al., 2001). Consecuentemente, se

incrementará la generación de productos como el NO (ver Figura 54), siendo una gran desventaja y una problemática en el ámbito medio ambiental (Qin et al., 2001).

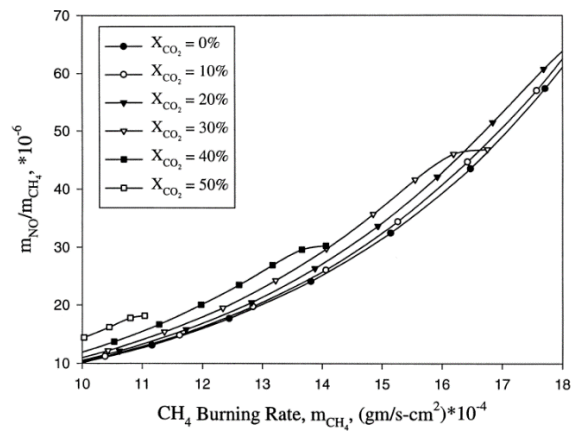


Figura 54. Variación de la producción de NO por gramo de CH₄ consumido respecto de la tasa de combustión en masa de CH₄ (Qin et al., 2001).

Respecto de las fracciones X_{6CO} y X_{10CO_2} ambas aumentan conforme el porcentaje de CO_2 se incrementa en la mezcla solo para los resultados de la simulación en el caso de mezcla rica, es decir, la ratio 1.1 (ver Figuras 52(f) y 53(d)). De manera general, se debe a que en mezclas ricas la combustión es incompleta lo cual generará un aumento de la cantidad de X_{6CO} , que posteriormente reaccionando con oxígeno formará el CO_2 . Por otro lado, conforme se aumenta el porcentaje de CO_2 , X_{6CO} disminuirá siempre para la mezcla estequiométrica y pobre, esto debido a que al aumentar el % CO_2 , se está disminuyendo el porcentaje de gas Natural o metano en el biogás y por ende se disminuye la cantidad de moléculas de carbono que podrán reaccionar con oxígeno para en un primer lugar formar el X_{6CO} y posteriormente el X_{10CO_2} . En consecuencia, siempre se verá un incremento de X_{10CO_2} para todos los casos ya que este no reacciona con el oxígeno y participa en la reacción como un gas inerte, lo cual tendrá consecuencias posteriores en las temperaturas de llama y velocidades de llama a analizar. Todos los resultados de los puntos ensayados correspondientes a los productos de combustión obtenidos mediante el aplicativo desarrollado en MATLAB y simulación usando los mecanismos de San Diego y Gri-Mech 3.0, se encuentran en los Anexos 7, 8 y 9,

respectivamente. Adicionalmente, el aplicativo no fue capaz de determinar los valores de 10%, 20%, 30%, 40% y 50% de CO₂ en todos los puntos de ratios de equivalencia a evaluar, esto debido a que el programa detectó durante su ejecución en los ratios más altos un exceso de carbono en la mezcla que generaría carbono libre en los productos de combustión (condición excluyente para la ejecución completa del programa) y que impedía cumplir la condición de suma de productos de combustión (fracciones molares) equivalente a 1 (Ecuación 17).

4.2 Temperaturas de llama

4.2.1 Temperaturas de llama obtenidas mediante metodología numérica en aplicativo MATLAB

En la Figura 55 se presentan los resultados de temperatura de llama obtenidos mediante la metodología numérica empleada en el aplicativo desarrollado en MATLAB.

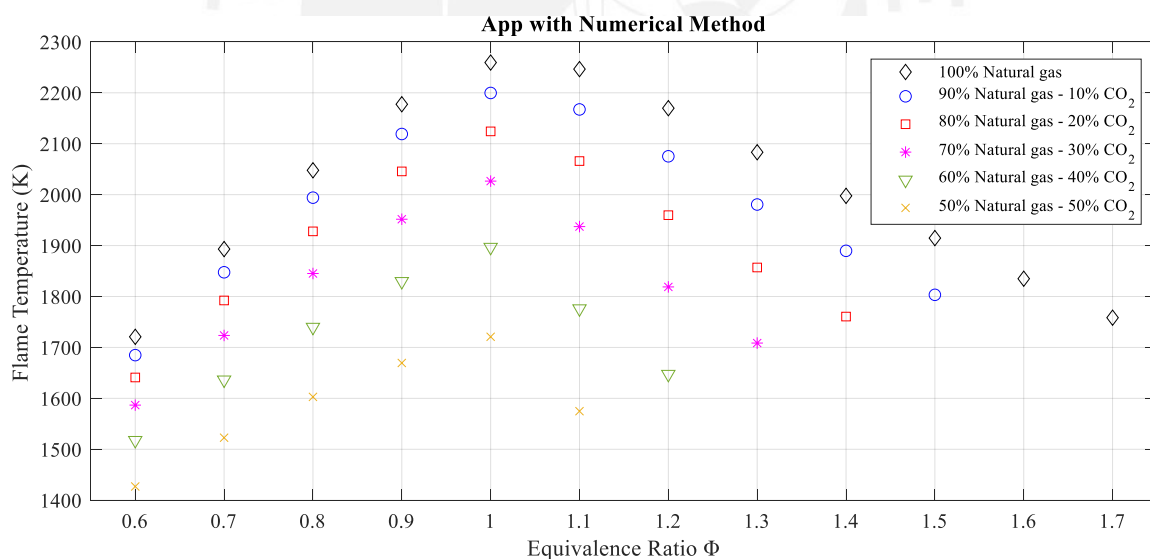


Figura 55. Temperaturas de llama determinadas por el aplicativo desarrollado en MATLAB a distintos porcentajes de CO₂.

De la Figura 55 se puede afirmar que a un mayor porcentaje de CO₂ presente en la mezcla, los valores de temperatura de llama decrecen considerablemente. Asimismo, las máximas temperaturas de llama determinadas por el aplicativo con la metodología numérica se dan para un valor de ratio estequiométrico igual a 1. De lo anterior mencionado, es posible realizar la

afirmación de que el CO_2 afecta térmicamente la combustión, por ello, las temperaturas de la llama irán decreciendo conforme se aumente el porcentaje de CO_2 en la mezcla. Esto principalmente por el comportamiento que tiene el CO_2 , el cual tiene propiedades del tipo inerte y contribuirá con la disipación del calor ocasionando la dilución de la mezcla a mayores porcentajes. Previo a la visualización de la simulación en Ansys Chemkin, es importante mencionar que, del comportamiento de los posteriores resultados de velocidad de llama determinados por la metodología numérica, se espera que sean directamente proporcionales a las temperaturas de llama gracias a la aplicación de la teoría de Mallard-Le Chateller para el cálculo y su dependencia única de la temperatura de la reacción. Este punto se validará analizando los resultados de velocidad de llama correspondientes al aplicativo desarrollado en MATLAB.

4.2.2 Temperaturas de llama obtenidas mediante simulación numérica en Ansys Chemkin

Las Figuras 56 y 57 presentan las temperaturas de llama obtenidas mediante simulación en Ansys Chemkin usando los mecanismos de San Diego y Gri-Mech 3.0 respectivamente.

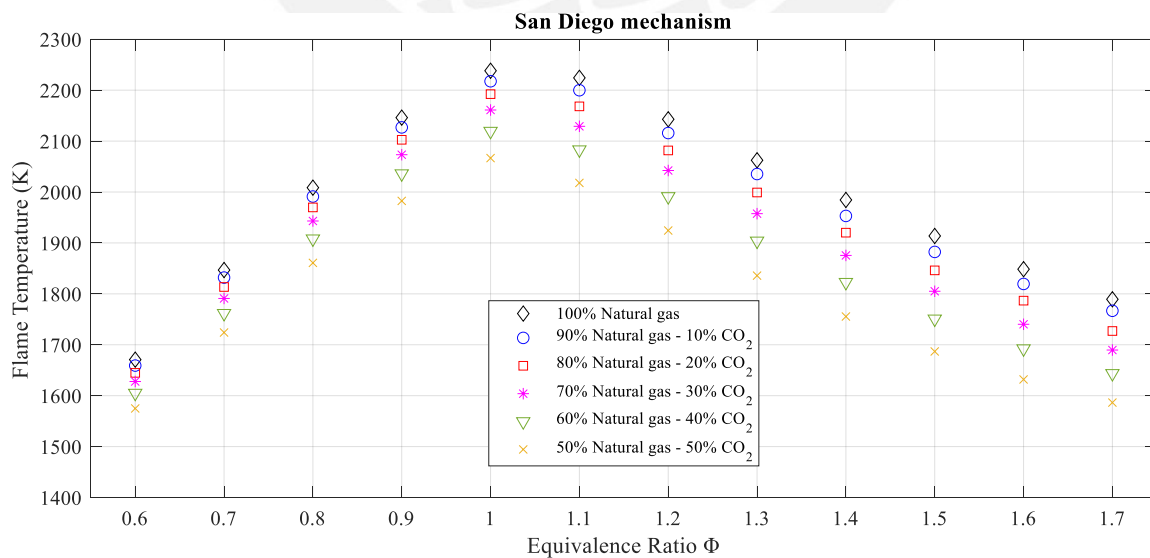


Figura 56. Temperaturas de llama determinadas mediante simulación en Ansys Chemkin empleando el mecanismo San Diego.

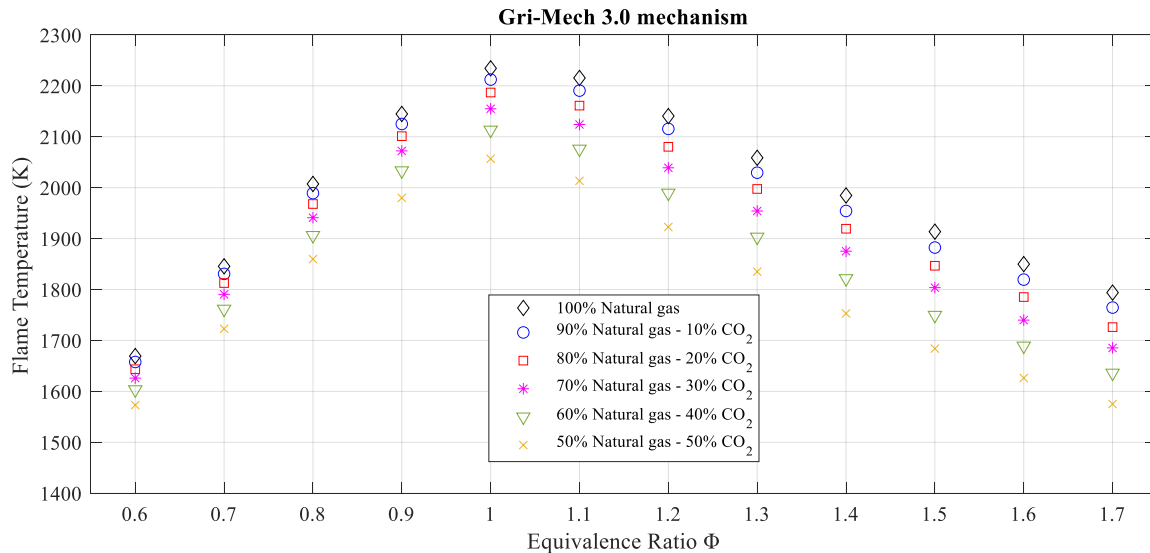


Figura 57. Temperaturas de llama determinadas mediante simulación en Ansys Chemkin empleando el mecanismo de Gri-Mech 3.0.

De las Figuras 56 y 57, las temperaturas de llama máximas de ambos mecanismos se encuentran para todos los porcentajes de CO₂ en la ratio de equivalencia igual 1. Asimismo, en la ratio de 0.6 se observa para ambos casos que la diferencia de temperaturas es menor respecto de las demás ratios analizados, indicando que el efecto inerte %CO₂ en ratios menores a 1 es menor. Además, como se mencionó en la sección 4.1 sobre los productos de combustión, se observa que al aumentar el porcentaje de CO₂, disminuye X₇NO. Esto se debe a que el CO₂ reduce la temperatura de la llama, lo que a su vez disminuye la formación de NO_x, ya que estos se generan principalmente a altas temperaturas.

4.2.3 Comparativa de temperaturas de llama entre las fuentes de resultados

En la Figura 58, se presentan la comparativa de los resultados de temperatura de llama laminar a distintas ratios para valores de 0%, 10%, 20%, 30%, 40% y 50% de CO₂.

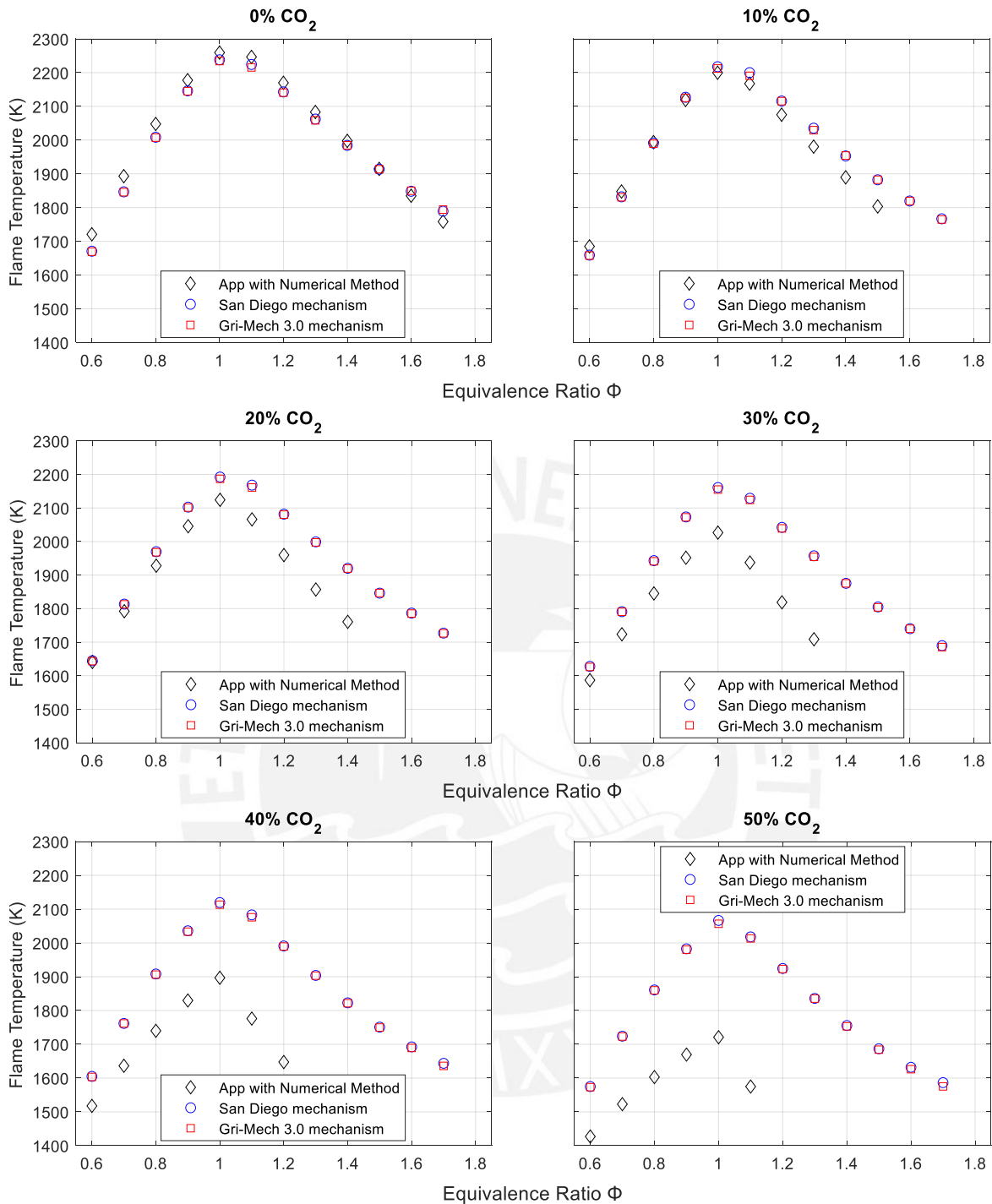


Figura 58. Comparativa de resultados de temperaturas de llama laminar para todos los casos de %CO₂ considerados.

Del comparativo, se puede afirmar que el aplicativo desarrollado en MATLAB presentó buena concordancia con la simulación realizada en Ansys Chemkin hasta los ensayos con 20% de CO₂ y conforme se dio el aumento de porcentaje de CO₂ en la mezcla, los resultados de la metodología numérica fueron alejándose de los simulados en Ansys Chemkin. Estas

diferencias principalmente se dan debido a factores no considerados en el aplicativo: otros productos de combustión adicionales a los 12 estudiados en el presente trabajo, combustible no quemado, otros elementos de estructura NO_x, etc., los cuales aportan valores de entalpía no consideradas en el balance energético final para determinar la temperatura de llama.

En la Tabla 12, se presenta el error absoluto (columna “ ΔT (K)”) y el error relativo (columna “%”) de las temperaturas de llama considerando como real los resultados de los mecanismos empleados en la simulación, donde las filas rellenadas con verde y naranja son la menor y mayor diferencia encontrada para cada porcentaje de CO₂.

Tabla 12: Errores absoluto y relativo de las temperaturas de llama calculadas por el aplicativo desarrollado en Matlab respecto de las simulaciones en Ansys Chemkin.

ϕ	% CO ₂											
	0%				10%				20%			
	App with Numerical Method vs San Diego		App with Numerical Method vs Gri-Mech 3.0		App with Numerical Method vs San Diego		App with Numerical Method vs Gri-Mech 3.0		App with Numerical Method vs San Diego		App with Numerical Method vs Gri-Mech 3.0	
	ΔT (K)	%	ΔT (K)	%	ΔT (K)	%	ΔT (K)	%	ΔT (K)	%	ΔT (K)	%
0.6	50.1	3.0%	51.6	3.1%	25.7	1.6%	27.2	1.6%	-3.8	-0.2%	-2.5	-0.2%
0.7	46.4	2.5%	47.5	2.6%	15.6	0.9%	16.8	0.9%	-21.2	-1.2%	-20.5	-1.1%
0.8	39.3	2.0%	40.5	2.0%	2.9	0.1%	4.9	0.2%	-41.8	-2.1%	-40.0	-2.0%
0.9	31.4	1.5%	32.7	1.5%	-7.8	-0.4%	-6.0	-0.3%	-56.9	-2.7%	-55.5	-2.6%
1	21.3	0.9%	25.0	1.1%	-17.9	-0.8%	-12.6	-0.6%	-68.0	-3.1%	-62.6	-2.9%
1.1	22.3	1.0%	31.0	1.4%	-32.6	-1.5%	-23.3	-1.1%	-102.2	-4.7%	-95.2	-4.4%
1.2	27.0	1.3%	29.2	1.4%	-40.5	-1.9%	-40.2	-1.9%	-122.0	-5.9%	-120.6	-5.8%
1.3	20.9	1.0%	24.6	1.2%	-54.7	-2.7%	-48.8	-2.4%	-142.1	-7.1%	-140.5	-7.0%
1.4	13.3	0.7%	13.0	0.7%	-63.3	-3.2%	-64.6	-3.3%	-159.6	-8.3%	-158.8	-8.3%
1.5	1.0	0.1%	1.1	0.1%	-79.0	-4.2%	-79.1	-4.2%	-	-	-	-
1.6	-13.4	-0.7%	-14.9	-0.8%	-	-	-	-	-	-	-	-
1.7	-30.9	-1.7%	-35.6	-2.0%	-	-	-	-	-	-	-	-
ϕ	% CO ₂											
	30%				40%				50%			
	App with Numerical Method vs San Diego		App with Numerical Method vs Gri-Mech 3.0		App with Numerical Method vs San Diego		App with Numerical Method vs Gri-Mech 3.0		App with Numerical Method vs San Diego		App with Numerical Method vs Gri-Mech 3.0	
	ΔT (K)	%	ΔT (K)	%	ΔT (K)	%	ΔT (K)	%	ΔT (K)	%	ΔT (K)	%
0.6	-41.1	-2.5%	-39.3	-2.4%	-87.4	-5.4%	-85.8	-5.4%	-147.9	-9.4%	-146.2	-9.3%
0.7	-67.4	-3.8%	-67.0	-3.7%	-125.4	-7.1%	-125.4	-7.1%	-201.3	-11.7%	-200.1	-11.6%
0.8	-97.9	-5.0%	-95.8	-4.9%	-168.3	-8.8%	-166.5	-8.7%	-258.0	-13.9%	-256.8	-13.8%
0.9	-121.6	-5.9%	-120.5	-5.8%	-206.3	-10.1%	-203.7	-10.0%	-313.1	-15.8%	-310.5	-15.7%

1	-134.5	-6.2%	-128.3	-6.0%	-222.7	-10.5%	-216.5	-10.2%	-345.7	-16.7%	-335.9	-16.3%
1.1	-191.7	-9.0%	-186.8	-8.8%	-307.0	-14.7%	-299.9	-14.4%	-443.1	-22.0%	-438.6	-21.8%
1.2	-223.4	-10.9%	-220.3	-10.8%	-343.7	-17.3%	-342.1	-17.2%	-	-	-	-
1.3	-248.9	-12.7%	-245.7	-12.6%	-	-	-	-	-	-	-	-

De la Tabla 12, se observa que las menores diferencias encontradas para todos los casos presentados de porcentajes de CO₂ de la metodología numérica en MATLAB respecto a las dos simulaciones en Ansys fueron en mezclas pobres, en comparación con la mezcla de 0% de CO₂ localizada en una mezcla rica (ratio 1.5), siendo esta la menor diferencia de todos los ensayos con un sobreestimado del aplicativo del 0.1% (+1 K) respecto de los mecanismos San Diego y Gri-Mech 3.0. Caso contrario, las mayores diferencias para los demás casos (10%, 20%, 30%, 40% y 50% de CO₂) de la metodología numérica del aplicativo respecto a las dos simulaciones en Ansys fueron en mezclas ricas, las cuales aumentaban conforme el incremento del porcentaje del CO₂ en la mezcla y ratio. La mayor diferencia encontrada fue en el porcentaje de 50% de CO₂ con un subestimado del aplicativo del 22% (-443.1 K) respecto del mecanismo San Diego. Esto reafirma la buena aproximación de la metodología numérica para los menores de ratio y porcentajes de CO₂.

4.2.4 Comparativa de temperaturas de llama entre los resultados del presente trabajo y otros autores

En la Tabla 13 se presenta la relación de trabajos considerando el presente documento y los previamente realizados por otros autores con parámetros de estudio idénticos o similares. Se especificaron las características de los ensayos realizados de los distintos trabajos, con el objetivo de visualizar las mayores semejanzas y diferencias en comparación a lo desarrollado. Se consideraron la temperatura inicial y presión de trabajo como fundamentales para la coherencia en la comparación de resultados. Asimismo, en la Figura 59 se visualizan los resultados de las investigaciones seleccionadas correspondientes a la temperatura de llama para los distintos porcentajes de CO₂.

Tabla 13: Especificaciones de investigaciones a comparar para análisis de temperatura de llama.

Investigación	Tipo de estudio	Presión (atm)	Temperatura Inicial (K)	Composición de mezclas de biogás estudiadas					
				#	Metano CH ₄	CO ₂	Etano C ₂ H ₆	Propano C ₃ H ₈	N ₂
App with Numerical Method – Presente trabajo	Metodología numérica codificada en aplicativo desarrollado en MATLAB	1	298	1	88.54%	0%	10.32%	0.020%	0.54%
				2	79.68%	10%	9.28%	0.018%	0.48%
				3	70.83%	20%	8.26%	0.016%	0.43%
				4	61.98%	30%	7.22%	0.014%	0.38%
				5	53.12%	40%	6.19%	0.012%	0.32%
				6	44.27%	50%	5.16%	0.010%	0.27%
San Diego mechanism – Presente trabajo	Simulación numérica en Ansys Chemkin	1	298	1	88.54%	0%	10.32%	0.020%	0.54%
				2	79.68%	10%	9.28%	0.018%	0.48%
				3	70.83%	20%	8.26%	0.016%	0.43%
				4	61.98%	30%	7.22%	0.014%	0.38%
				5	53.12%	40%	6.19%	0.012%	0.32%
				6	44.27%	50%	5.16%	0.010%	0.27%
Gri-Mech 3.0 mechanism – Presente trabajo	Simulación numérica en Ansys Chemkin	1	298	1	88.54%	0%	10.32%	0.020%	0.54%
				2	79.68%	10%	9.28%	0.018%	0.48%
				3	70.83%	20%	8.26%	0.016%	0.43%
				4	61.98%	30%	7.22%	0.014%	0.38%
				5	53.12%	40%	6.19%	0.012%	0.32%
				6	44.27%	50%	5.16%	0.010%	0.27%
Mendieta et al., 2016	Simulación numérica	1	298	1	100%	0%	0%	0%	0%
				2	90%	10%	0%	0%	0%
				3	80%	20%	0%	0%	0%
				4	70%	30%	0%	0%	0%
				5	60%	40%	0%	0%	0%
				6	50%	50%	0%	0%	0%
Xiang et al., 2019	Simulación numérica	1	298	1	100%	0%	0%	0%	0%
				2	95%	5%	0%	0%	0%
				3	85%	15%	0%	0%	0%
				4	75%	25%	0%	0%	0%
				5	65%	35%	0%	0%	0%

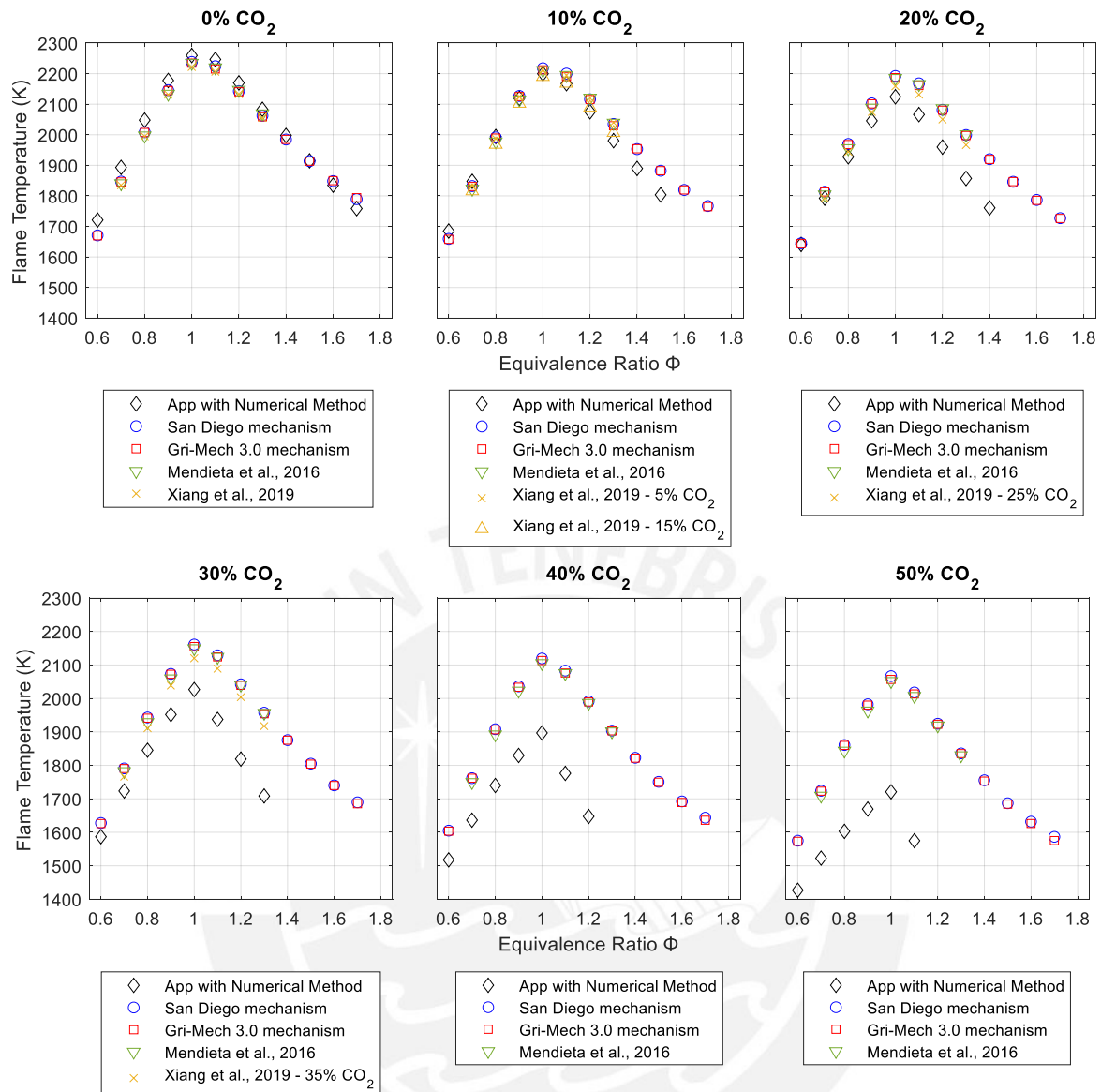


Figura 59. Comparativa de resultados de temperatura de llama laminar a distintos porcentajes de CO₂ entre el presente trabajo y otros autores.

De la Figura 59, se puede afirmar la similitud de los resultados de la simulación en Ansys Chemkin con las investigaciones de Mendieta et al., y Xiang et al., para todos los casos de mezcla y porcentajes de CO₂. Por otro lado, la metodología numérica del aplicativo presento nuevamente buen comportamiento para los resultados a menores porcentajes de CO₂ (0%, 10% y 20%), y a ratios de equivalencia menores a 1. Asimismo, se observó una disminución de las temperaturas de llama conforme aumentaba el CO₂ en todas las investigaciones desarrolladas.

Es importante mencionar que la simulación numérica realizada por Xiang et al., fue empleando el código PREMIX, el cual consiste en un programa codificado en FORTRAN para

el modelamiento de llamas premezcladas unidimensionales (programa similar a la función llama laminar de Ansys Chemkin). Por otro lado, Mendieta consideró realizar las simulaciones empleando el paquete REGATH y el esquema químico del Gri-Mech 3.0. Estas dos razones justificarían la buena semejanza entre los resultados encontrados por Mendieta y Xiang con lo simulado en el presente trabajo en Ansys Chemkin.

De los resultados correspondientes a la temperatura de llama, se puede afirmar para todos los casos que el CO₂ al ser agregado se comporta como diluyente, lo cual genera un incremento en la capacidad calorífica de la mezcla y esto conducirá a la disminución de la temperatura de llama y la ratio de combustión (menor porcentaje de metano o gas natural disponible para reaccionar a una misma ratio).

4.3 Velocidad de llama

4.3.1 Velocidades de llama obtenidas mediante metodología numérica codificada en aplicativo desarrollado en MATLAB

En la Figura 60 se presentan los resultados de velocidad de llama obtenidos mediante la metodología numérica codificada en el aplicativo desarrollado en MATLAB.

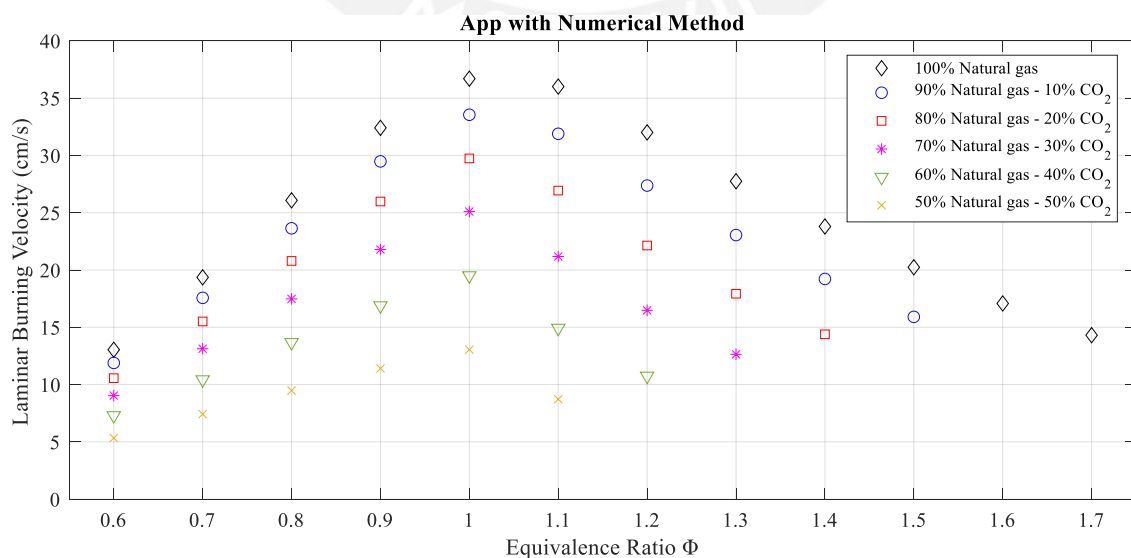


Figura 60. Velocidades de llama laminar determinadas por el aplicativo desarrollado en MATLAB a distintos porcentajes de CO₂.

De la Figura 60 se puede afirmar que conforme el porcentaje de CO₂ aumenta, la velocidad de llama decrece, asimismo, se puede observar que los valores de velocidad son sensibles al aumento del porcentaje de CO₂, disminuyendo de forma considerable su valor para cada ratio evaluado. Los valores máximos de velocidad de llama se encuentran para el valor de ratio igual a 1 para todos los casos de porcentaje de CO₂. Considerando que la metodología numérica emplea la metodología de Mallard-Le Chateller para el cálculo de la velocidad de llama, esta dependerá directamente de los resultados de temperatura de llama previamente calculados, por ende, se puede afirmar para los resultados del aplicativo, que a una mayor temperatura de llama se obtendrá una mayor velocidad de llama para una misma mezcla.

4.3.2 Velocidades de llama laminar obtenidas mediante simulación en Ansys Chemkin

Las Figuras 61 y 62 presentan las velocidades de llama obtenidas mediante simulación en Ansys Chemkin usando los mecanismos de San Diego y Gri-Mech 3.0 respectivamente.

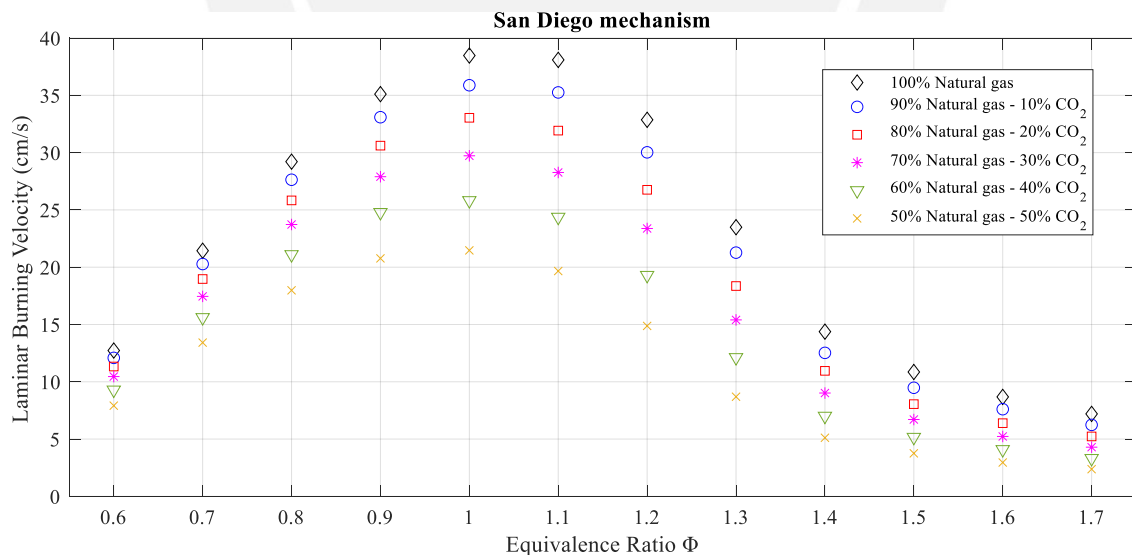


Figura 61. Velocidades de llama laminar determinadas mediante simulación en Ansys Chemkin empleando el mecanismo San Diego.

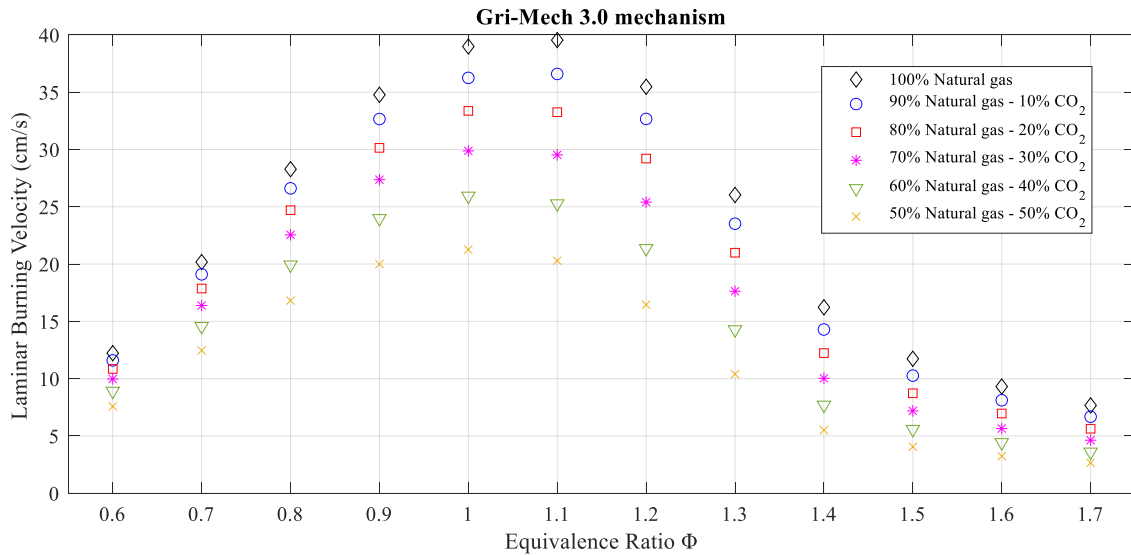
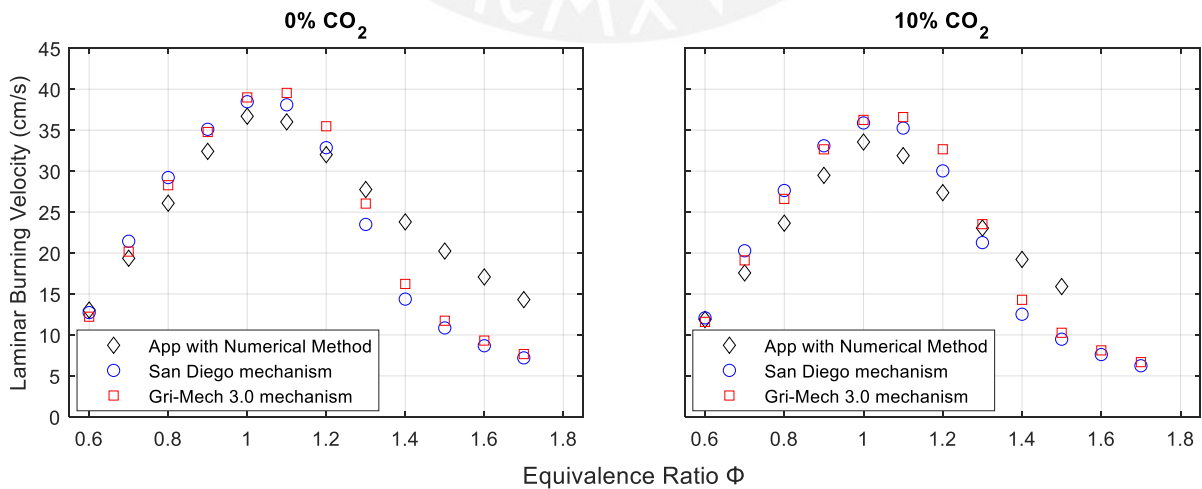


Figura 62. Velocidades de llama laminar determinadas mediante simulación en Ansys Chemkin empleando el mecanismo de Gri-Mech 3.0.

De las Figuras 61 y 62, la mayor velocidad de llama encontrada empleando el mecanismo de San Diego es en una ratio igual a 1. Caso contrario, para el mecanismo Gri-Mech 3.0 se encuentra en la ratio de 1.1 y cumpliéndose solo para los casos de 0% y 10% de CO₂.

4.3.3 Comparativa de velocidades de llama entre la metodología empleada en el aplicativo desarrollado en MATLAB y simulación en Ansys Chemkin

En la Figura 63, se presentan la comparativa de los resultados de velocidad de llama laminar a distintos ratios para valores de 0%, 10%, 20%, 30%, 40% y 50% de CO₂.



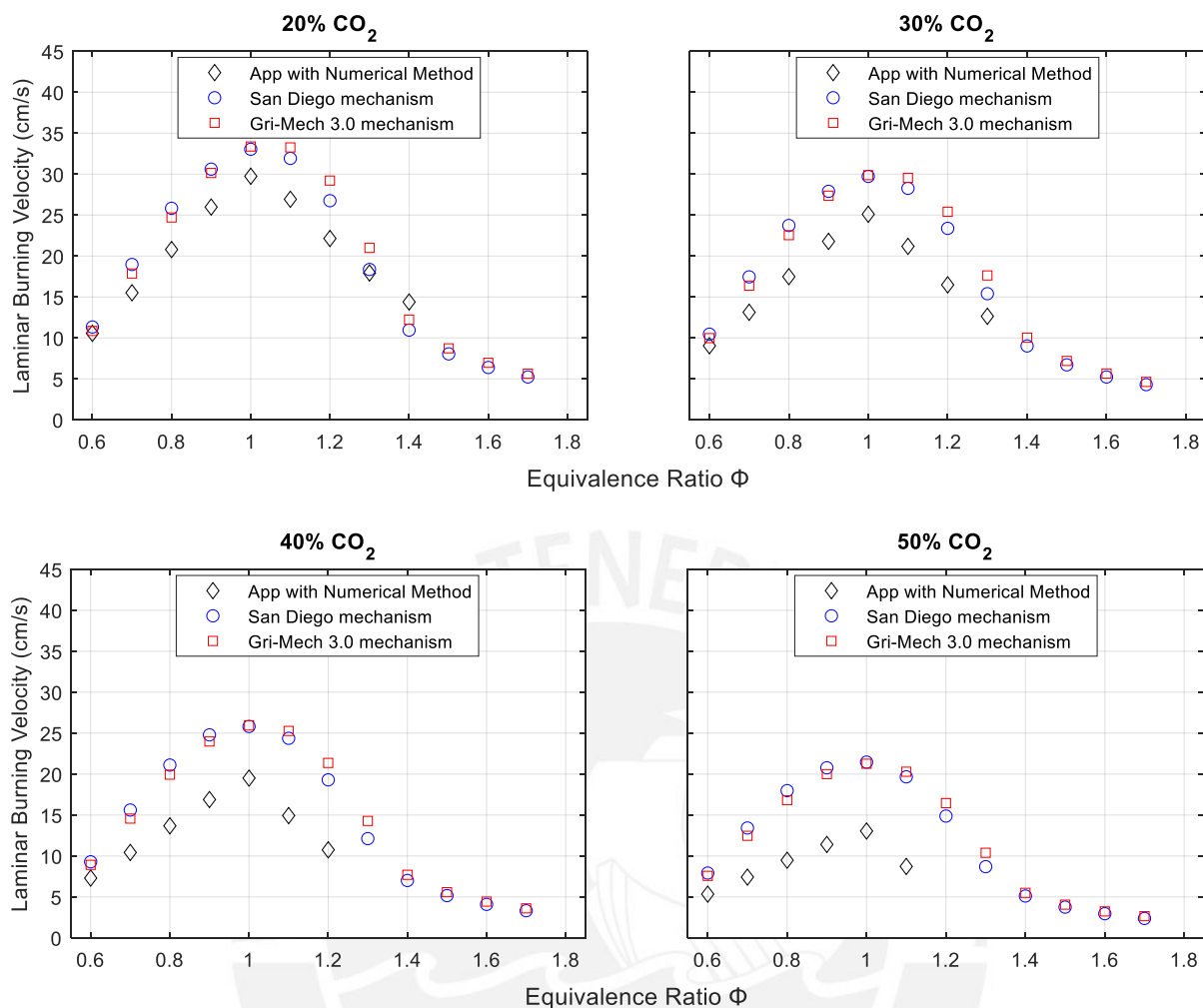


Figura 63. Comparativa de resultados de velocidades de llama laminar para todos los casos de %CO₂ considerados.

De la Figura 63, por un lado, se puede observar que para todas las fuentes de resultados a medida que la ratio aumenta, la velocidad de llama laminar se incrementa hasta la mezcla estequiométrica, posterior a ello, empieza a disminuir. Asimismo, las velocidades de llama disminuyen a medida que se incrementa el porcentaje de CO₂. Por otro lado, se puede afirmar que la metodología numérica empleada en el aplicativo, al igual que en los resultados de temperatura de llama, presenta un buen comportamiento hasta 20% de CO₂, y conforme se aumenta la ratio y el porcentaje de CO₂ la discrepancia de los resultados aumenta, siendo menores a los simulados para todos los casos de ratio. En la Tabla 14, se presenta el error absoluto (columna “ ΔS_L (cm/s)” y el error relativo (columna “%”) de las velocidades de llama considerando como real los resultados de los mecanismos empleados en la simulación, donde

las filas rellenas con verde y naranja son la menor y mayor diferencia encontrada para cada porcentaje de CO₂.

Tabla 14: Errores absoluto y relativo de las velocidades de llama laminar calculadas por el aplicativo desarrollado en Matlab respecto de las simulaciones en Ansys Chemkin.

ϕ	% CO ₂											
	0%				10%				20%			
	App with Numerical Method vs San Diego		App with Numerical Method vs Gri-Mech 3.0		App with Numerical Method vs San Diego		App with Numerical Method vs Gri-Mech 3.0		App with Numerical Method vs San Diego		App with Numerical Method vs Gri-Mech 3.0	
	ΔS_L (cm/s)	%	ΔS_L (cm/s)	%	ΔS_L (cm/s)	%	ΔS_L (cm/s)	%	ΔS_L (cm/s)	%	ΔS_L (cm/s)	%
0.6	0.3	2.5%	0.8	6.7%	-0.2	-1.6%	0.3	2.5%	-0.8	-6.8%	-0.3	-2.7%
0.7	-2.1	-9.7%	-0.8	-4.1%	-2.7	-13.3%	-1.5	-8.0%	-3.5	-18.2%	-2.4	-13.2%
0.8	-3.1	-10.7%	-2.2	-7.8%	-4.0	-14.5%	-3.0	-11.2%	-5.0	-19.5%	-3.9	-15.9%
0.9	-2.7	-7.7%	-2.4	-6.8%	-3.6	-10.9%	-3.2	-9.7%	-4.6	-15.1%	-4.2	-13.8%
1	-1.8	-4.6%	-2.3	-5.9%	-2.3	-6.5%	-2.7	-7.5%	-3.3	-10.0%	-3.6	-10.9%
1.1	-2.1	-5.5%	-3.5	-8.9%	-3.4	-9.5%	-4.7	-12.9%	-5.0	-15.6%	-6.3	-19.0%
1.2	-0.9	-2.6%	-3.5	-9.8%	-2.7	-8.8%	-5.3	-16.2%	-4.6	-17.3%	-7.1	-24.2%
1.3	4.3	18.1%	1.7	6.6%	1.8	8.4%	-0.5	-2.0%	-0.4	-2.3%	-3.1	-14.6%
1.4	9.4	65.6%	7.6	46.7%	6.7	53.5%	4.9	34.5%	3.4	31.4%	2.2	17.7%
1.5	9.4	86.5%	8.5	72.5%	6.4	67.9%	5.6	55.0%	-	-	-	-
1.6	8.4	96.8%	7.8	83.4%	-	-	-	-	-	-	-	-
1.7	7.1	98.8%	6.6	86.7%	-	-	-	-	-	-	-	-
ϕ	% CO ₂											
	30%				40%				50%			
	App with Numerical Method vs San Diego		App with Numerical Method vs Gri-Mech 3.0		App with Numerical Method vs San Diego		App with Numerical Method vs Gri-Mech 3.0		App with Numerical Method vs San Diego		App with Numerical Method vs Gri-Mech 3.0	
	ΔS_L (cm/s)	%	ΔS_L (cm/s)	%	ΔS_L (cm/s)	%	ΔS_L (cm/s)	%	ΔS_L (cm/s)	%	ΔS_L (cm/s)	%
0.6	-1.4	-13.5%	-0.9	-9.4%	-2.0	-21.4%	-1.6	-18.1%	-2.6	-32.6%	-2.2	-29.5%
0.7	-4.3	-24.8%	-3.3	-19.9%	-5.2	-33.2%	-4.1	-28.4%	-6.0	-44.7%	-5.0	-40.5%
0.8	-6.2	-26.3%	-5.1	-22.5%	-7.4	-35.2%	-6.3	-31.4%	-8.5	-47.3%	-7.3	-43.6%
0.9	-6.1	-21.9%	-5.6	-20.4%	-7.9	-31.9%	-7.1	-29.6%	-9.4	-45.1%	-8.6	-42.9%
1	-4.6	-15.6%	-4.8	-16.0%	-6.3	-24.4%	-6.4	-24.8%	-8.4	-39.2%	-8.2	-38.6%
1.1	-7.1	-25.1%	-8.4	-28.3%	-9.4	-38.7%	-10.3	-40.9%	-10.9	-55.7%	-11.6	-57.0%
1.2	-6.9	-29.5%	-8.9	-35.1%	-8.5	-44.3%	-10.6	-49.7%	-	-	-	-
1.3	-2.8	-17.9%	-5.0	-28.3%	-	-	-	-	-	-	-	-

De la Tabla 14, se observa que las menores diferencias encontradas para los casos presentados de porcentajes de 0%, 20%, 30%, 40% y 50% CO₂ de la metodología numérica en MATLAB respecto a las dos simulaciones en Ansys fueron en mezclas pobres. La primera excepción fue en la diferencia respecto de la simulación empleando el mecanismo de Gri-Mech

3.0 para el caso 10% CO₂ que estuvo en una mezcla rica (ratio 1.3) y se observó que el aplicativo MATLAB tuvo un subestimado del 2% (-0.5 cm/s). La segunda excepción se presentó en la misma ratio, pero para el caso de 20% CO₂ donde el aplicativo MATLAB tuvo un subestimado del 2.3% (-0.4 cm/s) respecto del mecanismo San Diego. La menor diferencia obtenida en los ensayos fue para el caso de 10% CO₂ y una ratio de 0.6, donde el aplicativo MATLAB tuvo un subestimado del 1.6% (-0.2 cm/s). Caso contrario, las mayores diferencias para todos los casos de %CO₂ de la metodología numérica en MATLAB respecto a las dos simulaciones en Ansys fueron en mezclas ricas, de forma que aumentaba conforme se incrementaba el porcentaje del CO₂ y ratio. La mayor diferencia encontrada fue en el porcentaje de 50% de CO₂ con un subestimado del aplicativo MATLAB del 57% (-11.6 cm/s) respecto del mecanismo Gri-Mech 3.0. Con los análisis realizados para los resultados de temperatura y velocidad de llama, es posible afirmar que la metodología numérica tiene un rango de validez óptimo para este caso de estudio de hasta una ratio de 1.1 y de hasta el 20% de CO₂.

4.3.4 Comparativa de velocidades de llama entre los resultados del presente trabajo y otros autores

En la Tabla 15 se presenta la relación de trabajos considerando el presente documento y los previamente realizados por otros autores con parámetros de estudio idénticos o similares. Se especificaron las características de los ensayos realizados de los distintos trabajos, con el objetivo de visualizar las mayores semejanzas y diferencias en comparación a lo desarrollado. Se consideraron la temperatura inicial y presión de trabajo como fundamentales para la coherencia en la comparación de resultados.

Tabla 15: Especificaciones de investigaciones a comparar para análisis de velocidad de llama laminar.

Investigación	Tipo de estudio	Presión (atm)	Temperatura Inicial (K)	Composición de mezclas de biogás estudiadas					
				#	Metano CH ₄	CO ₂	Etano C ₂ H ₆	Propano C ₃ H ₈	N ₂
App with Numerical Method – Presente trabajo	Metodología numérica codificada en aplicativo desarrollado en MATLAB	1	298	1	88.54%	0%	10.32%	0.020%	0.54%
				2	79.68%	10%	9.28%	0.018%	0.48%
				3	70.83%	20%	8.26%	0.016%	0.43%
				4	61.98%	30%	7.22%	0.014%	0.38%
				5	53.12%	40%	6.19%	0.012%	0.32%
				6	44.27%	50%	5.16%	0.010%	0.27%
San Diego mechanism – Presente trabajo	Simulación numérica en Ansys Chemkin	1	298	1	88.54%	0%	10.32%	0.020%	0.54%
				2	79.68%	10%	9.28%	0.018%	0.48%
				3	70.83%	20%	8.26%	0.016%	0.43%
				4	61.98%	30%	7.22%	0.014%	0.38%
				5	53.12%	40%	6.19%	0.012%	0.32%
				6	44.27%	50%	5.16%	0.010%	0.27%
Gri-Mech 3.0 mechanism – Presente trabajo	Simulación numérica en Ansys Chemkin	1	298	1	88.54%	0%	10.32%	0.020%	0.54%
				2	79.68%	10%	9.28%	0.018%	0.48%
				3	70.83%	20%	8.26%	0.016%	0.43%
				4	61.98%	30%	7.22%	0.014%	0.38%
				5	53.12%	40%	6.19%	0.012%	0.32%
				6	44.27%	50%	5.16%	0.010%	0.27%
Mendieta et al., 2016	Simulación numérica	1	298	1	100%	0%	0%	0%	0%
				2	90%	10%	0%	0%	0%
				3	80%	20%	0%	0%	0%
				4	70%	30%	0%	0%	0%
				5	60%	40%	0%	0%	0%
				6	50%	50%	0%	0%	0%
Xiang et al., 2019	Simulación numérica	1	298	1	100%	0%	0%	0%	0%
				2	95%	5%	0%	0%	0%
				3	85%	15%	0%	0%	0%
				4	75%	25%	0%	0%	0%
				5	65%	35%	0%	0%	0%
Nonaka & Pereira, 2016	Experimental, método de quemador de flujo de calor	1	298	1	100%	0%	0%	0%	0%
				2	90%	10%	0%	0%	0%
				3	80%	20%	0%	0%	0%
				4	70%	30%	0%	0%	0%
				5	60%	40%	0%	0%	0%
				6	50%	50%	0%	0%	0%
Qin et al., 2001	Simulación numérica	1	300	1	100%	0%	0%	0%	0%
				2	90%	10%	0%	0%	0%
				3	80%	20%	0%	0%	0%
				4	70%	30%	0%	0%	0%
				5	60%	40%	0%	0%	0%
				6	50%	50%	0%	0%	0%
				7	40%	60%	0%	0%	0%
Bai et al., 2019	Experimental, método de la cámara de combustión con ignición central	1	300	1	100%	0	0%	0%	0%
				2	80%	20	0%	0%	0%
				3	60%	40	0%	0%	0%
				4	40%	60	0%	0%	0%

Asimismo, en la Figura 64 se visualizan los resultados de las investigaciones seleccionadas correspondientes a la velocidad de llama para los distintos porcentajes de CO₂.

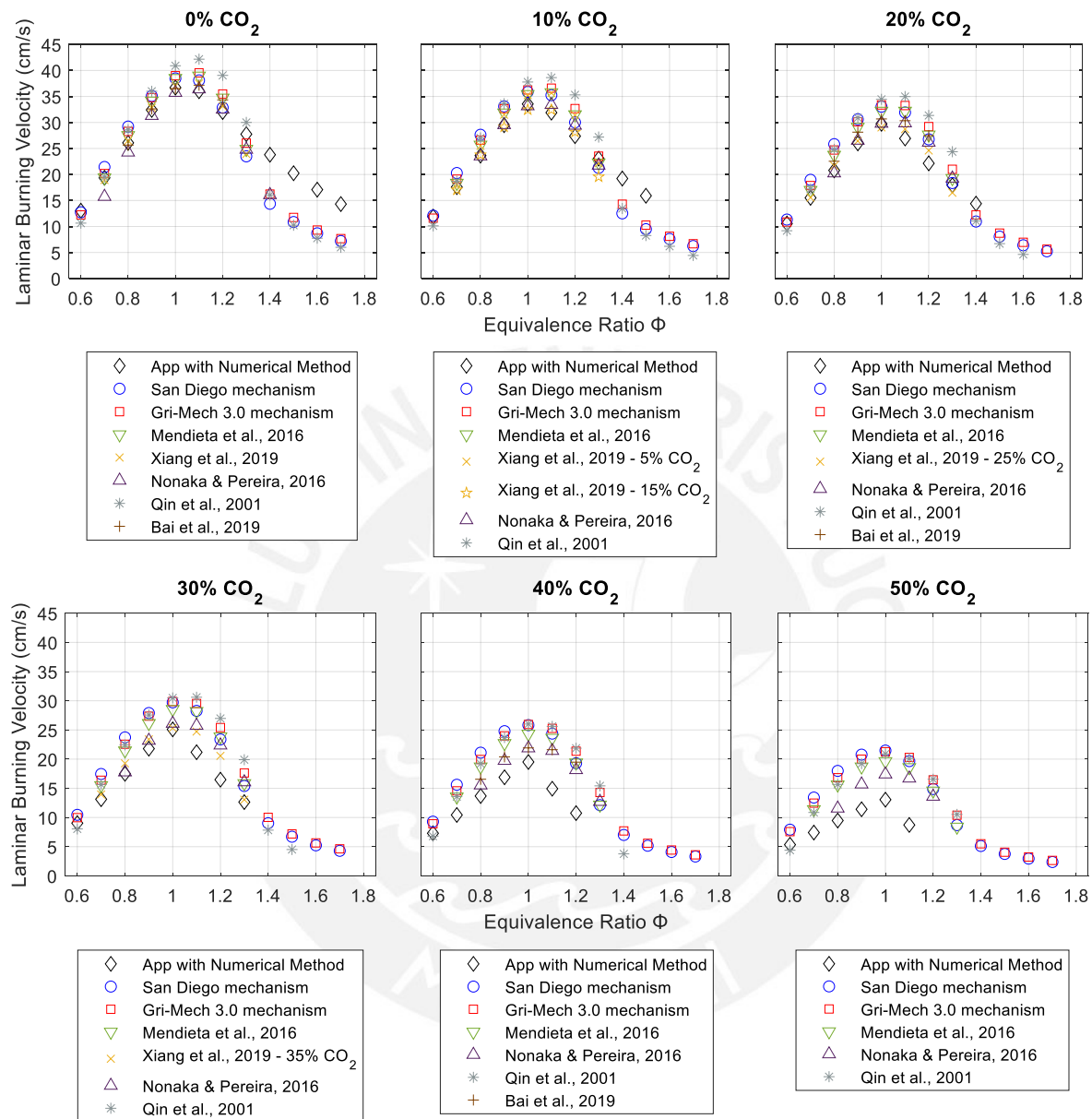


Figura 64. Comparativa de resultados de velocidad de llama laminar a distintos porcentajes de CO₂ entre el presente trabajo y otros autores.

De la Figura 64, el aplicativo desarrollado en MATLAB presenta una mayor afinidad y aproximación con los resultados desarrollados por Nonaka & Pereira, 2016 para todos los casos de CO₂. Es importante destacar, que los resultados obtenidos por Nonaka & Pereira, 2016 fueron de carácter experimental, mediante el empleo del método de quemador de flujo de calor. Por otro lado, los resultados obtenidos por simulación en Ansys Chemkin presentan buena

aproximación con los obtenidos por Mendieta et al, 2016, considerando que ambos son simulaciones numéricas. Además, los valores más altos de velocidad de llama laminar para los casos de 0% - 40% CO₂ fueron obtenidos por Qin et al., 2001, que empleó un modelo de transferencia de calor por radiación y el mecanismo Gri-Mech 2.11 para la descripción de los mecanismos cinéticos. Este mecanismo en comparación al Gri-Mech 3.0 empleado en el presente trabajo, contiene 49 especies y 277 reacciones elementales reversibles, generando de esta manera discrepancia en algunos resultados.

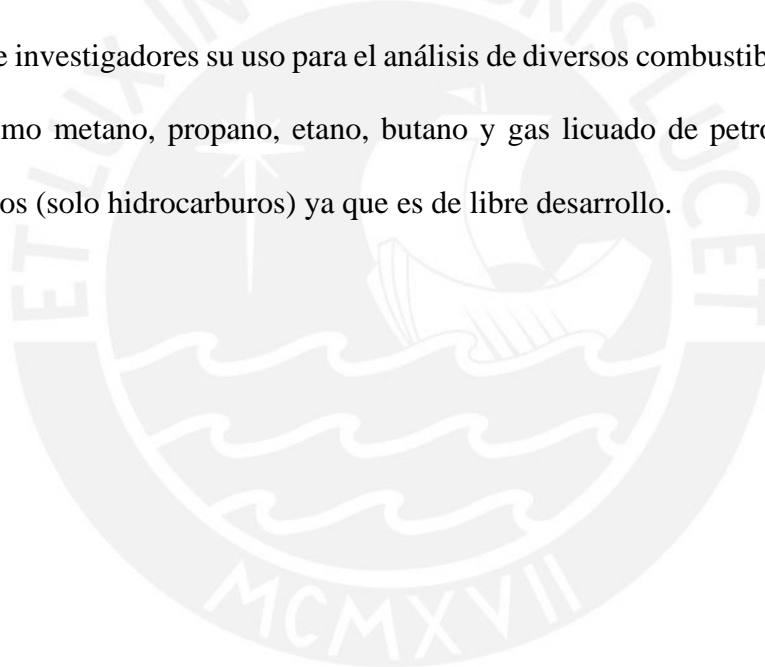


CONCLUSIONES

En el presente trabajo, se desarrolló una metodología numérica en un aplicativo codificado en MATLAB para el estudio y análisis de la influencia del CO₂ en las características de la combustión del biogás (productos de combustión, temperatura de llama y velocidad de llama), simulado como una mezcla de gas natural con CO₂. Asimismo, los resultados fueron comparados con simulación realizada en Ansys Chemkin empleando los mecanismos de San Diego y Gri-Mech 3.0, junto con trabajos de investigación previamente realizados por otros autores. Las conclusiones encontradas fueron las siguientes:

- 1) Los resultados indican que la presencia de CO₂ en el biogás reduce la velocidad y temperatura de llama de la reacción, aumentando su efecto reductor conforme se incrementa su porcentaje en la mezcla.
- 2) Respecto de los productos de combustión generados en la reacción se encontró que todos disminuyen conforme se aumenta el porcentaje de CO₂, a excepción de solo el CO₂ para los casos de mezclas pobres, mientras que CO y CO₂ simultáneamente para los casos de mezclas ricas.
- 3) A medida que el porcentaje de CO₂ se incrementaba en la mezcla combustible, los niveles de NO disminuían, sin embargo, para casos aplicativos donde se requiera mantener la ratio de consumo del gas natural o metano presentes en la mezcla, estos se incrementarán debido al aumento de las temperaturas de reacción, lo cual es condición para la formación de NO_x.
- 4) La metodología numérica codificada en el aplicativo desarrollado en MATLAB presentó para este caso de estudio, por un lado, concordancia con los resultados de la simulación en Ansys Chemkin e investigaciones realizadas por otros autores para las ratios 0.6 – 1.1 hasta el caso de 20% CO₂. Por otro lado, para ratios mayores (1.3 a 1.7) y mayores porcentajes de CO₂ la diferencia entre las diversas fuentes se vio incrementada.

- 5) La máxima temperatura y velocidad de llama determinada por la metodología numérica en el aplicativo desarrollado en MATLAB fue de 2259.4 K y 36.7cm/s para una ratio de 1 y 0% CO₂, teniendo un sobreestimado en temperatura respecto de los mecanismos de San Diego y Gri-Mech 3.0 del 0.9% (+21.26 K) y 1.1% (+25.03 K), y un subestimado en velocidad del 4.6% (-1.77 cm/s) y 7.2% (-2.84 cm/s), respectivamente.
- 6) De las investigaciones de velocidad de llama laminar realizadas por otros autores, la realizada por Nonaka & Pereira, 2016, presentó una mayor semejanza con los resultados del aplicativo desarrollado en MATLAB para todos los casos de estudio.
- 7) La metodología numérica codificada en el aplicativo desarrollado en MATLAB permite a los usuarios e investigadores su uso para el análisis de diversos combustibles, ya que cuenta con otros como metano, propano, etano, butano y gas licuado de petróleo, y es posible adicionar otros (solo hidrocarburos) ya que es de libre desarrollo.

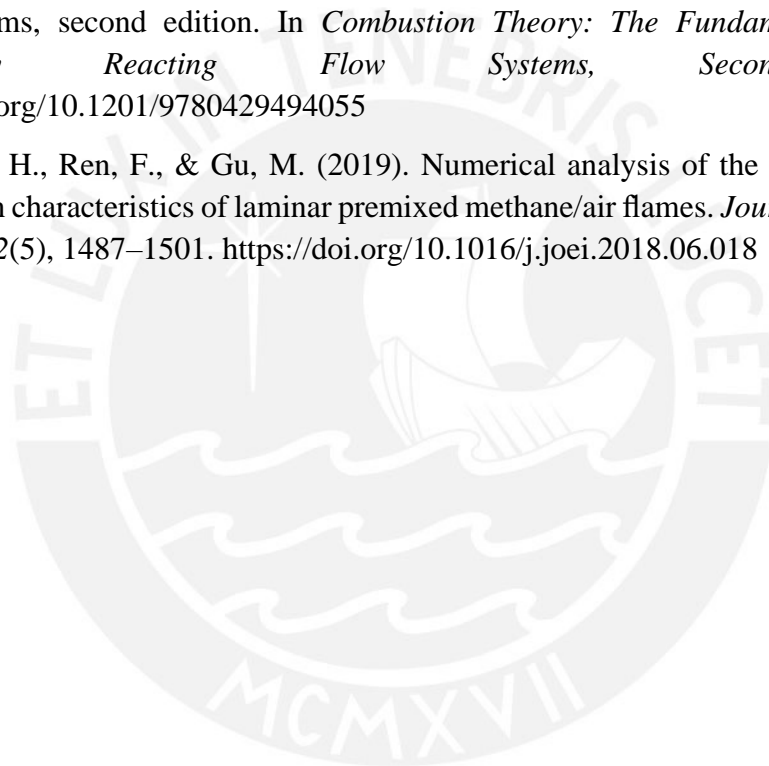


BIBLIOGRAFÍA

- Anggono, W., Wardana, I., Lawes, M., & Hughes, K. J. (2013). Effect of Inhibitors on Biogas Laminar Burning Velocity and Flammability Limits in Spark Ignited Premix Combustion. *International Journal of Engineering and Technology (IJET)*, 5(6), 4980–4987.
- Bai, Z., Wang, Z., Yu, G., Yang, Y., & Metghalchi, H. (2019). Experimental Study of Laminar Burning Speed for Premixed Biomass/Air Flame. *ASME. J. Energy Resour. Technol.*, 141(2). <https://doi.org/10.1115/1.4041412>
- Bakhtyari, A., Mofarahi, M., & Lee, C.-H. (2020). CO₂ adsorption by conventional and nanosized zeolites. In *Advances in Carbon Capture* (pp. 193–228). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/b978-0-12-819657-1.00009-8>
- Barón Moreno, A. C., & Contreras García, I. I. (2021). BIOGÁS: IMPORTANCIA Y BENEFICIOS DE ENERGÍAS ALTERNATIVAS EN EL MUNDO. *Boletín Semillas Ambientales*, 91–98. <https://revistas.udistrital.edu.co/index.php/bsa/article/view/17494/16505>
- Bisso Carrasco, J. L. (2015). *Determinación de la velocidad de llama laminar en un quemador de premezcla*. Pontificia Universidad Católica del Perú.
- Botha, J. P., & Spalding, D. B. (1954). The Laminar Flame Speed of Propane/Air Mixtures with Heat Extraction from the Flame. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 225(1160), 71–96. <http://www.jstor.org/stable/99442>
- Brizuela, E., & Romano, S. D. (2003a). Llamas turbulentas. *Combustión*, 94–104.
- Brizuela, E., & Romano, S. D. (2003b). Teoría de Llamas. *Combustión*, 76–93.
- Chan, Y. L., Zhu, M. M., Zhang, Z. Z., Liu, P. F., & Zhang, D. K. (2015). The Effect of CO₂ Dilution on the Laminar Burning Velocity of Premixed Methane/Air Flames. *Energy Procedia*, 75, 3048–3053. <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2015.07.621>
- Chase Jr. M. W., Davies C. A., & Downey J. R. (1979). *JANAF Thermochemical Tables*.
- Chase, M., Davies, C., Rowney, J., Frurip, D., McDonald, R., & Syverud, A. (1985). *JANAF Thermochemical Tables* (14th ed.).
- Cisneros, R. F., & Rojas, F. J. (2023). Determination of 12 Combustion Products, Flame Temperature and Laminar Burning Velocity of Saudi LPG Using Numerical Methods Coded in a MATLAB Application. *Energies*, 16(12), 4688. <https://doi.org/10.3390/en16124688>
- Cisneros, R. F., & Rojas, F. J. (2024). MATLAB Application for Determination of 12 Combustion Products, Adiabatic Temperature and Laminar Burning Velocity: Development, Coding and Explanation. *Computation*, 12(9). <https://doi.org/10.3390/computation12090189>

- Cisneros, R., & Rojas, F. (2024). MATLAB Application for determination of 12 Combustion Products, Flame Temperature and Laminar Burning Velocity. *Energy & Quality Journal*, 2, 54–59. <https://doi.org/10.24084/ejq24.247>
- Delgado, F. J. (2013). *Métodos Numéricos para Ingeniería*. www.ebookstec.com
- Díaz González, C. A., Amell Arrieta, A., & Cardona, L. F. (2008, July). ESTUDIO EXPERIMENTAL DE LA ESTABILIDAD DE LLAMA DE BIOGÁS EN UN SISTEMA DE PREMEZCLA. *Energética* (39), 35–42. <http://www.redalyc.org/articulo.oa?id=147020257004>
- Dugger, G. L. (1951). *EFFECT OF INITIAL MIXTURE TEMPERATURE ON FLAME SPEED OF METHANE-AIR, PROPANE-AIR, AND ETHYLENE-AIR MIXTURES*. <https://ntrs.nasa.gov/api/citations/19930087876/downloads/19930087876.pdf>
- EcuRed contributors. (2019a). *Ignición*. <https://www.ecured.cu/index.php?title=Ignición&oldid=3520936>
- EcuRed contributors. (2019b). *Llama (combustión)*. Llama (Combustión). [https://www.ecured.cu/index.php?title=Llama_\(combustión\)&oldid=3503693](https://www.ecured.cu/index.php?title=Llama_(combustión)&oldid=3503693)
- Glassman, I., & Yetter, R. A. (2008). *Combustion* (Fourth Edition). ELSEVIER.
- Griffiths, J. F., & Barnard, J. A. (1995). *Flame and combustion* (Third Edition, Vol. 120). Taylor & Francis Group. <https://doi.org/10.1201/9780203755976>
- Hahn, D. W., & Necati Özişik, M. (2012). Heat Conduction Fundamentals. In *Heat Conduction* (Third Edition, pp. 1–39). John Wiley & Sons, Ltd. <https://doi.org/https://doi.org/10.1002/9781118411285.ch1>
- IEA. (2019). *2019 Final Edition*.
- Khudhair, O., & Shahad, H. A. K. (2017). A Review of Laminar Burning Velocity and Flame Speed of Gases and Liquid Fuels. *International Journal of Current Engineering and Technology*, 7(11), 2277–4106. <http://inpressco.com/category/ijcet>
- Kondratiev, V. N. (2020). History Of The Study Of Combustion. *Combustion*, 1–7. <https://www.britannica.com/science/combustion>
- Kuo, Kenneth. K. (2005). Principles of combustion. In *Combustion, Explosion, and Shock Waves* (Vol. 14, Issue 4).
- López, G. J., Polupan, G., & Rodríguez, J. H. (2003). *Cálculo de los productos de la combustión empleando métodos numéricos*. XXII(1985), 2452–2466.
- Markatou, P., Pfefferle, L. D., & Smooke, M. D. (1993). A computational study of methane-air combustion over heated catalytic and non-catalytic surfaces. *Combustion and Flame*, 93(1), 185–201. [https://doi.org/https://doi.org/10.1016/0010-2180\(93\)90091-G](https://doi.org/https://doi.org/10.1016/0010-2180(93)90091-G)
- Mendieta Patiño, M. A., Alviso, D., & Gonçalves dos Santos, R. (2016). NUMERICAL STUDY OF LAMINAR PREMIXED METHANE/AIR FLAMES WITH CARBON DIOXIDE DILUTION. *Proceedings of ENCIT 2016*, 1–6. <https://doi.org/10.26678/ABCM.ENCIT2016.CIT2016-0688>

- Nonaka, H. O. B., & Pereira, F. M. (2016). Experimental and numerical study of CO₂ content effects on the laminar burning velocity of biogas. *Fuel*, *182*, 382–390. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2016.05.098>
- Olikara, C., & Borman, G. (1975). A Computer Program for Calculating Properties of Equilibrium Combustion Products with Some Applications to I.C. Engines. In *SAE Technical Papers 750468*. <https://doi.org/10.4271/750468>
- Qin, W., Egolfopoulos, F. N., & Tsotsis, T. T. (2001). Fundamental and environmental aspects of landfill gas utilization for power generation. *Chemical Engineering Journal*, *82*(1–3), 157–172. [https://doi.org/10.1016/S1385-8947\(00\)00366-1](https://doi.org/10.1016/S1385-8947(00)00366-1)
- Seitzman, J. (2012). *Laminar Flame Speed* (Issue AE/ME 6766 Combustion).
- Williams, F. A. (1985). Combustion theory: The fundamental theory of chemically reacting flow systems, second edition. In *Combustion Theory: The Fundamental Theory of Chemically Reacting Flow Systems, Second Edition*. <https://doi.org/10.1201/9780429494055>
- Xiang, L., Chu, H., Ren, F., & Gu, M. (2019). Numerical analysis of the effect of CO₂ on combustion characteristics of laminar premixed methane/air flames. *Journal of the Energy Institute*, *92*(5), 1487–1501. <https://doi.org/10.1016/j.joei.2018.06.018>



ANEXO A. Constantes de equilibrio

La constante de equilibrio (K_p) de las reacciones consideradas en el equilibrio termodinámico, se expresa por la Ecuación A1-1:

$$\log(K_p) = A * \ln(Ta) + \frac{B}{Ta} + C + DTa + ETa^2 \quad (A1-1)$$

Donde Ta es la temperatura absoluta equivalente a $0.005T/9$ (T en grados Rankine) y A, B, C, D, E son constantes. En la Tabla A1 se encuentra listado los valores de las constantes A, B, C, D, E para cada reacción.

Tabla A1: Constantes para el equilibrio termodinámico

Constantes Reacción	A	B	C	D	E
$\frac{1}{2}H_2 \leftrightarrow H$	0.432168	-0.112464×10^2	0.267269×10^1	-0.745744×10^{-1}	0.242484×10^{-2}
$\frac{1}{2}O_2 \leftrightarrow O$	0.310805	-0.129540×10^2	0.321779×10^1	-0.738336×10^{-1}	0.344645×10^{-2}
$\frac{1}{2}N_2 \leftrightarrow N$	0.389716	-0.245828×10^2	0.314505×10^1	-0.963730×10^{-1}	0.585643×10^{-2}
$\frac{1}{2}O_2 + \frac{1}{2}H_2 \leftrightarrow OH$	-0.141784	-0.213308×10^1	0.853461	0.355015×10^{-1}	-0.310227×10^{-2}
$\frac{1}{2}N_2 + \frac{1}{2}O_2 \leftrightarrow NO$	0.150879×10^{-1}	-0.470959×10^1	0.646096	0.272805×10^{-2}	-0.154444×10^{-2}
$H_2 + \frac{1}{2}O_2 \leftrightarrow H_2O$	-0.752364	0.124210×10^2	-0.260286×10^1	0.259556	-0.162687×10^{-1}
$CO + \frac{1}{2}O_2 \leftrightarrow CO_2$	-0.415302×10^{-2}	0.148627×10^2	-0.475746×10^1	0.124699	-0.900227×10^{-2}

ANEXO B. Derivadas parciales de las fracciones molares

Olikara y Borman definen por conveniencia las derivadas parciales las cuales de manera general se definen por las siguientes ecuaciones:

$$T_{ij} = \frac{\partial x_i}{\partial x_j} \quad y \quad T_{jj} = \frac{\partial x_j}{\partial x_j} = 1$$

Donde:

$$i = 1, 2, 3, 5, 7, 9, 10$$

$$j = 4, 6, 8, 11$$

Empleando las Ecuaciones 22 – 28 se obtienen las Ecuaciones B2-1 – B2-11.

$$T_{14} = 0.5 * C_1 / x_4^{\frac{1}{2}} \quad (B2-1)$$

$$T_{28} = 0.5 * C_2 / x_8^{\frac{1}{2}} \quad (B2-2)$$

$$T_{311} = 0.5 * C_3 / x_{11}^{\frac{1}{2}} \quad (B2-3)$$

$$T_{54} = 0.5 * C_5 * x_8^{\frac{1}{2}} / x_4^{\frac{1}{2}} \quad (B2-4)$$

$$T_{58} = 0.5 * C_5 * x_4^{\frac{1}{2}} / x_8^{\frac{1}{2}} \quad (B2-5)$$

$$T_{78} = 0.5 * C_7 * x_{11}^{\frac{1}{2}} / x_8^{\frac{1}{2}} \quad (B2-6)$$

$$T_{711} = 0.5 * C_7 * x_8^{\frac{1}{2}} / x_{11}^{\frac{1}{2}} \quad (B2-7)$$

$$T_{94} = C_9 * x_8^{\frac{1}{2}} \quad (B2-8)$$

$$T_{98} = 0.5 * C_9 * x_4 / x_8^{\frac{1}{2}} \quad (B2-9)$$

$$T_{106} = C_{10} * x_8^{\frac{1}{2}} \quad (B2-10)$$

$$T_{108} = 0.5 * C_{10} * x_6 * x_8^{\frac{1}{2}} \quad (B2-11)$$

ANEXO C. Elementos del sistema de ecuaciones no lineal de las fracciones molares

El sistema de ecuaciones no lineal que está definido como la Ecuación 37 es:

$$f_j + \frac{\partial f_j}{\partial x_4} \Delta x_4 + \frac{\partial f_j}{\partial x_6} \Delta x_6 + \frac{\partial f_j}{\partial x_8} \Delta x_8 + \frac{\partial f_j}{\partial x_{11}} \Delta x_{11} \cong 0, \quad j = 1, 2, 3, 4$$

Asimismo, este sistema se puede definir según la ecuación matricial $[A][\Delta x] = [B]$, donde los elementos correspondientes a la matriz A son las Ecuaciones C3-1 – C3-16.

$$A_{11} = \frac{\partial f_1}{\partial x_4} = T_{14} + 2 + T_{54} + 2 * T_{94} \quad (C3-1)$$

$$A_{12} = \frac{\partial f_1}{\partial x_6} = -d_1(1 + T_{106}) \quad (C3-2)$$

$$A_{13} = \frac{\partial f_1}{\partial x_8} = T_{58} + 2 * T_{98} - d_1 * T_{108} \quad (C3-3)$$

$$A_{14} = \frac{\partial f_1}{\partial x_{11}} = 0 \quad (C3-4)$$

$$A_{21} = \frac{\partial f_2}{\partial x_4} = T_{54} + T_{94} \quad (C3-5)$$

$$A_{22} = \frac{\partial f_2}{\partial x_6} = 1 + 2 * T_{106} - d_2(1 + T_{106}) \quad (C3-6)$$

$$A_{23} = \frac{\partial f_2}{\partial x_8} = T_{28} + T_{58} + T_{78} + 2 + T_{98} + 2 * T_{108} - d_2 * T_{108} \quad (C3-7)$$

$$A_{24} = \frac{\partial f_2}{\partial x_{11}} = T_{711} \quad (C3-8)$$

$$A_{31} = \frac{\partial f_3}{\partial x_4} = 0 \quad (C3-9)$$

$$A_{32} = \frac{\partial f_3}{\partial x_6} = -d_3(1 + T_{106}) \quad (C3-10)$$

$$A_{33} = \frac{\partial f_3}{\partial x_8} = T_{78} - d_3 * T_{108} \quad (C3-11)$$

$$A_{34} = \frac{\partial f_3}{\partial x_{11}} = T_{311} + T_{711} + 2 \quad (C3-12)$$

$$A_{41} = \frac{\partial f_4}{\partial x_4} = T_{14} + 1 + T_{54} + T_{94} \quad (C3-13)$$

$$A_{42} = \frac{\partial f_4}{\partial x_6} = 1 + T_{106} + d_4(1 + T_{106}) \quad (C3-14)$$

$$A_{43} = \frac{\partial f_4}{\partial x_8} = T_{28} + T_{58} + T_{78} + 1 + T_{98} + T_{108} + d_4 * T_{108} \quad (C3-15)$$

$$A_{44} = \frac{\partial f_4}{\partial x_{11}} = T_{311} + T_{711} + 1 \quad (C3-16)$$

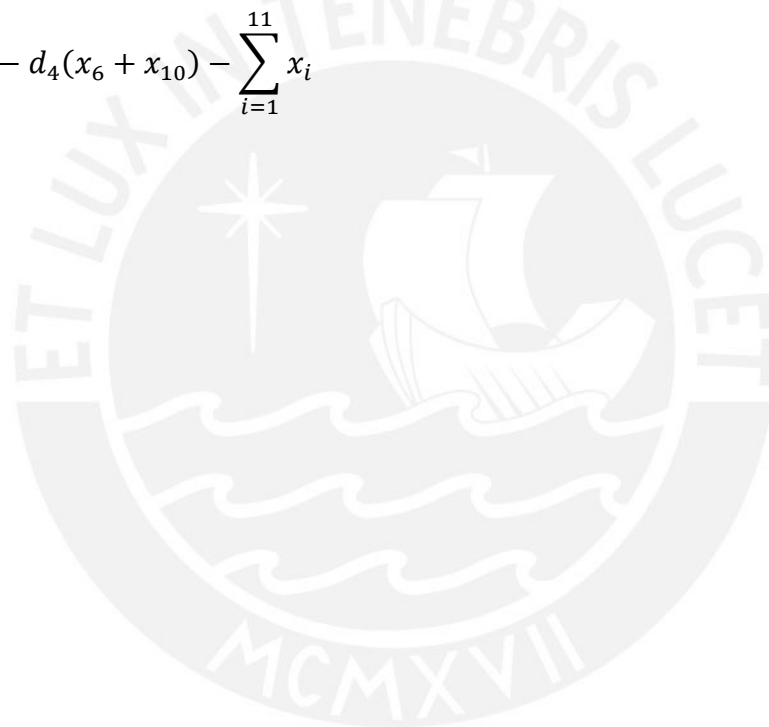
Para la matriz resultado (B) sus elementos se definen en las Ecuaciones C3-17 – C3-20.

$$B_1 = -f_1 = -(x_1 + 2 * x_4 + x_5 + 2 * x_9) + d_1(x_6 + x_{10}) \quad (C3-17)$$

$$B_2 = -f_2 = -(x_2 + x_5 + x_6 + x_7 + 2 * x_8 + x_9 + 2 * x_{10}) + d_2(x_6 + x_{10}) \quad (C3-18)$$

$$B_3 = -f_3 = -(x_3 + x_7 + 2 * x_{11}) + d_3(x_6 + x_{10}) \quad (C3-19)$$

$$B_4 = -f_4 = 1 - d_4(x_6 + x_{10}) - \sum_{i=1}^{11} x_i \quad (C3-20)$$



ANEXO D. Elementos del sistema de ecuaciones no lineal de las derivadas parciales

Se define:

$$Y_i = \frac{x_i}{C_j}$$

Donde:

$$i = 1, 2, 3, 5, 7, 9, 10$$

Se plantean el sistema de ecuaciones respecto de la temperatura

$$\frac{\partial f_1}{\partial T} = \frac{\partial C_1}{\partial T} Y_1 + \frac{\partial C_5}{\partial T} Y_5 + 2 \frac{\partial C_9}{\partial T} Y_9 - d_1 \frac{\partial C_{10}}{\partial T} Y_{10} \quad (\text{D4-1})$$

$$\frac{\partial f_2}{\partial T} = \frac{\partial C_2}{\partial T} Y_2 + \frac{\partial C_5}{\partial T} Y_5 + \frac{\partial C_7}{\partial T} Y_7 + \frac{\partial C_9}{\partial T} Y_9 + 2 \frac{\partial C_{10}}{\partial T} Y_{10} - d_2 \frac{\partial C_{10}}{\partial T} Y_{10} \quad (\text{D4-2})$$

$$\frac{\partial f_3}{\partial T} = \frac{\partial C_3}{\partial T} Y_3 + \frac{\partial C_7}{\partial T} Y_7 - d_3 \frac{\partial C_{10}}{\partial T} Y_{10} \quad (\text{D4-3})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_4}{\partial T} = & \frac{\partial C_1}{\partial T} Y_1 + \frac{\partial C_2}{\partial T} Y_2 + \frac{\partial C_3}{\partial T} Y_3 + \frac{\partial C_3}{\partial T} Y_3 + \frac{\partial C_5}{\partial T} Y_5 + \frac{\partial C_7}{\partial T} Y_7 + \frac{\partial C_9}{\partial T} Y_9 \\ & + \frac{\partial C_{10}}{\partial T} Y_{10} + d_4 \frac{\partial C_{10}}{\partial T} Y_{10} \end{aligned} \quad (\text{D4-4})$$

Las derivadas parciales respecto de p son similares, excepto que $\partial/\partial T$ es reemplazado por $\partial/\partial p$. Asimismo, se definen las ecuaciones del sistema linealizado respecto del ratio de equivalencia.

$$\frac{\partial f_1}{\partial F} = -(x_6 + C_{10} Y_{10}) \frac{\partial d_1}{\partial F} = 0 \quad (\text{D4-5})$$

$$\frac{\partial f_2}{\partial F} = -(x_6 + C_{10} Y_{10}) \frac{\partial d_2}{\partial F} \quad (\text{D4-6})$$

$$\frac{\partial f_3}{\partial F} = -(x_6 + C_{10} Y_{10}) \frac{\partial d_3}{\partial F} \quad (\text{D4-7})$$

$$\frac{\partial f_4}{\partial F} = (x_6 + C_{10}Y_{10}) \frac{\partial d_4}{\partial F} \quad (\text{D4-8})$$

Además, de las expresiones C_i y d_i :

$$\frac{\partial C_1}{\partial T} = \frac{dK_1}{dT} / p^{1/2} \quad (\text{D4-9})$$

$$\frac{\partial C_2}{\partial T} = \frac{dK_2}{dT} / p^{1/2} \quad (\text{D4-10})$$

$$\frac{\partial C_3}{\partial T} = \frac{dK_3}{dT} / p^{1/2} \quad (\text{D4-11})$$

$$\frac{\partial C_5}{\partial T} = \frac{dK_5}{dT} \quad (\text{D4-12})$$

$$\frac{\partial C_7}{\partial T} = \frac{dK_7}{dT} \quad (\text{D4-13})$$

$$\frac{\partial C_9}{\partial T} = \frac{dK_9}{dT} p^{1/2} \quad (\text{D4-14})$$

$$\frac{\partial C_{10}}{\partial T} = \frac{dK_{10}}{dT} p^{1/2} \quad (\text{D4-15})$$

$$\frac{\partial C_1}{\partial p} = -\frac{1}{2} \frac{C_1}{p} \quad (\text{D4-16})$$

$$\frac{\partial C_2}{\partial p} = -\frac{1}{2} \frac{C_2}{p} \quad (\text{D4-17})$$

$$\frac{\partial C_3}{\partial p} = -\frac{1}{2} \frac{C_3}{p} \quad (\text{D4-18})$$

$$\frac{\partial C_9}{\partial p} = \frac{1}{2} \frac{C_9}{p} \quad (\text{D4-19})$$

$$\frac{\partial C_{10}}{\partial p} = \frac{1}{2} \frac{C_{10}}{p} \quad (\text{D4-20})$$

$$d_5 = -(n + \frac{m}{4} - \frac{l}{2})/F^2 \quad (D4-21)$$

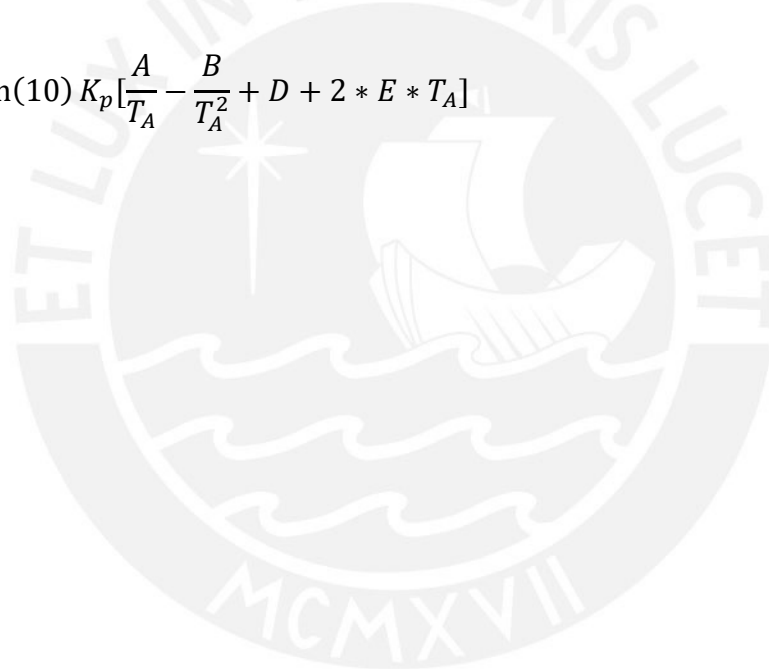
$$\frac{\partial d_2}{\partial F} = \frac{2 dr}{n dF} = \frac{2}{n} d_5 \quad (D4-22)$$

$$\frac{\partial d_3}{\partial F} = \frac{2 dr'}{n dF} = \frac{2}{n} * 3.7274 * d_5 \quad (D4-23)$$

$$\frac{\partial d_4}{\partial F} = \frac{1 dr''}{n dF} = \frac{1}{n} * 0.0444 * d_5 \quad (D4-23)$$

El modelo usado para el equilibrio de las constantes Kp (Ecuación A1-1) se deriva respecto de la temperatura (única variable en función) y se obtiene la Ecuación D4-24.

$$\frac{\partial K_p}{\partial T} = \frac{0.005}{9} \ln(10) K_p \left[\frac{A}{T_A} - \frac{B}{T_A^2} + D + 2 * E * T_A \right] \quad (D4-24)$$



ANEXO E. Derivadas parciales de las fracciones molares restantes respecto de la temperatura, presión y ratio de equivalencia

De las ecuaciones 22 – 28, se obtienen para las derivadas respecto de la temperatura:

$$\frac{\partial x_1}{\partial T} = C_1 \left(\frac{1}{2}\right) x_4^{-\frac{1}{2}} \frac{\partial x_4}{\partial T} + \frac{\partial C_1}{\partial T} x_4^{\frac{1}{2}} \quad (E5-1)$$

$$\frac{\partial x_2}{\partial T} = C_2 \left(\frac{1}{2}\right) x_8^{-\frac{1}{2}} \frac{\partial x_8}{\partial T} + \frac{\partial C_2}{\partial T} x_8^{\frac{1}{2}} \quad (E5-2)$$

$$\frac{\partial x_3}{\partial T} = C_3 \left(\frac{1}{2}\right) x_{11}^{-\frac{1}{2}} \frac{\partial x_{11}}{\partial T} + \frac{\partial C_3}{\partial T} x_{11}^{\frac{1}{2}} \quad (E5-3)$$

$$\frac{\partial x_5}{\partial T} = C_5 \left[\frac{1}{2}\right] \left[x_4^{-\frac{1}{2}} x_8^{\frac{1}{2}} \frac{\partial x_4}{\partial T} + x_4^{\frac{1}{2}} x_8^{-\frac{1}{2}} \frac{\partial x_8}{\partial T} \right] + \frac{\partial C_5}{\partial T} x_4^{\frac{1}{2}} x_8^{\frac{1}{2}} \quad (E5-4)$$

$$\frac{\partial x_7}{\partial T} = C_7 \left[\frac{1}{2}\right] \left[x_8^{-\frac{1}{2}} x_{11}^{\frac{1}{2}} \frac{\partial x_8}{\partial T} + x_8^{\frac{1}{2}} x_{11}^{-\frac{1}{2}} \frac{\partial x_{11}}{\partial T} \right] + \frac{\partial C_7}{\partial T} x_8^{\frac{1}{2}} x_{11}^{\frac{1}{2}} \quad (E5-5)$$

$$\frac{\partial x_9}{\partial T} = C_9 \left[x_8^{\frac{1}{2}} \frac{\partial x_4}{\partial T} + \frac{1}{2} x_4 x_8^{-\frac{1}{2}} \frac{\partial x_8}{\partial T} \right] + \frac{\partial C_9}{\partial T} x_4 x_8^{\frac{1}{2}} \quad (E5-6)$$

$$\frac{\partial x_{10}}{\partial T} = C_{10} \left[x_8^{\frac{1}{2}} \frac{\partial x_6}{\partial T} + \frac{1}{2} x_6 x_8^{-\frac{1}{2}} \frac{\partial x_8}{\partial T} \right] + \frac{\partial C_{10}}{\partial T} x_6 x_8^{\frac{1}{2}} \quad (E5-7)$$

$$\frac{\partial x_{12}}{\partial T} = d_4 \left[\frac{\partial x_6}{\partial T} + \frac{\partial x_{10}}{\partial T} \right] \quad (E5-8)$$

Para las derivadas parciales respecto de la presión, se sustituye $\partial/\partial T$ por $\partial/\partial p$. Para las derivadas parciales respecto del ratio de equivalencia, se sustituye 0 donde aparece $\partial C_i/\partial T$ y $\partial/\partial F$ por $\partial/\partial T$. Como ejemplo se realiza el reemplazo para la derivada parcial $\partial x_1/\partial F$:

$$\frac{\partial x_1}{\partial F} = C_1 \left(\frac{1}{2}\right) x_4^{-\frac{1}{2}} \frac{\partial x_4}{\partial F}$$

Como excepción se tiene la derivada parcial de $\partial x_{12}/\partial F$:

$$\frac{\partial x_{12}}{\partial F} = d_4 \left[\frac{\partial x_6}{\partial F} + \frac{\partial x_{10}}{\partial F} \right] + \frac{\partial d_4}{\partial F} [x_6 + x_{10}] \quad (E5-9)$$

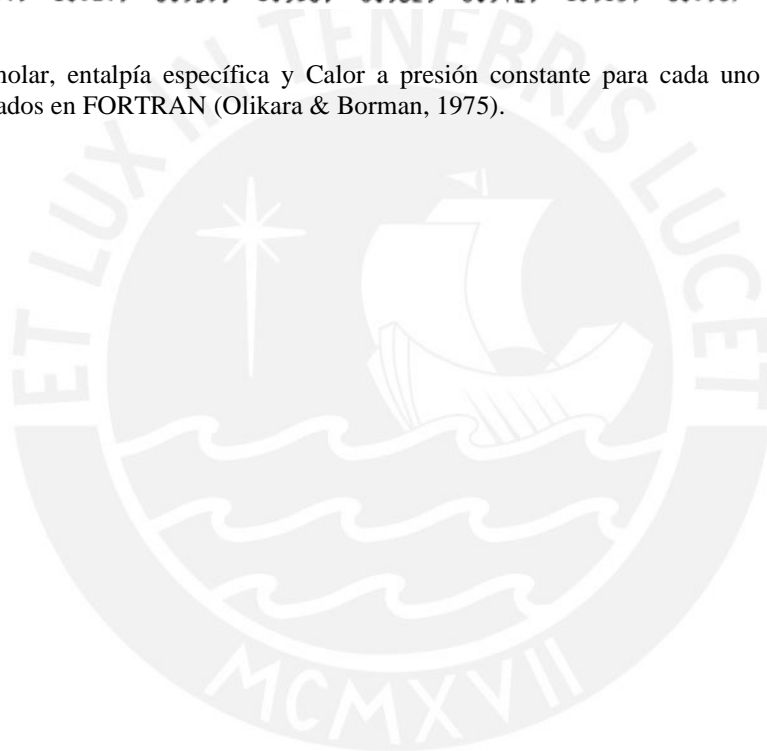
ANEXO F. Valores de M, h y Cp para los productos de combustión

La base de datos de los valores de masa molar, entalpía específica y calor a presión constante para cada uno de los productos de combustión empleada por Olikara y Borman en el código original en FORTRAN (Olikara & Borman, 1975), y usada en la metodología numérica mediante el aplicativo MATLAB, se presentan en la Figura F1:

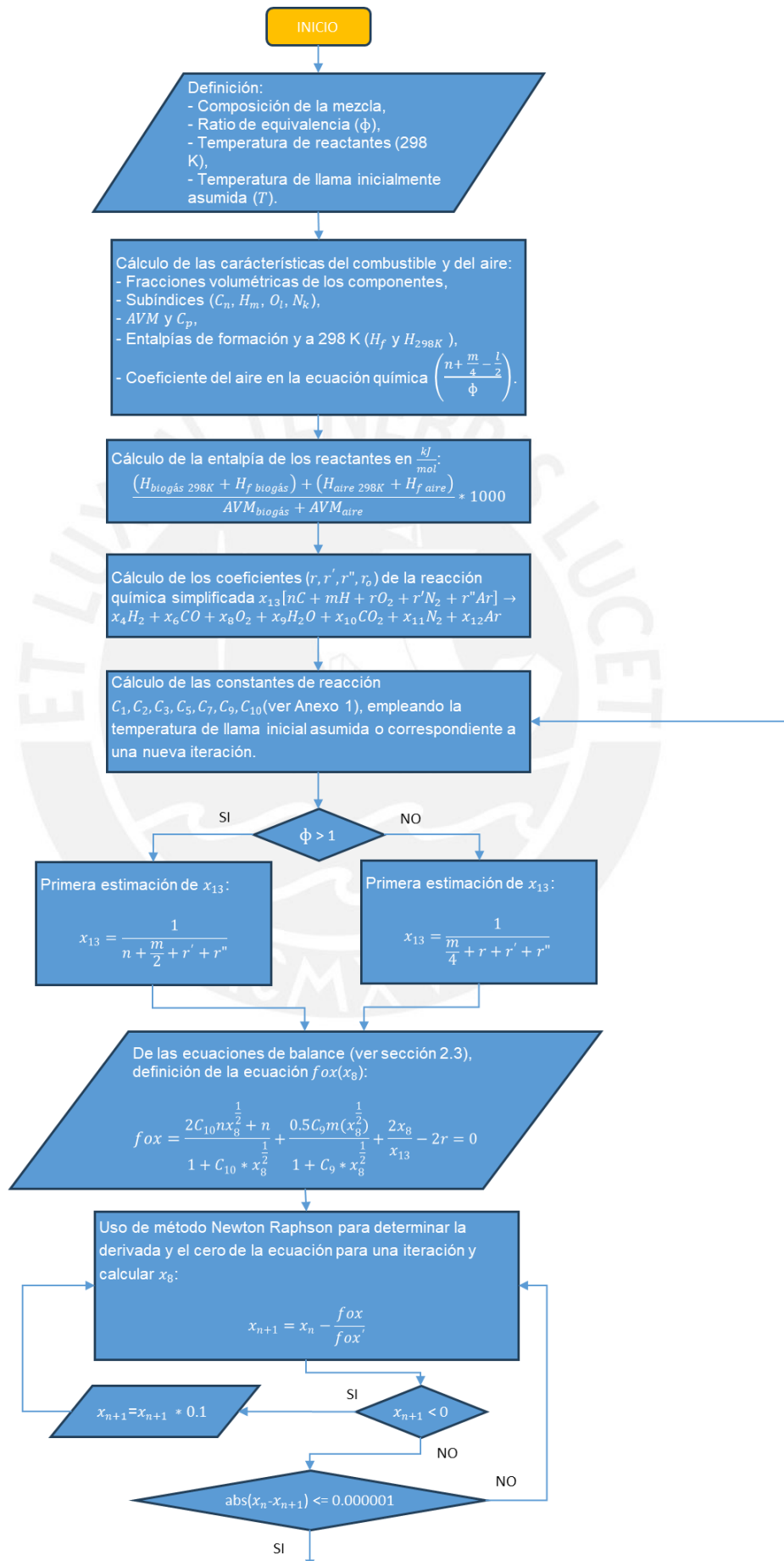
COMMON /PROP/	AVM,R,H,U,DRT,DHT,DUT,DRP,DHP,DUP,DRF,DHF,DUF	PER	80
DIMENSION	SH(12),SM(12),HT(351),C(351)	PER	90
DATA SM/	1.008,16.000,14.008,2.016,17.007,28.011,30.008,31.999,	PER	100
	118.016,44.010,28.013,39.944/	PER	110
DATA HT/	62.141, 62.645, 63.147, 63.649, 64.149, 64.648, 65.148,	PER	120
1	65.646, 66.145, 66.643, 67.141, 67.639, 68.137, 68.635, 69.133,	PER	130
1	69.631, 70.129, 70.626, 71.124, 71.623, 72.121, 72.620, 73.119,	PER	140
1	73.619, 74.119, 74.620, 75.121, 75.623, 76.126, 76.630, 77.134,	PER	150
1	77.640, 78.146, 78.654, 79.162,115.501,115.997,116.494,116.991,	PER	160
1	117.488,117.985,118.482,118.978,119.475,119.972,120.469,120.966,	PER	170
1	121.462,121.959,122.456,122.953,123.450,123.947,124.445,124.942,	PER	180
1	125.440,125.939,126.438,126.937,127.438,127.940,128.442,128.947,	PER	190
1	129.452,129.960,130.470,130.981,131.496,132.013,132.532, 4.130,	PER	200
1	4.832, 5.538, 6.250, 6.968, 7.694, 8.428, 9.172, 9.926,	PER	210
1	10.692, 11.470, 12.257, 13.054, 13.860, 14.675, 15.499, 16.331,	PER	220
1	17.170, 18.017, 18.872, 19.732, 20.599, 21.472, 22.350, 23.234,	PER	230
1	24.122, 25.016, 25.915, 26.818, 27.727, 28.640, 29.559, 30.481,	PER	240
1	31.409, 32.341, 33.281, 34.226, 35.176, 36.131, 37.097,	PER	250
1	17.972, 18.733, 19.504, 20.286, 21.077, 21.878, 22.688, 23.505,	PER	260
1	24.330, 25.162, 26.001, 26.845, 27.695, 28.550, 29.410, 30.275,	PER	270
1	31.143, 32.016, 32.892, 33.772, 34.655, 35.541, 36.430, 37.322,	PER	280
1	38.216, 39.113, 40.013, 40.915, 41.819, -22.991, -22.255, -21.501,	PER	290
1	-20.731, -19.945, -19.145, -18.334, -17.512, -16.682, -15.843, -14.998,	PER	300
1	-14.148, -13.292, -12.431, -11.567, -10.698, -9.827, -8.953, -8.076,	PER	310
1	-7.197, -6.315, -5.432, -4.546, -3.659, -2.771, -1.880, -0.989,	PER	320
1	-0.096, 0.799, 1.694, 2.591, 3.489, 4.388, 5.288, 6.188,	PER	330
1	25.839, 26.595, 27.369, 28.160, 28.966, 29.784, 30.613, 31.451,	PER	340
1	33.297, 33.149, 34.007, 34.870, 35.737, 36.608, 37.482, 38.359,	PER	350
1	39.240, 40.122, 41.007, 41.894, 42.782, 43.673, 44.564, 45.458,	PER	360
1	46.353, 47.249, 48.146, 49.045, 49.944, 50.845, 51.747, 52.650,	PER	370
1	53.553, 54.458, 55.363, 56.268, 57.173, 58.078, 58.983, 59.888,	PER	380
1	8.341, 9.189, 10.046, 10.910, 11.781, 12.658, 13.540, 14.429,	PER	390
1	15.324, 16.224, 17.129, 18.041, 18.957, 19.879, 20.807, 21.739,	PER	400
1	22.677, 23.620, 24.568, 25.521, 26.478, 27.440, 28.406, 29.377,	PER	410
1	30.351, 31.329, 32.311, 33.296, 34.284, 35.276, -52.227, -51.346,	PER	420
1	-50.436, -49.496, -48.527, -47.526, -46.496, -45.438, -44.352, -43.241,	PER	430
1	-42.106, -40.949, -39.772, -38.576, -37.363, -36.134, -34.890, -33.633,	PER	440
1	-32.364, -31.083, -29.791, -28.490, -27.180, -25.861, -24.535, -23.201,	PER	450
1	-21.860, -20.513, -19.159, -17.800, -16.436, -15.067, -13.693, -12.314,	PER	460
1	-10.931, -8.864, -8.748, -8.627, -8.502, -8.373, -8.243, -8.109,	PER	470
1	-7.973, -7.836, -7.697, -7.557, -7.416, -7.274, -7.130, -6.987,	PER	480
1	-6.842, -6.697, -6.551, -6.403, -6.258, -6.114, -5.969, -5.816,	PER	490
1	-5.668, -5.512, -5.370, -5.221, -5.077, -4.920, -4.771, -4.629,	PER	500
1	-4.475, -4.320, -4.170, -4.019, 4.197, 4.925, 5.668, 6.427,	PER	510
1	7.201, 7.989, 8.790, 9.601, 10.422, 11.251, 12.087, 12.930,	PER	520
1	13.779, 14.632, 15.490, 16.352, 17.218, 18.087, 18.958, 19.833,	PER	530
1	20.710, 21.589, 22.470, 23.352, 24.237, 25.123, 26.011, 26.901,	PER	540
1	27.791, 28.683, 29.577, 30.471, 31.367, 32.263, 33.161, 34.060,	PER	550
DATA CT/	5.049, 5.029, 5.015, 5.006, 4.999, 4.994, 4.990,	PER	560
1	4.987, 4.984, 4.982, 4.981, 4.979, 4.979, 4.978, 4.978,	PER	570
1	4.978, 4.979, 4.980, 4.981, 4.984, 4.986, 4.990, 4.994,	PER	580
1	4.999, 5.004, 5.010, 5.017, 5.025, 5.033, 5.041, 5.050,	PER	590
1	5.060, 5.070, 5.081, 5.091, 4.968, 4.968, 4.968, 4.968,	PER	600
1	4.968, 4.968, 4.968, 4.968, 4.968, 4.968, 4.968, 4.968,	PER	610
1	4.968, 4.969, 4.969, 4.969, 4.971, 4.972, 4.975, 4.978,	PER	620
1	4.982, 4.987, 4.993, 5.001, 5.011, 5.022, 5.035, 5.050,	PER	630
1	5.067, 5.086, 5.107, 5.130, 5.156, 5.183, 5.213, 7.009,	PER	640
1	7.036, 7.087, 7.148, 7.219, 7.300, 7.390, 7.490, 7.600,	PER	650
1	7.720, 7.823, 7.921, 8.016, 8.108, 8.195, 8.279, 8.358,	PER	660
1	8.434, 8.506, 8.575, 8.639, 8.700, 8.757, 8.810, 8.859,	PER	670
1	8.911, 8.962, 9.012, 9.061, 9.110, 9.158, 9.205, 9.252,	PER	680
1	9.297, 9.342, 7.057, 7.090, 7.150, 7.233, 7.332, 7.439,	PER	690
1	7.549, 7.659, 7.766, 7.867, 7.966, 8.053, 8.137, 8.214,	PER	700
1	8.286, 8.353, 8.415, 8.472, 8.526, 8.576, 8.622, 8.665,	PER	710
1	8.706, 8.744, 8.780, 8.814, 8.846, 8.876, 8.905, 8.933,	PER	720
1	8.959, 8.984, 9.008, 9.031, 9.053, 7.276, 7.450, 7.624,	PER	730
1	7.786, 7.931, 8.057, 8.168, 8.263, 8.346, 8.417, 8.480,	PER	740

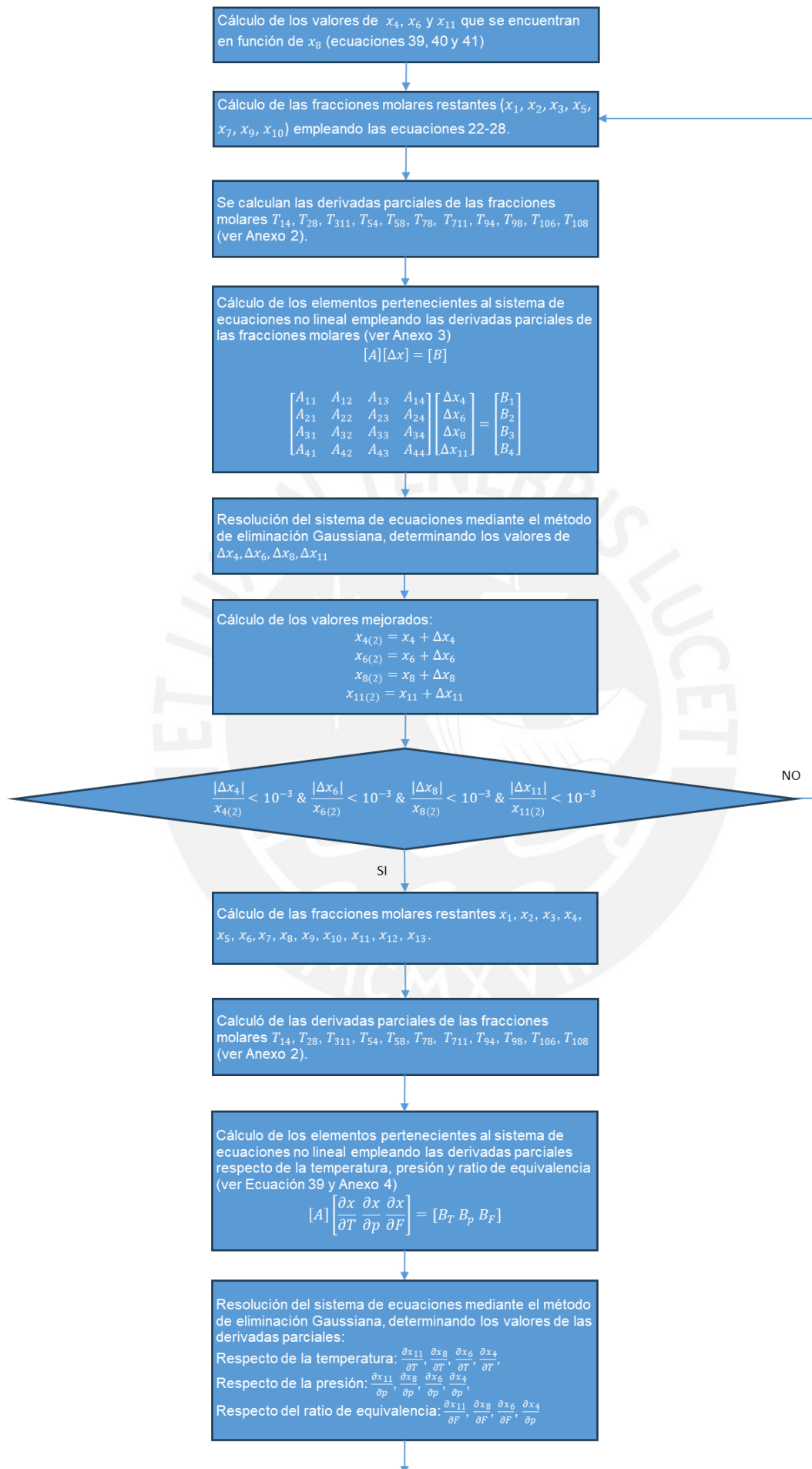
1	8.535,	8.583,	8.626,	8.664,	8.698,	8.728,	8.756,	8.781,	PER	750
1	8.804,	8.825,	8.844,	8.863,	8.879,	8.895,	8.910,	8.924,	PER	760
1	8.937,	8.949,	8.961,	8.973,	8.984,	8.994,	9.004,	9.014,	PER	770
1	7.466,	7.655,	7.832,	7.988,	8.123,	8.238,	8.336,	8.419,	PER	780
1	8.491,	8.552,	8.605,	8.651,	8.692,	8.727,	8.759,	8.788,	PER	790
1	8.813,	8.837,	8.858,	8.877,	8.895,	8.912,	8.927,	8.941,	PER	800
1	8.955,	8.968,	8.980,	8.991,	9.002,	9.012,	9.022,	9.032,	PER	810
1	9.041,	9.050,	9.058,	7.670,	7.883,	8.063,	8.212,	8.336,	PER	820
1	8.439,	8.527,	8.604,	8.674,	8.738,	8.800,	8.858,	8.916,	PER	830
1	8.973,	9.029,	9.084,	9.139,	9.194,	9.248,	9.301,	9.354,	PER	840
1	9.405,	9.455,	9.503,	9.551,	9.596,	9.640,	9.682,	9.723,	PER	850
1	9.762,	9.799,	9.835,	9.869,	9.901,	9.932,	8.676,	8.954,	PER	860
1	9.246,	9.547,	9.851,	10.152,	10.444,	10.723,	10.987,	11.233,	PER	870
1	11.462,	11.674,	11.869,	12.048,	12.214,	12.366,	12.505,	12.634,	PER	880
1	12.753,	12.863,	12.965,	13.059,	13.146,	13.228,	13.304,	13.374,	PER	890
1	13.441,	13.503,	13.562,	13.617,	13.669,	13.718,	13.764,	13.808,	PER	900
1	13.850,	11.310,	11.846,	12.293,	12.667,	12.980,	13.243,	13.466,	PER	910
1	13.656,	13.815,	13.953,	14.074,	14.177,	14.269,	14.352,	14.424,	PER	920
1	14.489,	14.547,	14.600,	14.648,	14.692,	14.734,	14.771,	14.807,	PER	930
1	14.841,	14.873,	14.902,	14.930,	14.956,	14.982,	15.006,	15.030,	PER	940
1	15.053,	15.075,	15.097,	15.119,	7.196,	7.350,	7.512,	7.670,	PER	950
1	7.815,	7.945,	8.061,	8.162,	8.252,	8.330,	8.398,	8.458,	PER	960
1	8.512,	8.559,	8.601,	8.638,	8.672,	8.703,	8.731,	8.756,	PER	970
1	8.779,	8.800,	8.820,	8.838,	8.855,	8.871,	8.886,	8.900,	PER	980
1	8.914,	8.927,	8.939,	8.950,	8.962,	8.972,	8.983,	8.993/	PER	990

Figura F1. Masa molar, entalpía específica y Calor a presión constante para cada uno de los productos de combustión codificados en FORTRAN (Olikara & Borman, 1975).



ANEXO G. Diagrama de flujo de la metodología para el cálculo de productos de combustión, temperatura de llama y velocidad de llama laminar





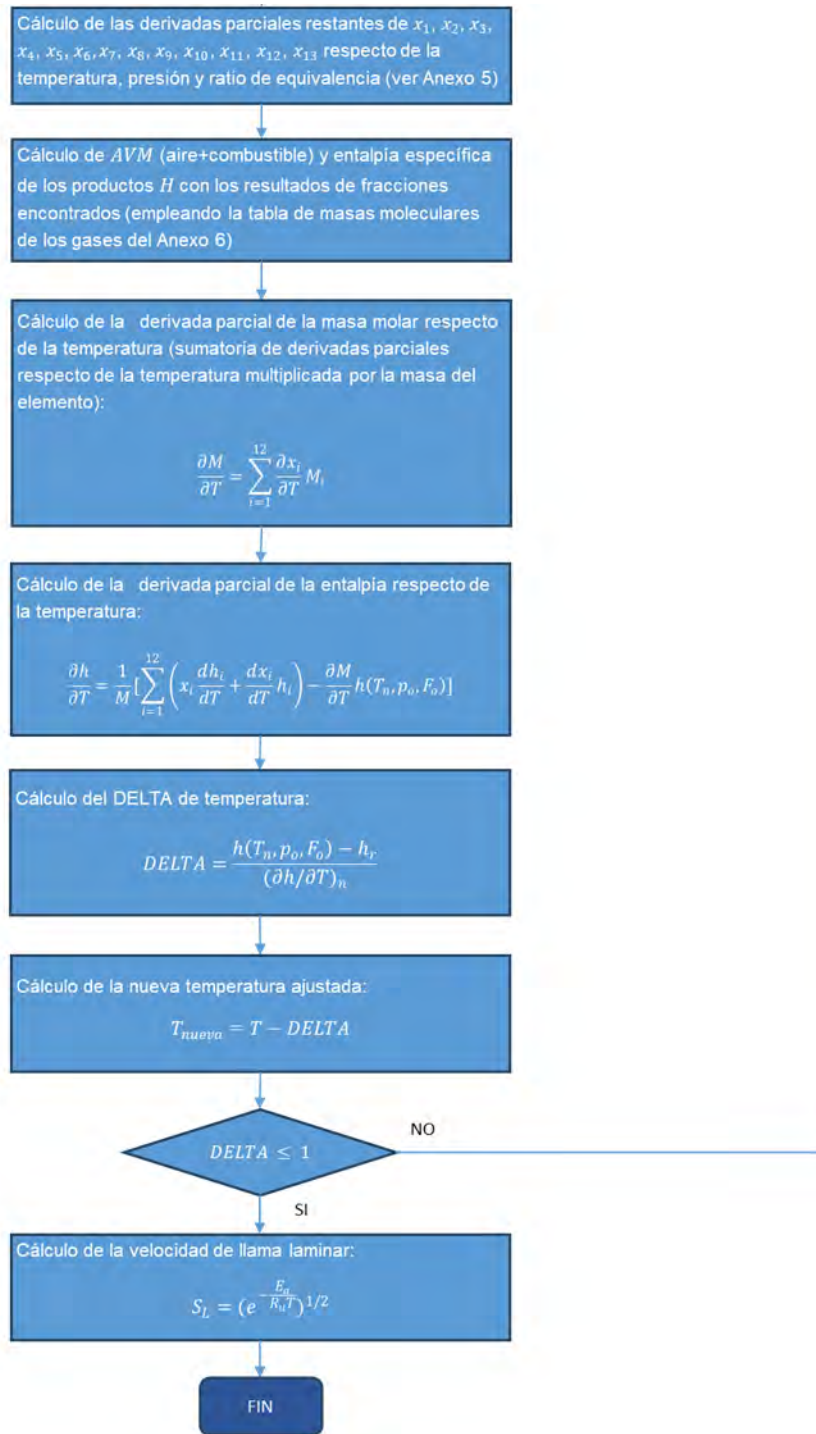


Figura G1. Flujo de la metodología numérica implementada en el aplicativo desarrollado en MATLAB.

ANEXO H. Productos de combustión (fracciones molares) obtenidos empleando la metodología numérica codificada en el aplicativo desarrollado en MATLAB

En las tablas H1 y H2 presentan los resultados empleando el aplicativo de X₁H (hidrógeno) y X₂O (oxígeno) a distintos valores de %CO₂ respectivamente.

Tabla H1: Fracciones molares de X₁H (hidrógeno) empleando el aplicativo.

Ratio (ϕ)	X ₁ H					
	% CO ₂					
	0%	10%	20%	30%	40%	50%
0.6	5.72 x 10 ⁻⁰⁷	3.38 x 10 ⁻⁰⁷	1.73 x 10 ⁻⁰⁷	7.15 x 10 ⁻⁰⁸	2.12 x 10 ⁻⁰⁸	3.64 x 10 ⁻⁰⁹
0.7	6.24 x 10 ⁻⁰⁶	3.57 x 10 ⁻⁰⁷	1.76 x 10 ⁻⁰⁶	6.86 x 10 ⁻⁰⁷	1.85 x 10 ⁻⁰⁷	2.69 x 10 ⁻⁰⁸
0.8	3.99 x 10 ⁻⁰⁵	2.28 x 10 ⁻⁰⁵	1.09 x 10 ⁻⁰⁵	4.07 x 10 ⁻⁰⁶	1.01 x 10 ⁻⁰⁶	1.27 x 10 ⁻⁰⁷
0.9	1.71 x 10 ⁻⁰⁴	1.00 x 10 ⁻⁰⁴	4.88 x 10 ⁻⁰⁵	1.79 x 10 ⁻⁰⁵	4.20 x 10 ⁻⁰⁶	4.53 x 10 ⁻⁰⁷
1	4.93 x 10 ⁻⁰⁴	3.10 x 10 ⁻⁰⁴	1.67 x 10 ⁻⁰⁴	7.05 x 10 ⁻⁰⁵	1.97 x 10 ⁻⁰⁵	2.61 x 10 ⁻⁰⁶
1.1	7.99 x 10 ⁻⁰⁴	4.89 x 10 ⁻⁰⁴	2.53 x 10 ⁻⁰⁴	1.02 x 10 ⁻⁰⁴	2.80 x 10 ⁻⁰⁵	3.98 x 10 ⁻⁰⁶
1.2	7.58 x 10 ⁻⁰⁴	4.14 x 10 ⁻⁰⁴	1.85 x 10 ⁻⁰⁴	6.18 x 10 ⁻⁰⁵	1.28 x 10 ⁻⁰⁵	-
1.3	5.76 x 10 ⁻⁰⁴	2.84 x 10 ⁻⁰⁴	1.11 x 10 ⁻⁰⁴	3.02 x 10 ⁻⁰⁵	-	-
1.4	3.93 x 10 ⁻⁰⁴	1.76 x 10 ⁻⁰⁴	5.93 x 10 ⁻⁰⁵	-	-	-
1.5	2.50 x 10 ⁻⁰⁴	1.01 x 10 ⁻⁰⁴	-	-	-	-
1.6	1.50 x 10 ⁻⁰⁴	-	-	-	-	-
1.7	8.58 x 10 ⁻⁰⁵	-	-	-	-	-

Tabla H2: Fracciones molares de X₂O (oxígeno) empleando el aplicativo.

Ratio (ϕ)	X ₂ O					
	% CO ₂					
	0%	10%	20%	30%	40%	50%
0.6	1.54 x 10 ⁻⁰⁵	1.05 x 10 ⁻⁰⁵	6.47 x 10 ⁻⁰⁶	3.40 x 10 ⁻⁰⁶	1.41 x 10 ⁻⁰⁶	3.88 x 10 ⁻⁰⁷
0.7	6.69 x 10 ⁻⁰⁵	4.46 x 10 ⁻⁰⁵	2.68 x 10 ⁻⁰⁵	1.35 x 10 ⁻⁰⁵	5.22 x 10 ⁻⁰⁶	1.28 x 10 ⁻⁰⁶
0.8	1.82 x 10 ⁻⁰⁴	1.22 x 10 ⁻⁰⁴	7.16 x 10 ⁻⁰⁵	3.50 x 10 ⁻⁰⁵	1.28 x 10 ⁻⁰⁵	2.83 x 10 ⁻⁰⁶
0.9	3.17 x 10 ⁻⁰⁴	2.13 x 10 ⁻⁰⁴	1.26 x 10 ⁻⁰⁴	6.05 x 10 ⁻⁰⁵	2.11 x 10 ⁻⁰⁵	4.21 x 10 ⁻⁰⁶
1	2.82 x 10 ⁻⁰⁴	1.77 x 10 ⁻⁰⁴	9.38 x 10 ⁻⁰⁵	3.80 x 10 ⁻⁰⁵	8.76 x 10 ⁻⁰⁶	1.09 x 10 ⁻⁰⁶
1.1	8.30 x 10 ⁻⁰⁵	3.37 x 10 ⁻⁰⁵	9.09 x 10 ⁻⁰⁶	1.34 x 10 ⁻⁰⁶	7.89 x 10 ⁻⁰⁸	9.65 x 10 ⁻¹⁰
1.2	1.49 x 10 ⁻⁰⁵	4.38 x 10 ⁻⁰⁶	8.14 x 10 ⁻⁰⁷	7.67 x 10 ⁻⁰⁸	2.35 x 10 ⁻⁰⁹	-
1.3	2.73 x 10 ⁻⁰⁶	6.35 x 10 ⁻⁰⁷	8.68 x 10 ⁻⁰⁸	5.17 x 10 ⁻⁰⁹	-	-
1.4	5.23 x 10 ⁻⁰⁷	9.79 x 10 ⁻⁰⁸	9.63 x 10 ⁻⁰⁹	-	-	-
1.5	1.02 x 10 ⁻⁰⁷	1.51 x 10 ⁻⁰⁸	-	-	-	-
1.6	1.93 x 10 ⁻⁰⁸	-	-	-	-	-
1.7	3.57 x 10 ⁻⁰⁹	-	-	-	-	-

En las tablas H3 y H4 se presentan los resultados empleando el aplicativo de X₃N (nitrógeno) y X₄H₂ (hidrógeno) a distintos valores de %CO₂ respectivamente.

Tabla H3: Fracciones molares de X₃N (nitrógeno) empleando el aplicativo.

Ratio (ϕ)	X ₃ N					
	% CO ₂					
	0%	10%	20%	30%	40%	50%
0.6	7.20×10^{-12}	3.51×10^{-12}	1.41×10^{-12}	4.20×10^{-13}	8.01×10^{-14}	7.15×10^{-15}
0.7	1.52×10^{-10}	7.08×10^{-11}	2.71×10^{-11}	7.48×10^{-12}	1.25×10^{-12}	8.98×10^{-14}
0.8	1.50×10^{-09}	6.99×10^{-10}	2.58×10^{-10}	6.69×10^{-11}	1.00×10^{-11}	5.91×10^{-13}
0.9	7.99×10^{-09}	3.83×10^{-09}	1.43×10^{-09}	3.66×10^{-10}	5.05×10^{-11}	2.43×10^{-12}
1	2.08×10^{-08}	1.03×10^{-08}	4.05×10^{-09}	1.08×10^{-09}	1.53×10^{-10}	6.76×10^{-12}
1.1	1.78×10^{-08}	6.91×10^{-09}	1.86×10^{-09}	2.88×10^{-10}	1.91×10^{-11}	2.99×10^{-13}
1.2	7.06×10^{-09}	2.09×10^{-09}	4.02×10^{-10}	4.11×10^{-11}	1.49×10^{-11}	-
1.3	2.31×10^{-09}	5.45×10^{-10}	7.83×10^{-11}	5.19×10^{-12}	-	-
1.4	6.94×10^{-10}	1.33×10^{-10}	1.40×10^{-11}	-	-	-
1.5	1.98×10^{-10}	3.03×10^{-11}	-	-	-	-
1.6	5.25×10^{-11}	-	-	-	-	-
1.7	1.32×10^{-11}	-	-	-	-	-

Tabla H4: Fracciones molares de X₄H₂ (hidrógeno) empleando el aplicativo.

Ratio (ϕ)	X ₄ H ₂					
	% CO ₂					
	0%	10%	20%	30%	40%	50%
0.6	1.03×10^{-05}	7.04×10^{-06}	4.35×10^{-06}	2.30×10^{-06}	9.63×10^{-07}	2.71×10^{-07}
0.7	6.96×10^{-05}	4.59×10^{-05}	2.76×10^{-05}	1.40×10^{-05}	5.47×10^{-06}	1.37×10^{-06}
0.8	3.20×10^{-04}	2.14×10^{-04}	1.26×10^{-04}	6.20×10^{-05}	2.27×10^{-05}	5.12×10^{-06}
0.9	1.20×10^{-03}	8.21×10^{-04}	4.92×10^{-04}	2.41×10^{-04}	8.48×10^{-05}	1.71×10^{-05}
1	4.02×10^{-03}	3.07×10^{-03}	2.15×10^{-03}	1.32×10^{-03}	6.50×10^{-04}	2.14×10^{-04}
1.1	1.21×10^{-02}	1.10×10^{-02}	1.02×10^{-02}	9.60×10^{-03}	9.24×10^{-03}	9.25×10^{-03}
1.2	2.58×10^{-02}	2.43×10^{-02}	2.29×10^{-02}	2.18×10^{-02}	2.12×10^{-02}	-
1.3	4.25×10^{-02}	4.01×10^{-02}	3.79×10^{-02}	3.62×10^{-02}	-	-
1.4	6.07×10^{-02}	5.74×10^{-02}	5.44×10^{-02}	-	-	-
1.5	7.98×10^{-02}	7.55×10^{-02}	-	-	-	-
1.6	9.90×10^{-02}	-	-	-	-	-
1.7	1.18×10^{-01}	-	-	-	-	-

En las Tabla H5 y H6 se presentan los resultados empleando el aplicativo de X₅OH (hidróxido) y X₆CO (monóxido de carbono) a distintos valores de %CO₂ respectivamente.

Tabla H5: Fracciones molares de X₅OH (hidróxido) empleando el aplicativo.

Ratio (ϕ)	X ₅ OH					
	% CO ₂					
	0%	10%	20%	30%	40%	50%
0.6	3.47×10^{-04}	2.71×10^{-04}	1.98×10^{-04}	1.30×10^{-04}	7.36×10^{-05}	3.20×10^{-05}
0.7	9.74×10^{-04}	7.49×10^{-04}	5.39×10^{-04}	3.46×10^{-04}	1.87×10^{-04}	7.54×10^{-05}
0.8	2.02×10^{-03}	1.56×10^{-03}	1.11×10^{-03}	6.96×10^{-04}	3.62×10^{-04}	1.37×10^{-04}
0.9	3.16×10^{-03}	2.45×10^{-03}	1.75×10^{-03}	1.09×10^{-03}	5.53×10^{-04}	1.95×10^{-04}
1	3.32×10^{-03}	2.50×10^{-03}	1.70×10^{-03}	9.80×10^{-04}	4.27×10^{-04}	1.12×10^{-04}
1.1	1.82×10^{-03}	1.08×10^{-03}	5.08×10^{-04}	1.69×10^{-04}	3.32×10^{-05}	2.66×10^{-06}

1.2	7.18×10^{-4}	3.56×10^{-4}	1.36×10^{-4}	3.50×10^{-5}	4.73×10^{-6}	-
1.3	2.80×10^{-4}	1.22×10^{-4}	3.89×10^{-5}	7.71×10^{-6}	-	-
1.4	1.10×10^{-4}	4.23×10^{-5}	1.12×10^{-5}	-	-	-
1.5	4.32×10^{-5}	1.45×10^{-5}	-	-	-	-
1.6	1.66×10^{-5}	-	-	-	-	-
1.7	6.24×10^{-6}	-	-	-	-	-

Tabla H6: Fracciones molares de X₆CO (monóxido de carbono) empleando el aplicativo.

Ratio (ϕ)	X ₆ CO					
	% CO ₂					
	0%	10%	20%	30%	40%	50%
0.6	1.88×10^{-5}	1.36×10^{-5}	8.87×10^{-6}	4.95×10^{-6}	2.16×10^{-6}	6.19×10^{-7}
0.7	1.50×10^{-4}	1.06×10^{-4}	6.73×10^{-5}	3.58×10^{-5}	1.45×10^{-5}	3.67×10^{-6}
0.8	7.92×10^{-4}	5.60×10^{-4}	3.49×10^{-4}	1.80×10^{-4}	6.84×10^{-5}	1.55×10^{-5}
0.9	3.18×10^{-3}	2.33×10^{-3}	1.49×10^{-3}	7.67×10^{-4}	2.80×10^{-4}	5.62×10^{-5}
1	1.05×10^{-2}	8.73×10^{-3}	6.64×10^{-3}	4.38×10^{-3}	2.26×10^{-3}	7.47×10^{-4}
1.1	2.71×10^{-2}	2.67×10^{-2}	2.63×10^{-2}	2.60×10^{-2}	2.55×10^{-2}	2.45×10^{-2}
1.2	4.63×10^{-2}	4.69×10^{-2}	4.72×10^{-2}	4.71×10^{-2}	4.62×10^{-2}	-
1.3	6.24×10^{-2}	6.36×10^{-2}	6.44×10^{-2}	6.43×10^{-2}	-	-
1.4	7.56×10^{-2}	7.73×10^{-2}	7.84×10^{-2}	-	-	-
1.5	8.64×10^{-2}	8.87×10^{-2}	-	-	-	-
1.6	9.57×10^{-2}	-	-	-	-	-
1.7	1.04×10^{-1}	-	-	-	-	-

En las Tabla H7 y H8 se presentan los resultados empleando el aplicativo de X₇NO (óxido de nitrógeno) y X₈O₂ (oxígeno) a distintos valores de %CO₂ respectivamente.

Tabla H7: Fracciones molares de X₇NO (óxido de nitrógeno) empleando el aplicativo.

Ratio (ϕ)	X ₇ NO					
	% CO ₂					
	0%	10%	20%	30%	40%	50%
0.6	1.98×10^{-3}	1.72×10^{-3}	1.44×10^{-3}	1.14×10^{-3}	8.22×10^{-4}	5.13×10^{-4}
0.7	3.00×10^{-3}	2.58×10^{-3}	2.14×10^{-3}	1.67×10^{-3}	1.18×10^{-3}	7.04×10^{-4}
0.8	3.69×10^{-3}	3.19×10^{-3}	2.63×10^{-3}	2.02×10^{-3}	1.40×10^{-3}	8.06×10^{-4}
0.9	3.58×10^{-3}	3.08×10^{-3}	2.53×10^{-3}	1.93×10^{-3}	1.31×10^{-3}	7.29×10^{-4}
1	2.27×10^{-3}	1.81×10^{-3}	1.31×10^{-3}	8.29×10^{-4}	4.11×10^{-4}	1.31×10^{-4}
1.1	6.97×10^{-4}	3.89×10^{-4}	1.64×10^{-4}	4.54×10^{-5}	6.66×10^{-6}	3.32×10^{-7}
1.2	1.68×10^{-4}	7.49×10^{-5}	2.43×10^{-5}	4.95×10^{-6}	4.66×10^{-7}	-
1.3	4.47×10^{-5}	1.69×10^{-5}	4.46×10^{-6}	6.65×10^{-7}	-	-
1.4	1.27×10^{-5}	4.16×10^{-6}	8.77×10^{-7}	-	-	-
1.5	3.74×10^{-6}	1.05×10^{-6}	-	-	-	-
1.6	1.10×10^{-6}	-	-	-	-	-
1.7	3.22×10^{-7}	-	-	-	-	-

Tabla H8: Fracciones molares de X_8O_2 (oxígeno) empleando el aplicativo.

Ratio (ϕ)	X_8O_2					
	% CO_2					
	0%	10%	20%	30%	40%	50%
0.6	7.79×10^{-02}	7.75×10^{-02}	7.71×10^{-02}	7.65×10^{-02}	7.57×10^{-02}	7.45×10^{-02}
0.7	5.69×10^{-02}	5.68×10^{-02}	5.65×10^{-02}	5.62×10^{-02}	5.56×10^{-02}	5.47×10^{-02}
0.8	3.68×10^{-02}	3.67×10^{-02}	3.66×10^{-02}	3.65×10^{-02}	3.62×10^{-02}	3.57×10^{-02}
0.9	1.86×10^{-02}	1.83×10^{-02}	1.80×10^{-02}	1.78×10^{-02}	1.76×10^{-02}	1.74×10^{-02}
1	5.28×10^{-03}	4.36×10^{-03}	3.31×10^{-03}	2.19×10^{-03}	1.15×10^{-03}	3.87×10^{-04}
1.1	5.36×10^{-04}	2.40×10^{-04}	7.03×10^{-05}	1.11×10^{-05}	6.74×10^{-07}	8.25×10^{-09}
1.2	4.52×10^{-05}	1.43×10^{-05}	2.82×10^{-06}	2.81×10^{-07}	8.89×10^{-09}	-
1.3	4.96×10^{-06}	1.23×10^{-06}	1.80×10^{-07}	1.13×10^{-08}	-	-
1.4	6.43×10^{-07}	1.29×10^{-07}	1.36×10^{-08}	-	-	-
1.5	9.14×10^{-08}	1.46×10^{-08}	-	-	-	-
1.6	1.33×10^{-08}	-	-	-	-	-
1.7	1.95×10^{-09}	-	-	-	-	-

En las tablas H9 y H10 se presentan los resultados empleando el aplicativo de X_9H_2O (óxido de hidrógeno) y $X_{10}CO_2$ (dióxido de carbono) a distintos valores de % CO_2 respectivamente.

Tabla H9: Fracciones molares de X_9H_2O (óxido de hidrógeno) empleando el aplicativo.

Ratio (ϕ)	X_9H_2O					
	% CO_2					
	0%	10%	20%	30%	40%	50%
0.6	0.115326	0.114662	0.113831	0.112766	0.111360	0.109430
0.7	0.132867	0.132072	0.131047	0.129704	0.127898	0.125391
0.8	0.149561	0.148749	0.147629	0.146072	0.143890	0.140783
0.9	0.164952	0.164376	0.163388	0.161797	0.159336	0.155639
1	0.177805	0.177776	0.177295	0.176098	0.173788	0.169813
1.1	0.184378	0.184086	0.182933	0.180689	0.177119	0.171740
1.2	0.183750	0.183378	0.182167	0.179861	0.175979	-
1.3	0.179051	0.179113	0.178284	0.176129	-	-
1.4	0.171972	0.172633	0.172265	-	-	-
1.5	0.163503	0.164757	-	-	-	-
1.6	0.154255	-	-	-	-	-
1.7	0.144631	-	-	-	-	-

Tabla H10: Fracciones molares de $X_{10}CO_2$ (dióxido de carbono) empleando el aplicativo.

Ratio (ϕ)	$X_{10}CO_2$					
	% CO_2					
	0%	10%	20%	30%	40%	50%
0.6	0.0609329	0.0666953	0.0737978	0.0827701	0.0944636	0.1103400
0.7	0.0702552	0.0768821	0.0850180	0.0952526	0.1085270	0.1264510
0.8	0.0788399	0.0864555	0.0957279	0.1072810	0.1221240	0.1419920
0.9	0.0853707	0.0944042	0.1052570	0.1185110	0.1351460	0.1569700
1	0.0864273	0.0971706	0.1102150	0.1261610	0.1458490	0.1707260
1.1	0.0772455	0.0871771	0.0990653	0.1137130	0.1325600	0.1579970

1.2	0.0646443	0.0739881	0.0857279	0.1008600	0.1210120	-
1.3	0.0546690	0.0638309	0.0757128	0.0915076	-	-
1.4	0.0473575	0.0563965	0.0684774	-	-	-
1.5	0.0420035	0.0509930	-	-	-	-
1.6	0.0380447	-	-	-	-	-
1.7	0.0350631	-	-	-	-	-

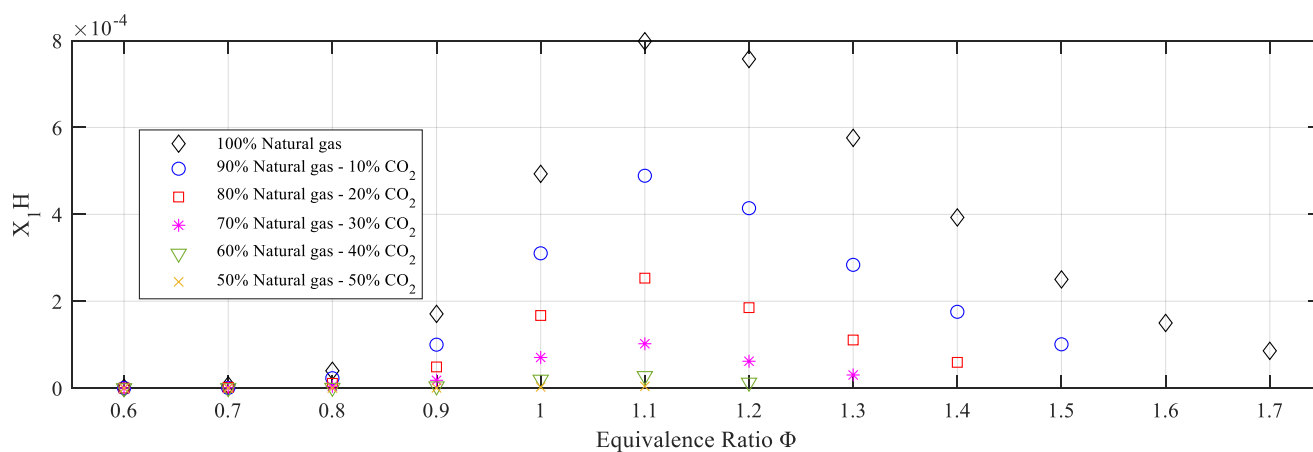
En las tablas H11 y H12 se presentan los resultados empleando el aplicativo de $X_{11}N_2$ (nitrógeno) y $X_{12}AR$ (argón) a distintos valores de %CO₂ respectivamente.

Tabla H11: Fracciones molares de $X_{11}N_2$ (nitrógeno) empleando el aplicativo.

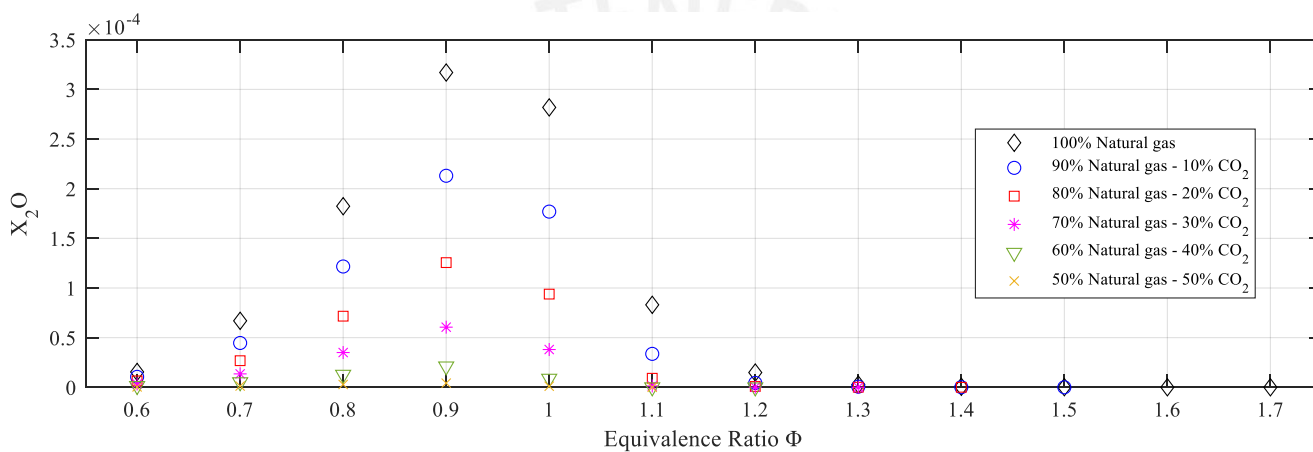
Ratio (ϕ)	$X_{11}N_2$					
	% CO ₂					
	0%	10%	20%	30%	40%	50%
0.6	0.734755	0.730394	0.724992	0.718133	0.709143	0.696867
0.7	0.727001	0.722127	0.716070	0.708370	0.698271	0.684494
0.8	0.719177	0.713896	0.707300	0.698863	0.687755	0.672584
0.9	0.710972	0.705509	0.698589	0.689604	0.677623	0.661156
1	0.701215	0.695805	0.688907	0.679832	0.667486	0.650126
1.1	0.687044	0.680698	0.672490	0.661804	0.647798	0.629042
1.2	0.669841	0.662736	0.653856	0.642630	0.628163	-
1.3	0.652714	0.645239	0.636020	0.624471	-	-
1.4	0.636275	0.628554	0.619094	-	-	-
1.5	0.620586	0.612680	-	-	-	-
1.6	0.605628	-	-	-	-	-
1.7	0.591360	-	-	-	-	-

Tabla H12: Fracciones molares de $X_{12}AR$ (argón) empleando el aplicativo.

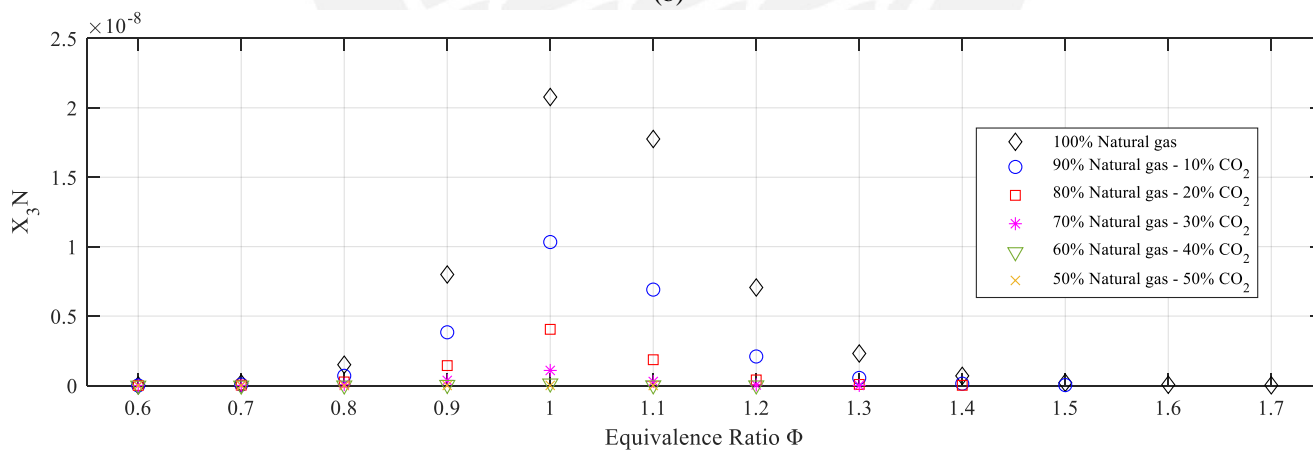
Ratio (ϕ)	$X_{12}AR$					
	% CO ₂					
	0%	10%	20%	30%	40%	50%
0.6	0.00876047	0.00870700	0.00864100	0.00855752	0.00844861	0.00830061
0.7	0.00867361	0.00861312	0.00853839	0.00844388	0.00832072	0.00815386
0.8	0.00858402	0.00851813	0.00843627	0.00833223	0.00819626	0.00801213
0.9	0.00848510	0.00841710	0.00833143	0.00822091	0.00807459	0.00787509
1	0.00836058	0.00829340	0.00820835	0.00809745	0.00794801	0.00773969
1.1	0.00818196	0.00810459	0.00800555	0.00787765	0.00771071	0.00748742
1.2	0.00797350	0.00788839	0.00778240	0.00764866	0.00747646	-
1.3	0.00776840	0.00767928	0.00756948	0.00743201	-	-
1.4	0.00757205	0.00748011	0.00736752	-	-	-
1.5	0.00738479	0.00729069	-	-	-	-
1.6	0.00720628	-	-	-	-	-
1.7	0.00703603	-	-	-	-	-



(a)

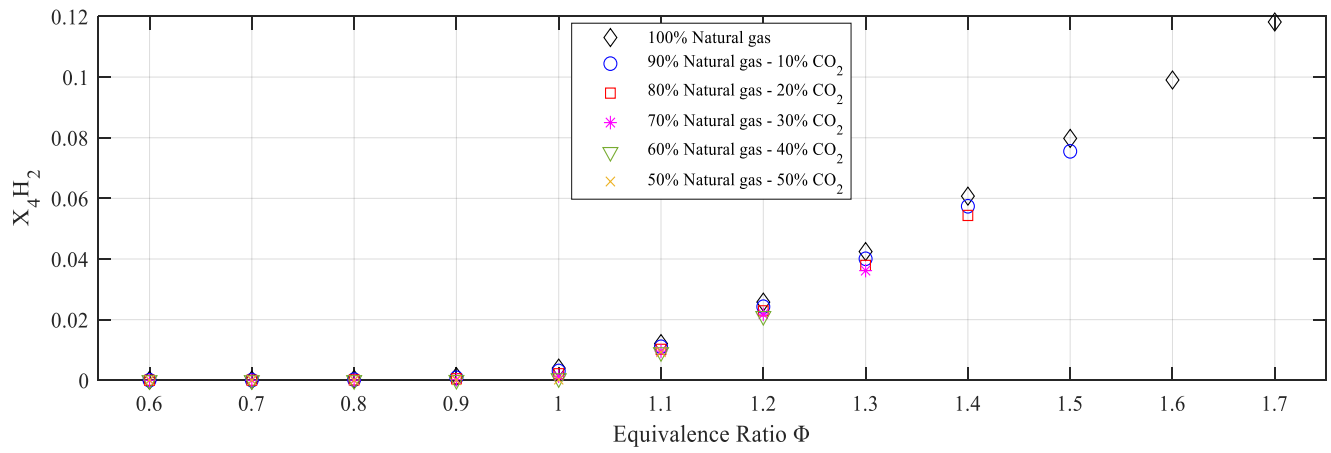


(b)

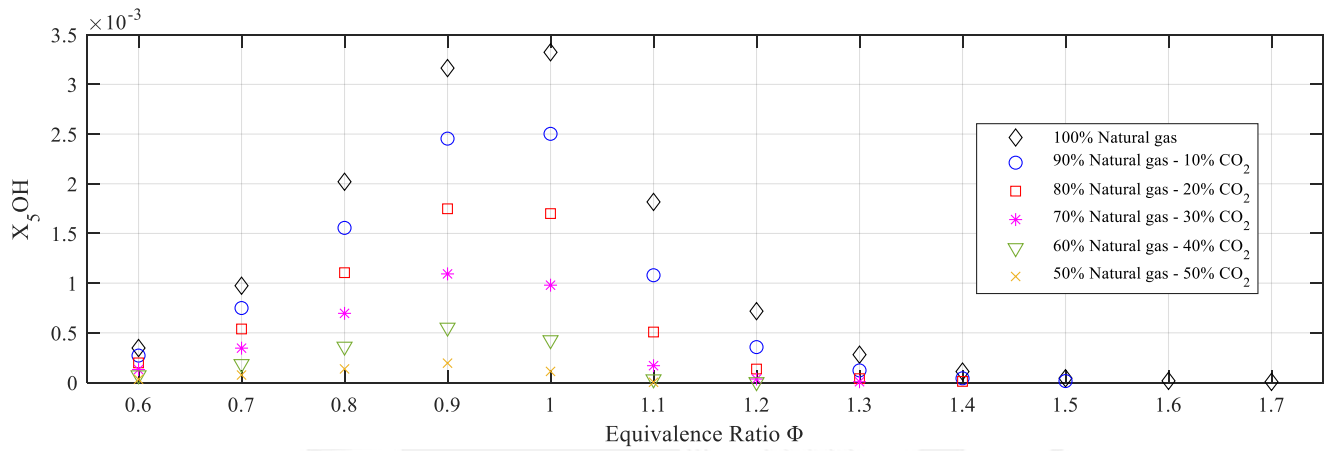


(c)

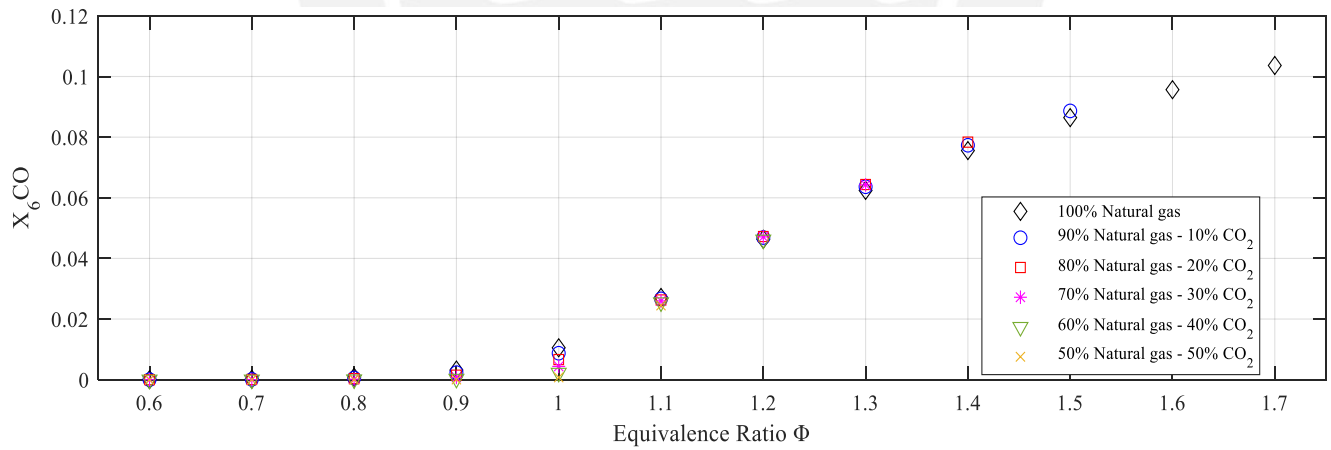
Figura H1. Productos de combustión ($X_1 - X_3$) determinados por el aplicativo desarrollado en MATLAB para mezclas de gas natural con 0%, 10%, 20%, 30%, 40% y 50% de CO_2 .



(a)

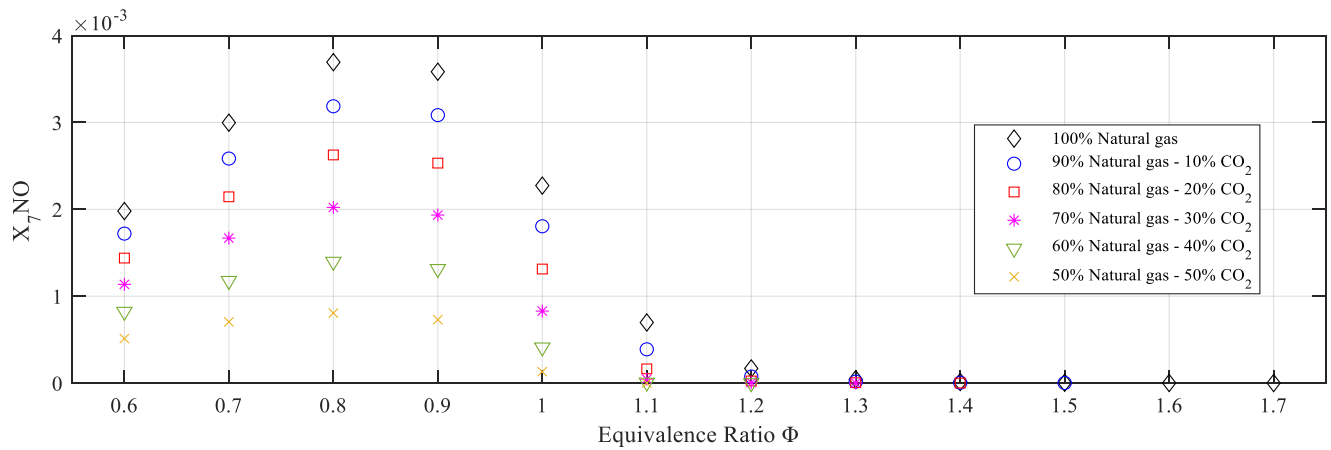


(b)

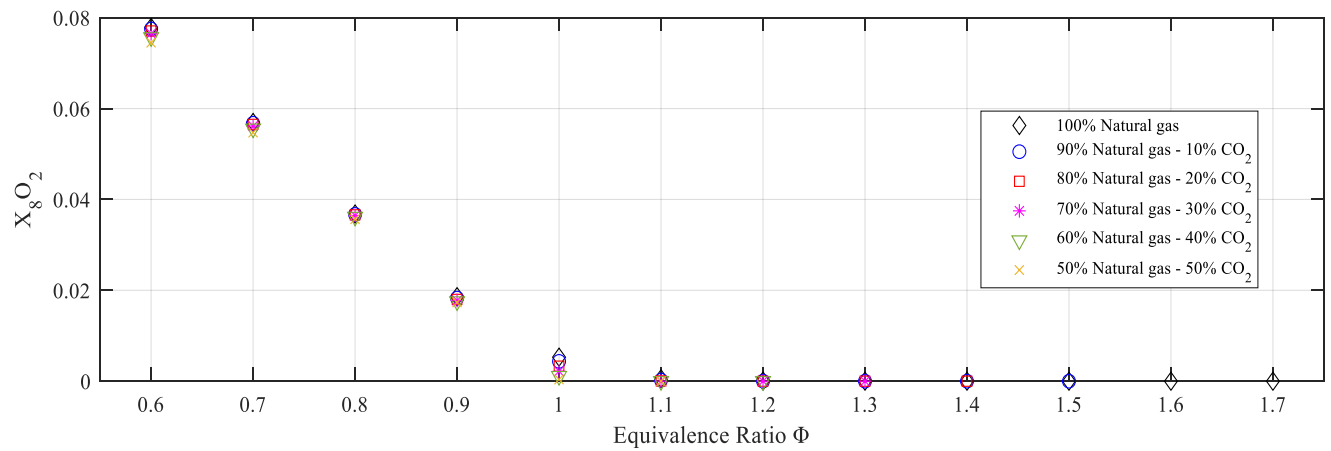


(c)

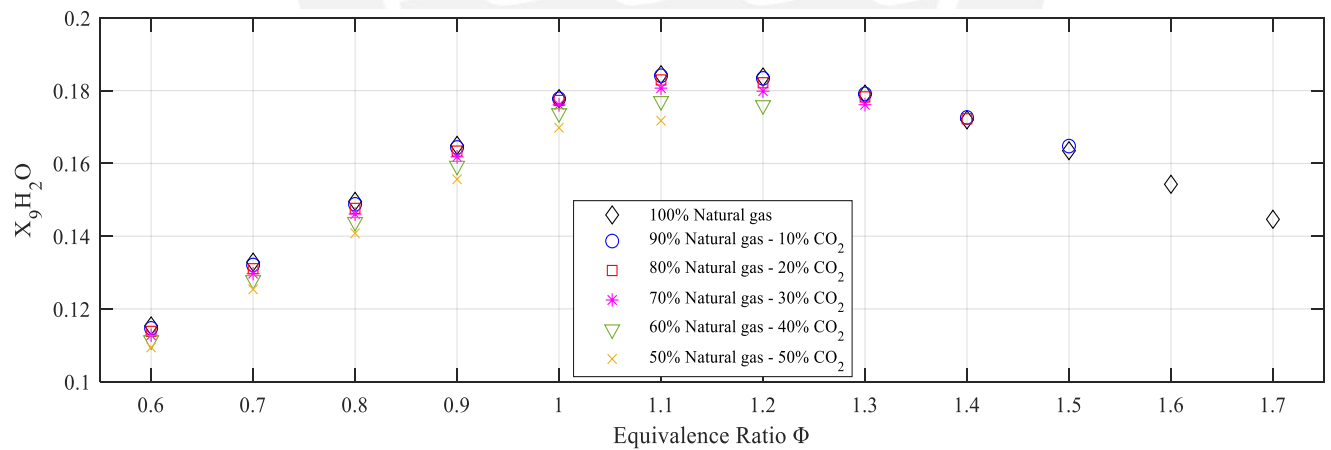
Figura H2. Productos de combustión ($X_4 - X_6$) determinados por el aplicativo desarrollado en MATLAB para mezclas de gas natural con 0%, 10%, 20%, 30%, 40% y 50% de CO_2 .



(a)

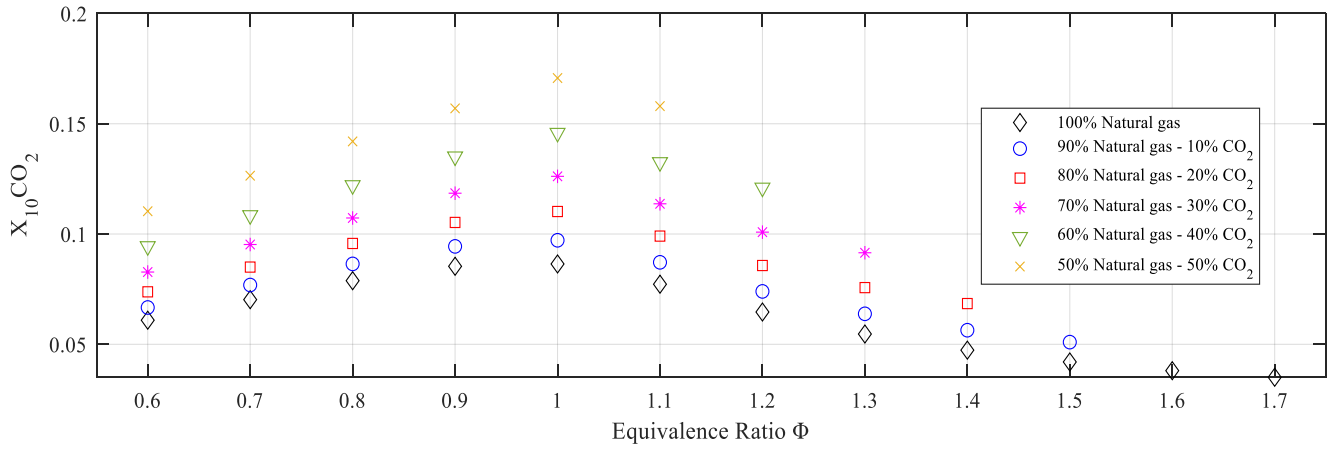


(b)

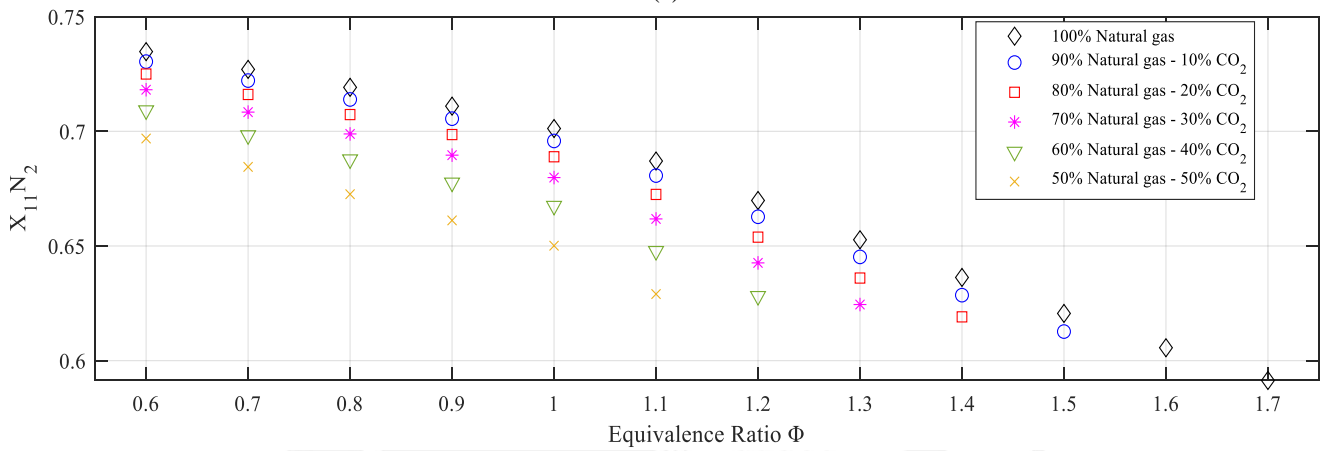


(c)

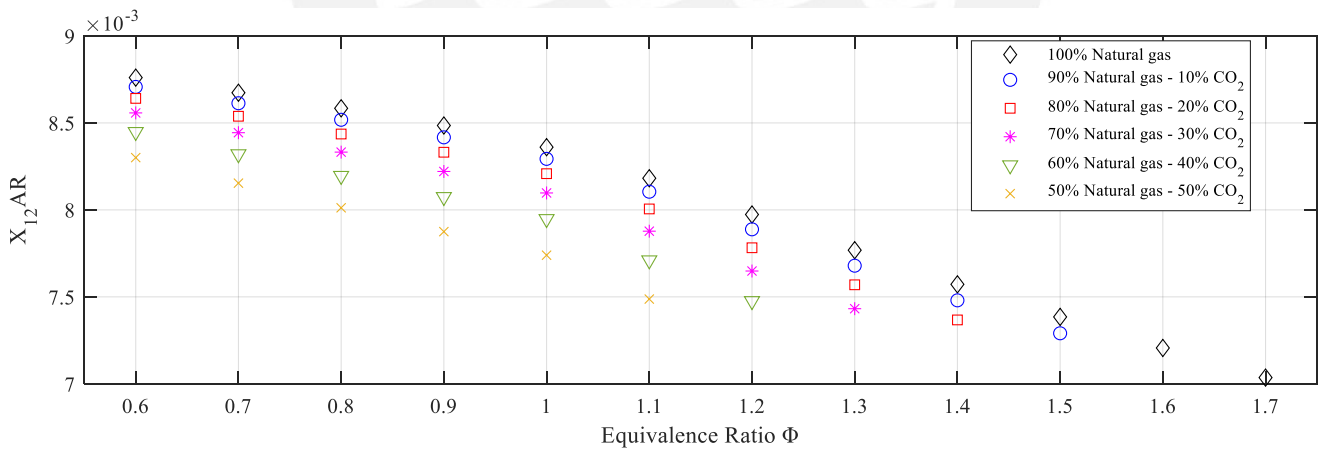
Figura H3. Productos de combustión ($X_7 - X_9$) determinados por el aplicativo desarrollado en MATLAB para mezclas de gas natural con 0%, 10%, 20%, 30%, 40% y 50% de CO_2 .



(a)



(b)



(c)

Figura H4. Productos de combustión ($X_{10} - X_{12}$) determinados por el aplicativo desarrollado en MATLAB para mezclas de gas natural con 0%, 10%, 20%, 30%, 40% y 50% de CO_2 .

ANEXO I. Productos de combustión (fracciones molares) obtenidos mediante simulación en Ansys Chemkin usando el mecanismo San Diego

En la tablas I1 y I2 se presentan los resultados del X₁H (hidrógeno) y X₂O (oxígeno) a distintos valores de %CO₂ empleando el mecanismo de San Diego.

Tabla I1: Fracciones molares de X₁H (hidrógeno) empleando el mecanismo de San Diego.

Ratio (ϕ)	X ₁ H					
	% CO ₂					
	0%	10%	20%	30%	40%	50%
0.6	2.80 x 10 ⁻⁰⁷	2.35 x 10 ⁻⁰⁷	1.88 x 10 ⁻⁰⁷	1.45 x 10 ⁻⁰⁷	1.00 x 10 ⁻⁰⁷	6.10 x 10 ⁻⁰⁸
0.7	3.83 x 10 ⁻⁰⁶	3.30 x 10 ⁻⁰⁶	2.62 x 10 ⁻⁰⁶	1.99 x 10 ⁻⁰⁶	1.41 x 10 ⁻⁰⁶	7.09 x 10 ⁻⁰⁷
0.8	2.75 x 10 ⁻⁰⁵	2.31 x 10 ⁻⁰⁵	1.87 x 10 ⁻⁰⁵	1.41 x 10 ⁻⁰⁵	9.71 x 10 ⁻⁰⁶	5.91 x 10 ⁻⁰⁶
0.9	1.28 x 10 ⁻⁰⁴	1.07 x 10 ⁻⁰⁴	8.47 x 10 ⁻⁰⁵	6.40 x 10 ⁻⁰⁵	4.43 x 10 ⁻⁰⁵	2.57 x 10 ⁻⁰⁵
1	4.14 x 10 ⁻⁰⁴	3.49 x 10 ⁻⁰⁴	2.83 x 10 ⁻⁰⁴	2.18 x 10 ⁻⁰⁴	1.54 x 10 ⁻⁰⁴	9.86 x 10 ⁻⁰⁵
1.1	7.12 x 10 ⁻⁰⁴	5.96 x 10 ⁻⁰⁴	4.75 x 10 ⁻⁰⁴	3.58 x 10 ⁻⁰⁴	2.57 x 10 ⁻⁰⁴	1.59 x 10 ⁻⁰⁴
1.2	6.64 x 10 ⁻⁰⁴	5.43 x 10 ⁻⁰⁴	4.21 x 10 ⁻⁰⁴	3.10 x 10 ⁻⁰⁴	2.05 x 10 ⁻⁰⁴	1.22 x 10 ⁻⁰⁴
1.3	5.25 x 10 ⁻⁰⁴	4.19 x 10 ⁻⁰⁴	3.14 x 10 ⁻⁰⁴	2.23 x 10 ⁻⁰⁴	1.44 x 10 ⁻⁰⁴	8.27 x 10 ⁻⁰⁵
1.4	3.68 x 10 ⁻⁰⁴	2.82 x 10 ⁻⁰⁴	2.10 x 10 ⁻⁰⁴	1.39 x 10 ⁻⁰⁴	8.26 x 10 ⁻⁰⁵	4.17 x 10 ⁻⁰⁵
1.5	2.42 x 10 ⁻⁰⁴	1.82 x 10 ⁻⁰⁴	1.29 x 10 ⁻⁰⁴	8.61 x 10 ⁻⁰⁵	4.97 x 10 ⁻⁰⁵	2.45 x 10 ⁻⁰⁵
1.6	1.58 x 10 ⁻⁰⁴	1.19 x 10 ⁻⁰⁴	8.39 x 10 ⁻⁰⁵	5.31 x 10 ⁻⁰⁵	3.08 x 10 ⁻⁰⁵	1.47 x 10 ⁻⁰⁵
1.7	1.04 x 10 ⁻⁰⁴	7.90 x 10 ⁻⁰⁵	5.29 x 10 ⁻⁰⁵	3.42 x 10 ⁻⁰⁵	1.93 x 10 ⁻⁰⁵	9.10 x 10 ⁻⁰⁶

Tabla I2: Fracciones molares de X₂O (oxígeno) empleando el mecanismo de San Diego.

Ratio (ϕ)	X ₂ O					
	% CO ₂					
	0%	10%	20%	30%	40%	50%
0.6	9.28 x 10 ⁻⁰⁶	8.17 x 10 ⁻⁰⁶	6.93 x 10 ⁻⁰⁶	5.71 x 10 ⁻⁰⁶	4.35 x 10 ⁻⁰⁶	3.02 x 10 ⁻⁰⁶
0.7	4.78 x 10 ⁻⁰⁵	4.27 x 10 ⁻⁰⁵	3.60 x 10 ⁻⁰⁵	2.94 x 10 ⁻⁰⁵	2.27 x 10 ⁻⁰⁵	1.38 x 10 ⁻⁰⁵
0.8	1.44 x 10 ⁻⁰⁴	1.26 x 10 ⁻⁰⁴	1.08 x 10 ⁻⁰⁴	8.76 x 10 ⁻⁰⁵	6.64 x 10 ⁻⁰⁵	4.59 x 10 ⁻⁰⁵
0.9	2.69 x 10 ⁻⁰⁴	2.36 x 10 ⁻⁰⁴	1.99 x 10 ⁻⁰⁴	1.61 x 10 ⁻⁰⁴	1.22 x 10 ⁻⁰⁴	8.13 x 10 ⁻⁰⁵
1	2.52 x 10 ⁻⁰⁴	2.18 x 10 ⁻⁰⁴	1.81 x 10 ⁻⁰⁴	1.45 x 10 ⁻⁰⁴	1.05 x 10 ⁻⁰⁴	6.91 x 10 ⁻⁰⁵
1.1	6.45 x 10 ⁻⁰⁵	5.19 x 10 ⁻⁰⁵	3.80 x 10 ⁻⁰⁵	2.51 x 10 ⁻⁰⁵	1.56 x 10 ⁻⁰⁵	7.44 x 10 ⁻⁰⁶
1.2	1.02 x 10 ⁻⁰⁵	7.75 x 10 ⁻⁰⁶	5.29 x 10 ⁻⁰⁶	3.37 x 10 ⁻⁰⁶	1.81 x 10 ⁻⁰⁶	7.74 x 10 ⁻⁰⁷
1.3	1.95 x 10 ⁻⁰⁶	1.45 x 10 ⁻⁰⁶	9.58 x 10 ⁻⁰⁷	5.68 x 10 ⁻⁰⁷	2.85 x 10 ⁻⁰⁷	1.10 x 10 ⁻⁰⁷
1.4	4.15 x 10 ⁻⁰⁷	2.76 x 10 ⁻⁰⁷	1.78 x 10 ⁻⁰⁷	8.91 x 10 ⁻⁰⁸	3.85 x 10 ⁻⁰⁸	1.18 x 10 ⁻⁰⁸
1.5	8.94 x 10 ⁻⁰⁸	5.72 x 10 ⁻⁰⁸	3.37 x 10 ⁻⁰⁸	1.77 x 10 ⁻⁰⁸	7.22 x 10 ⁻⁰⁹	2.22 x 10 ⁻⁰⁹
1.6	2.24 x 10 ⁻⁰⁸	1.46 x 10 ⁻⁰⁸	8.98 x 10 ⁻⁰⁹	4.09 x 10 ⁻⁰⁹	1.73 x 10 ⁻⁰⁹	5.26 x 10 ⁻¹⁰
1.7	6.21 x 10 ⁻⁰⁹	4.45 x 10 ⁻⁰⁹	2.27 x 10 ⁻⁰⁹	1.18 x 10 ⁻⁰⁹	4.90 x 10 ⁻¹⁰	1.55 x 10 ⁻¹⁰

En las tablas I3 y I4 se presentan los resultados del X₃N (nitrógeno) y X₄H₂ (hidrógeno) a distintos valores de %CO₂ empleando el mecanismo de San Diego.

Tabla I3: Fracciones molares de X₃N (nitrógeno) empleando el mecanismo de San Diego.

Ratio (ϕ)	X ₃ N					
	% CO ₂					
	0%	10%	20%	30%	40%	50%
0.6	9.60 x 10 ⁻¹³	7.36 x 10 ⁻¹³	5.27 x 10 ⁻¹³	3.53 x 10 ⁻¹³	2.02 x 10 ⁻¹³	9.48 x 10 ⁻¹⁴
0.7	3.82 x 10 ⁻¹¹	2.98 x 10 ⁻¹¹	2.12 x 10 ⁻¹¹	1.39 x 10 ⁻¹¹	8.05 x 10 ⁻¹²	3.34 x 10 ⁻¹²
0.8	5.48 x 10 ⁻¹⁰	4.26 x 10 ⁻¹⁰	3.11 x 10 ⁻¹⁰	2.07 x 10 ⁻¹⁰	1.19 x 10 ⁻¹⁰	5.56 x 10 ⁻¹¹
0.9	3.41 x 10 ⁻⁰⁹	2.68 x 10 ⁻⁰⁹	1.97 x 10 ⁻⁰⁹	1.34 x 10 ⁻⁰⁹	8.10 x 10 ⁻¹⁰	3.82 x 10 ⁻¹⁰
1	8.87 x 10 ⁻⁰⁹	6.93 x 10 ⁻⁰⁹	5.10 x 10 ⁻⁰⁹	3.46 x 10 ⁻⁰⁹	2.08 x 10 ⁻⁰⁹	1.07 x 10 ⁻⁰⁹
1.1	4.55 x 10 ⁻⁰⁹	3.33 x 10 ⁻⁰⁹	2.19 x 10 ⁻⁰⁹	1.28 x 10 ⁻⁰⁹	6.80 x 10 ⁻¹⁰	2.66 x 10 ⁻¹⁰
1.2	1.04 x 10 ⁻⁰⁹	7.09 x 10 ⁻¹⁰	4.32 x 10 ⁻¹⁰	2.41 x 10 ⁻¹⁰	1.11 x 10 ⁻¹⁰	3.83 x 10 ⁻¹¹
1.3	2.35 x 10 ⁻¹⁰	1.65 x 10 ⁻¹⁰	8.88 x 10 ⁻¹¹	4.46 x 10 ⁻¹¹	1.72 x 10 ⁻¹¹	4.43 x 10 ⁻¹²
1.4	4.79 x 10 ⁻¹¹	2.38 x 10 ⁻¹¹	1.19 x 10 ⁻¹¹	3.96 x 10 ⁻¹²	1.03 x 10 ⁻¹²	1.55 x 10 ⁻¹³
1.5	5.39 x 10 ⁻¹²	2.49 x 10 ⁻¹²	1.02 x 10 ⁻¹²	3.42 x 10 ⁻¹³	9.70 x 10 ⁻¹⁴	1.62 x 10 ⁻¹⁴
1.6	6.30 x 10 ⁻¹³	3.02 x 10 ⁻¹³	1.34 x 10 ⁻¹³	4.56 x 10 ⁻¹⁴	1.20 x 10 ⁻¹⁴	2.15 x 10 ⁻¹⁵
1.7	1.06 x 10 ⁻¹³	5.15 x 10 ⁻¹⁴	2.04 x 10 ⁻¹⁴	7.24 x 10 ⁻¹⁵	1.96 x 10 ⁻¹⁵	3.69 x 10 ⁻¹⁶

Tabla I4: Fracciones molares de X₄H₂ (hidrógeno) empleando el mecanismo de San Diego.

Ratio (ϕ)	X ₄ H ₂					
	% CO ₂					
	0%	10%	20%	30%	40%	50%
0.6	6.14 x 10 ⁻⁰⁶	5.41 x 10 ⁻⁰⁶	4.60 x 10 ⁻⁰⁶	3.81 x 10 ⁻⁰⁶	2.91 x 10 ⁻⁰⁶	2.03 x 10 ⁻⁰⁶
0.7	4.79 x 10 ⁻⁰⁵	4.29 x 10 ⁻⁰⁵	3.63 x 10 ⁻⁰⁵	2.97 x 10 ⁻⁰⁵	2.31 x 10 ⁻⁰⁵	1.41 x 10 ⁻⁰⁵
0.8	2.42 x 10 ⁻⁰⁴	2.13 x 10 ⁻⁰⁴	1.82 x 10 ⁻⁰⁴	1.49 x 10 ⁻⁰⁴	1.13 x 10 ⁻⁰⁴	7.84 x 10 ⁻⁰⁵
0.9	9.54 x 10 ⁻⁰⁴	8.38 x 10 ⁻⁰⁴	7.08 x 10 ⁻⁰⁴	5.80 x 10 ⁻⁰⁴	4.44 x 10 ⁻⁰⁴	2.99 x 10 ⁻⁰⁴
1	3.53 x 10 ⁻⁰³	3.15 x 10 ⁻⁰³	2.74 x 10 ⁻⁰³	2.31 x 10 ⁻⁰³	1.83 x 10 ⁻⁰³	1.38 x 10 ⁻⁰³
1.1	1.21 x 10 ⁻⁰²	1.11 x 10 ⁻⁰²	1.01 x 10 ⁻⁰²	9.08 x 10 ⁻⁰³	7.95 x 10 ⁻⁰³	6.67 x 10 ⁻⁰³
1.2	2.68 x 10 ⁻⁰²	2.47 x 10 ⁻⁰²	2.26 x 10 ⁻⁰²	2.02 x 10 ⁻⁰²	1.74 x 10 ⁻⁰²	1.49 x 10 ⁻⁰²
1.3	4.54 x 10 ⁻⁰²	4.12 x 10 ⁻⁰²	3.69 x 10 ⁻⁰²	3.28 x 10 ⁻⁰²	2.86 x 10 ⁻⁰²	2.46 x 10 ⁻⁰²
1.4	6.34 x 10 ⁻⁰²	5.83 x 10 ⁻⁰²	5.30 x 10 ⁻⁰²	4.76 x 10 ⁻⁰²	4.10 x 10 ⁻⁰²	3.47 x 10 ⁻⁰²
1.5	8.24 x 10 ⁻⁰²	7.60 x 10 ⁻⁰²	6.85 x 10 ⁻⁰²	6.10 x 10 ⁻⁰²	5.22 x 10 ⁻⁰²	4.31 x 10 ⁻⁰²
1.6	9.86 x 10 ⁻⁰²	9.05 x 10 ⁻⁰²	7.94 x 10 ⁻⁰²	7.17 x 10 ⁻⁰²	6.09 x 10 ⁻⁰²	4.92 x 10 ⁻⁰²
1.7	1.13 x 10 ⁻⁰¹	1.01 x 10 ⁻⁰¹	9.17 x 10 ⁻⁰²	7.99 x 10 ⁻⁰²	6.67 x 10 ⁻⁰²	5.35 x 10 ⁻⁰²

En las tablas I5 y I6 se presentan los resultados del X₅OH (hidróxido) y X₆CO (monóxido de carbono) a distintos valores de %CO₂ empleando el mecanismo de San Diego.

Tabla I5: Fracciones molares de X₅OH (hidróxido) empleando el mecanismo de San Diego.

Ratio (ϕ)	X ₅ OH					
	% CO ₂					
	0%	10%	20%	30%	40%	50%
0.6	2.87 x 10 ⁻⁰⁴	2.63 x 10 ⁻⁰⁴	2.37 x 10 ⁻⁰⁴	2.09 x 10 ⁻⁰⁴	1.74 x 10 ⁻⁰⁴	1.37 x 10 ⁻⁰⁴
0.7	8.81 x 10 ⁻⁰⁴	8.15 x 10 ⁻⁰⁴	7.28 x 10 ⁻⁰⁴	6.36 x 10 ⁻⁰⁴	5.35 x 10 ⁻⁰⁴	3.93 x 10 ⁻⁰⁴
0.8	1.93 x 10 ⁻⁰³	1.77 x 10 ⁻⁰³	1.60 x 10 ⁻⁰³	1.39 x 10 ⁻⁰³	1.16 x 10 ⁻⁰³	9.01 x 10 ⁻⁰⁴
0.9	3.16 x 10 ⁻⁰³	2.90 x 10 ⁻⁰³	2.59 x 10 ⁻⁰³	2.25 x 10 ⁻⁰³	1.88 x 10 ⁻⁰³	1.44 x 10 ⁻⁰³
1	3.43 x 10 ⁻⁰³	3.12 x 10 ⁻⁰³	2.78 x 10 ⁻⁰³	2.40 x 10 ⁻⁰³	1.96 x 10 ⁻⁰³	1.50 x 10 ⁻⁰³

1.1	1.74×10^{-03}	1.53×10^{-03}	1.27×10^{-03}	9.93×10^{-04}	7.46×10^{-04}	4.79×10^{-04}
1.2	6.47×10^{-04}	5.50×10^{-04}	4.40×10^{-04}	3.38×10^{-04}	2.34×10^{-04}	1.41×10^{-04}
1.3	2.60×10^{-04}	2.19×10^{-04}	1.72×10^{-04}	1.27×10^{-04}	8.44×10^{-05}	4.81×10^{-05}
1.4	1.09×10^{-04}	8.62×10^{-05}	6.72×10^{-05}	4.54×10^{-05}	2.80×10^{-05}	1.42×10^{-05}
1.5	4.58×10^{-05}	3.57×10^{-05}	2.65×10^{-05}	1.85×10^{-05}	1.10×10^{-05}	5.59×10^{-06}
1.6	2.08×10^{-05}	1.65×10^{-05}	1.25×10^{-05}	8.03×10^{-06}	4.95×10^{-06}	2.50×10^{-06}
1.7	9.96×10^{-06}	8.39×10^{-06}	5.74×10^{-06}	3.99×10^{-06}	2.44×10^{-06}	1.23×10^{-06}

Tabla I6: Fracciones molares de X_6CO (monóxido de carbono) empleando el mecanismo de San Diego.

Ratio (ϕ)	X_6CO					
	% CO_2					
	0%	10%	20%	30%	40%	50%
0.6	1.06×10^{-05}	1.02×10^{-05}	9.49×10^{-06}	8.68×10^{-06}	7.48×10^{-06}	5.96×10^{-06}
0.7	1.01×10^{-04}	9.86×10^{-05}	9.13×10^{-05}	8.29×10^{-05}	7.27×10^{-05}	4.98×10^{-05}
0.8	5.83×10^{-04}	5.59×10^{-04}	5.24×10^{-04}	4.73×10^{-04}	4.05×10^{-04}	3.22×10^{-04}
0.9	2.50×10^{-03}	2.39×10^{-03}	2.22×10^{-03}	2.02×10^{-03}	1.75×10^{-03}	1.35×10^{-03}
1	9.23×10^{-03}	9.03×10^{-03}	8.70×10^{-03}	8.22×10^{-03}	7.43×10^{-03}	6.48×10^{-03}
1.1	2.68×10^{-02}	2.71×10^{-02}	2.75×10^{-02}	2.78×10^{-02}	2.79×10^{-02}	2.72×10^{-02}
1.2	4.67×10^{-02}	4.80×10^{-02}	4.93×10^{-02}	5.03×10^{-02}	5.05×10^{-02}	5.08×10^{-02}
1.3	6.32×10^{-02}	6.51×10^{-02}	6.70×10^{-02}	6.88×10^{-02}	7.02×10^{-02}	7.12×10^{-02}
1.4	7.60×10^{-02}	7.91×10^{-02}	8.19×10^{-02}	8.47×10^{-02}	8.67×10^{-02}	8.76×10^{-02}
1.5	8.63×10^{-02}	8.99×10^{-02}	9.33×10^{-02}	9.62×10^{-02}	9.88×10^{-02}	9.88×10^{-02}
1.6	9.35×10^{-02}	9.73×10^{-02}	1.01×10^{-01}	1.05×10^{-01}	1.06×10^{-01}	1.05×10^{-01}
1.7	9.99×10^{-02}	1.02×10^{-01}	1.08×10^{-01}	1.10×10^{-01}	1.11×10^{-01}	1.09×10^{-01}

En las tablas I7 y I8 se presentan los resultados de X_7NO (óxido de nitrógeno) y X_8O_2 (oxígeno) a distintos valores de % CO_2 empleando el mecanismo de San Diego.

Tabla I7: Fracciones molares de X_7NO (óxido de nitrógeno) empleando el mecanismo de San Diego.

Ratio (ϕ)	X_7NO					
	% CO_2					
	0%	10%	20%	30%	40%	50%
0.6	6.50×10^{-07}	5.68×10^{-07}	4.82×10^{-07}	3.98×10^{-07}	3.13×10^{-07}	2.29×10^{-07}
0.7	4.44×10^{-06}	3.74×10^{-06}	3.00×10^{-06}	2.30×10^{-06}	1.64×10^{-06}	1.15×10^{-06}
0.8	2.60×10^{-05}	2.15×10^{-05}	1.70×10^{-05}	1.25×10^{-05}	8.46×10^{-06}	4.92×10^{-06}
0.9	1.26×10^{-04}	1.03×10^{-04}	7.97×10^{-05}	5.77×10^{-05}	3.83×10^{-05}	2.12×10^{-05}
1	2.21×10^{-04}	1.80×10^{-04}	1.38×10^{-04}	8.81×10^{-05}	5.67×10^{-05}	3.19×10^{-05}
1.1	4.57×10^{-05}	3.60×10^{-05}	2.59×10^{-05}	1.71×10^{-05}	1.07×10^{-05}	5.55×10^{-06}
1.2	8.20×10^{-06}	6.36×10^{-06}	4.57×10^{-06}	3.15×10^{-06}	2.00×10^{-06}	1.08×10^{-06}
1.3	1.62×10^{-06}	1.45×10^{-06}	9.24×10^{-07}	6.29×10^{-07}	3.79×10^{-07}	1.91×10^{-07}
1.4	2.54×10^{-07}	1.35×10^{-07}	9.13×10^{-08}	5.35×10^{-08}	3.13×10^{-08}	1.60×10^{-08}
1.5	4.51×10^{-08}	3.24×10^{-08}	2.28×10^{-08}	1.51×10^{-08}	9.92×10^{-09}	5.39×10^{-09}
1.6	1.69×10^{-08}	1.29×10^{-08}	9.68×10^{-09}	6.84×10^{-09}	4.28×10^{-09}	2.38×10^{-09}
1.7	8.76×10^{-09}	6.53×10^{-09}	4.95×10^{-09}	3.43×10^{-09}	2.16×10^{-09}	1.23×10^{-09}

Tabla I8: Fracciones molares de X_8O_2 (oxígeno) empleando el mecanismo de San Diego.

Ratio (ϕ)	X_8O_2					
	% CO_2					
	0%	10%	20%	30%	40%	50%
0.6	7.90×10^{-02}	7.85×10^{-02}	7.80×10^{-02}	7.72×10^{-02}	7.62×10^{-02}	7.49×10^{-02}
0.7	5.86×10^{-02}	5.82×10^{-02}	5.77×10^{-02}	5.71×10^{-02}	5.63×10^{-02}	5.52×10^{-02}
0.8	3.86×10^{-02}	3.83×10^{-02}	3.80×10^{-02}	3.75×10^{-02}	3.70×10^{-02}	3.62×10^{-02}
0.9	1.99×10^{-02}	1.98×10^{-02}	1.96×10^{-02}	1.92×10^{-02}	1.88×10^{-02}	1.83×10^{-02}
1	5.40×10^{-03}	5.22×10^{-03}	4.95×10^{-03}	4.65×10^{-03}	4.21×10^{-03}	3.61×10^{-03}
1.1	4.18×10^{-04}	3.66×10^{-04}	2.94×10^{-04}	2.14×10^{-04}	1.52×10^{-04}	8.61×10^{-05}
1.2	3.00×10^{-05}	2.48×10^{-05}	1.85×10^{-05}	1.32×10^{-05}	8.23×10^{-06}	4.17×10^{-06}
1.3	3.34×10^{-06}	2.76×10^{-06}	2.04×10^{-06}	1.37×10^{-06}	8.01×10^{-07}	3.72×10^{-07}
1.4	4.90×10^{-07}	3.60×10^{-07}	2.58×10^{-07}	1.46×10^{-07}	7.68×10^{-08}	4.68×10^{-08}
1.5	7.81×10^{-08}	5.53×10^{-08}	3.69×10^{-08}	2.48×10^{-08}	1.08×10^{-08}	9.79×10^{-09}
1.6	1.59×10^{-08}	1.20×10^{-08}	1.11×10^{-08}	4.25×10^{-09}	2.79×10^{-09}	2.17×10^{-08}
1.7	3.61×10^{-09}	3.28×10^{-09}	1.75×10^{-09}	1.25×10^{-09}	6.02×10^{-09}	2.17×10^{-07}

En las tablas I9 y I10 se presentan los resultados de X_9H_2O (óxido de hidrógeno) y $X_{10}CO_2$ (dióxido de carbono) a distintos valores de % CO_2 empleando el mecanismo de San Diego.

Tabla I9: Fracciones molares de X_9H_2O (óxido de hidrógeno) empleando el mecanismo de San Diego.

Ratio (ϕ)	X_9H_2O					
	% CO_2					
	0%	10%	20%	30%	40%	50%
0.6	0.1155868	0.1148760	0.1140518	0.113156	0.111450	0.109476
0.7	0.1335435	0.1324628	0.1313974	0.130004	0.128016	0.125565
0.8	0.1505465	0.1494558	0.1481203	0.146546	0.143983	0.140759
0.9	0.1662958	0.1651333	0.1633648	0.161667	0.159181	0.155053
1	0.1798467	0.1784918	0.1771013	0.174888	0.172061	0.168150
1.1	0.1862634	0.1853040	0.1839670	0.182230	0.179744	0.175329
1.2	0.1853021	0.1851820	0.1847539	0.183980	0.181203	0.177583
1.3	0.1811698	0.1821128	0.1819383	0.181726	0.180254	0.177891
1.4	0.1731857	0.1746599	0.1769950	0.178170	0.177726	0.176502
1.5	0.1652125	0.1681329	0.1706862	0.173736	0.173915	0.173462
1.6	0.1572488	0.1614380	0.1646356	0.167551	0.170377	0.170680
1.7	0.1492091	0.1551960	0.1587315	0.163568	0.166871	0.167671

Tabla I10: Fracciones molares de $X_{10}CO_2$ (dióxido de carbono) empleando el mecanismo de San Diego.

Ratio (ϕ)	$X_{10}CO_2$					
	% CO_2					
	0%	10%	20%	30%	40%	50%
0.6	0.0605952	0.0663332	0.0733859	0.0822671	0.0940931	0.1100096
0.7	0.0697597	0.0764064	0.0845024	0.0946949	0.1079769	0.1258651
0.8	0.0784888	0.0858593	0.0948999	0.1062378	0.1210943	0.1409933
0.9	0.0854513	0.0936274	0.1037920	0.1164450	0.1327019	0.1548865
1	0.0870054	0.0960667	0.1071388	0.1211650	0.1393898	0.1635769

1.1	0.0768647	0.0858952	0.0970095	0.1109845	0.1291644	0.1542800
1.2	0.0635063	0.0720998	0.0827872	0.0966725	0.1158807	0.1411795
1.3	0.0526028	0.0611672	0.0721614	0.0860881	0.1049025	0.1302302
1.4	0.0459159	0.0538382	0.0638734	0.0772290	0.0963060	0.1225961
1.5	0.0406891	0.0481302	0.0583369	0.0716704	0.0911849	0.1190085
1.6	0.0373277	0.0447532	0.0557530	0.0689855	0.0888855	0.1183183
1.7	0.0350776	0.0431282	0.0531559	0.0676132	0.0887633	0.1197625

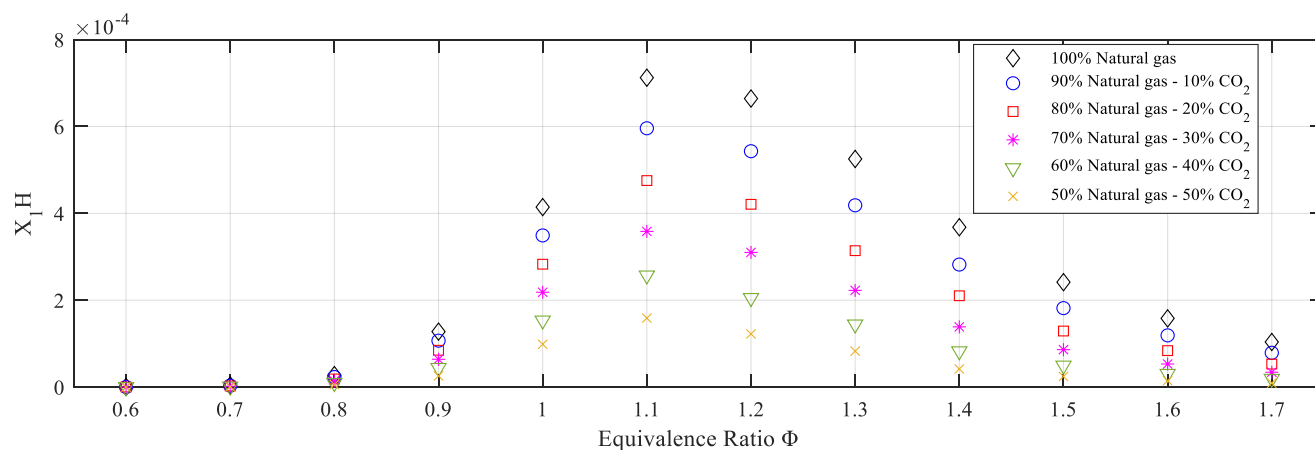
En las tablas I11 y I12 se presentan los resultados de $X_{11}N_2$ (nitrógeno) y $X_{12}AR$ (argón) a distintos valores de %CO₂ empleando el mecanismo de San Diego.

Tabla I11: Fracciones molares de $X_{11}N_2$ (nitrógeno) empleando el mecanismo de San Diego.

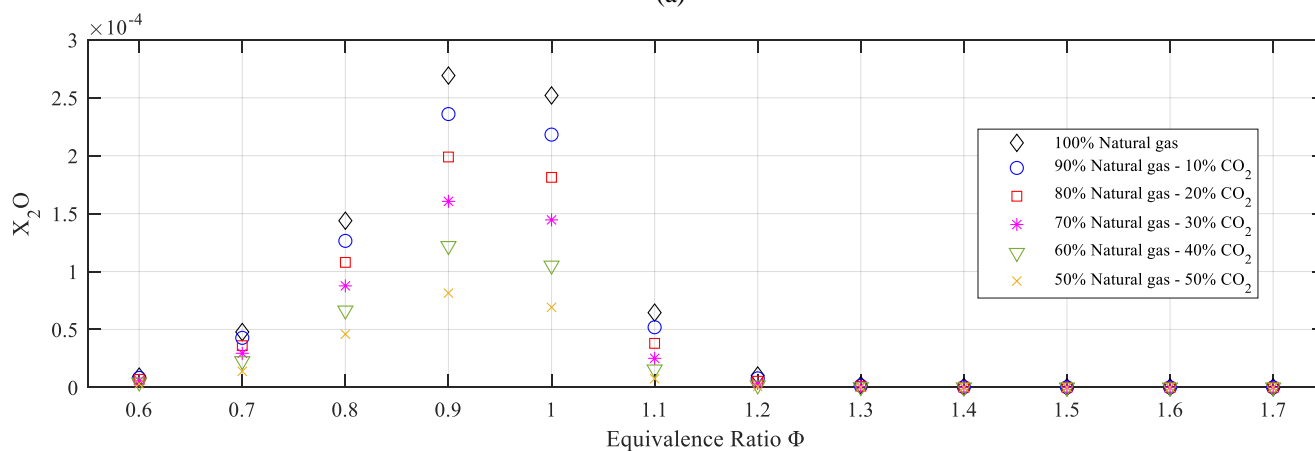
Ratio (ϕ)	$X_{11}N_2$					
	% CO ₂					
	0%	10%	20%	30%	40%	50%
0.6	0.735550	0.731061	0.725486	0.718365	0.709406	0.697014
0.7	0.728121	0.723107	0.716749	0.708787	0.698547	0.684539
0.8	0.720662	0.714962	0.707947	0.699035	0.687806	0.672458
0.9	0.712514	0.706292	0.698872	0.689197	0.676795	0.660528
1	0.702123	0.695701	0.687607	0.677661	0.664702	0.647218
1.1	0.686661	0.679732	0.671135	0.660210	0.646237	0.628093
1.2	0.668149	0.660843	0.651745	0.640393	0.626905	0.607937
1.3	0.648924	0.642022	0.633785	0.622618	0.608422	0.588725
1.4	0.633288	0.626152	0.616438	0.604707	0.590809	0.571229
1.5	0.617308	0.609687	0.601026	0.588962	0.575601	0.556733
1.6	0.603812	0.596249	0.589292	0.576947	0.562657	0.544259
1.7	0.592173	0.586139	0.576806	0.565711	0.552133	0.533750

Tabla I12: Fracciones molares de $X_{12}AR$ (argón) empleando el mecanismo de San Diego.

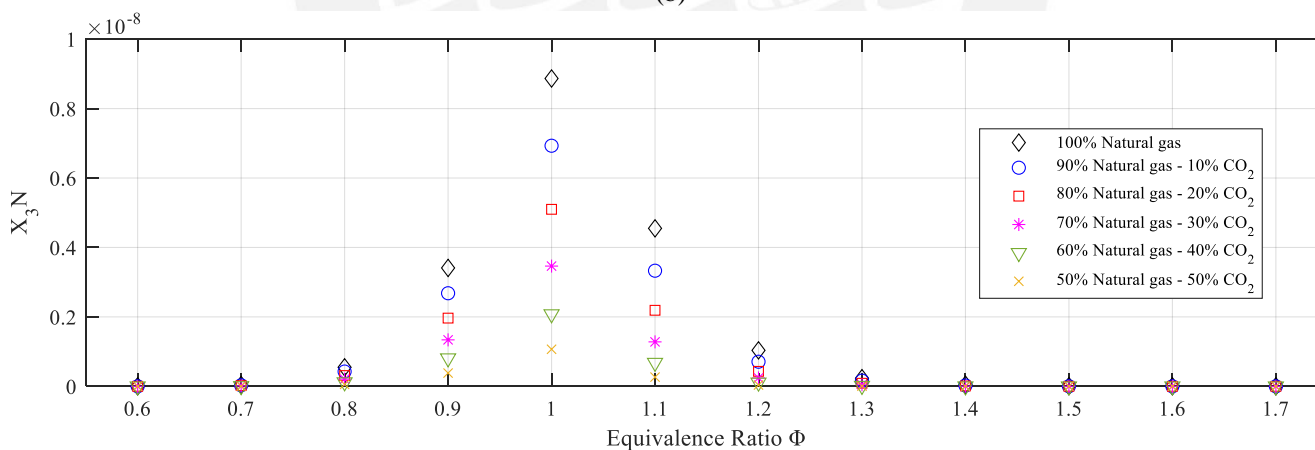
Ratio (ϕ)	$X_{12}AR$					
	% CO ₂					
	0%	10%	20%	30%	40%	50%
0.6	0.00896225	0.00890755	0.00883959	0.00875300	0.00864367	0.00849272
0.7	0.00887137	0.00881012	0.00873272	0.00863575	0.00851086	0.00834016
0.8	0.00878002	0.00871058	0.00862511	0.00851661	0.00837960	0.00819255
0.9	0.00868074	0.00860486	0.00851422	0.00839642	0.00824530	0.00804680
1	0.00855419	0.00847571	0.00837694	0.00825548	0.00809748	0.00788441
1.1	0.00836425	0.00827983	0.00817510	0.00804217	0.00787212	0.00765088
1.2	0.00813803	0.00804914	0.00793850	0.00780049	0.00763594	0.00740510
1.3	0.00790325	0.00781933	0.00771909	0.00758322	0.00741025	0.00717075
1.4	0.00771213	0.00762544	0.00750727	0.00736468	0.00719528	0.00695716
1.5	0.00751675	0.00742425	0.00731903	0.00717255	0.00700966	0.00678002
1.6	0.00735179	0.00726000	0.00717541	0.00702532	0.00685160	0.00662772
1.7	0.00720948	0.00713629	0.00702290	0.00688805	0.00672290	0.00649930



(a)

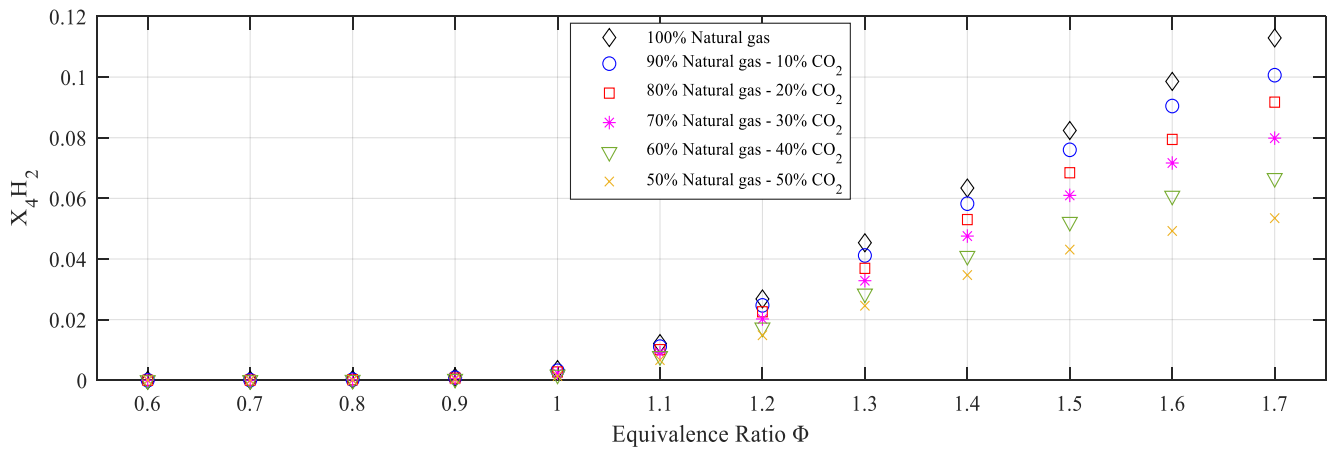


(b)

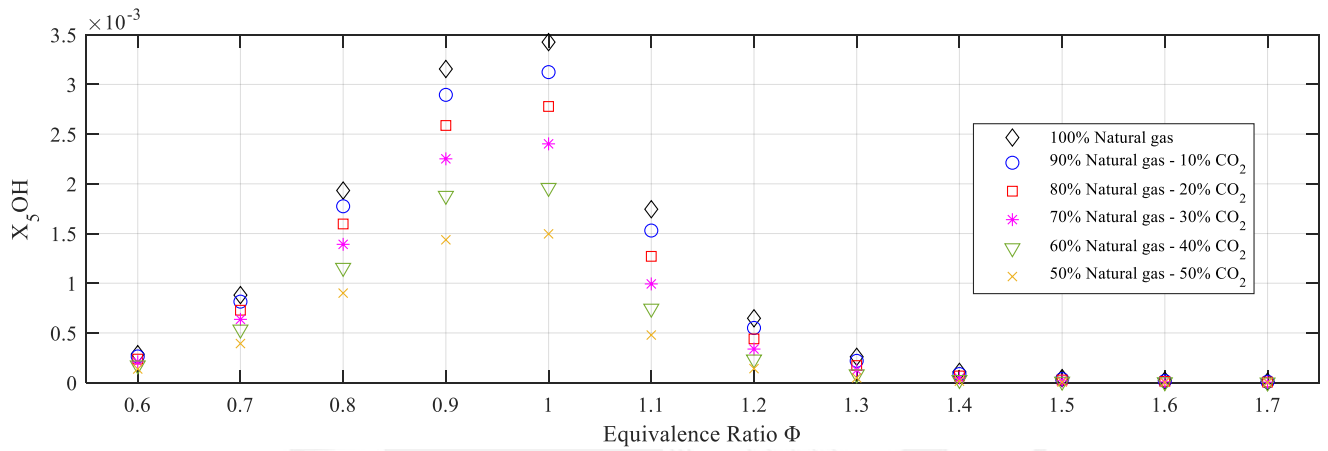


(c)

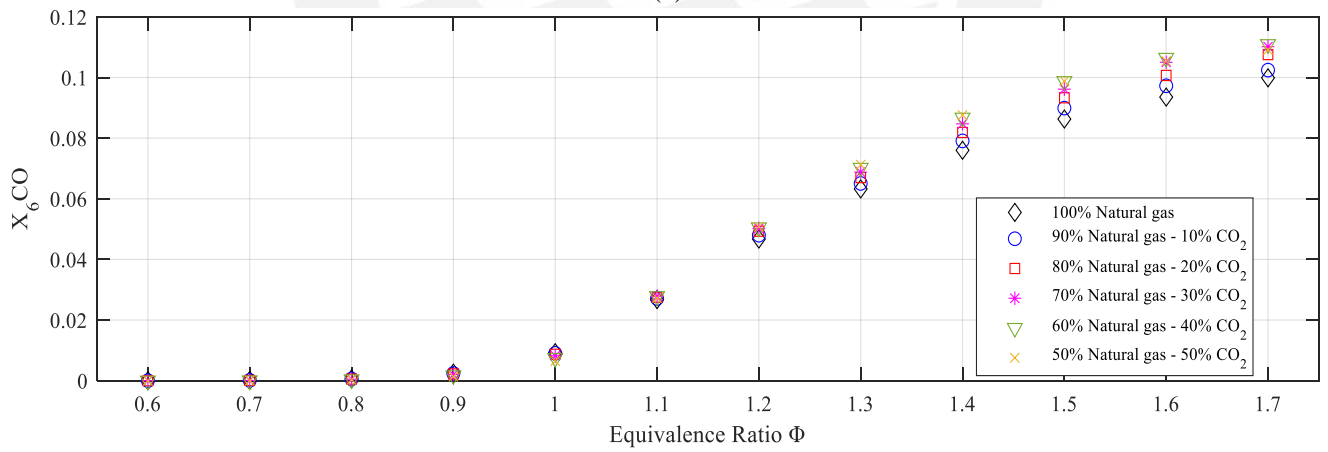
Figura 11. Productos de combustión ($X_1 - X_3$) determinados por el mecanismo San Diego para mezclas de gas natural con 0%, 10%, 20%, 30%, 40% y 50% de CO_2 .



(a)

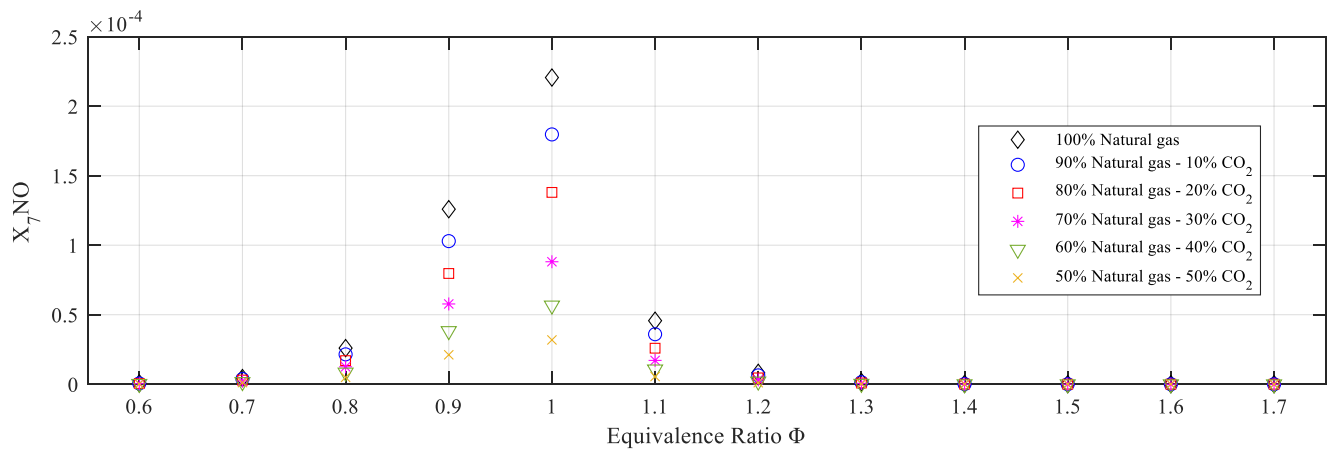


(b)

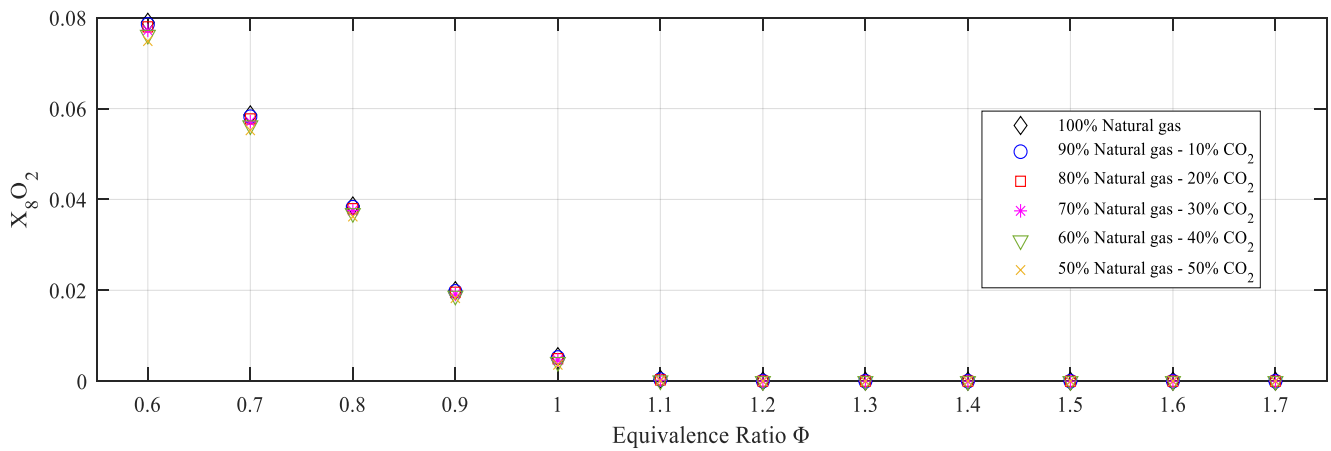


(c)

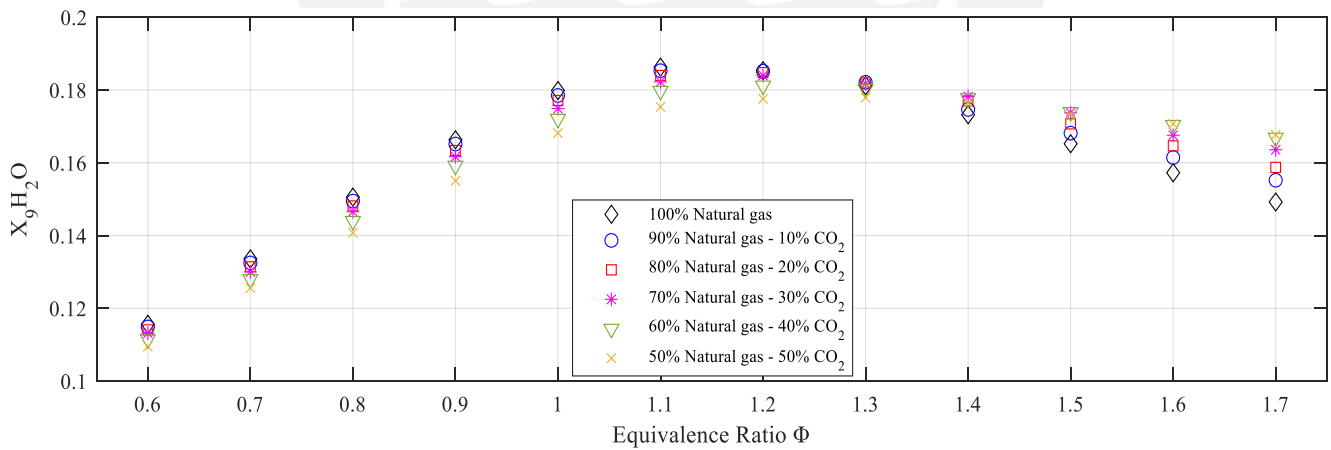
Figura I2. Productos de combustión ($X_4 - X_6$) determinados por el mecanismo San Diego para mezclas de gas natural con 0%, 10%, 20%, 30%, 40% y 50% de CO_2 .



(a)

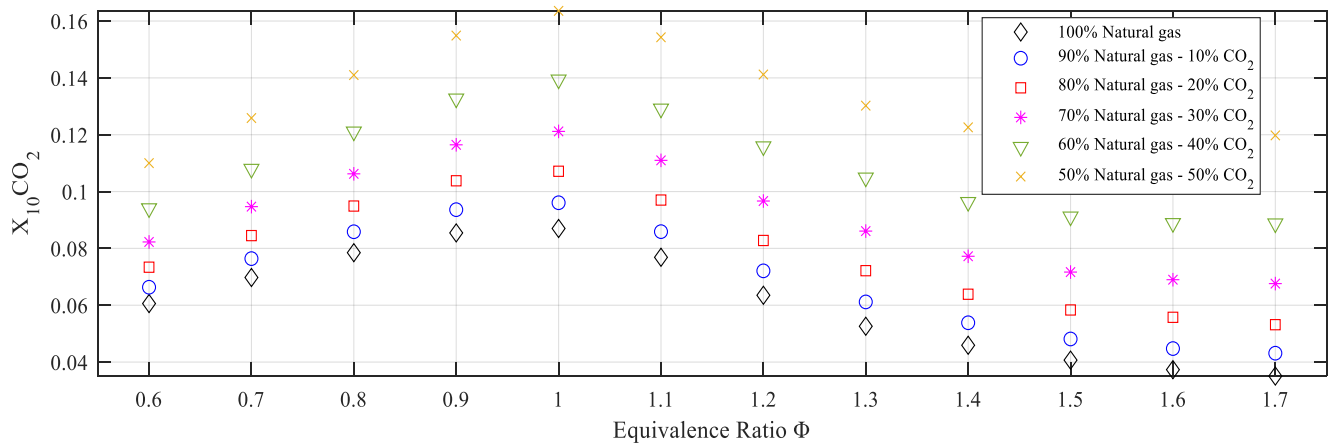


(b)

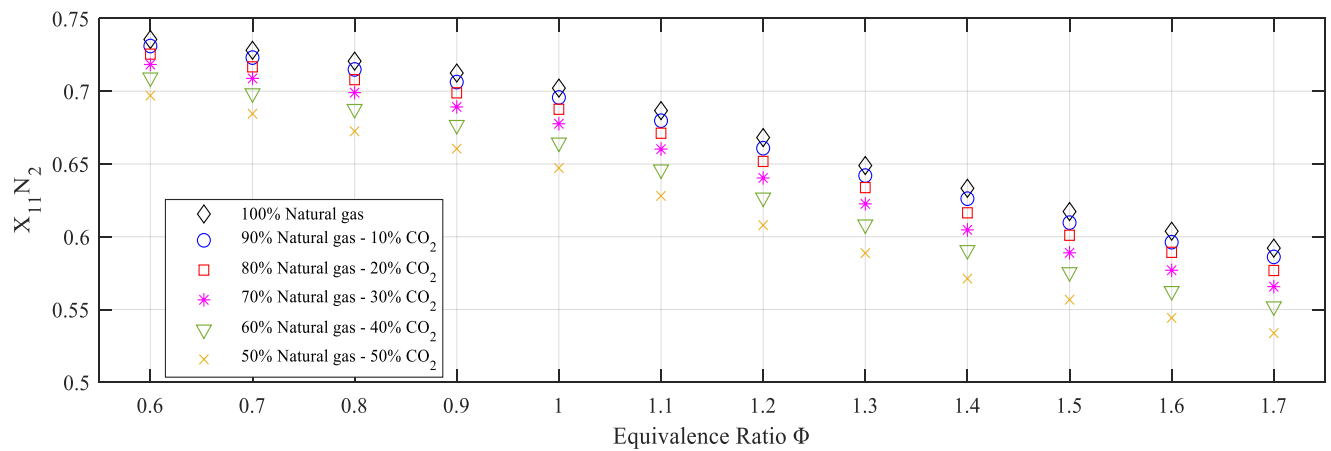


(c)

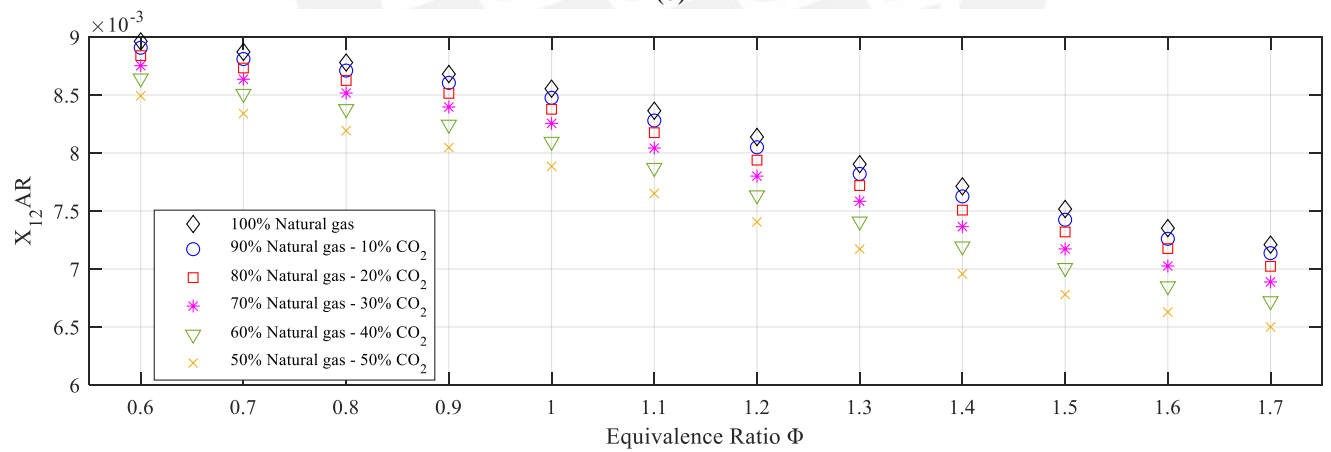
Figura I3. Productos de combustión ($X_7 - X_9$) determinados por el mecanismo San Diego para mezclas de gas natural con 0%, 10%, 20%, 30%, 40% y 50% de CO_2 .



(a)



(b)



(c)

Figura I4. Productos de combustión ($X_{10} - X_{12}$) determinados por el mecanismo San Diego para mezclas de gas natural con 0%, 10%, 20%, 30%, 40% y 50% de CO_2 .

ANEXO J. Productos de combustión (fracciones molares) obtenidos mediante simulación en Ansys Chemkin usando el mecanismo Gri-Mech 3.0

En las tablas J1 y J2 se presentan los resultados de X₁H (hidrógeno) y X₂O (oxígeno) a distintos valores de %CO₂ empleando el mecanismo Gri-Mech 3.0.

Tabla J1: Fracciones molares de X₁H (hidrógeno) empleando el mecanismo Gri-Mech 3.0.

Ratio (ϕ)	X ₁ H					
	% CO ₂					
	0%	10%	20%	30%	40%	50%
0.6	2.71 x 10 ⁻⁰⁷	2.27 x 10 ⁻⁰⁷	1.83 x 10 ⁻⁰⁷	1.38 x 10 ⁻⁰⁷	9.61 x 10 ⁻⁰⁸	5.82 x 10 ⁻⁰⁸
0.7	3.53 x 10 ⁻⁰⁶	2.93 x 10 ⁻⁰⁶	2.31 x 10 ⁻⁰⁶	1.73 x 10 ⁻⁰⁶	1.19 x 10 ⁻⁰⁶	6.84 x 10 ⁻⁰⁷
0.8	2.62 x 10 ⁻⁰⁵	2.17 x 10 ⁻⁰⁵	1.73 x 10 ⁻⁰⁵	1.28 x 10 ⁻⁰⁵	8.61 x 10 ⁻⁰⁶	4.95 x 10 ⁻⁰⁶
0.9	1.28 x 10 ⁻⁰⁴	1.07 x 10 ⁻⁰⁴	8.51 x 10 ⁻⁰⁵	6.44 x 10 ⁻⁰⁵	4.39 x 10 ⁻⁰⁵	2.64 x 10 ⁻⁰⁵
1	4.35 x 10 ⁻⁰⁴	3.69 x 10 ⁻⁰⁴	3.06 x 10 ⁻⁰⁴	2.43 x 10 ⁻⁰⁴	1.82 x 10 ⁻⁰⁴	1.23 x 10 ⁻⁰⁴
1.1	8.08 x 10 ⁻⁰⁴	6.94 x 10 ⁻⁰⁴	5.79 x 10 ⁻⁰⁴	4.64 x 10 ⁻⁰⁴	3.52 x 10 ⁻⁰⁴	2.46 x 10 ⁻⁰⁴
1.2	8.47 x 10 ⁻⁰⁴	6.72 x 10 ⁻⁰⁴	5.78 x 10 ⁻⁰⁴	4.48 x 10 ⁻⁰⁴	3.30 x 10 ⁻⁰⁴	2.18 x 10 ⁻⁰⁴
1.3	6.72 x 10 ⁻⁰⁴	5.55 x 10 ⁻⁰⁴	4.46 x 10 ⁻⁰⁴	3.34 x 10 ⁻⁰⁴	2.38 x 10 ⁻⁰⁴	1.52 x 10 ⁻⁰⁴
1.4	4.25 x 10 ⁻⁰⁴	3.22 x 10 ⁻⁰⁴	2.36 x 10 ⁻⁰⁴	1.45 x 10 ⁻⁰⁴	8.00 x 10 ⁻⁰⁵	4.05 x 10 ⁻⁰⁵
1.5	2.38 x 10 ⁻⁰⁴	1.80 x 10 ⁻⁰⁴	1.30 x 10 ⁻⁰⁴	8.64 x 10 ⁻⁰⁵	5.01 x 10 ⁻⁰⁵	2.47 x 10 ⁻⁰⁵
1.6	1.64 x 10 ⁻⁰⁴	1.23 x 10 ⁻⁰⁴	8.75 x 10 ⁻⁰⁵	5.51 x 10 ⁻⁰⁵	3.14 x 10 ⁻⁰⁵	1.50 x 10 ⁻⁰⁵
1.7	1.11 x 10 ⁻⁰⁴	8.16 x 10 ⁻⁰⁵	5.52 x 10 ⁻⁰⁵	3.48 x 10 ⁻⁰⁵	1.92 x 10 ⁻⁰⁵	8.89 x 10 ⁻⁰⁶

Tabla J2: Fracciones molares de X₂O (oxígeno) empleando el mecanismo Gri-Mech 3.0.

Ratio (ϕ)	X ₂ O					
	% CO ₂					
	0%	10%	20%	30%	40%	50%
0.6	9.06 x 10 ⁻⁰⁶	7.96 x 10 ⁻⁰⁶	6.79 x 10 ⁻⁰⁶	5.53 x 10 ⁻⁰⁶	4.23 x 10 ⁻⁰⁶	2.92 x 10 ⁻⁰⁶
0.7	4.52 x 10 ⁻⁰⁵	3.94 x 10 ⁻⁰⁵	3.31 x 10 ⁻⁰⁵	2.67 x 10 ⁻⁰⁵	2.03 x 10 ⁻⁰⁵	1.35 x 10 ⁻⁰⁵
0.8	1.39 x 10 ⁻⁰⁴	1.21 x 10 ⁻⁰⁴	1.02 x 10 ⁻⁰⁴	8.21 x 10 ⁻⁰⁵	6.14 x 10 ⁻⁰⁵	4.08 x 10 ⁻⁰⁵
0.9	2.69 x 10 ⁻⁰⁴	2.35 x 10 ⁻⁰⁴	1.99 x 10 ⁻⁰⁴	1.61 x 10 ⁻⁰⁴	1.21 x 10 ⁻⁰⁴	8.28 x 10 ⁻⁰⁵
1	2.63 x 10 ⁻⁰⁴	2.29 x 10 ⁻⁰⁴	1.95 x 10 ⁻⁰⁴	1.58 x 10 ⁻⁰⁴	1.22 x 10 ⁻⁰⁴	8.66 x 10 ⁻⁰⁵
1.1	7.99 x 10 ⁻⁰⁵	6.69 x 10 ⁻⁰⁵	5.42 x 10 ⁻⁰⁵	4.06 x 10 ⁻⁰⁵	2.79 x 10 ⁻⁰⁵	1.74 x 10 ⁻⁰⁵
1.2	1.66 x 10 ⁻⁰⁵	1.19 x 10 ⁻⁰⁵	1.00 x 10 ⁻⁰⁵	6.98 x 10 ⁻⁰⁶	4.54 x 10 ⁻⁰⁶	2.46 x 10 ⁻⁰⁶
1.3	3.22 x 10 ⁻⁰⁶	2.47 x 10 ⁻⁰⁶	1.89 x 10 ⁻⁰⁶	1.26 x 10 ⁻⁰⁶	7.67 x 10 ⁻⁰⁷	3.77 x 10 ⁻⁰⁷
1.4	5.59 x 10 ⁻⁰⁷	3.62 x 10 ⁻⁰⁷	2.23 x 10 ⁻⁰⁷	9.82 x 10 ⁻⁰⁸	3.50 x 10 ⁻⁰⁸	1.08 x 10 ⁻⁰⁸
1.5	8.67 x 10 ⁻⁰⁸	5.66 x 10 ⁻⁰⁸	3.36 x 10 ⁻⁰⁸	1.70 x 10 ⁻⁰⁸	6.83 x 10 ⁻⁰⁹	1.95 x 10 ⁻⁰⁹
1.6	2.37 x 10 ⁻⁰⁸	1.48 x 10 ⁻⁰⁸	8.49 x 10 ⁻⁰⁹	3.92 x 10 ⁻⁰⁹	1.48 x 10 ⁻⁰⁹	3.98 x 10 ⁻¹⁰
1.7	6.72 x 10 ⁻⁰⁹	4.10 x 10 ⁻⁰⁹	2.11 x 10 ⁻⁰⁹	9.66 x 10 ⁻¹⁰	3.50 x 10 ⁻¹⁰	1.22 x 10 ⁻¹⁰

En las tablas J3 y J4 se presentan los resultados de X₃N (nitrógeno) y X₄H₂ (hidrógeno) a distintos valores de %CO₂ empleando el mecanismo Gri-Mech 3.0.

Tabla J3: Fracciones molares de X₃N (nitrógeno) empleando el mecanismo Gri-Mech 3.0.

Ratio (ϕ)	X ₃ N					
	% CO ₂					
	0%	10%	20%	30%	40%	50%
0.6	5.35 x 10 ⁻¹³	4.08 x 10 ⁻¹³	2.92 x 10 ⁻¹³	1.91 x 10 ⁻¹³	1.09 x 10 ⁻¹³	5.03 x 10 ⁻¹⁴
0.7	2.15 x 10 ⁻¹¹	1.62 x 10 ⁻¹¹	1.14 x 10 ⁻¹¹	7.35 x 10 ⁻¹²	4.13 x 10 ⁻¹²	1.79 x 10 ⁻¹²
0.8	3.41 x 10 ⁻¹⁰	2.58 x 10 ⁻¹⁰	1.83 x 10 ⁻¹⁰	1.17 x 10 ⁻¹⁰	6.49 x 10 ⁻¹¹	2.82 x 10 ⁻¹¹
0.9	2.41 x 10 ⁻⁰⁹	1.85 x 10 ⁻⁰⁹	1.33 x 10 ⁻⁰⁹	8.85 x 10 ⁻¹⁰	5.01 x 10 ⁻¹⁰	2.26 x 10 ⁻¹⁰
1	6.76 x 10 ⁻⁰⁹	5.17 x 10 ⁻⁰⁹	3.77 x 10 ⁻⁰⁹	2.52 x 10 ⁻⁰⁹	1.48 x 10 ⁻⁰⁹	7.03 x 10 ⁻¹⁰
1.1	4.82 x 10 ⁻⁰⁹	3.54 x 10 ⁻⁰⁹	2.45 x 10 ⁻⁰⁹	1.53 x 10 ⁻⁰⁹	8.27 x 10 ⁻¹⁰	3.71 x 10 ⁻¹⁰
1.2	3.56 x 10 ⁻⁰⁹	2.59 x 10 ⁻⁰⁹	1.88 x 10 ⁻⁰⁹	1.24 x 10 ⁻⁰⁹	7.40 x 10 ⁻¹⁰	3.80 x 10 ⁻¹⁰
1.3	4.71 x 10 ⁻⁰⁹	3.55 x 10 ⁻⁰⁹	2.51 x 10 ⁻⁰⁹	1.64 x 10 ⁻⁰⁹	9.67 x 10 ⁻¹⁰	4.80 x 10 ⁻¹⁰
1.4	4.62 x 10 ⁻⁰⁹	3.09 x 10 ⁻⁰⁹	1.92 x 10 ⁻⁰⁹	9.16 x 10 ⁻¹⁰	3.06 x 10 ⁻¹⁰	6.69 x 10 ⁻¹¹
1.5	1.73 x 10 ⁻⁰⁹	9.42 x 10 ⁻¹⁰	4.42 x 10 ⁻¹⁰	1.64 x 10 ⁻¹⁰	4.49 x 10 ⁻¹¹	7.72 x 10 ⁻¹²
1.6	4.81 x 10 ⁻¹⁰	2.42 x 10 ⁻¹⁰	1.08 x 10 ⁻¹⁰	3.53 x 10 ⁻¹¹	9.24 x 10 ⁻¹²	1.56 x 10 ⁻¹²
1.7	1.28 x 10 ⁻¹⁰	6.52 x 10 ⁻¹¹	2.53 x 10 ⁻¹¹	8.90 x 10 ⁻¹²	2.30 x 10 ⁻¹²	3.71 x 10 ⁻¹³

Tabla J4: Fracciones molares de X₄H₂ (hidrógeno) empleando el mecanismo Gri-Mech 3.0.

Ratio (ϕ)	X ₄ H ₂					
	% CO ₂					
	0%	10%	20%	30%	40%	50%
0.6	6.00 x 10 ⁻⁰⁶	5.28 x 10 ⁻⁰⁶	4.52 x 10 ⁻⁰⁶	3.69 x 10 ⁻⁰⁶	2.84 x 10 ⁻⁰⁶	1.97 x 10 ⁻⁰⁶
0.7	4.54 x 10 ⁻⁰⁵	3.96 x 10 ⁻⁰⁵	3.33 x 10 ⁻⁰⁵	2.70 x 10 ⁻⁰⁵	2.06 x 10 ⁻⁰⁵	1.38 x 10 ⁻⁰⁵
0.8	2.34 x 10 ⁻⁰⁴	2.04 x 10 ⁻⁰⁴	1.73 x 10 ⁻⁰⁴	1.39 x 10 ⁻⁰⁴	1.04 x 10 ⁻⁰⁴	6.96 x 10 ⁻⁰⁵
0.9	9.53 x 10 ⁻⁰⁴	8.36 x 10 ⁻⁰⁴	7.11 x 10 ⁻⁰⁴	5.82 x 10 ⁻⁰⁴	4.41 x 10 ⁻⁰⁴	3.04 x 10 ⁻⁰⁴
1	3.62 x 10 ⁻⁰³	3.23 x 10 ⁻⁰³	2.85 x 10 ⁻⁰³	2.44 x 10 ⁻⁰³	2.00 x 10 ⁻⁰³	1.53 x 10 ⁻⁰³
1.1	1.23 x 10 ⁻⁰²	1.13 x 10 ⁻⁰²	1.02 x 10 ⁻⁰²	9.19 x 10 ⁻⁰³	8.08 x 10 ⁻⁰³	6.72 x 10 ⁻⁰³
1.2	2.68 x 10 ⁻⁰²	2.47 x 10 ⁻⁰²	2.25 x 10 ⁻⁰²	2.02 x 10 ⁻⁰²	1.77 x 10 ⁻⁰²	1.48 x 10 ⁻⁰²
1.3	4.49 x 10 ⁻⁰²	4.16 x 10 ⁻⁰²	3.73 x 10 ⁻⁰²	3.30 x 10 ⁻⁰²	2.87 x 10 ⁻⁰²	2.45 x 10 ⁻⁰²
1.4	6.31 x 10 ⁻⁰²	5.83 x 10 ⁻⁰²	5.31 x 10 ⁻⁰²	4.74 x 10 ⁻⁰²	4.15 x 10 ⁻⁰²	3.46 x 10 ⁻⁰²
1.5	8.11 x 10 ⁻⁰²	7.41 x 10 ⁻⁰²	6.66 x 10 ⁻⁰²	5.91 x 10 ⁻⁰²	5.09 x 10 ⁻⁰²	4.17 x 10 ⁻⁰²
1.6	9.29 x 10 ⁻⁰²	8.48 x 10 ⁻⁰²	7.61 x 10 ⁻⁰²	6.74 x 10 ⁻⁰²	5.70 x 10 ⁻⁰²	4.66 x 10 ⁻⁰²
1.7	1.01 x 10 ⁻⁰¹	9.16 x 10 ⁻⁰²	8.35 x 10 ⁻⁰²	7.26 x 10 ⁻⁰²	6.14 x 10 ⁻⁰²	5.04 x 10 ⁻⁰²

En las tablas J5 y J6 se presentan los resultados de X₅OH (hidróxido) y X₆CO (monóxido de carbono) a distintos valores de %CO₂ empleando el mecanismo Gri-Mech 3.0.

Tabla J5: Fracciones molares de X₅OH (hidróxido) empleando el mecanismo Gri-Mech 3.0.

Ratio (ϕ)	X ₅ OH					
	% CO ₂					
	0%	10%	20%	30%	40%	50%
0.6	2.49 x 10 ⁻⁰⁴	2.28 x 10 ⁻⁰⁴	2.05 x 10 ⁻⁰⁴	1.79 x 10 ⁻⁰⁴	1.50 x 10 ⁻⁰⁴	1.17 x 10 ⁻⁰⁴
0.7	7.61 x 10 ⁻⁰⁴	6.95 x 10 ⁻⁰⁴	6.20 x 10 ⁻⁰⁴	5.38 x 10 ⁻⁰⁴	4.48 x 10 ⁻⁰⁴	3.42 x 10 ⁻⁰⁴
0.8	1.71 x 10 ⁻⁰³	1.56 x 10 ⁻⁰³	1.39 x 10 ⁻⁰³	1.20 x 10 ⁻⁰³	9.91 x 10 ⁻⁰⁴	7.55 x 10 ⁻⁰⁴
0.9	2.85 x 10 ⁻⁰³	2.61 x 10 ⁻⁰³	2.34 x 10 ⁻⁰³	2.03 x 10 ⁻⁰³	1.68 x 10 ⁻⁰³	1.30 x 10 ⁻⁰³
1	3.17 x 10 ⁻⁰³	2.89 x 10 ⁻⁰³	2.60 x 10 ⁻⁰³	2.26 x 10 ⁻⁰³	1.90 x 10 ⁻⁰³	1.49 x 10 ⁻⁰³

1.1	1.75×10^{-03}	1.56×10^{-03}	1.36×10^{-03}	1.14×10^{-03}	8.93×10^{-04}	6.53×10^{-04}
1.2	7.43×10^{-04}	6.14×10^{-04}	5.45×10^{-04}	4.36×10^{-04}	3.32×10^{-04}	2.24×10^{-04}
1.3	2.99×10^{-04}	2.55×10^{-04}	2.16×10^{-04}	1.68×10^{-04}	1.24×10^{-04}	7.91×10^{-05}
1.4	1.13×10^{-04}	8.86×10^{-05}	6.73×10^{-05}	4.25×10^{-05}	2.38×10^{-05}	1.22×10^{-05}
1.5	4.11×10^{-05}	3.25×10^{-05}	2.45×10^{-05}	1.70×10^{-05}	1.01×10^{-05}	5.12×10^{-06}
1.6	2.11×10^{-05}	1.66×10^{-05}	1.24×10^{-05}	7.99×10^{-06}	4.81×10^{-06}	2.35×10^{-06}
1.7	1.14×10^{-05}	8.90×10^{-06}	6.08×10^{-06}	4.06×10^{-06}	2.35×10^{-06}	1.11×10^{-06}

Tabla J6: Fracciones molares de X₆CO (monóxido de carbono) empleando el mecanismo Gri-Mech 3.0.

Ratio (ϕ)	X ₆ CO					
	% CO ₂					
	0%	10%	20%	30%	40%	50%
0.6	1.03×10^{-05}	9.88×10^{-06}	9.28×10^{-06}	8.39×10^{-06}	7.24×10^{-06}	5.77×10^{-06}
0.7	9.49×10^{-05}	9.01×10^{-05}	8.27×10^{-05}	7.43×10^{-05}	6.40×10^{-05}	4.85×10^{-05}
0.8	5.61×10^{-04}	5.32×10^{-04}	4.94×10^{-04}	4.40×10^{-04}	3.71×10^{-04}	2.83×10^{-04}
0.9	2.49×10^{-03}	2.38×10^{-03}	2.23×10^{-03}	2.03×10^{-03}	1.73×10^{-03}	1.37×10^{-03}
1	9.44×10^{-03}	9.25×10^{-03}	9.02×10^{-03}	8.65×10^{-03}	8.05×10^{-03}	7.11×10^{-03}
1.1	2.70×10^{-02}	2.74×10^{-02}	2.77×10^{-02}	2.81×10^{-02}	2.82×10^{-02}	2.74×10^{-02}
1.2	4.67×10^{-02}	4.79×10^{-02}	4.92×10^{-02}	5.03×10^{-02}	5.09×10^{-02}	5.07×10^{-02}
1.3	6.31×10^{-02}	6.54×10^{-02}	6.71×10^{-02}	6.89×10^{-02}	7.02×10^{-02}	7.10×10^{-02}
1.4	7.58×10^{-02}	7.89×10^{-02}	8.19×10^{-02}	8.46×10^{-02}	8.68×10^{-02}	8.73×10^{-02}
1.5	8.51×10^{-02}	8.83×10^{-02}	9.13×10^{-02}	9.38×10^{-02}	9.65×10^{-02}	9.59×10^{-02}
1.6	8.86×10^{-02}	9.18×10^{-02}	9.48×10^{-02}	9.93×10^{-02}	1.00×10^{-01}	9.95×10^{-02}
1.7	8.83×10^{-02}	9.18×10^{-02}	9.76×10^{-02}	1.00×10^{-01}	1.02×10^{-01}	1.01×10^{-01}

En las tablas J7 y J8 presentan los valores de X₇NO (óxido de nitrógeno) y X₈O₂ (oxígeno) a distintos valores de %CO₂ empleando el mecanismo Gri-Mech 3.0.

Tabla J7: Fracciones molares de X₇NO (óxido de nitrógeno) empleando el mecanismo Gri-Mech 3.0.

Ratio (ϕ)	X ₇ NO					
	% CO ₂					
	0%	10%	20%	30%	40%	50%
0.6	2.07×10^{-06}	1.91×10^{-06}	1.73×10^{-06}	1.54×10^{-06}	1.31×10^{-06}	1.07×10^{-06}
0.7	7.43×10^{-06}	6.65×10^{-06}	5.83×10^{-06}	4.97×10^{-06}	4.07×10^{-06}	3.13×10^{-06}
0.8	2.79×10^{-05}	2.39×10^{-05}	2.00×10^{-05}	1.60×10^{-05}	1.22×10^{-05}	8.59×10^{-06}
0.9	8.63×10^{-05}	7.26×10^{-05}	5.91×10^{-05}	4.60×10^{-05}	3.33×10^{-05}	2.19×10^{-05}
1	1.39×10^{-04}	1.17×10^{-04}	9.55×10^{-05}	7.48×10^{-05}	5.49×10^{-05}	3.67×10^{-05}
1.1	8.89×10^{-05}	7.67×10^{-05}	6.47×10^{-05}	5.24×10^{-05}	4.05×10^{-05}	2.97×10^{-05}
1.2	6.91×10^{-05}	6.22×10^{-05}	5.45×10^{-05}	4.68×10^{-05}	3.86×10^{-05}	3.04×10^{-05}
1.3	8.00×10^{-05}	7.22×10^{-05}	6.35×10^{-05}	5.43×10^{-05}	4.43×10^{-05}	3.34×10^{-05}
1.4	7.31×10^{-05}	6.16×10^{-05}	4.88×10^{-05}	3.25×10^{-05}	1.61×10^{-05}	5.90×10^{-06}
1.5	1.77×10^{-05}	1.19×10^{-05}	7.20×10^{-06}	3.65×10^{-06}	1.79×10^{-06}	5.16×10^{-07}
1.6	3.73×10^{-06}	2.28×10^{-06}	1.28×10^{-06}	7.01×10^{-07}	2.61×10^{-07}	7.68×10^{-08}
1.7	8.04×10^{-07}	4.86×10^{-07}	2.91×10^{-07}	1.34×10^{-07}	5.34×10^{-08}	1.82×10^{-08}

Tabla J8: Fracciones molares de X₈O₂ (oxígeno) empleando el mecanismo Gri-Mech 3.0.

Ratio (ϕ)	X ₈ O ₂					
	% CO ₂					
	0%	10%	20%	30%	40%	50%
0.6	7.91 x 10 ⁻⁰²	7.86 x 10 ⁻⁰²	7.80 x 10 ⁻⁰²	7.73 x 10 ⁻⁰²	7.63 x 10 ⁻⁰²	7.50 x 10 ⁻⁰²
0.7	5.86 x 10 ⁻⁰²	5.83 x 10 ⁻⁰²	5.78 x 10 ⁻⁰²	5.72 x 10 ⁻⁰²	5.64 x 10 ⁻⁰²	5.53 x 10 ⁻⁰²
0.8	3.87 x 10 ⁻⁰²	3.84 x 10 ⁻⁰²	3.80 x 10 ⁻⁰²	3.76 x 10 ⁻⁰²	3.71 x 10 ⁻⁰²	3.63 x 10 ⁻⁰²
0.9	2.00 x 10 ⁻⁰²	1.98 x 10 ⁻⁰²	1.96 x 10 ⁻⁰²	1.92 x 10 ⁻⁰²	1.88 x 10 ⁻⁰²	1.84 x 10 ⁻⁰²
1	5.51 x 10 ⁻⁰³	5.35 x 10 ⁻⁰³	5.13 x 10 ⁻⁰³	4.84 x 10 ⁻⁰³	4.53 x 10 ⁻⁰³	4.14 x 10 ⁻⁰³
1.1	5.16 x 10 ⁻⁰⁴	4.69 x 10 ⁻⁰⁴	4.19 x 10 ⁻⁰⁴	3.49 x 10 ⁻⁰⁴	2.72 x 10 ⁻⁰⁴	2.02 x 10 ⁻⁰⁴
1.2	4.95 x 10 ⁻⁰⁵	3.84 x 10 ⁻⁰⁵	3.61 x 10 ⁻⁰⁵	2.81 x 10 ⁻⁰⁵	2.11 x 10 ⁻⁰⁵	1.36 x 10 ⁻⁰⁵
1.3	5.65 x 10 ⁻⁰⁶	4.74 x 10 ⁻⁰⁶	4.10 x 10 ⁻⁰⁶	3.11 x 10 ⁻⁰⁶	2.21 x 10 ⁻⁰⁶	1.30 x 10 ⁻⁰⁶
1.4	6.71 x 10 ⁻⁰⁷	4.77 x 10 ⁻⁰⁷	3.28 x 10 ⁻⁰⁷	1.63 x 10 ⁻⁰⁷	6.69 x 10 ⁻⁰⁸	3.10 x 10 ⁻⁰⁸
1.5	7.73 x 10 ⁻⁰⁸	5.64 x 10 ⁻⁰⁸	3.81 x 10 ⁻⁰⁸	2.23 x 10 ⁻⁰⁸	1.05 x 10 ⁻⁰⁸	8.16 x 10 ⁻⁰⁹
1.6	1.81 x 10 ⁻⁰⁸	1.28 x 10 ⁻⁰⁸	8.53 x 10 ⁻⁰⁹	4.47 x 10 ⁻⁰⁹	4.08 x 10 ⁻⁰⁹	7.91 x 10 ⁻⁰⁸
1.7	4.80 x 10 ⁻⁰⁹	4.76 x 10 ⁻⁰⁹	1.98 x 10 ⁻⁰⁹	2.65 x 10 ⁻⁰⁹	3.37 x 10 ⁻⁰⁸	1.36 x 10 ⁻⁰⁶

En las tablas J9 y J10 se presentan los resultados de X₉H₂O (óxido de hidrógeno) y X₁₀CO₂ (dióxido de carbono) a distintos valores de %CO₂ empleando el mecanismo Gri-Mech 3.0.

Tabla J9: Fracciones molares de X₉H₂O (óxido de hidrógeno) empleando el mecanismo Gri-Mech 3.0.

Ratio (ϕ)	X ₉ H ₂ O					
	% CO ₂					
	0%	10%	20%	30%	40%	50%
0.6	0.11586680	0.1151785	0.1143269	0.113299	0.111932	0.109904
0.7	0.13372070	0.1327844	0.1317051	0.130282	0.128342	0.125738
0.8	0.15080890	0.1497491	0.1483464	0.146686	0.144151	0.141028
0.9	0.16652970	0.1653911	0.1637460	0.161979	0.159401	0.155430
1	0.17977800	0.1785343	0.1771589	0.175015	0.172164	0.167883
1.1	0.18589020	0.1850284	0.1836759	0.182026	0.179440	0.174904
1.2	0.18504630	0.1852188	0.1845496	0.183586	0.181805	0.177445
1.3	0.18060100	0.1817107	0.1823280	0.181554	0.180744	0.177934
1.4	0.17338520	0.1752517	0.1771159	0.178145	0.178485	0.176494
1.5	0.16620040	0.1691804	0.1720264	0.174865	0.175161	0.174674
1.6	0.16163180	0.1658176	0.1700906	0.171493	0.173975	0.173892
1.7	0.16016950	0.1647445	0.1668168	0.170721	0.172863	0.172329

Tabla J10: Fracciones molares de X₁₀CO₂ (dióxido de carbono) empleando el mecanismo Gri-Mech 3.0.

Ratio (ϕ)	X ₁₀ CO ₂					
	% CO ₂					
	0%	10%	20%	30%	40%	50%
0.6	0.06041458	0.0661470	0.0732252	0.0821519	0.0938024	0.1096987
0.7	0.06975762	0.0763137	0.0843718	0.0945508	0.1078392	0.1257574
0.8	0.07842390	0.0858316	0.0949343	0.1062649	0.1210447	0.1409517
0.9	0.08546612	0.0936448	0.1037571	0.1163635	0.1327534	0.1546960
1	0.08690735	0.0959293	0.1068576	0.1207257	0.1386472	0.1628459

1.1	0.07674558	0.0856558	0.0967872	0.1106849	0.1288778	0.1541285
1.2	0.06351800	0.0720100	0.0829008	0.0967044	0.1152250	0.1412030
1.3	0.05295358	0.0609260	0.0717865	0.0860094	0.1046529	0.1304420
1.4	0.04609273	0.0537923	0.0638312	0.0774376	0.0957897	0.1227547
1.5	0.04097807	0.0487566	0.0590427	0.0726700	0.0920821	0.1202743
1.6	0.03847232	0.0461669	0.0565220	0.0707602	0.0911321	0.1204857
1.7	0.03687705	0.0449424	0.0555179	0.0705082	0.0917438	0.1224990

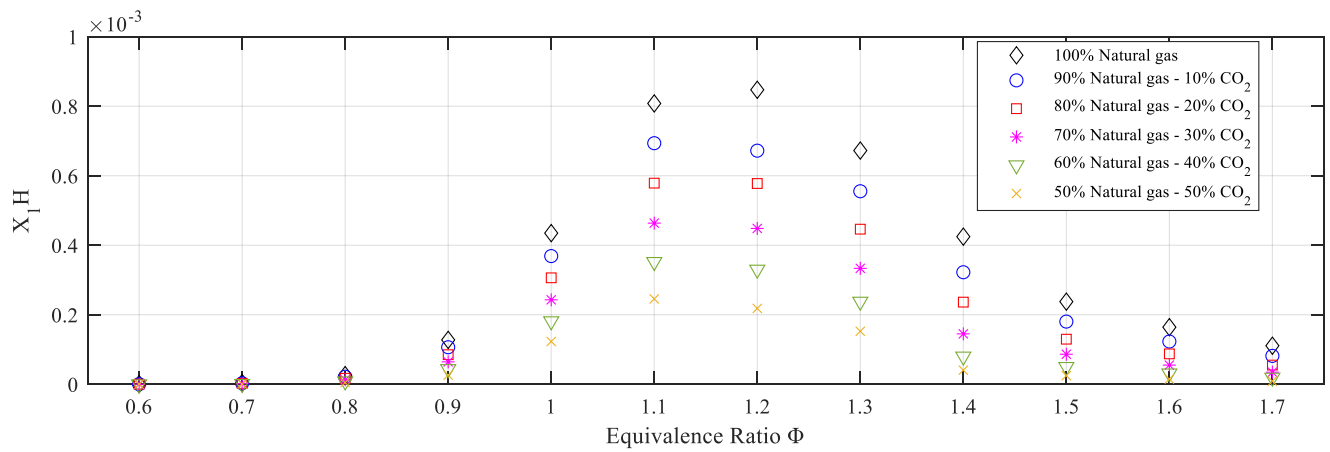
En las tablas J11 y J12 se presentan los resultados de $X_{11}N_2$ (nitrógeno) y $X_{12}AR$ (argón) a distintos valores de %CO₂ empleando el mecanismo Gri-Mech 3.0.

Tabla J11: Fracciones molares de $X_{11}N_2$ (nitrógeno) empleando el mecanismo Gri-Mech 3.0.

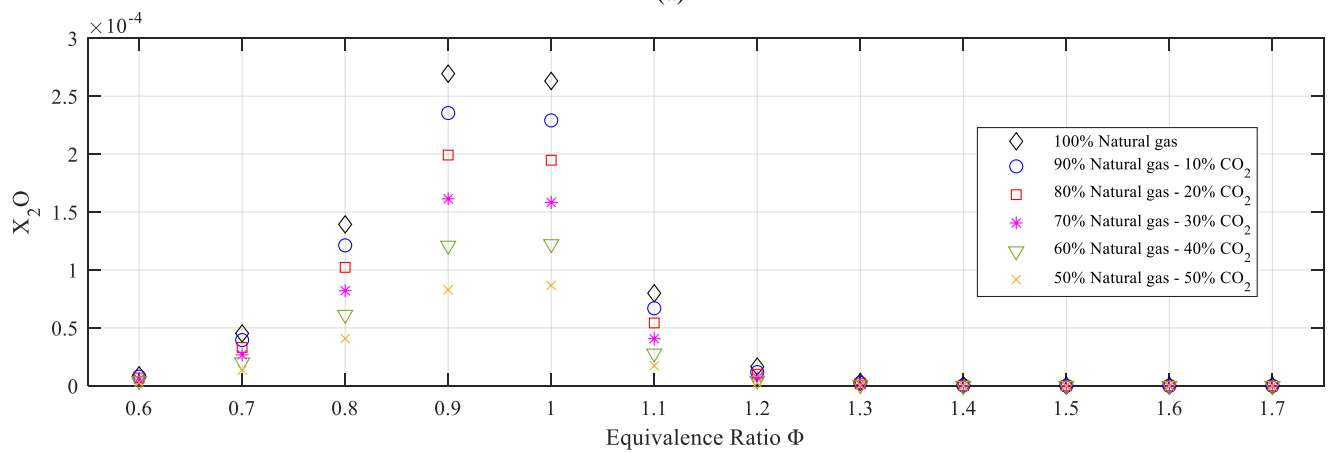
Ratio (ϕ)	$X_{11}N_2$					
	% CO ₂					
	0%	10%	20%	30%	40%	50%
0.6	0.735393	0.730894	0.725339	0.718298	0.709133	0.696783
0.7	0.728046	0.722935	0.716608	0.708651	0.698377	0.684453
0.8	0.720619	0.714865	0.707886	0.699007	0.687756	0.672330
0.9	0.712537	0.706288	0.698777	0.689110	0.676730	0.660307
1	0.702185	0.695624	0.687409	0.677333	0.664261	0.646869
1.1	0.686524	0.679453	0.670916	0.659965	0.645996	0.628009
1.2	0.668130	0.660655	0.651752	0.640431	0.626088	0.607906
1.3	0.649429	0.641679	0.633040	0.622450	0.607877	0.588720
1.4	0.633331	0.625683	0.616209	0.604857	0.589962	0.571391
1.5	0.617863	0.610800	0.602004	0.590294	0.576359	0.557725
1.6	0.606765	0.599334	0.590044	0.579115	0.564917	0.545975
1.7	0.597400	0.590191	0.580788	0.569601	0.555262	0.535806

Tabla J12: Fracciones molares de $X_{12}AR$ (argón) empleando el mecanismo Gri-Mech 3.0.

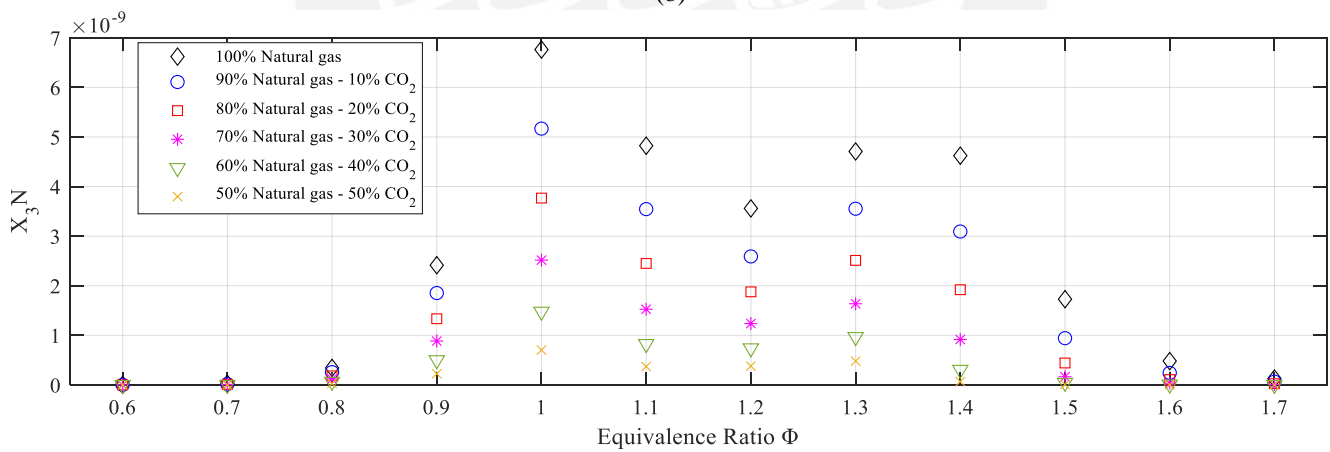
Ratio (ϕ)	$X_{12}AR$					
	% CO ₂					
	0%	10%	20%	30%	40%	50%
0.6	0.00896036	0.00890553	0.00883785	0.00875206	0.00864039	0.00848993
0.7	0.00887039	0.00880809	0.00873100	0.00863402	0.00850890	0.00833916
0.8	0.00877952	0.00870949	0.00862445	0.00851630	0.00837893	0.00819103
0.9	0.00868083	0.00860467	0.00851309	0.00839536	0.00824455	0.00804414
1	0.00855445	0.00847445	0.00837434	0.00825154	0.00809218	0.00788007
1.1	0.00836282	0.00827671	0.00817269	0.00803941	0.00786932	0.00764992
1.2	0.00813813	0.00804718	0.00793884	0.00780110	0.00762661	0.00740477
1.3	0.00790986	0.00781567	0.00771053	0.00758151	0.00740410	0.00717075
1.4	0.00771301	0.00762004	0.00750481	0.00736663	0.00718545	0.00695905
1.5	0.00752374	0.00743795	0.00733101	0.00718873	0.00701890	0.00679194
1.6	0.00738791	0.00729768	0.00718481	0.00705179	0.00687904	0.00664848
1.7	0.00727313	0.00718568	0.00707143	0.00693538	0.00676093	0.00652414



(a)

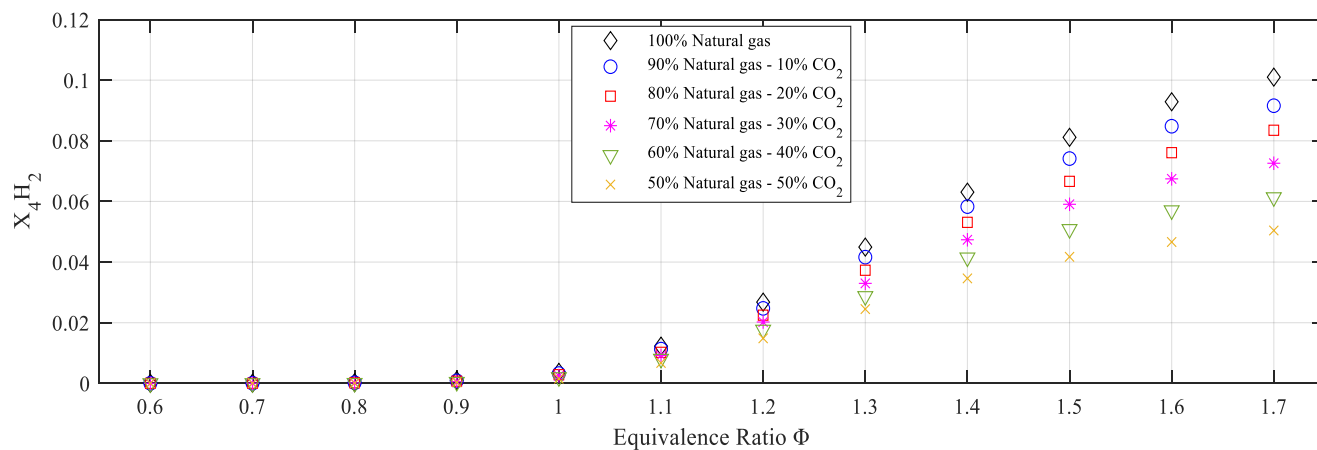


(b)

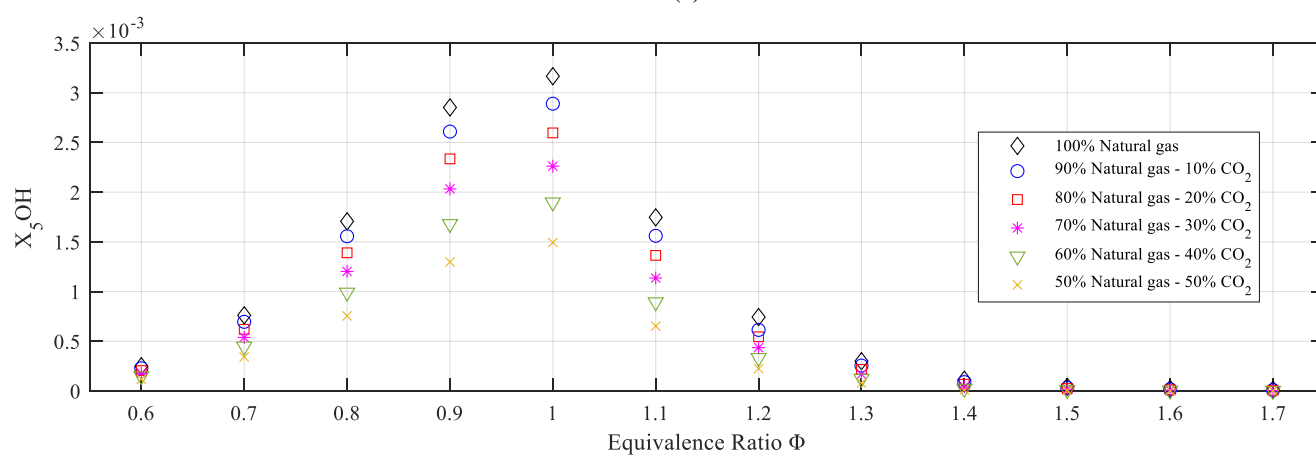


(c)

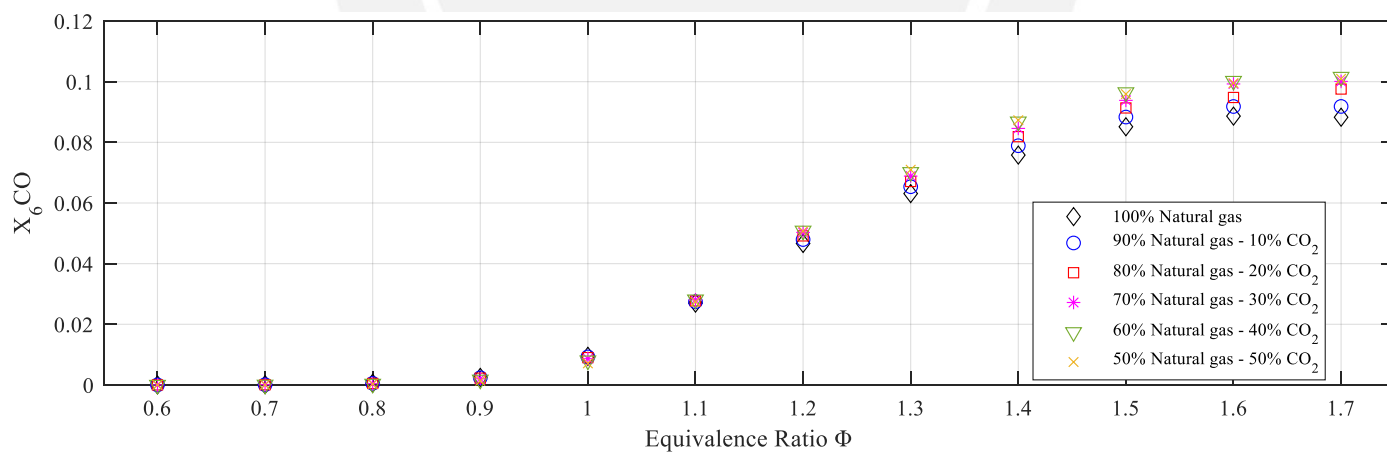
Figura J1. Productos de combustión ($X_1 - X_3$) determinados por el mecanismo Gri-Mech 3.0 para mezclas de gas natural con 0%, 10%, 20%, 30%, 40% y 50% de CO_2 .



(a)

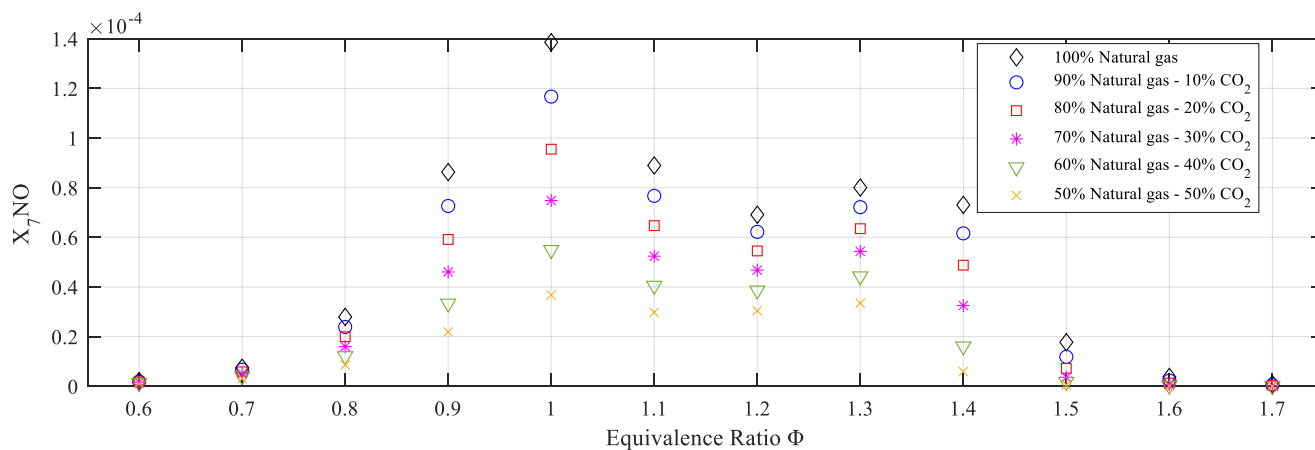


(b)

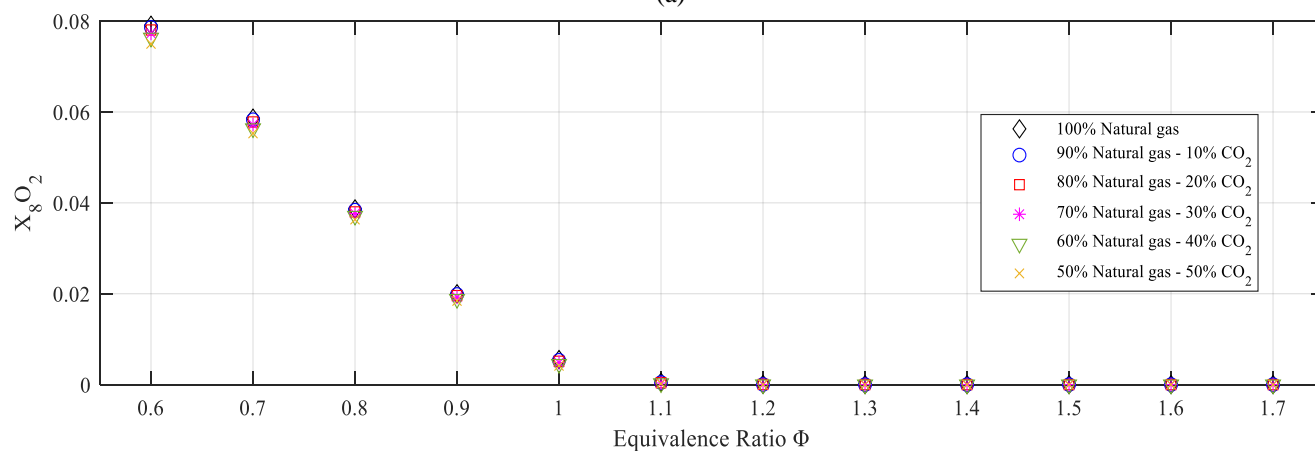


(c)

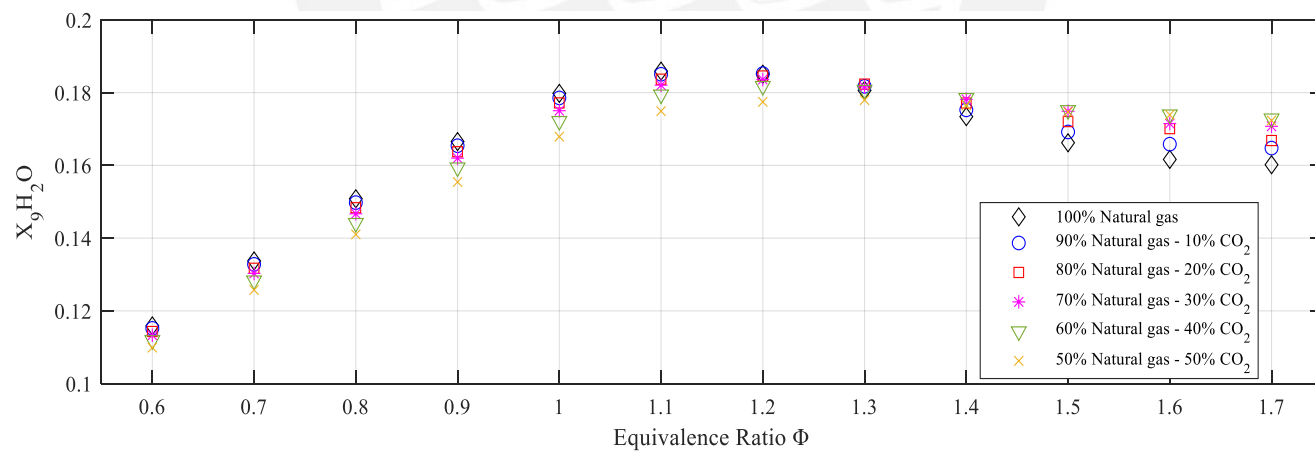
Figura J2. Productos de combustión ($X_4 - X_6$) determinados por el mecanismo Gri-Mech 3.0 para mezclas de gas natural con 0%, 10%, 20%, 30%, 40% y 50% de CO_2 .



(a)

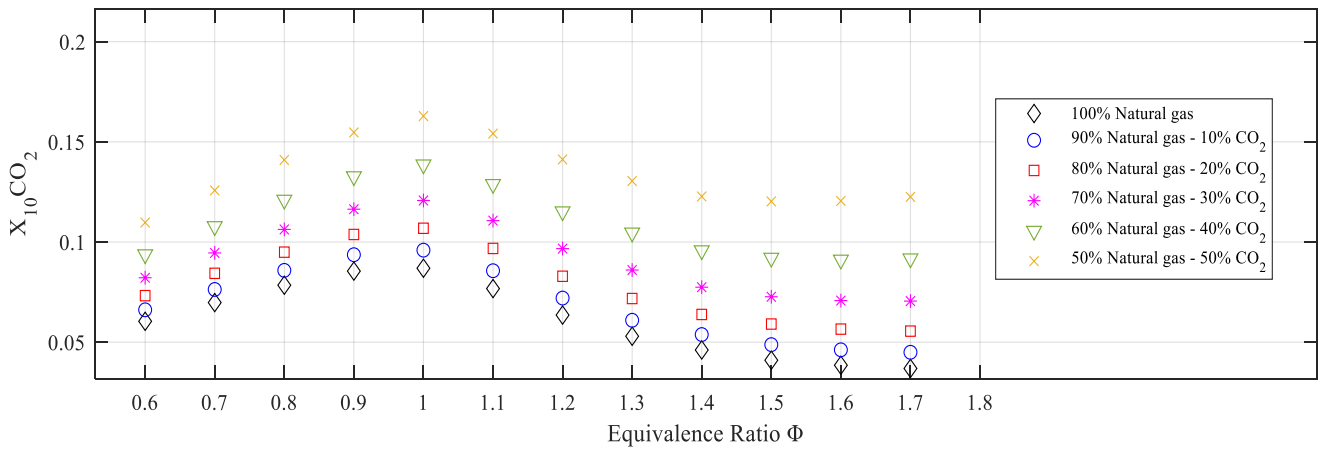


(b)

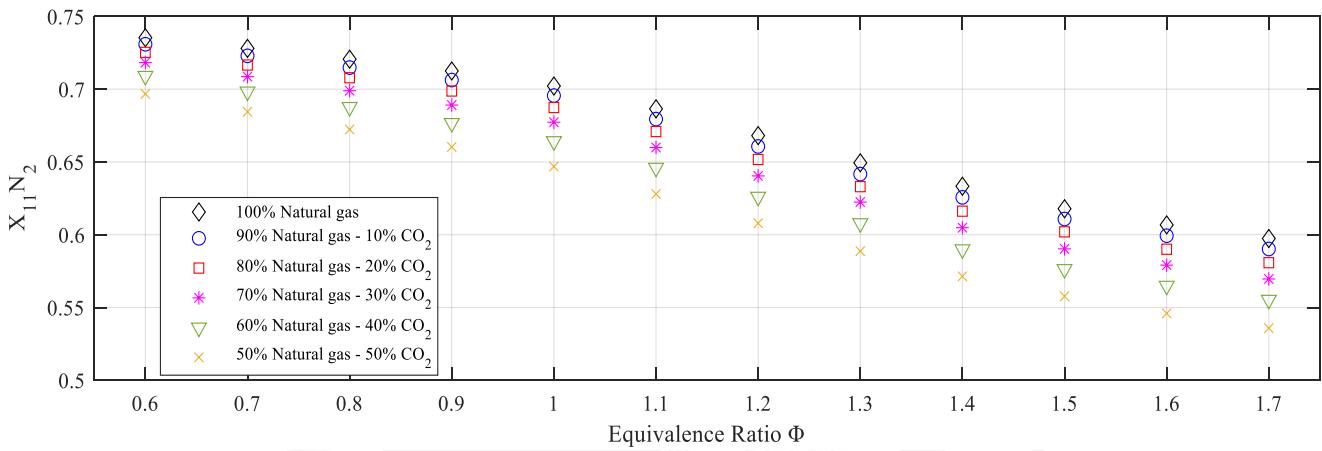


(c)

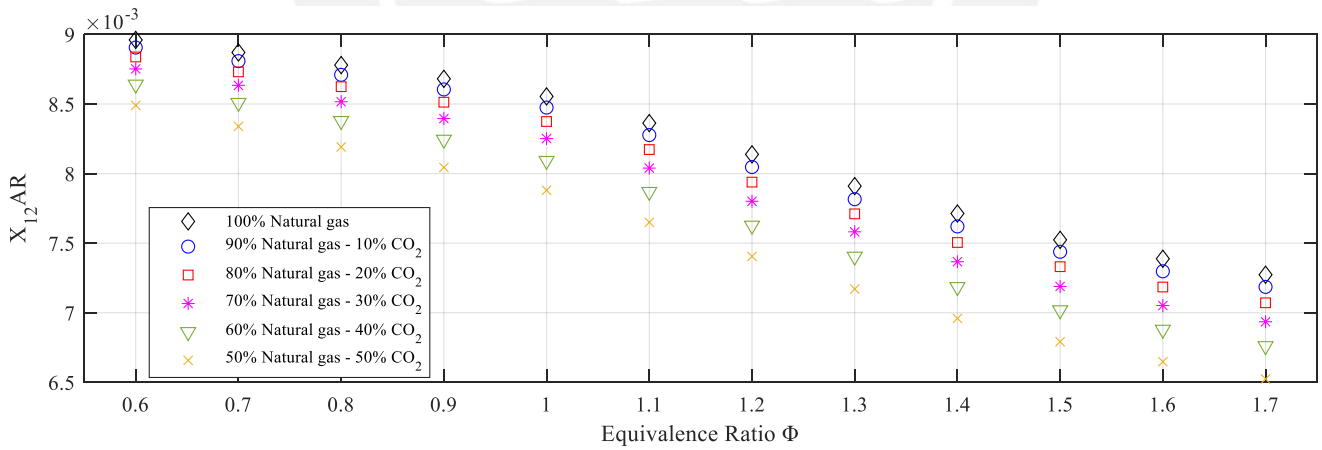
Figura J3. Productos de combustión ($X_7 - X_9$) determinados por el mecanismo Gri-Mech 3.0 para mezclas de gas natural con 0%, 10%, 20%, 30%, 40% y 50% de CO_2 .



(a)



(b)



(c)

Figura J4. Productos de combustión ($X_{10} - X_{12}$) determinados por el mecanismo Gri-Mech 3.0 para mezclas de gas natural con 0%, 10%, 20%, 30%, 40% y 50% de CO_2 .