

Combustión de mezclas NH₃/CH₄/H₂ a alta presión

Eva Casanova, Pedro García-Ruiz*, María U. Alzueta

Afiliación: Grupo de procesos termoquímicos (GPT)
Instituto de Investigación en Ingeniería de Aragón (I3A)
Universidad de Zaragoza, Mariano Esquillor s/n, 50018, Zaragoza, Spain.
*Tel. +876555451, e-mail: p.garcia@unizar.es

Resumen

Motivado por la preocupación por el medio ambiente y la búsqueda de combustibles alternativos, en el presente trabajo se han investigado la combustión de las mezclas de amoníaco con H₂ y CH₄ a alta presión. Los resultados experimentales han sido simulados con un mecanismo detallado de reacción.

Introducción

Actualmente, hay una creciente preocupación por el medio ambiente que impulsa la búsqueda de alternativas a los combustibles fósiles. En este sentido, el amoníaco tiene interés como combustible libre de carbono [1]. Sin embargo, la combustión del NH₃ puede implicar algunos problemas como son su dificultad de ignición, baja velocidad de combustión y posibles emisiones de NO. El uso de mezclas de amoníaco, con H₂ y/o CH₄ entre otros, puede ser una solución [2].

Por tanto, en este trabajo se han considerado las mezclas de amoníaco con metano e hidrógeno. Se ha investigado la influencia de la presión y la temperatura para una concentración dada de NH₃, H₂ y CH₄, en la conversión del amoníaco y los productos formado en condiciones estequiométricas. Los resultados de los experimentos se han simulado utilizando un modelo cinético desarrollado en el grupo [e.g. 3].

Metodología Experimental

Los experimentos han sido llevados a cabo en una instalación de alta presión localizada en la Universidad de Zaragoza. Esta consiste en un reactor tubular de cuarzo de 153.8 cm de longitud y un diámetro interno de 0.6 cm, situado dentro de una carcasa presurizada, que a su vez está rodeada por un horno con 3 resistencias eléctricas. La descripción completa de la instalación puede encontrarse en otros trabajos [e.g. 4].

Manteniendo una concentración nominal de 1000 ppm para NH₃, H₂ y CH₄, en los distintos

experimentos se han modificado algunas de las variables de operación, como la presión (1, 10, 20 y 40 bar) y la temperatura (entre 473 K y 1183 K), en condiciones estequiométricas. Las mezclas están altamente diluidas en argón, con objeto de mantener la isothermicidad. En los experimentos se mantiene un caudal constante de 1000 ml (STP)/min, lo que implica un tiempo de residencia de los gases de $3.81 \cdot \frac{P [\text{bar}]}{T [\text{K}]}$ segundos.

Se han analizado once productos de reacción: N₂, H₂, CH₄, O₂, CO y CO₂ analizados mediante cromatografía de gases; NH₃, NO, N₂O y NO₂ analizados mediante un analizador de gases en continuo; y HCN analizado mediante espectroscopia de infrarrojo por transformada de Fourier (FTIR). Los experimentos se han simulado con un mecanismo cinético detallado de reacción usando el software Chemkin PRO.

Resultados y discusión

La figura 1 muestra la variación de la concentración de amoníaco en los diferentes experimentos realizados. Los resultados experimentales se muestran mediante símbolos y las simulaciones como líneas. En esta figura se muestra la influencia de la variación de la presión entre 1 y 40 bares manteniendo constante la composición de la mezcla, en la cual se tiene una concentración nominal inicial de 1000 ppm de NH₃, H₂ y CH₄ y una concentración de 3250 ppm de oxígeno (condiciones estequiométricas). Se observa que la conversión de amoníaco se desplaza a temperaturas menores a medida que aumenta la presión. Esta diferencia es más notable a menores presiones, entre 1 y 10 bares, que, a altas presiones, entre 20 y 40 bar.

En cuanto a los productos de reacción analizados a la salida del reactor, se ha encontrado que el CO y CO₂ se comienzan a producir a menor temperatura cuanto mayor es la presión, siendo más notable la diferencia a menores presiones. Aunque la mayor parte del NH₃ convertido da lugar a N₂, también se observan cantidades apreciables de HCN y de óxidos de

nitrógeno: NO y N₂O, mientras que no se produce NO₂ en ninguna de las condiciones estudiadas. Los resultados de simulación ajustan muy bien los resultados experimentales.

Conclusiones

En el presente trabajo se ha estudiado la influencia de la temperatura y la presión en condiciones estequiométricas, en la combustión de mezclas de NH₃ con CH₄ e H₂. Se observa una importante influencia de la presión en el intervalo de temperaturas en que tiene lugar la conversión de reactante, menor temperatura a medida que aumenta la presión. El mecanismo cinético usado reproduce muy bien los resultados experimentales obtenidos.

Agradecimientos

Esta publicación forma parte del proyecto PID2021-12432OB-I00 financiado por MCIN/AEI/10.13039/501100011033/FEDER "Una manera de hacer Europa". Los autores expresan su agradecimiento al Gobierno de Aragón (Ref. T22_23R), cofinanciado por FEDER "Construyendo Europa desde Aragón" y MINECO PRE2019-090162 por el apoyo financiero.

Figura

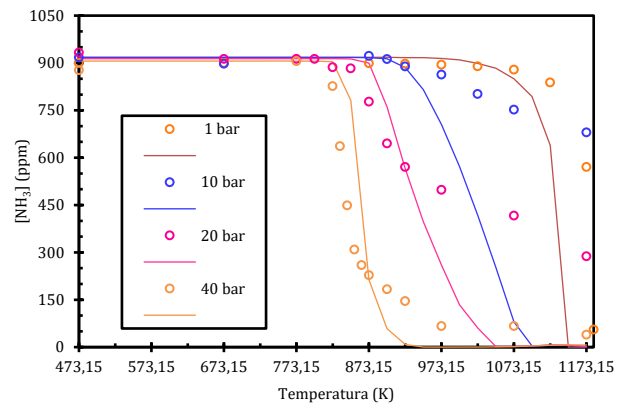


Figura 1: Concentración de amoníaco en función de la temperatura a diferentes presiones.

Referencias

- [1]. Valera-Medina A., Marsh R., Runyon J., Pugh D., Beasley P., Hughes T., Bowen P. Ammonia- methane combustion in tangential swirl burners for gas turbine power generation. *Applied Energy*. 2017, 185, 1362-1371.
- [2]. Okafor E. C., Naito Y., Colson S., Ichikawa A., Kudo T., Hayakawa A., Kobayashi H. Experimental and numerical study of the laminar burning velocity of CH₄-NH₃-air premixed flames. *Combustion and Flame*. 2018, 187, 185-198.
- [3]. Alzueta M.U., Abián M., Elvira I., Mercader V.D., Sieso L. Unraveling the NO reduction mechanisms occurring during the combustion of NH₃/CH₄ mixtures. *Combustion and Flame*. In press 2023.
- [4]. García-Ruiz P., Uruén M., Abián M., Alzueta M.U. High pressure ammonia oxidation in a flow reactor. *Fuel*. 2023, 348, 128302.