

Modelos analíticos para predecir la longitud de la llama difusiva en mezclas de GN-H₂-CO₂

Diego J. Mariños Rosado^{1,5*}, Einara Blanco Machin^{2,5}, Daniel Travieso Pedroso^{3,5},
Andrés Z. Mendiburu^{4,5}, João A. de Carvalho Jr.^{1,5}

¹ Universidade Estadual Paulista (UNESP), Facultad de Ingeniería Mecánica, Departamento de Química y Energía, Brasil.
Email: diego.marinos@unesp.br; jacarvalho@unesp.br

² Universidad de Concepción, Facultad de Ingeniería, Departamento de Ingeniería Mecánica, Concepción, Chile.
Email: eblanco@udec.cl

³ Universidad del Bío-Bío, Facultad de Ingeniería, Departamento de Ingeniería Mecánica, Concepción, Chile.
Email: dtravieso@ubiobio.cl

⁴ Universidade Federal de Rio Grande do Sul (UFRGS), Departamento de Ingeniería Mecánica, Brasil.
Email: andresmendiburu@ufrgs.br

⁵ Grupo Internacional de Investigación para la Sostenibilidad Energética (IRGES), Brasil.

Resumen

En este trabajo se proponen dos soluciones analíticas de la ecuación de difusión de llama (ED) bidimensional y tridimensional en estados estacionarios y transitorios (M2 y M3), basadas en la extensión de la teoría de Roper (M1) para estudiar la longitud de llama difusiva en mezclas de gas natural e hidrógeno. La metodología consta de derivación de los modelos analíticos M1, M2 y M3, así como una revisión de otras soluciones analíticas de la ecuación de difusión de llama en una, dos y tres dimensiones. La longitud de llama obtenida por los modelos M2 y M3 se validó con resultados experimentales a través del error relativo (ER). Al comparar el modelo M3 en condiciones transitorias con los resultados de otras soluciones analíticas, se observó que el valor de ER es bajo en comparación con un modelo tridimensional (<2%), seguido de un modelo bidimensional (7-9%), mientras que se obtiene un valor de ER más alto para un modelo unidimensional (16-26%), lo que indica la inadecuación de este último modelo. Finalmente, los valores de ER obtenidos con los modelos M2 y M3 indican que estos valores fluctúan menos del 10% en estado estacionario y menos del 30% en estado transitorio. En general, ambos modelos funcionan satisfactoriamente, siendo el modelo M3 más preciso, considerando las propiedades de cada mezcla.

Palabras clave: combustión, hidrogeno, longitud de llama, llama difusiva, modelo analítico.

Abstract

In this work, two analytical solutions of the bidimensional and tridimensional flame diffusion equations (DE) in both stead and transient conditions (M2 and M3) are proposed, based on the extension of Roper's theory (M1) to study the diffusion flame length in natural gas and hydrogen mixtures. The methodology consists of deriving the analytical models M1, M2, and M3, as well as a review of other analytical solutions of the flame diffusion equation in one, two, and three dimensions. The flame length obtained from the M2 and M3 models was validated with experimental results using the relative error (RE). Comparing the transient condition of model M3 with the results from other analytical solutions, it was observed that the RE value is low compared to a tridimensional model (<2%), followed by a bidimensional model (7-9%), while a higher RE value was obtained for a unidimensional model (16-26%), indicating the inadequacy of the latter model. Finally, the RE values obtained with models M2 and M3 indicate that these values fluctuate by less than 10% in steady-state and less than 30% in transient-state. Overall, both models perform satisfactorily, with model M3 being more accurate, considering the properties of each mixture.

Keywords: combustion, hydrogen, flame length, diffusive flame, analytical model.

1. Introducción

Aproximadamente el 90% de toda la energía utilizada proviene directa o indirectamente de diversos procesos de combustión. Por esta razón, las presiones climáticas exigen un cambio drástico hacia la promoción de la combustión con máxima conversión de energía y mínima generación de contaminantes. A esta cuestión se suma la crisis mundial del petróleo de 1973 que impulsó la búsqueda de nuevas fuentes de energía [1]. En el escenario mundial, se crearon algunos planes de incentivos para el uso de energías alternativas para fomentar la investigación y el desarrollo de estas tecnologías. En este escenario, el hidrógeno (H_2) puede citarse como un portador de energía alternativa sostenible en la implementación de políticas energéticas que no dependan de recursos fósiles o, en última instancia, del carbono. En los últimos años, hemos visto un crecimiento vibrante y continuo en todos los campos relacionados. El concepto de "descarbonización" significa literalmente reemplazar átomos de carbono por átomos de hidrógeno [2].

Aunque numerosos investigadores a lo largo de los años han realizado estudios experimentales y de simulación que caracterizan el gas natural dopado con mezclas de hidrógeno en diversas aplicaciones, la mayoría de estos estudios se han centrado en el proceso de combustión [3], los efectos de la mezcla [4], la estructura y las zonas de reacción [5], la transferencia de calor radiante [6] y la formación de contaminantes [7]. El impacto de las características de la llama en este tipo de gas natural enriquecido con mezclas de hidrógeno no ha recibido mucha atención. En este sentido, las mezclas GN- H_2 siguen teniendo una relevancia significativa.

Por tanto, el reto es caracterizar este tipo de mezclas en llamas difusivas a través de modelos analíticos que predigan los parámetros aerodinámicos de la llama, como la longitud y la forma, con el objetivo de garantizar que las llamas puedan permanecer encendidas cuando se sometan a diversas condiciones de operación. La predicción precisa del transporte de la llama es crucial para gestionar el diseño seguro y eficiente de las ubicaciones de los quemadores, ya que los niveles excesivos de radiación térmica de la llama a las superficies de la cámara y la posibilidad de que la llama se adhiera a la estructura del quemador son consideraciones importantes para desarrollar un diseño seguro del sistema. En este sentido, es importante establecer modelos analíticos del transporte de la llama para predecir de forma segura la dependencia del tamaño y la trayectoria de la llama a partir de variables como la composición del gas combustible y la velocidad del flujo.

1.1. Transporte de la llama: ecuación de difusión de la llama

El transporte de la llama puede describirse a través de la ecuación de difusión de la llama (ecuación de advección-difusión) (ED), pero su solución se vuelve compleja cuando se adapta a diferentes problemas de transporte, por lo que generalmente se resuelve numéricamente. Estos modelos numéricos representan una aproximación de las ecuaciones que detallan el proceso de transporte, por lo que la dificultad radica en evaluar la precisión. En la literatura, encontramos algunos enfoques que evalúan la precisión del esquema numérico, como: i) refinamiento sucesivo de malla, ii) comparación de diferentes esquemas numéricos y iii) el uso de soluciones analíticas. Este último enfoque es el único que proporciona una precisión confiable de un esquema numérico.

Los pioneros en realizar una investigación analítico-experimental de la ecuación de difusión de llama para describir la estructura, comportamiento y propiedades de llamas no premezcladas fueron Burke y Schumann [8]. Los autores realizaron una investigación teórico-experimental en placas paralelas y conductos circulares, considerando parámetros como variaciones en las dimensiones del conducto, coeficiente de difusión, relación estequiométrica entre oxígeno y combustible, variación de presión, precalentamiento de combustible y oxígeno, adición de oxígeno primario al combustible, variación en el espesor del conducto y análisis químico de los gases de llama. Posteriormente, otros estudios analítico-experimentales de la ecuación de difusión fueron realizados por Roper [9] y Roper et al. [10]. En estos estudios, se estimaron expresiones para predecir la longitud de la llama para varias geometrías de quemadores y diferentes regímenes de potencia. Sus resultados fueron validados contra los obtenidos por Burke y Schumann [8].

Con base en todo lo mencionado anteriormente, este trabajo desarrolla dos modelos analíticos de la ecuación de difusión de llama en dos y tres dimensiones tanto en régimen estacionario como transitorio a través de una extensión de la Teoría de Roper para determinar la longitud de la llama difusiva en mezclas de gas natural e hidrógeno. Estas soluciones analíticas son esenciales para verificar esquemas numéricos de solución de la ecuación de advección-difusión, que consideran difusión espacialmente variable y campo de flujo no uniforme [11].

La sección siguiente se centra en el desarrollo de soluciones analíticas de la ecuación de difusión. Esta sección comienza con la derivación de la solución analítica de Roper desarrollada para un chorro laminar bidimensional en condiciones de estado estacionario sin convección, denominado como modelo M1. Este

modelo [9] se deriva y se prueba para comprender cómo la geometría de los quemadores influye en los modelos. Posteriormente, los modelos analíticos propuestos M2 y M3 se derivan en dos y tres dimensiones tanto en estado estacionario como transitorio con base en la extensión de la teoría de Roper (M1). Adicionalmente, se presenta una revisión de varias soluciones analíticas de la ecuación de difusión.

Finalmente, la longitud de la llama difusiva obtenida a través de las soluciones analíticas en dos y tres dimensiones de los modelos M2 y M3 se validará con resultados experimentales utilizando el Error Relativo. Esta validación también implicará una comparación con otras soluciones analíticas de la ecuación de difusión de la llama en una, dos y tres dimensiones.

2. Metodología

A continuación, se presentan soluciones analíticas de la ecuación de difusión unidimensional, bidimensional y tridimensional, determinadas por diversos autores para los estados estacionario y transitorio. Estas soluciones analíticas se compararán con las soluciones analíticas de los modelos M1, M2 y M3 desarrollados en este trabajo para obtener el escalar conservado C necesario para la determinación de la longitud de llama. Los símbolos de estas ecuaciones se han adaptado a este estudio.

2.1. Derivación de la ecuación de Roper (M1)

La derivación de la ecuación original de Roper, descrita en dos dimensiones en estado estacionario sin convección presenta las siguientes consideraciones:

- El fenómeno se evalúa en dos dimensiones y en estado estacionario.
- La velocidad puede cambiar a lo largo del eje de la llama, pero es constante en el plano perpendicular a este eje.
- Las difusividades de masa de las especies químicas son todas iguales.
- La temperatura y la difusividad son constantes en las regiones de la llama donde los gradientes de concentración son significativos (regiones controladas por difusión).
- Los números de Schmidt (Sc) y Lewis (Le) son iguales a la unidad.
- El número total de moles es constante.

Cabe mencionar que en la formulación de la teoría de Roper, el autor define el escalar conservado C basado en la ecuación (1), donde $f = v_{ar}^s x_F - x_{O_2}$, $f_1 = v_{ar}^s x_{F,0}$ y $f_2 = -x_{O_2,0}$. Este escalar será utilizado en las derivaciones de las ecuaciones de llama de difusión para los modelos M2 y M3 [12].

$$C = \frac{f-f_2}{f_1-f_2} \quad (1)$$

Comprender las deducciones de las ecuaciones originales de Roper es crucial para comprender cómo la geometría del quemador influye en los modelos y, por lo tanto, comprender las derivaciones de los modelos M2 y M3.

La ecuación (2) se obtuvo como resultado final del escalar conservado C, de donde se dedujo la longitud teórica L_f para cada geometría.

$$C = \frac{1}{4\pi\sqrt{\theta_x\theta_y}} \iint \exp\left[-\frac{(\eta-\eta_0)^2}{4\theta_x} - \frac{(\xi-\xi_0)^2}{4\theta_y}\right] d\eta d\xi \quad (2)$$

El par (η_0, ξ_0) define las coordenadas del punto donde se requiere el valor de C.

Finalmente, las ecuaciones (3) - (7) presentan el resultado de estas deducciones para predecir la longitud de la llama en el quemador circular, cuadrado y rectangular cuando las llamas están dominadas por efectos de momento, efectos de flotabilidad y régimen de transición, respectivamente [9].

$$\frac{L}{Q} = \left[4\pi D_0 \ln\left(1 + \frac{1}{S}\right)\right]^{-1} \left(\frac{T_0}{T_f}\right)^{0.67} \quad (3)$$

$$\frac{L}{Q} = \frac{1}{16D_0} \left[\text{inverf}\left[(1+S)^{-\frac{1}{2}}\right]\right]^{-2} \left(\frac{T_0}{T_f}\right)^{0.67} \quad (4)$$

$$L_M = \frac{b Q M \beta^2}{D_0 I h} \left(\frac{T_0}{T_1}\right) \left(\frac{T_f}{T_0}\right)^{0.33} \quad (5)$$

$$L_B = \left(\frac{9 Q^4 \beta^4}{8 D_0^2 a h^4}\right)^{0.33} \left(\frac{T_f}{T_0}\right)^{0.22} \quad (6)$$

$$L_T = \frac{4}{9} L_M \left(\frac{L_B}{L_M}\right)^3 \left\{ \left[1 + \frac{27}{8} \left(\frac{L_M}{L_B}\right)^3\right]^{0.67} - 1 \right\} \quad (7)$$

Donde, $\beta = \left[4 \text{ inverf}\left(\frac{1}{1+S}\right)\right]^{-1}$, S es la relación estequiométrica de masa que relaciona la fracción de masa del oxidante y el combustible, $S = v_{ar} \frac{x_{O_2}}{x_f}$, $x_{O_2} = k$, e inverf es la función inversa de la función de error, es decir $\omega = \text{inverf}[\text{erf}(\omega)]$.

2.2. Derivación de la ED en 2D (M2)

Para la derivación de la ecuación de difusión de llama (ED), se realizan consideraciones adicionales a las ya establecidas en la derivación para el estado estacionario presentada en la sección 2.1 [12].

- El fenómeno se evalúa en un estado transitorio bidimensional.

- La difusión axial $D_z \left(\frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right)$ no se considera porque se supone que el flujo de masa del gas domina el proceso en la dirección axial, mientras que la temperatura se considera constante en las regiones de la llama donde los gradientes de concentración son significativos (regiones controladas por difusión).
- La convección alejada del eje de la llama $v_z \frac{\partial C}{\partial z}$ no se considera.

Teniendo en cuenta las consideraciones anteriores, se obtiene una nueva solución analítica para la ecuación de difusión de la llama.

$$\frac{\partial C}{\partial t} + v_x \frac{\partial C}{\partial x} + v_y \frac{\partial C}{\partial y} + v_z \frac{\partial C}{\partial z} = D_x \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right) + D_y \left(\frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) \quad (8)$$

La solución analítica en 2D para el perfil en estado estable y transitorio se muestra en las ecuaciones (9) y (10) respectivamente.

$$C(x, y) = \frac{1}{2\pi D_0 v_0^2 \sqrt{xyx_0 y_0}} \left[\frac{xy_0}{yx_0} \right]^{\frac{1}{2v_0 D_0}} * K_0 \left[\frac{\left[\frac{1}{v_0} \sqrt{\ln^2 \left(\frac{x}{x_0} \right) + \ln^2 \left(\frac{y}{y_0} \right)} \right] \sqrt{1 + D_0^2 v_0^2}}{\sqrt{2} D_0} \right] \quad (9)$$

$$C(x, y, t) = \frac{1}{4\pi D_0 v_0^2 t \sqrt{xyx_0 y_0}} \left[\frac{xy_0}{yx_0} \right]^{\frac{1}{2v_0 D_0}} * \exp \left[\frac{- \left[\frac{1}{v_0} \sqrt{\ln^2 \left(\frac{x}{x_0} \right) + \ln^2 \left(\frac{y}{y_0} \right)} \right]^2 - 2[1 + D_0^2 v_0^2] t^2}{4 D_0 t} \right] \quad (10)$$

Donde, K_0 es la función de Bessel modificada del segundo tipo de orden cero y argumento r .

2.3. Derivación de la ED en 3D (M3)

Al igual que en la derivación de la sección anterior, se añaden consideraciones adicionales a M1 [12].

- El fenómeno se evalúa en un estado transitorio tridimensional.
- Se considera la difusión axial $D_z \left(\frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right)$, mientras que la temperatura se considera constante en las regiones de la llama donde los gradientes de concentración son significativos (regiones controladas por difusión).
- Se considera la convección alejada del eje de la llama $v_z \frac{\partial C}{\partial z}$.

Teniendo en cuenta las consideraciones anteriores, se deriva una solución analítica novedosa para la expresión de difusión-advección.

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \left(v_x - \frac{\partial D_x}{\partial x} \right) \frac{\partial C}{\partial x} + \left(v_y - \frac{\partial D_y}{\partial y} \right) \frac{\partial C}{\partial y} + \left(v_z - \frac{\partial D_z}{\partial z} \right) \frac{\partial C}{\partial z} + C \left(\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} + \lambda \right) = D_x \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right) + D_y \left(\frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) + D_z \left(\frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right) \quad (11)$$

Aquí, el escalar conservado se escribe como $C(x, y, z, t)$, t es el tiempo, λ es un coeficiente que determina la tasa de decaimiento del escalar conservado, el vector de velocidad \vec{v} y el coeficiente de difusión en coordenadas cartesianas x , y y z son (v_x, v_y, v_z) y (D_x, D_y, D_z) , respectivamente.

Como los coeficientes de la ecuación (11) dependen del espacio, los términos de difusión contribuyen al término de advección y los términos de advección contribuyen al término de decaimiento. La última contribución es cero si la divergencia, $\nabla \cdot \vec{u} = 0$. La ecuación (11) representa una ecuación diferencial parcial donde la intención es reducir los coeficientes variables de los vectores de velocidad y difusión a una ecuación con coeficientes constantes. Esto se hará utilizando las transformaciones que se muestran en la ecuación (12).

$$x = \exp(v_{x0} X), \quad y = \exp(v_{y0} Y) \quad \text{y} \quad z = \exp(v_{z0} Z) \quad (12)$$

Donde: $-\infty \leq X, Y, Z \leq \infty$.

Se suponen las siguientes condiciones de variación espacial para los coeficientes de velocidad y difusión:

$$v_x = v_{x0} X, \quad v_y = v_{y0} Y \quad \text{y} \quad v_z = v_{z0} Z \quad (13)$$

$$D_x = D_0 v_{x0}^2 x^2, \quad D_y = D_0 v_{y0}^2 y^2 \quad \text{y} \quad D_z = D_0 v_{z0}^2 z^2 \quad (14)$$

Donde: $x \geq 0, y \geq 0$ y $z \geq 0$

En cada dirección, el componente de velocidad y el coeficiente de difusión exhiben una dependencia lineal y cuadrática de la distancia, respectivamente. La relación de v_x con x y v_y con y surge de la consideración del flujo potencial [13], mientras que la asociación de D_x y D_y con v_0^2 se aplica en escenarios donde el fluido pasa a través de un tubo de diámetro estrecho. Este fenómeno surge debido a los efectos combinados de la difusión molecular y la variación de la velocidad a través de la sección transversal. Analíticamente, la dispersión del escalar conservado a lo largo del tubo está gobernada por un coeficiente de difusividad, que se puede calcular a partir de distribuciones escalares conservadas observadas. Esta dispersión se mueve con la velocidad media del flujo y permanece simétrica con respecto a ella, a pesar de la asimetría del flujo [14].

Sustituyendo las ecuaciones (12) – (14) en la ecuación (11) se obtiene:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + (1 - D_0 v_{x_0}) \frac{\partial C}{\partial x} + (1 - D_0 v_{y_0}) \frac{\partial C}{\partial y} + (1 - D_0 v_{z_0}) \frac{\partial C}{\partial z} = D_0 \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right) - C(v_{x_0} + v_{y_0} + v_{z_0} + \lambda) \quad (15)$$

La ecuación (15) representa la ecuación de difusión de llama con coeficientes constantes. Las soluciones analíticas en 3D se obtuvieron utilizando el mismo enfoque utilizado para las soluciones analíticas en 2D. Desarrollando la ecuación (15), la solución analítica en 3D para el perfil en estado estacionario y transitorio se muestra en las ecuaciones (16) y (17) respectivamente.

$$C(x, y, z) = \frac{1}{4\pi D_0 \alpha_1 |v_{x_0} v_{y_0} v_{z_0}| \sqrt{xyz x_0 y_0 z_0}} * \left[\frac{x}{x_0} \right]^{\frac{1}{2v_{x_0} D_0}} \left[\frac{y}{y_0} \right]^{\frac{1}{2v_{y_0} D_0}} \left[\frac{z}{z_0} \right]^{\frac{1}{2v_{z_0} D_0}} \exp \left[\frac{-\alpha_1 \sqrt{3 + D_0^2 \alpha_2^2}}{2D_0} \right] \quad (16)$$

$$C(x, y, z, t) = \frac{1}{8 |v_{x_0} v_{y_0} v_{z_0}| \sqrt{(\pi D_0 t)^3 (xyz x_0 y_0 z_0)}} \left[\frac{x}{x_0} \right]^{\frac{1}{2v_{x_0} D_0}} * \left[\frac{y}{y_0} \right]^{\frac{1}{2v_{y_0} D_0}} \left[\frac{z}{z_0} \right]^{\frac{1}{2v_{z_0} D_0}} \exp \left[\frac{-\alpha_1^2 - [3 + D_0^2 \alpha_2^2] t^2}{4D_0 t} \right] \quad (17)$$

Donde:

$$\alpha_1 = \sqrt{\left[\frac{1}{v_{x_0}^2} \ln^2 \left(\frac{x}{x_0} \right) \right] + \left[\frac{1}{v_{y_0}^2} \ln^2 \left(\frac{y}{y_0} \right) \right] + \left[\frac{1}{v_{z_0}^2} \ln^2 \left(\frac{z}{z_0} \right) \right]} \quad (18)$$

$$\alpha_2 = \sqrt{v_{x_0}^2 + v_{y_0}^2 + v_{z_0}^2} \quad (19)$$

2.4. Otras soluciones analíticas de la ED

Las primeras soluciones utilizaban técnicas tradicionales para resolver la ecuación clásica unidimensional de advección-difusión. Desafortunadamente, estas soluciones, obtenidas mediante técnicas tradicionales como diferencias finitas y elementos finitos, a menudo presentaban amortiguamiento u oscilaciones indeseables cuando dominaba la advección. Años después, se desarrollaron nuevas variantes de las técnicas tradicionales y se aplicaron nuevamente para resolver la ecuación de advección-difusión. Estas nuevas soluciones utilizaban el método analítico finito [15] y el método de la función de prueba óptima [16]. Estas soluciones funcionan bien para problemas de estado estable.

Li et al. [17] se dieron cuenta de que las soluciones analíticas para la ecuación de advección-difusión

utilizando variantes de las técnicas tradicionales eran muy limitadas al resolver problemas para una fuente instantánea. Basándose en este hallazgo, Li et al. desarrollaron un método analítico para resolver la ecuación de advección-difusión unidimensional en una condición transitoria. La ecuación de advección-difusión se resolvió considerando el método de función de prueba analítica finita u óptima, y la dependencia del tiempo se obtuvo mediante un algoritmo eficiente que involucra la transformada inversa de Laplace. El resultado se muestra en la ecuación (20).

$$C(x, 0) = \frac{C_0}{2} \left[\operatorname{inverf} \left[\frac{x - v_0 t}{\sqrt{4D_0 t}} \right] + \exp \left[\frac{v_0 x}{D_0} \right] \operatorname{inverf} \left[\frac{x + v_0 t}{\sqrt{4D_0 t}} \right] \right] \quad (20)$$

Zoppou y Knight [11] extendieron la solución propuesta por Li et al. [17] y presentaron una nueva solución para la ecuación unidimensional de difusión-advección utilizando coeficientes de difusividad y velocidad variables espacialmente. El modelo se muestra en la ecuación (21).

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \left[\frac{1}{x} \operatorname{inverf} \left[\frac{\ln(x) - t(v_0 + D_0)}{2(D_0 t)^{\frac{1}{2}}} \right] + \exp \left[\frac{v_0 \ln(x)}{D_0} \right] \operatorname{inverf} \left[\frac{\ln(x) + t(v_0 + D_0)}{2(D_0 t)^{\frac{1}{2}}} \right] \right] \quad (21)$$

Philip [18] presentó soluciones de la ecuación de difusión-convección en dos y tres dimensiones considerando flujo radial estacionario y difusividad proporcional a una potencia del número de Peclet (Peⁿ). A continuación, se presentan las soluciones exactas de fuentes puntuales instantáneas y continuas para el flujo radial en dos y tres dimensiones para un número de Peclet con potencia n=2.

Solución exacta de una fuente instantánea en dos dimensiones:

$$C(x, y, t) = \frac{1}{(\pi t)^{\frac{1}{2}}} \exp \left[-\frac{\left(\frac{v_0}{D_0} - 2t \right)^2}{16t} \right] - \frac{1}{2} \exp \left[\frac{v_0}{2D_0} \right] \operatorname{inverf} \left[\frac{\frac{v_0}{D_0} + 2t}{4t^{\frac{1}{2}}} \right] \quad (22)$$

Solución exacta de una fuente instantánea en tres dimensiones:

$$C(x, y, z, t) = \frac{1}{(\pi t)^{\frac{3}{2}}} \exp \left[-\frac{\left(\left(\frac{v_0}{D_0} \right)^3 - 3t \right)^2}{36t} \right] - \frac{1}{2} \exp \left[\frac{1}{3} \left(\frac{v_0}{D_0} \right)^3 \right] \operatorname{inverf} \left[\frac{\left(\frac{v_0}{D_0} \right)^3 + 3t}{6t^{\frac{1}{2}}} \right] \quad (23)$$

Zoppou y Knight [19] presentaron soluciones analíticas de la ecuación unidimensional de difusión-advección utilizando coeficientes variables espacialmente, donde la velocidad es proporcional a la distancia y el coeficiente de difusión es proporcional al cuadrado de la velocidad. Estas soluciones analíticas se escribieron para coeficientes constantes y para las formas conservativas y no conservativas de masa expresadas en las ecuaciones (24) – (26).

Perfil con coeficientes constantes:

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \operatorname{inverf} \left[\frac{x-x_0-v_0t}{2\sqrt{D_0t}} \right] + \frac{C_0}{2} \exp \left[\frac{v_0(x-x_0)}{D_0} \right] \operatorname{inverf} \left[\frac{x-x_0+v_0t}{2\sqrt{D_0t}} \right] \quad (24)$$

Perfil en forma conservadora:

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \left[\frac{x_0}{x} \operatorname{inverf} \left[\frac{\ln\left(\frac{x}{x_0}\right) - t(v_0 + D_0)}{2\sqrt{D_0t}} \right] + \exp \left[\frac{v_0 \ln\left(\frac{x}{x_0}\right)}{D_0} \right] \operatorname{inverf} \left[\frac{\ln\left(\frac{x}{x_0}\right) + t(v_0 + D_0)}{2\sqrt{D_0t}} \right] \right] \quad (25)$$

Perfil en forma no conservadora:

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \operatorname{inverf} \left[\frac{\ln\left(\frac{x}{x_0}\right) - v_0t}{2\sqrt{D_0t}} \right] + \frac{C_0}{2} \exp \left[\frac{v_0 \ln\left(\frac{x}{x_0}\right)}{D_0} \right] \operatorname{inverf} \left[\frac{\ln\left(\frac{x}{x_0}\right) + v_0t}{2\sqrt{D_0t}} \right] \quad (26)$$

Kumar et al. [20] presentaron soluciones analíticas de la ecuación unidimensional de difusión-advección con coeficientes variables en un dominio finito considerando la dispersión dependiente del tiempo a lo largo de un flujo uniforme en un dominio homogéneo. La técnica de transformación de Laplace se utilizó en el desarrollo de estas soluciones analíticas, y también se introdujeron en el proceso nuevas variables independientes para el espacio y el tiempo. Las soluciones se obtuvieron para una condición de entrada continua de naturaleza uniforme y creciente.

Condición de entrada continua de naturaleza uniforme:

$$C(x, t) = C_0 \left[\frac{1}{2} \operatorname{inverf} \left[\frac{x-v_0t}{2\sqrt{D_0t}} \right] + \frac{1}{2} \exp \left[\frac{v_0x}{D_0} \right] \operatorname{inverf} \left[\frac{x+v_0t}{2\sqrt{D_0t}} \right] + \frac{1}{2} \left[2 + \frac{v_0(2x_0-x)}{D_0} + \frac{v_0^2t}{D_0} \right] \exp \left[\frac{v_0x_0}{D_0} \right] \operatorname{inverf} \left[\frac{(2x_0-x)+v_0t}{2\sqrt{D_0t}} \right] - \left(\frac{v_0^2t}{\pi D_0} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left[\frac{v_0x_0}{D_0} - \frac{(2x_0-x+v_0t)^2}{4D_0t} \right] \right] \quad (27)$$

Condición de entrada continua de naturaleza creciente:

$$C(x, t) = C_0 \left[\frac{1}{2} \operatorname{inverf} \left[\frac{x-v_0t}{2\sqrt{D_0t}} \right] + \left(\frac{v_0^2t}{\pi D_0} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left[-\frac{(x+v_0t)^2}{4D_0t} \right] - \frac{1}{2} \left[1 + \frac{v_0x}{D_0} + \frac{v_0^2t}{D_0} \right] \exp \left[\frac{v_0x}{D_0} \right] \operatorname{inverf} \left[\frac{x+v_0t}{2\sqrt{D_0t}} \right] + \left(\frac{4v_0t}{\pi D_0} \right)^{\frac{1}{2}} \left[1 + \frac{v_0}{4D_0} (2x_0 - x + v_0t) \right] \exp \left[\frac{v_0x_0}{D_0} - \frac{(2x_0-x+v_0t)}{4D_0t} \right] - \frac{v_0}{D_0} \left[(2x_0 - x) + \frac{3v_0t}{2} + \frac{v_0}{4D_0} (2x_0 - x + v_0t)^2 \right] \exp \left[\frac{v_0x_0}{D_0} \right] \operatorname{inverf} \left[\frac{(2x_0-x)+v_0t}{2\sqrt{D_0t}} \right] \right] \quad (28)$$

Kumbinarasaiah y Nirmala [21] presentaron soluciones analíticas de la ecuación unidimensional de advección-difusión utilizando un método llamado método de colocación de polinomios de Hosoya (HPCM). Este método desarrolla una matriz de integración operacional de los polinomios ortonormales de los gráficos de trayectoria de Hosoya (OHPG) para calcular el escalador conservado y convertir la ecuación de difusión-advección en un sistema algebraico en el que se resuelve como un sistema de ecuaciones utilizando el método de Newton. A continuación, se presentan dos soluciones para la ecuación de difusión-advección.

$$C(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4t+1}} \exp \left[\frac{-(x-1-v_0t)^2}{D_0(4t+1)} \right] \quad (29)$$

$$C(x, t) = \frac{1}{2} \operatorname{inverf} \left[\frac{x-v_0t}{\sqrt{4D_0t}} \right] + \frac{1}{2} \exp \left[\frac{v_0x}{D_0} \right] \operatorname{inverf} \left[\frac{x+v_0t}{\sqrt{4D_0t}} \right] \quad (30)$$

Los escalares conservados C obtenidos en las soluciones analíticas se evalúan utilizando la ecuación (31) para determinar la longitud de la llama en quemadores circulares.

$$L = -\frac{v_1\left(\frac{d}{2}\right)^2}{4D_0 \ln(1-C)} \left(\frac{T_f}{T_1} \right) \left(\frac{T_0}{T_f} \right)^{1.67} \quad (31)$$

2.5. Error relativo y error relativo medio

Para evaluar la concordancia entre los resultados experimentales obtenidos por Quezada [22] y los resultados obtenidos con los modelos M2 y M3, se determinó el Error Relativo (ER) y el Error Relativo Medio (ERM). Estos errores están definidos por las expresiones dadas en las ecuaciones (32) y (33), respectivamente.

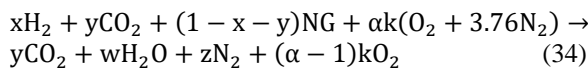
$$ER = \frac{\sum_{i=1}^N [(L_f)_{\text{exp}} - (L_f)_{M2, M3}]}{\sum_{i=1}^N (L_f)_{\text{exp}}} \quad (32)$$

$$ERM = \frac{ER}{N} \quad (33)$$

Donde, $(L_f)_{exp}$ representa los resultados experimentales obtenidos por Quezada [22].

3. Resultados y discusiones

Comprender y predecir el comportamiento previsto de los parámetros de combustión es crucial, ya que las mezclas se pueden adquirir en diversas proporciones. Por lo tanto, para una mezcla de GN-H₂-CO₂ y el oxidante, la reacción de combustión resultante es:



Donde α es el exceso de aire normalizado, k es el coeficiente de oxígeno estequiométrico para la reacción de combustión y los coeficientes y , w y z dependen del contenido de C, H₂ y N₂ del gas natural, respectivamente.

Como gas de referencia se consideró gas natural comercial, cuya composición molar es 90,8% CH₄, 6% C₂H₆, 1,2% C₃H₈, 0,5% CO₂ y 1,5% N₂, con un poder calorífico inferior (PCI) de 47,82 MJ/Nm³ [23]. La pureza del H₂ utilizado es del 99,9% y la pureza del CO₂ utilizado es del 99,2%.

3.1. Resultados de los modelos M1, M2 y M3

En esta sección se presenta la evolución del escalador conservado de una fuente instantánea en forma bidimensional y tridimensional para una potencia de entrada de 2 kW, considerando cinco mezclas de GN-H₂-CO₂. Para el modelo M2 en estado estacionario, una fuente bidimensional se ubica en $x_0 = 5$ y $y_0 = 5$, con un coeficiente de difusión de $D_0 = 2$, mientras que el coeficiente de velocidad v_0 varía en función de las mezclas y las geometrías del quemador. Por el contrario, el modelo M3 en estado estacionario involucra una fuente tridimensional en $x_0 = 5$, $y_0 = 5$, y $z_0 = 5$, con $D_0 = 0.2$ y $v_{z_0} = -1$, donde las velocidades v_{x_0} y v_{y_0} son específicas para cada mezcla.

Los perfiles para los modelos M2 y M3 en estados estables y transitorios para el gas 1: 100%GN se muestran en la Figura 1.

La Figura 2 ilustra la correlación entre la longitud de la llama y el escalador conservado C obtenido a partir de los modelos M1, M2 y M3 en condiciones estables y transitorias, considerando una entrada de potencia de 2 kW para comparación. Las observaciones de ambos modelos incluyen: (i) Con respecto al tiempo, se observa que las longitudes de llama durante el estado transitorio en $t = 0,1$ son mayores que las del estado

estable. (ii) Con respecto a la composición del gas, el Gas 20 exhibe una longitud de llama mayor debido a su menor contenido de carbono, lo que resulta en un coeficiente de oxígeno estequiométrico k reducido en comparación con otros gases con el mismo diámetro hidráulico y entrada de potencia. Hallazgos similares fueron informados por Piemsinlapakunchon et al. [57] y Li et al. [58]. Además, se observa que las longitudes de llama obtenidas de M3 para todos los gases son mayores en comparación con las de M2. Este aumento en la longitud de la llama se atribuye a la incorporación de difusión axial y convección a lo largo del eje z en M3.

3.2. Validación de los modelos M2 y M3

Los modelos teóricos M2 y M3 se validan utilizando las composiciones analizadas en el estudio experimental realizado por Quezada [22], junto con otras soluciones analíticas de la ecuación de difusión en una, dos y tres dimensiones. Estas soluciones analíticas fueron adaptadas en este estudio para estudiar la longitud de la llama difusiva.

La Figura 3 muestra los resultados de estas comparaciones para los dos gases en estudio, así mismo se observa que el Gas A exhibe la longitud de llama más alta en todos los resultados para una misma potencia. Este alargamiento se atribuye al mayor contenido de carbono en la composición del Gas A, lo que da lugar al coeficiente estequiométrico de oxígeno k más alto entre todas las mezclas, lo que se traduce en la mayor longitud de llama. El impacto del CO₂ en la composición del Gas B también es evidente, lo que contribuye a una reducción de la longitud de la llama.

La Figura 3 también muestra que al comparar la longitud de llama del modelo M3 en el estado transitorio con los resultados de otras soluciones analíticas, se observa un comportamiento similar al considerar las propiedades de los gases individuales. Para el Gas A, se observa que el valor de ER es menor para un modelo tridimensional (< 2%), seguido de un modelo bidimensional (7-9%), mientras que se obtiene un valor de ER más alto para un modelo unidimensional (16-26%), lo que indica la insuficiencia de este último modelo. Una excepción se encuentra en los modelos unidimensionales propuestos recientemente por Kumbinarasaiah y Nirmala [21], que exhiben un valor de ER entre 3-7%. A diferencia de otros modelos unidimensionales tradicionales, este método propuesto emplea una matriz de integración de dos polinomios ortonormales de gráficos de trayectoria de Hosoya (OHPG) para calcular el escalador conservado. Esto da como resultado un modelo práctico que demuestra resultados prometedores similares a los de los modelos bidimensionales y tridimensionales.

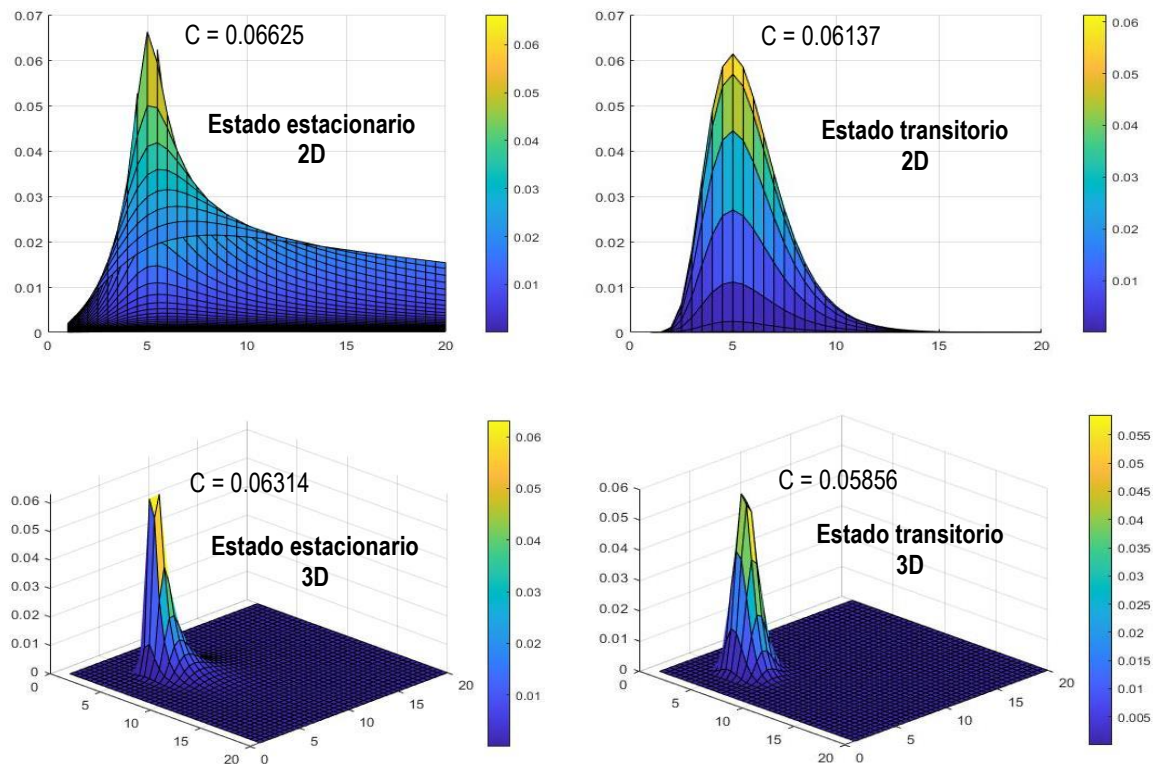


Figura 1. Perfiles de los modelos M2 y M3 ubicados en $x_0=5$, $y_0=5$ y $z_0=5$, 2 kW, Gas 1: 100% GN.
Fuente: elaboración propia.

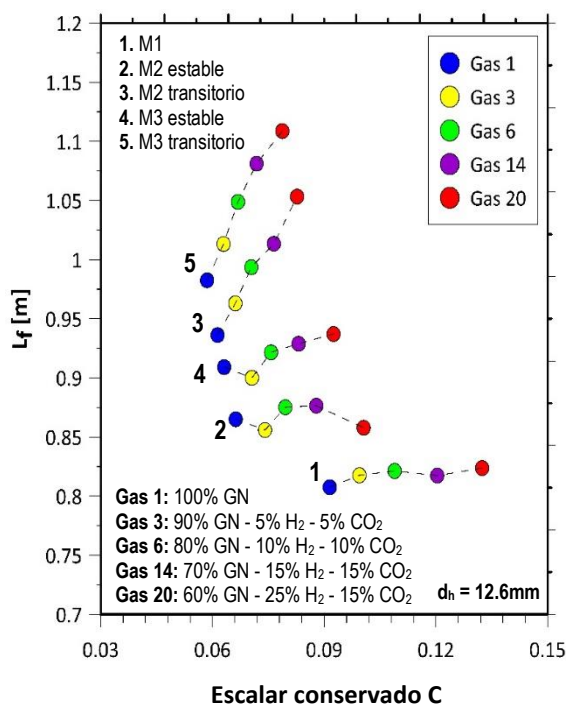


Figura 2. Longitud de llama de los modelos M1, M2 y M3 en mezclas GN-H₂-CO₂, $d_h=12,6$ mm.
Fuente: elaboración propia.

Los valores de ER obtenidos con los modelos M2 y M3 para cada gas indican que estos valores fluctúan menos del 10% en estado estacionario y menos del 30% en estado transitorio. Por lo tanto, ambos modelos M2 y M3 se consideran aceptables para determinar la longitud de llama, teniendo en cuenta las propiedades de cada mezcla.

4. Conclusiones

Se presentaron soluciones analíticas de la ecuación de difusión de llama para comprender y analizar el mecanismo que rige la longitud visible de las llamas difusivas en mezclas de gas natural e hidrógeno. La ecuación original de Roper (M1) se derivó. Los modelos M2 y M3 ampliaron la teoría de Roper (M1) al derivar ecuaciones en dos y tres dimensiones en estados estables y transitorios proporcionando nuevas ecuaciones para la llama difusiva.

Los modelos teóricos M2 y M3 se validaron tanto en estado estable como transitorio utilizando los resultados experimentales de Quezada y otras soluciones analíticas en una, dos y tres dimensiones. Los valores de ER derivados de los modelos M2 y M3 indicaron variaciones inferiores al 10% en estado estable e inferiores al 30% en estado transitorio. En consecuencia, el rendimiento general de ambos modelos se considera satisfactorio, y el modelo M3 exhibe una mayor precisión.

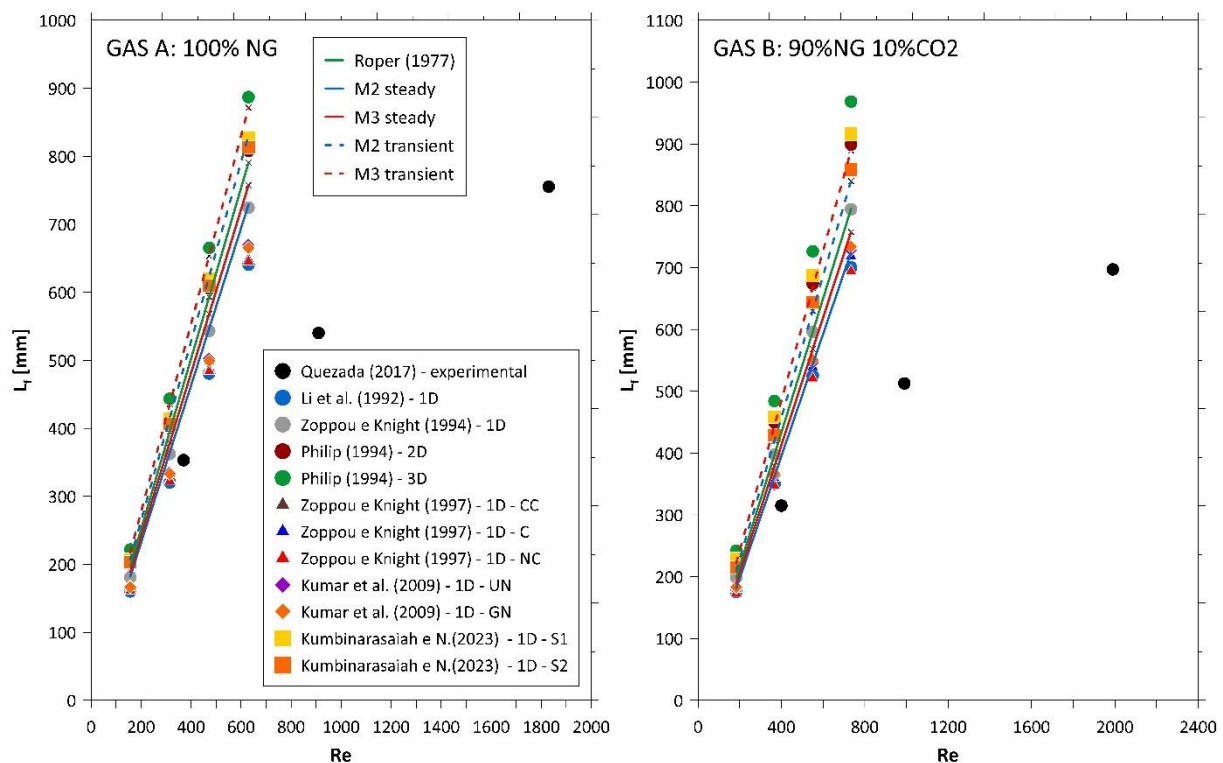


Figura 3. Comparación de los modelos M2 y M3 con los hallazgos experimentales obtenidos por Quezada [22] y otras soluciones analíticas. $D_h = 7.55\text{mm}$, $v_{NG} = 1.51 \times 10^{-5} \text{m}^2/\text{s}$ y $v_{CO_2} = 8.03 \times 10^{-6} \text{m}^2/\text{s}$. Nomenclatura: Coeficientes Constantes (CC), Forma Conservativa (C), Forma No Conservativa (NC), Naturaleza Uniforme (UN), Naturaleza Creciente (GN), Primera Solución (S1) y Segunda Solución (S2). Fuente: elaboración propia.

Los modelos teóricos M2 y M3 sirven como base para el avance de estudios teóricos y experimentales extensos. En consecuencia, la investigación futura podría explorar las siguientes áreas: examinar la emisión de radiación térmica de llamas difusivas mediante la integración del escalar conservado radialmente en un régimen transitorio 3D. Además, comprender la longitud de la llama es crucial en las investigaciones relacionadas con la estabilidad de la llama, como los parámetros de despegue (lift-off) y de extinción (blow-out).

5. Agradecimientos

Este estudio fue financiado por la Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Finanzas 001. Los autores agradecen al Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) por apoyar este trabajo a través del Proyecto 200067/2024-9 y a la Comisión Nacional de Investigación Científica y Tecnológica de Chile por apoyar este trabajo a través del Fondecyt Regular 1230656.

6. Referencias

[1] M. De Falco, A. Basile. Enriched methane. The first step towards the hydrogen economy, First edition, Springer, Switzerland, 2016 [en línea]. Disponible en:

<https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-319-22192-2>

[2] R. Hernández, D. Tuma, D. Lozano, C.R. Chamorro. “Accurate experimental (p, ρ , T) data of natural gas mixtures for the assessment of reference equations of state when dealing with hydrogen-enriched natural gas”. *Int J Hydrogen Energy*, pp. 21983–21998, 2018 [en línea]. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2018.10.027>

[3] S. Eckart, G. Pio, T. Zirwes, F. Zhang, E. Salzano, H. Krause, H. Bockhorn. “Impact of carbon dioxide and nitrogen addition on the global structure of hydrogen flames”. *Fuel*, vol. 335, 2023 [en línea]. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2022.126929>

[4] A. Restrepo, M. Viana, A. Colorado, A.A. Amell. “Experimental investigation of hydrogen enriched natural gas diffusion reactions using preheated air in a hot coflow burner”. *Int J Hydrogen Energy*, vol. 48, pp. 337–349, 2023 [en línea]. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.09.232>

[5] K.A. Francis, R. Sreenivasan, V. Raghavan. “Investigation of structures and reaction zones of methane-hydrogen laminar jet diffusion flames”. *Int J Hydrogen Energy*, vol. 36, pp. 11183–11194, 2011 [en

- línea]. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2011.06.002>
- [6] A.J. Gee, Y. Yin, K.K. Foo, A. Chinnici, N. Smith, P.R. Medwell. “Toluene addition to turbulent H₂/natural gas flames in bluff-body burners”. *Int J Hydrogen Energy*, vol. 47, pp. 27733–27746, 2022 [en línea]. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.06.154>
- [7] T. Boushaki, H. Zaidaoui, S. Chakchak, A. Ghabi, A.I.A. El-Rahman, A.F. Ghoniem. “Impact of Oxygen Enrichment and CO₂–H₂O Dilution on Stability and Pollutant Emissions of Non-Premixed Swirling Turbulent Flames”. *Flow Turbul Combust*, vol. 112, pp. 673–688, 2024 [en línea]. Disponible en: <https://doi.org/10.1007/s10494-023-00454-x>
- [8] S.P. Burke, T.E.W. Schumann. “Diffusion flames”. *Proceedings of the Symposium on Combustion*, vol. 1–2, pp. 2–11, 1928 [en línea]. Disponible en: [https://doi.org/10.1016/S1062-2888\(65\)80003-X](https://doi.org/10.1016/S1062-2888(65)80003-X)
- [9] F.G. Roper. “The prediction of laminar jet diffusion flame sizes: part I. theoretical model”. *Combust Flame*, vol. 29, pp. 219–226, 1977 [en línea]. Disponible en: [https://doi.org/10.1016/0010-2180\(78\)90137-2](https://doi.org/10.1016/0010-2180(78)90137-2)
- [10] F.G. Roper, C. Smith, A.C. Cunningham. “The prediction of laminar jet diffusion flame sizes: part II. experimental verification”. *Combust Flame*, vol. 29, pp. 227–234, 1977 [en línea]. Disponible en: [https://doi.org/10.1016/0010-2180\(77\)90113-4](https://doi.org/10.1016/0010-2180(77)90113-4)
- [11] C. Zoppou, J.H. Knight, “Comment on: A space-time accurate method for solving solute transport problems by S. G. Li, F. Ruan, and D. McLaughlin”. *Water Resour Res*, vol. 30, pp. 3233–3235, 1994 [en línea]. Disponible en: <https://doi.org/10.1029/94WR01492>
- [12] D.J. Mariños Rosado, A.Z. Mendiburu, E.B. Machin, D.T. Pedroso, J.A. de Carvalho. “Theoretical study of the expansion of Roper’s theory on the laminar jet diffusion flame length in 2D and 3D in natural gas and hydrogen mixtures”. *Int J Hydrogen Energy*, vol. 77, pp. 1352–1374, 2024 [en línea]. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2024.06.277>
- [13] P.K. Kundu, I.M. Cohen. *Fluid Mechanics*, Second edition, Academic Press, Orlando, Florida, 2002 [PDF]. Disponible en: <https://dl.icdst.org/pdfs/files1/c1267d289a227533bb6042b5abb716e5.pdf>
- [14] T. Geoffrey. “Dispersion of soluble matter in solvent flowing slowly through a tube”. *Proceeding of the Royal Society of London, Mathematical and Physical Sciences*, vol. 219, pp. 186–203, 1953 [en línea]. Disponible en: <https://doi.org/10.1098/rspa.1953.0139>
- [15] C.J. Chen, H.C. Chen. “Finite Analytic Numerical Method for Unsteady Two-Dimensional Navier-Stokes Equations”, *J Comput Phys*, vol. 53, pp. 209–226, 1984 [en línea]. Disponible en: [https://doi.org/https://doi.org/10.1016/0021-9991\(84\)90038-X](https://doi.org/https://doi.org/10.1016/0021-9991(84)90038-X)
- [16] E.J. Parish, C.R. Wentland, K. Duraisamy. “The Adjoint Petrov–Galerkin method for non-linear model reduction”. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 365, pp. 112991, 2020 [en línea]. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.cma.2020.112991>
- [17] S.G. Li, F. Ruan, D. McLaughlin. “A space-time accurate method for solving solute transport problems”. *Water Resour Res*, vol. 28, pp. 2297–2306, 1992 [en línea]. Disponible en: <https://doi.org/10.1029/92WR01009>
- [18] J.R. Philip. “Some exact solutions of convection-diffusion and diffusion equations”. *Water Resour Res*, vol. 30, pp. 3545–3551, 1994 [en línea]. Disponible en: <https://doi.org/10.1029/94WR01329>
- [19] C. Zoppou, J.H. Knight. “Analytical solutions for advection and advection-diffusion equations with spatially variable coefficients”. *Journal of Hydraulic Engineering*, vol. 123, pp. 144–148, 1997 [en línea]. Disponible en: [https://doi.org/10.1061/\(asce\)0733-9429\(1997\)123:2\(144\)](https://doi.org/10.1061/(asce)0733-9429(1997)123:2(144))
- [20] A. Kumar, D. Kumar, N. Kumar. “Analytical solutions of one-dimensional advection-diffusion equation with variable coefficients in a finite domain. *Journal of Earth System Science*, vol. 118, pp. 539–549, 2009 [en línea]. Disponible en: <https://doi.org/10.1007/s12040-009-0049-y>
- [21] S. Kumbinarasaiah, A. Nirmala. “Numerical solution of Advection–Diffusion Equation using Graph theoretic polynomial collocation method”. *Results in Control and Optimization*, vol. 12, pp. 100245, 2023 [en línea]. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.rico.2023.100245>
- [22] L.A. Quezada. “Experimental study of stability and emission of thermal radiation in non-premixed natural gas flames diluted with carbon dioxide”. *Federal University of Rio Grande do Sul*, 2017 [en línea]. Disponible en: <https://lume.ufrgs.br/handle/10183/178794>
- [23] Gasnet. *Gas natural: composição do gás natural comercial*, 2013 [en línea]. Disponible en: <https://www.gasnet.com.br/GasNatural/OGasCompleto#gas1>