



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO**  
PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA  
INGENIERÍA MECÁNICA – MECÁNICA APLICADA

SIMULACIÓN NUMÉRICA TRIDIMENSIONAL DE UN GASIFICADOR DE FLUJO DE  
ARRASTRE DE CARBÓN MEDIANTE UN MODELO EULERIANO

TESIS  
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:  
MAESTRO EN INGENIERÍA

PRESENTA:  
ING. LUIS HUMBERTO BERMUDEZ CORDERO

TUTOR PRINCIPAL  
DR. WILLIAM VICENTE Y RODRÍGUEZ, INSTITUTO DE INGENIERÍA

QUERÉTARO, QRO. SEPTIEMBRE 2013

**JURADO ASIGNADO:**

Presidente: DR. MARCELO LÓPEZ PARRA

Secretario: DR. SAÚL DANIEL SANTILLÁN GUTIÉRREZ

Vocal: DR. WILLIAM VICENTE Y RODRÍGUEZ

1er. Suplente: DR. ACHIM MAX LOSKE MEHLING

2do. Suplente: DR. ALEJANDRO C. RAMÍREZ REIVICH

Lugar donde se realizó la tesis: QUERÉTARO, QRO.

**TUTOR DE TESIS:**

DR. WILLIAM VICENTE Y RODRÍGUEZ

-----  
**FIRMA**

(Segunda hoja)

# ÍNDICE

RESUMEN. ....	6
1. INTRODUCCIÓN. ....	8
1.1 ANTECEDENTES. ....	9
1.2 CLASIFICACIÓN DE LOS GASIFICADORES. ....	11
1.3 ELEMENTOS PRINCIPALES DE LA GASIFICACIÓN. ....	17
1.4 PROCESOS FÍSICOS Y QUÍMICOS QUE OCURREN DURANTE LA GASIFICACIÓN. ....	18
1.4.1 SECADO. ....	19
1.4.2 PIRÓLISIS Y VOLATIZACIÓN. ....	19
1.4.3 GASIFICACIÓN Y COMBUSTIÓN. ....	20
1.5 USO DEL GAS DE SÍNTESIS. ....	22
1.6 PROBLEMA A RESOLVER. ....	22
1.7 OBJETIVO DE LA TESIS. ....	23
1.8 ESTRUCTURA DE LA TESIS. ....	23
2. ECUACIONES DE TRANSPORTE. ....	25
2.1 ECUACIONES DE CONSERVACIÓN. ....	25
2.2 COMPONENTES DE LA PARTÍCULA DE CARBÓN Y DE LA FASE GASEOSA. ....	27
2.3 ECUACIONES DEL PROCESO DE GASIFICACIÓN. ....	27
2.3.1 SECADO DE LA PARTÍCULA. ....	27
2.3.2 PIRÓLISIS (VOLATIZACIÓN). ....	28
2.3.3 COMBUSTIÓN Y GASIFICACIÓN. ....	28
2.3.3.1 REACCIONES HOMOGÉNEAS. ....	28
2.3.3.2 REACCIONES HETEROGÉNEAS. ....	30
2.4 TAMAÑO DE PARTÍCULA. ....	32
2.5 COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA DE CALOR ENTRE LA PARTÍCULA Y LA FASE GASEOSA. ....	32
2.6 FUERZA DE ARRASTE ENTRE LA PARTÍCULA Y LA FASE GASEOSA. ...	33
2.7 MODELO DE TURBULENCIA. ....	33
2.8 DISPERSIÓN TURBULENTO DE LA PARTÍCULA. ....	34

3. MÉTODO DE SIMULACIÓN DE LAS ECUACIONES. ....	36
3.1 MÉTODO DE VOLÚMENES FINITO. ....	36
3.2 MÉTODO DE LA CELDA CORTADA (CUT-CELL METHOD). ....	41
4. ANÁLISIS DE RESULTADOS DE SIMULACIÓN Y DISCUSIÓN. ....	43
4.1 CARACTERÍSTICAS Y DIMENSIONES DEL SISTEMA A SIMULAR. ....	43
4.2 DETALLES NUMÉRICOS. ....	46
4.3 ANÁLISIS DE RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN. ....	49
5. CONCLUSIONES. ....	56
APÉNDICE A - PROMEDIADO DE LAS ECUACIONES. ....	58
APÉNDICE B - ESQUEMAS DE DISCRETIZACIÓN. ....	62
BIBLIOGRAFÍA. ....	65

## **RESUMEN**

La manufactura de gases combustible a partir de combustibles sólidos ha sido una práctica antigua. En un sentido amplio, el término gasificación abarca la conversión de un combustible a base de carbono en uno del tipo gaseoso, manteniendo un valor calorífico útil. En las últimas décadas, ha existido un renacimiento de esta tecnología. Esto se debe a diferentes razones, pero destaca el dramático incremento en los costos de la energía. La percepción de que se trata de una tendencia a largo plazo causada en parte por la rápida industrialización e incremento en la demanda de energía en países como China e India ha contribuido a ver al carbón como una alternativa de energía aprovechable, particularmente por su disponibilidad tan amplia.

La generación de electricidad ha emergido como un amplio mercado nuevo para estos desarrollos, partiendo de que la gasificación es vista como una manera de mejorar la aceptación desde un punto de vista ambiental del carbón, como también para incrementar la eficiencia total de la conversión de la energía química contenida dentro del carbón en electricidad. Así, surge el interés de tecnologías de bajo costo como la gasificación de carbón.

La gasificación es un proceso muy flexible para el aprovechamiento de residuos agrícolas, madera, otros tipos de biomasa seca, carbón, etc. por medio de procesos termoquímicos. De los tipos de gasificación, el que utiliza aire como agente oxidante es el más utilizado por su bajo costo, a pesar de que se obtiene un gas con un bajo poder calorífico. El otro tipo es el que utiliza oxígeno como agente oxidante, que si bien puede ser operado a extremadamente altas temperaturas para una conversión completa del combustible, tiene la desventaja de requerir una planta de oxígeno que consume un porcentaje aproximado entre un 10 y 15% de la energía generada, con su respectivo aumento en la inversión del proyecto.

En este trabajo se presenta un modelo numérico, para la representación de los principales procesos, físicos y químicos en un gasificador de carbón por flujo de arrastre. El modelo se basa en un concepto Euleriano-Euleriano y toma en cuenta los efectos de la difusión de masa entre fases, de transferencia de calor y cantidad de movimiento entre fases. El modelo está implementado en un código de Dinámica de Fluidos Computacional comercial, *Phoenix*.

Las ecuaciones para simular el reactor del tipo “up-flow” que consiste de un combustor y un reductor separado por una garganta se basa en ecuaciones de conservación de la masa, de la energía y conservación de cantidad de movimiento de las fases. El efecto de turbulencia presentado por la fase gaseosa se determina usando el modelo  $k - \varepsilon$ .

El proceso a simular consiste en una alimentación de carbón pulverizado y char reciclado en alrededor de un 20 - 40% con cerca de un 80% del aire total inyectado tangencialmente dentro del combustor a través de 2 juegos, de 4 inyectores cada uno a 0.30 y 0.60 metros del fondo. El remanente de carbón pulverizado con cerca de un 20% del aire total es inyectado dentro del reductor a través de 4 inyectores a un altura de 2.80 metros. En el combustor, el carbón pulverizado es volatilizado y reacciona rápidamente con oxígeno para producir un gas de combustión a alta temperatura, el cual es usado simultáneamente para conducir las reacciones endotérmicas char-H<sub>2</sub>O y char-CO<sub>2</sub>. En el reductor, el carbón es volatilizado bajo condiciones pobres de oxígeno para producir principalmente hidrógeno y monóxido de carbono, con un mínimo de dióxido de carbono posible.

El modelo proporciona información sobre la composición del gas de síntesis, velocidades, temperaturas de salida y presión del proceso. Al final, los resultados obtenidos son contrastados con datos disponibles en la literatura.

# **1 INTRODUCCIÓN**

En el presente capítulo se da un contexto histórico del desarrollo de la gasificación de carbón desde sus inicios y se presentan las condiciones del entorno actual en cuestiones de energéticos. También se hace un resumen de los diferentes tipos de gasificadores que existen en base a su tipo y se hace mención de los principales elementos que tienen que ver con el proceso de la gasificación de carbón. En la parte final se discuten las razones de por qué se decidió realizar el presente trabajo.

El desarrollo humano históricamente ha estado relacionado con el fuego y por lo tanto con los combustibles. Entre los primeros combustibles que el hombre utilizó se encuentra la madera, que todavía se usa en la actualidad por millones de personas para cocinar sus alimentos y calentar sus hogares. En áreas poblacionales amplias este uso ha conducido a una escasez de la madera. Por otro lado, la madera se usa para otros fines como la construcción y algunos procesos industriales.

Si bien la producción de carbón ha sido conocida por mucho tiempo, fue hasta la segunda mitad del siglo XVIII en que la producción tomó auge. No sorprende que esto haya ocurrido en Inglaterra el lugar de la Revolución Industrial. El gas combustible más importante en el primer siglo del desarrollo industrial fue el gas “town”. La primera aplicación del gas industrial fue la iluminación. Este fue seguido por producción de calor, después como materia prima para la industria química y más recientemente para la generación de energía.

En los últimos tiempos, nuestro planeta ha mostrado cambios significativos en su clima, siendo uno de los principales causantes el efecto invernadero. Esto ocurre ya que determinados gases de la atmósfera retienen parte de la energía que la superficie emite al haber sido calentada por la radiación solar. Este efecto se acentúa por la emisión a la atmósfera de ciertos gases, como el dióxido de carbono y el metano.

Durante la década pasada, una de las principales preocupaciones fue el crecimiento de la amenaza del calentamiento global. Esto está vinculado estrechamente al uso de combustibles fósiles y al acelerado incremento en las emisiones de gases de efecto invernadero. Existen otros factores como la deforestación que también contribuyen al problema. Algunos organismos como la

FAO (Food and Agriculture Organization of the United Nations) buscan imponer leyes en los países industrializados para la limitación del crecimiento futuro de las emisiones de gases de efecto invernadero. Para ello, es necesario gestionar la demanda de energía, aumentar la eficiencia energética y fomentar el uso de energías renovables.

El aprovechamiento de las fuentes de energía renovable, entre ellas la energía solar, eólica, hidráulica y uso de combustibles gaseosos generados a partir de un combustible sólido como el carbón, entre otros, toman un papel fundamental. Es por ello, que impulsar el uso de la tecnología de gasificación ha crecido tanto en los últimos años, también debido a otros factores, como el económico. Se espera que dicho crecimiento continúe en el futuro. La figura 1 muestra el desarrollo de esta tecnología en las últimas décadas.

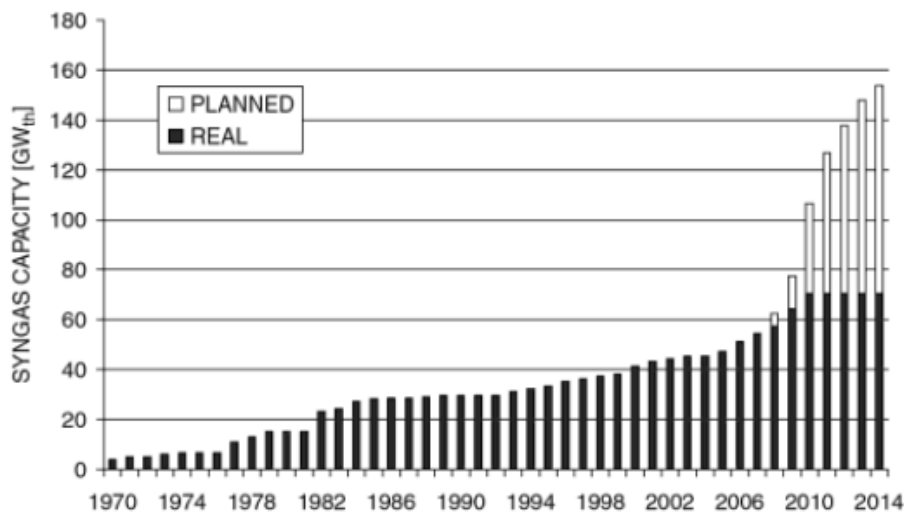


Figura 1. Capacidad acumulada de gasificación a nivel mundial [Simbeck, 2007]

## 1.1 ANTECEDENTES

Se define como gasificación la producción de un gas “pobre” a partir de un combustible a base de carbono. Desde un punto de vista práctico, los combustibles sólidos usados industrialmente pueden clasificarse en tres categorías principales: carbón, biomasa y otros. Combustibles a base de carbono están formados de colecciones complejas de polímeros orgánicos que consisten principalmente de cadenas aromáticas combinadas con hidrocarburos y otros



átomos, entre los que se encuentran el oxígeno, nitrógeno, sulfuro, potasio, sodio, etc. El carbón es el resultado principal del lento deterioro de biomasa. El grado de deterioro determina el rango del mismo.

Por gasificación se excluye la combustión, porque el gas producto no contiene valor calorífico residual. La tecnología dominante es la oxidación parcial, la cual produce un gas de síntesis que contiene hidrógeno y monóxido de carbono en rangos variables, en donde el oxidante puede ser oxígeno puro, aire y/o vapor de agua. Sin embargo, en la mayoría de los procesos se utiliza aire como agente oxidante, por razones económicas y tecnológicas. A diferencia de los procesos de combustión de carbón, la gasificación se realiza con condiciones pobres de oxígeno. Si bien nos permite sustituir a combustibles ligeros de origen fósil, la gasificación permite obtener altos rendimientos de generación de energía a partir del carbón.

La producción de carbón ha sido conocida durante largo tiempo, pero fue en Inglaterra durante la segunda mitad del siglo XVIII donde tomó auge. A finales del mismo siglo se produjo un gas a gran escala, partir de carbón (por pirólisis). Con la fundación en 1812 de la London Gas, Light and Coke Co., la gasificación finalmente se convirtió en un proceso comercial. Desde entonces, la gasificación ha tomado un rol principal en el desarrollo industrial.

El combustible gaseoso más importante en el primer siglo del desarrollo industrial fue el gas "town". El uso del gas generado con el proceso de gasificación fue la iluminación, seguida de la producción de calor, después como materia prima en la industria química y recientemente para la producción de energía eléctrica.

Durante la Primera Guerra Mundial su uso se extendió en la fabricación de motores alimentados por biomasa o carbón para vehículos automotores, barcos, trenes y generadores de energía eléctrica de pequeña escala. Sin embargo, la llegada de combustibles fósiles relativamente baratos y de "quemado" fácil como la gasolina desplazó a los gasificadores de la industria energética. En el inicio de la Segunda Guerra Mundial surgió un interés por formas alternativas de producir combustibles, retomando el uso de gasificadores en la industria automotriz. Un caso destacable de este hecho surgió en Suecia, donde en 1943 alrededor del 90% de los vehículos en el país contaban con un motor basado en un gasificador.

Cuando la producción de petróleo comenzó a estar disponible, el uso de gas combustible producto de la gasificación de carbón disminuyó. Actualmente, debido al agotamiento de los combustibles y a la alza en los precios del petróleo, las tecnologías de gasificación han sido redescubiertas como una fuente de energía alternativa que ofrece varias ventajas sobre la combustión o quemado directo de

combustibles fósiles como la gasolina y el carbón. El proceso de gasificación resulta atractivo debido a que es posible utilizar materiales de escaso valor comercial para generar energía eléctrica con alta eficiencia y baja producción de gases de efecto invernadero a un costo capital relativamente bajo.

En el presente existe una creciente preocupación por el medio ambiente, que ha generado una serie de cuestionamientos sobre continuar usando combustibles fósiles y por ello, la necesidad de producir energía sostenible ha incrementado la investigación en este campo y especialmente en el campo de la gasificación u oxidación parcial.

## 1.2 CLASIFICACIÓN DE LOS GASIFICADORES

El proceso de gasificación se lleva a cabo en el interior de equipos denominados gasificadores. Estos dispositivos son reactores de conversión termoquímica donde un combustible sólido/líquido reacciona con un agente oxidante/gasificante, produciendo un combustible gaseoso con cierta composición, generalmente una mezcla de los gases  $H_2$ ,  $CO$  y  $CO_2$ . Existen diferentes criterios para caracterizar un gasificador. Abajo se presentan algunas de las diferentes clasificaciones existentes:

### 1.- Tecnología de gasificadores en uso comercial

- *Lecho Fijo “Down Draft”*. En esta tecnología, el agente oxidante (vapor, oxígeno y/o aire) fluye a través del combustible de alimentación en la misma dirección. El gas de síntesis abandona el gasificador a una alta temperatura y puesto que todo el alquitrán pasa por un lecho muy caliente de carbonizado mientras el gas de síntesis sale, los niveles de alquitranes se mantienen bastante bajos.
- *Lecho Fijo “Up Draft”*. El gasificador “Up Draft” es esencialmente el mismo diseño que el “Down Draft”, excepto por el agente oxidante, que ahora fluye en la dirección opuesta al combustible de alimentación. El rendimiento de este tipo de gasificador es relativamente bajo. El gas de síntesis abandona el gasificador a temperaturas que generalmente resultan en una necesidad intensiva de limpieza porque el proceso produce grandes cantidades de alquitrán.

- *Lecho Fluidizado*. En este proceso se emplea un combustible de alimentación granulado que se convierte en fluidizado al introducir el oxígeno o aire. El rendimiento del combustible es más alto que el de lecho fijo, sin embargo, los niveles de alquitranes pueden ser más altos y las eficiencias de conversión pueden ser más bien bajas.
- *Flujo de Arrastre*. Esta tecnología usa combustible de alimentación atomizado, pulverizado y seco el cual es procesado usualmente con oxígeno puro. El proceso requiere alta temperatura y presión. Se utiliza principalmente para el procesamiento en gran volumen.
- *Plasma*. Se pasa una corriente eléctrica de alto voltaje a través de unos electrodos, creando un arco eléctrico. Un gas inerte pasa a través del combustible de alimentación y el arco rompe este en un gas de síntesis. Este método de gasificación opera a muy altas temperaturas y puede procesar cualquier tipo de residuo. Esta tecnología es usada frecuentemente en la producción química.

## 2.- Tipos genéricos de gasificadores:

- *Lecho Movable*. Estos son reactores de flujo contracorriente en los que el carbón entra en la parte alta de éste y el aire u oxígeno entra en la parte baja. Como el carbón se mueve lentamente hacia abajo a través del reactor, este es gasificado y las cenizas restantes caen a la parte baja del reactor. Debido a este arreglo de flujo contracorriente, el calor de reacción de las reacciones de gasificación sirven para pre-calentar el carbón antes de que éste entre a la zona de reacción de gasificación. Consecuentemente, la temperatura del gas de síntesis que sale es significativamente más baja que la temperatura que se necesita para la conversión completa del carbón.  
El tiempo de residencia del carbón dentro de un gasificador de lecho movable puede ser del orden de horas.

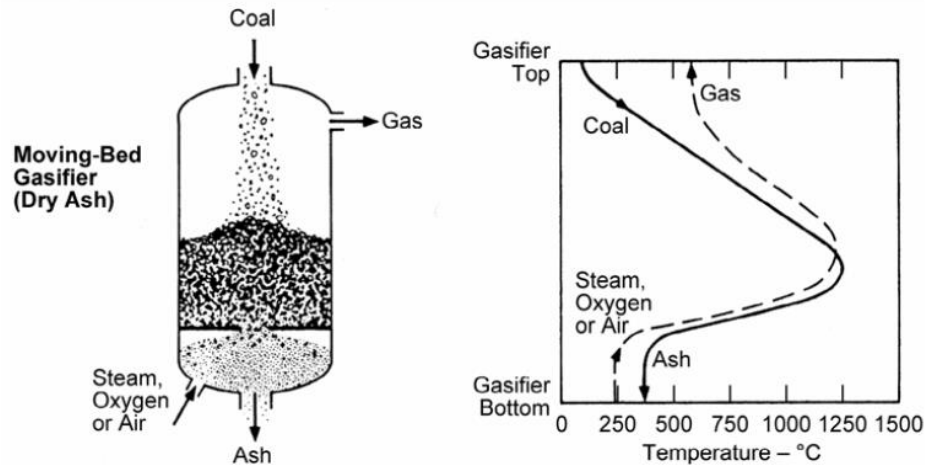


Figura 2. Diagrama de un gasificador de lecho movible [Phillips, 2005]

- Lecho Fluidizado.** En estos reactores que se consideran “bien agitados” una mezcla consistente de nuevas partículas de carbón se combina con las viejas, ya gasificadas parcial o completamente. La mezcla también fomenta temperaturas uniformes a través del lecho. El flujo del gas dentro del reactor (oxidante, vapor, o gas de síntesis reciclado) debe ser suficiente para hacer flotar las partículas de carbón dentro del lecho pero no tan alto para arrastrarlas fuera del lecho. Sin embargo, al momento en que las partículas son gasificadas se vuelven lo suficientemente pequeñas y ligeras lo que hará que se arrastren fuera del reactor. Es también importante que las temperaturas dentro del lecho sean menores que la temperatura inicial de fundición de las cenizas de carbón para evitar la aglomeración de las partículas. El tiempo de residencia del carbón dentro de un gasificador de lecho fluidizado es más corto que en el tipo de lecho movible.

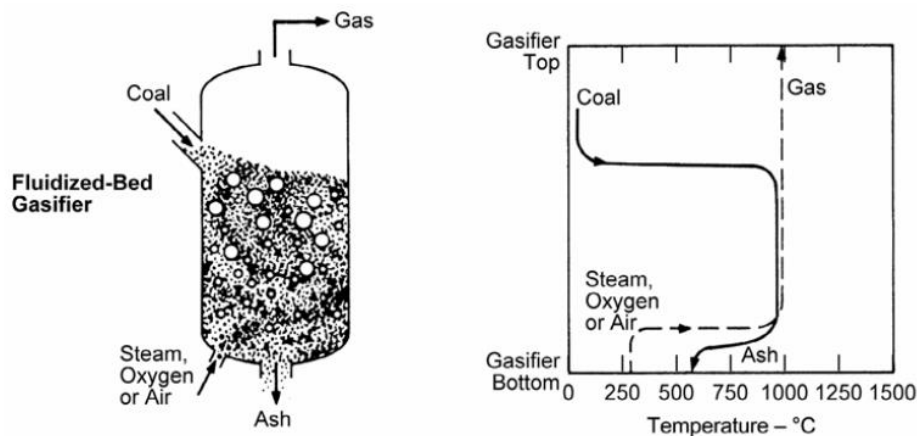


Figura 3. Diagrama de un gasificador de lecho fluidizado [Phillips, 2005]

- *Flujo de Arrastre.* Un flujo conjunto de carbón finamente pulverizado con el agente oxidante es inyectado al reactor. El carbón rápidamente se calienta y reacciona con el agente oxidante. El tiempo de residencia de un gasificador de flujo de arrastre es del orden de segundos o decenas de segundos. Debido a tan corto tiempo de residencia, los gasificadores de flujo de arrastre deben operar a altas temperaturas para alcanzar una alta conversión de carbón. Consecuentemente, la mayoría de los gasificadores de este tipo utilizan oxígeno y operan arriba de la temperatura de escorificación del carbón.

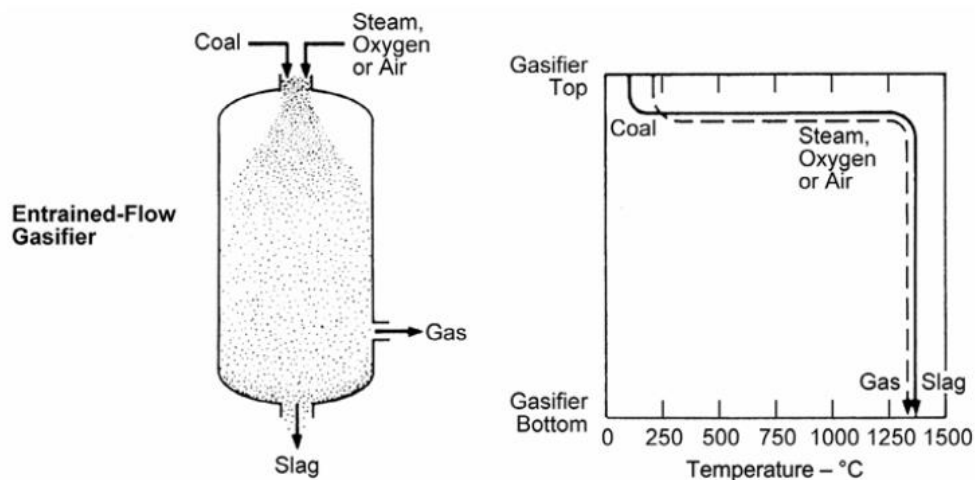


Figura 4. Diagrama de un gasificador de flujo de arrastre [Phillips, 2005]

3.- Por el tipo de agente oxidante que se utiliza:

- *Aire.* Los gasificadores de este tipo evitan la inversión de capital en una unidad productora de oxígeno pero producen un gas de síntesis con mucho menor valor calorífico que en el caso de los gasificadores que usan oxígeno. El nitrógeno en el aire típicamente diluye el gas de síntesis en un factor de 3 comparado con el del oxígeno. Con este tipo de gasificador se produce un gas de síntesis típico con valor calorífico en el orden de 100 Btu/scf. El nitrógeno que se encuentra en el aire debe ser calentado a la temperatura de salida del gasificador quemando parte del gas de síntesis, este tipo de gasificador es más favorable para los que operan a bajas temperaturas (no escorificación).
- *Oxígeno.* El oxígeno para las reacciones de gasificación se provee por una unidad de separación de aire (ASU: Air Separation Unit). Con este tipo de

gasificador se produce un gas de síntesis típico con valor calorífico en el orden de 300 Btu/scf. A diferencia del tipo de aire, no tiene el efecto negativo de capturar el CO<sub>2</sub>. Debido al efecto de dilución del nitrógeno, la presión parcial del CO<sub>2</sub> con el gas de síntesis será un tercio de aquel con el tipo de gasificador que usa oxígeno como agente oxidante. Esto incrementa el costo y decrece la efectividad del equipo para remover el CO<sub>2</sub>.

4.- Por el tipo de presión que se utiliza:

- *Atmosférico.* Los gasificadores pueden operar a presión atmosférica. Gasificadores a baja presión o atmosférica requieren de un compresor después del proceso de limpieza del gas de síntesis. Si la captura de CO<sub>2</sub> es requerida en futuros proyectos IGCC, este tipo tiene la desventaja con respecto a los presurizados que empeora el rendimiento de los procesos de absorción física que remueven el CO<sub>2</sub> del gas de síntesis.
- *Presurizado.* Los gasificadores pueden operar a presiones tan altas como 62 bar (900 psi). Estos gasificadores son más adecuados para una operación IGCC (Integrated Gasification Combined Cycle) puesto que la presión del gas de síntesis producido será la suficiente para ser alimentado directamente al sistema de control de combustible de una turbina de gas. También tienen un efecto positivo en el costo y rendimiento de la limpieza del gas de síntesis porque el flujo volumétrico del gas es mucho más pequeño que si fuera por un proceso atmosférico, así que el tamaño del equipo de limpieza del gas es más pequeño.

**Tabla 1. Tabla comparativa de las características de los distintos tipos de gasificadores de acuerdo a los parámetros de operación.**

<b>Parámetro</b>	<b>Lecho Fijo</b>	<b>Lecho Fluidizado</b>	<b>Lecho de flujo de arrastre</b>
Tamaño de partícula de combustible entrante	<51mm	<6mm	<0.15mm
Temperatura de salida del gas de síntesis	450-650°C	800-1000°C	>1260°C
Velocidad superficial	0.2m/s (Incinerador)	1-2m/s (Burbujeante) y 10-30m/s (Circulante)	27-45m/s
Demanda de agente oxidante	Baja	Moderada	Alta
Demanda de agente de vapor de agua	Alta	Moderada	Baja
Temperatura de combustión	109°C	800-1000°C	>1990°C
Subtipos de gasificadores	Descendente, Ascendente, y Cruzado	Burbujeante y Circulante	
Valor calorífico	Bajo	Alto	Alto
Contenido de alquitranes en el gas de síntesis	Muy alto en gasificador Ascendente y Muy bajo en gasificador Descendente	Bajo	Bajo
Velocidad de encendido	Muy lenta	Rápida	Muy rápida
Problemas asociados	Producción alta de alquitranes y bajo desempeño con partículas finas	Conversión de carbón baja	Enfriamiento del gas de síntesis
Emisión de óxido nítrico	400-600ppm	50-200ppm	400-600ppm
Escala de producción de energía	Capacidad pequeña y mediana	Capacidad mediana	Gran escala
Tolerancia a partículas finas	Limitada	Buena	Excelente
Tolerancia a partículas gruesas	Muy buena	Buena	Pobre

### 1.3. ELEMENTOS PRINCIPALES DE LA GASIFICACIÓN

#### ❖ Agentes de oxidación

Existen cuatro tipos básicos de agentes oxidantes utilizados en el proceso de gasificación: vapor de agua, aire, oxígeno, e hidrógeno. De acuerdo al agente usado se producirán efectos distintos en el proceso de gasificación, lo que hará variar la composición y poder calorífico del gas de síntesis.

Si se gasifica con aire, parte del carbón procesado se quema con el oxígeno presente, no obstante, el 50% del gas de síntesis es nitrógeno y en términos de poder calorífico el gas ronda en los  $5.5 \text{ MJ/m}^3$ .

La gasificación con vapor de agua u oxígeno, mejoran el rendimiento global, y aumenta la proporción de hidrógeno en el gas de síntesis. Es el agente más adecuado si se desea empearlo como materia prima para producir metanol o gasolina sintética, aunque hay que considerar el costo económico y energético debido a la producción del vapor de agua u oxígeno.

La utilización de hidrógeno como agente gasificante permite obtener un gas de síntesis que puede sustituir al gas natural, pues puede alcanzar un poder calorífico de  $30 \text{ MJ/m}^3$ . No obstante, el hidrógeno es el mejor de los combustibles, susceptible a usarse en cualquier tipo de dispositivo termodinámico, por lo que no es muy recomendable como gasificante.

#### ❖ Combustible de alimentación

El combustible sólido tiene un tamaño homogéneo, estable en el tiempo y lo suficientemente pequeño para que las reacciones se produzcan a una velocidad adecuada, en un volumen razonable.

Antes de ser alimentado a un gasificador, el combustible sólido pasa por un proceso de pulverizado. Un tamaño de partícula pequeño permite aumentar la calidad del gas de síntesis, reducir el tamaño del reactor o bien aumentar el tiempo de permanencia para el craqueo de las fracciones más pesadas y condensable (alquitranes). Un tamaño excesivamente pequeño puede hacer que el pulverizado se atasque en los conductos o que sea arrastrado junto con las cenizas volantes al exterior del reactor antes de tiempo.



La mayoría de los gasificadores operan con dimensiones de partícula en el orden de  $10^{-6}$  a  $10^{-2}$  m. El tamaño de partícula influye no únicamente en la tasa en la cual el combustible reacciona con el oxígeno y otros gases, sino en casi todos los aspectos de las operaciones del gasificador.

La forma de la partícula también influye varios fenómenos que se encuentran en los gasificadores. Las tasas de reacciones gas-sólido entre ellas la oxidación del sólido o combustión depende del área de superficie de la partícula. Así, para el mismo volumen, la partícula con mayor área de superficie debería conducir a un consumo más rápido

Los valores de humedad de la materia a gasificar deben de rondar entre el 10 y el 15%, ya que el secado excesivo del combustible de alimentación presenta dos inconvenientes. El primero es que, a medida que se seca, es más costoso en términos energéticos y económicos. En segundo lugar, un combustible sólido secado más allá de su punto de equilibrio recupera la humedad al entrar en contacto con el aire del ambiente. En general la humedad facilita la formación de hidrógeno pero reduce la eficiencia térmica.

#### **1.4 PROCESOS FÍSICOS Y QUÍMICOS QUE OCURREN DURANTE LA GASIFICACIÓN**

Cuando una muestra de partículas de combustible sólidas es calentada se llevan a cabo varios fenómenos físicos. Por supuesto, la secuencia y las características de estos procesos dependen de las propiedades físicas y químicas del combustible, así como también de las condiciones de la atmósfera que rodea la muestra, tal como temperatura, presión y composición. En adición, la tasa a la cual el calor es impuesto a las partículas sólidas juega un papel importante en las características de la descomposición térmica del combustible.

Los siguientes pasos principales suceden cuando una muestra se calienta:

- ❖ En el secado, el agua líquida abandona la partícula en forma de vapor.
- ❖ En la pirólisis o volatilización, los gases como el  $H_2$ ,  $CH_4$ ,  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $H_2O$ , etc., también como los alquitranes se liberan a los alrededores. En adición, importantes reacciones y transformaciones se llevan a cabo dentro de la partícula.
- ❖ En la gasificación, parte de los componentes de la partícula sólida reacciona con los gases de alrededor. Si este ambiente contiene oxígeno, el proceso de

gasificación se le llama combustión. Sin embargo, uno debe estar alerta de que durante la combustión, muchas otras reacciones entre la matriz del sólido y otros gases ocurre también.

#### **1.4.1 SECADO**

El secado es el primer proceso que ocurre durante el calentamiento del combustible sólido. A presión atmosférica, esto ocurre en el rango de temperatura ambiente hasta alrededor de unos 380 K.

A pesar de su aparente simplicidad, el secado de una partícula sólida es una combinación compleja de eventos que involucran 3 fases: agua líquida, vapor y el sólido poroso por donde el líquido y vapor emigran. En adición, iones de sodio y potasio, entre otros, se disuelven en el agua dentro de los poros de la partícula, y un fenómeno complejo de tensión superficial pasa durante el proceso de secado.

El combustible sólido introducido en el gasificador es secado y calentado por medio de una corriente de aire convectiva precalentada a una temperatura mayor al punto de ebullición del agua.

A la salida de este proceso la mayoría de la humedad del combustible ha sido evaporada y separada con una temperatura cercana a la de la pirólisis.

El proceso de secado es necesario para evitar ciertos problemas asociados a la cantidad de humedad presente en el combustible, ya que si la humedad del combustible es muy alta, se puede obtener un gas de síntesis con baja calidad, una eficiencia del gasificador baja, y los procesos de volatilización y oxidación se retardarían.

#### **1.4.2 PIRÓLISIS O VOLATIZACIÓN**

Es un proceso muy complejo que involucra varias reacciones, así como transferencias de calor y masa, que resultan en la liberación de mezclas de gases orgánicos e inorgánicos y líquidos de la partícula hacia el ambiente que la rodea.

Usualmente, el término pirólisis es reservado para el proceso de volatilización cuando un ambiente inerte rodea la partícula. El término hidropirólisis es usado para la volatilización que sucede en una atmósfera de hidrógeno.

Tres fracciones principales se producen durante la pirólisis de carbón:

- ❖ Gases ligeros, que incluyen H<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, etc.
- ❖ Alquitranes, compuestos de moléculas orgánicas e inorgánicas relativamente pesadas que escapan de la matriz del sólido como gases y líquido en forma de niebla.
- ❖ Carbonizado, que es el remanente del residuo sólido.

Las características, composición y cantidades de las especies químicas liberadas de la volatilización dependen de una amplia cantidad de factores. Las más importantes son los siguientes:

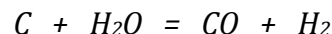
- ❖ Composición y estructura de la partícula a base de carbono original.
- ❖ Temperatura, presión y composición de la atmósfera que envuelve las partículas.
- ❖ Tasa de calor impuesta sobre las partículas a base de carbono.

### 1.4.3. GASIFICACIÓN Y COMBUSTIÓN

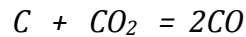
En términos generales la gasificación es la transformación de los componentes de un combustible sólido como el carbón en un gas. Esto usualmente se obtiene por tratamientos térmicos y reacciones químicas, o por una combinación de ambos. Por lo tanto, la volatilización es parte del proceso de gasificación así como la combustión o la reacción del combustible a base de carbono y oxígeno. Sin embargo, en un contexto general, las reacciones de gasificación son aquellas que ocurren entre el carbonizado y gases diferentes del oxígeno. Además, hay que tomar en cuenta que en el proceso real, las reacciones de la volatilización, gasificación, y combustión pueden ocurrir simultáneamente. Es decir, es casi imposible tener combustión sin otras reacciones típicas de la gasificación porque los gases formados durante ésta también reaccionan con la parte sólida.

Existen un inmenso número de reacciones en la gasificación. De las cuales destacan las siguientes:

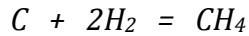
- ❖ Sólido a base de carbono y agua; esta es una de las más importantes reacciones para la producción del gas de síntesis.



- ❖ Sólido a base de carbono y dióxido de carbono, o simplemente



❖ Sólido a base de carbono e hidrógeno, o simplemente



Por supuesto, estas son simplificaciones y otros componentes estarían involucrados como reactivos y productos partiendo que un combustible a base de carbono común contiene H, N, O, S, etc.

Muchas especies resultantes de las reacciones de gasificación están en su forma reducida o menos oxidada, tal como CO en lugar de CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub> en lugar de H<sub>2</sub>O, H<sub>2</sub>S en lugar de SO<sub>2</sub>, y NH<sub>3</sub> (o HCN) en lugar de NO u otros óxidos. Como una regla burda, las reacciones de gasificación son endotérmicas. Esto explica por qué en la mayoría de procesos, la energía para promover las reacciones de la gasificación viene de la combustión parcial del combustible sólido.

El contacto entre las partículas de combustible sólido y los gases se obtiene por varios medios, los más importantes son los de lecho movable y fluidizado, así como las suspensiones.

La combustión es un proceso de gasificación en el cual el oxígeno está presente entre los gases en contacto con el combustible. La reacción principal de combustión se lleva a cabo entre el carbono y oxígeno, que conduce al monóxido y dióxido de carbono. Por las temperaturas típicas encontradas en los procesos de combustión, de manera práctica, de tal reacción sólo se produce monóxido de carbono. El dióxido de carbono sería típico a temperaturas relativamente bajas. El monóxido de carbono se oxida a dióxido si suficiente oxígeno está todavía disponible.

Muchos otros gases son producidos por la reacción de oxígeno con los componentes del combustible sólido. Usualmente, los gases de la combustión están en su forma más estable entre los posibles óxidos. Así, la oxidación del nitrógeno del combustible conduce a NO, en lugar de N<sub>2</sub>O y NO<sub>2</sub>. El nitrógeno como un componente del combustible sólido, puede ser atacado por gases reactivos como el O<sub>2</sub> mucho más fácilmente que la molécula de nitrógeno (N<sub>2</sub>) en el aire.

El tema del nitrógeno es muy importante puesto que los óxidos de nitrógeno son de los contaminantes más fuertes y responsables de parte del proceso que resulta en lluvia ácida, que se produce principalmente por la formación de ácidos nítricos y sulfúricos en la atmósfera a partir de los óxidos de nitrógeno y de sulfuro (NO<sub>x</sub> y

SO<sub>x</sub>). Dichos ácidos regresan a la superficie de la tierra, lo que causa daños en la salud y en el ambiente.

## 1.5 USO DEL GAS DE SINTESIS

El gas de síntesis es utilizado en procesos de combustión interna y externa:

- ❖ Interna: Para motores con chispa (gas pobre solamente) y motores diésel (gas pobre más un porcentaje de gasolina).
- ❖ Externa: Para turbinas de gas (gas pobre de alta calidad) y motores Stirling (gas pobre solamente).

En algunos casos el gas requiere tratamiento para eliminar alquitranes, ácidos y polvos, para aumentar el rendimiento.

## 1.6 PROBLEMA A RESOLVER

Conocer y analizar el comportamiento de los procesos fisicoquímicos que ocurren durante el proceso de gasificación es importante para obtener el rendimiento del gasificador a diferentes parámetros de operación, buscando alcanzar un nivel óptimo de aprovechamiento de los combustibles sólidos.

El medio en el que se desarrolla el proceso de gasificación es turbulento, por lo cual las propiedades del sistema varían de manera temporal y espacial. Así, para poder modelar dicho movimiento de forma precisa es necesario proponer un modelo matemático que permita resolver y analizar la naturaleza turbulenta del proceso.

El análisis numérico de este proceso posee una gran complejidad debido al gran número de reacciones de cada especie (cinética química) y a la turbulencia del flujo, así como su interacción. Para obtener dicho análisis se puede utilizar un método de simulación numérica computacional. Este método es una herramienta de gran utilidad para este tipo de estudios, en los cuales, un análisis por método experimental, es poco conveniente debido a los altos costos de construcción de

prototipos o modelos físicos. Al mismo tiempo, un método experimental puede conllevar un inherente riesgo de desastre o perjuicio humano al realizar las pruebas (prueba y error) para buscar las mejoras pertinentes.

El método de simulación numérica es muy conveniente dado que los resultados que proporciona pueden ser confiables y de exactitud aceptable para una aplicación en un caso real.

Esta tesis se basa en un modelo de simulación numérica computacional, en donde se simulará el proceso de gasificación de un combustible sólido, en este caso, el carbón, en un gasificador de flujo de arrastre.

La simulación se hace mediante la resolución de las ecuaciones de conservación de la masa, de la cantidad de movimiento y la energía de cada una de las fases, así como su interacción entre ambas. La turbulencia del proceso es considerada mediante un modelo del tipo  $k - \varepsilon$ . La solución de estas ecuaciones se lleva a cabo mediante el método de volúmenes finitos.

## **1.7 OBJETIVO DE LA TESIS**

Simular los procesos internos de la gasificación de carbón (pulverizado), en un gasificador de flujo de arrastre en tres dimensiones, mediante un modelo de Dinámica de Fluidos Computacional para reproducir, de manera cuantitativa, el comportamiento de las variables de operación. Del mismo modo, los resultados serán comparados respecto a los valores experimentales obtenidos en un gasificador similar y a las mismas condiciones para validar el modelo numérico.

## **1.8 ESTRUCTURA DE LA TESIS**

Esta tesis se divide en cinco capítulos, el primero de ellos es la introducción, donde se da un breve panorama de la importancia del proceso de gasificación de carbón y su relevancia actual en la generación de energía eléctrica al usar el gas de síntesis con bajos índices de contaminantes, a un menor costo, así como la importancia del problema planteado para fines futuros de investigación.

En el segundo capítulo se presentan las ecuaciones que dominan el proceso.

En el tercer capítulo se da una introducción sobre el método de solución por volúmenes finitos, el cual permite resolver las ecuaciones de transporte planteadas en el segundo capítulo.

La simulación numérica realizada con el modelo numérico deducido mediante el método de volúmenes finitos se presenta en el cuarto capítulo. El análisis y resultados obtenidos en la investigación, también se describen en este capítulo.

Finalmente, en el quinto capítulo, se muestran las conclusiones basadas en los resultados obtenidos de la presente investigación, así como los posibles trabajos futuros posteriores al que aquí se presenta.

## 2 ECUACIONES DE TRANSPORTE

En este capítulo se abordan las ecuaciones de transporte para el flujo en estudio. Las ecuaciones que rigen el movimiento del flujo son: de fracción volumétrica, de cantidad de movimiento, de energía y de especies químicas para ambas fases.

Los procesos de gasificación son modelados para ambas fases, así como la interacción entre la fase sólida y gaseosa. Cabe mencionar que para el flujo se supieron las siguientes consideraciones:

- ❖ Flujo de baja velocidad ( $Ma \ll 1$ ) : Flujo incompresible
- ❖ Densidad variable solo con la Temperatura
- ❖ Viscosidad constante

Para simular el flujo turbulento se aplicó la alternativa de Ecuaciones Promediadas (Apéndice A). En esta alternativa se promedian las escalas espaciales y temporales de las fluctuaciones turbulentas y se resuelven las ecuaciones de transporte en términos de variables medias del sistema. Como resultado de este promediado, aparecen nuevos términos en las ecuaciones, los cuales son modelados mediante el modelo  $k - \varepsilon$ . Por simplificación, se omite la tilde de promedio (como superíndice), pero las variables que se presentan son variables medias.

### 2.1. ECUACIONES DE CONSERVACIÓN

Las fases sólida y gaseosa son representadas por medio de las fracciones volumétricas de cada componente. Estas fracciones volumétricas se obtienen de las ecuaciones de conservación

$$\frac{\partial(\rho_i r_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_i r_i V_i) - \nabla(\Gamma_{ri} \nabla r_i) = m_{j \rightarrow i} \quad (1)$$

donde  $r_1$  es para el gas y  $r_2$  es para el sólido (carbón),  $\rho_i$  es la densidad de la fase,  $\Gamma_{ri}$  es el coeficiente de difusión, y  $m_{j \rightarrow i}$  representa la transferencia de masa entre las fases en las reacciones heterogéneas, de secado y de volatilización, y el último término de lado izquierdo de la ecuación (1) representa los efectos de la turbulencia sobre la dispersión de las partículas.



Las fracciones volumétricas deben de cumplir la condición:

$$r_1(x, y, z, t) + r_2(x, y, z, t) = 1 \quad (2)$$

En cualquier tiempo, cualquier propiedad de la fase gaseosa o fase sólida ( $\varphi_i$ ), se puede determinar resolviendo la ecuación de conservación euleriana.

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(\rho_i r_i \varphi_i)}{\partial x} + \nabla(\rho_i r_i \varphi_i V_i) - \nabla(\Gamma_{r_i} \Phi_i \nabla r_i) - (\Gamma_{\Phi_i} r_i \nabla \Phi_i) \\ & = S_{\Phi_i} + \|\| m_{j \rightarrow i} \|\| \Phi_+ - \|\| m_{i \rightarrow j} \|\| \Phi_- + f_{j \rightarrow i} (\Phi_j - \Phi_i) \end{aligned} \quad (3)$$

En la ecuación (3)  $\Phi_+$  representa el valor proveniente de la fase en la fracción másica ( $m_{j \rightarrow i}$ ) proveniente de la fase  $j$  hacia la fase  $i$ ; De la misma forma  $\Phi_-$ .

La doble barra ( $\|\|$ ) es un operador que toma el valor máximo entre el cero y la cantidad encerrada.  $f_{j \rightarrow i}$ , es un coeficiente del factor de fricción para el transporte difusivo de  $\Phi$  entre las fases. Para la ecuación de momentum,  $f_{j \rightarrow i}$  representa la modificación de la ecuación de Navier-Stokes para un flujo a través de un lecho fijo o fuerzas volumétricas o de fricción sobre la partícula. Para la ecuación de entalpía, representa la transferencia de calor entre las fases. Finalmente  $S_{\Phi_i}$ , representa otras fuentes, por ejemplo los gradientes de presión en las ecuaciones de momentum.  $\rho_i$  es la densidad de la fase sólida o gaseosa,  $r_i$  es la fracción volumétrica de cada fase,  $V_i$  es la velocidad de la fase y  $\Gamma_{\Phi_i}$  es el coeficiente convectivo.

Los dos términos de difusión aparecen en la ecuación (3). El término  $\nabla(\Gamma_{r_i} \Phi_i \nabla r_i)$  es el transporte de  $\Phi_i$  debido a la difusión turbulenta de  $r_i$  de la ecuación (1). El término  $(\Gamma_{\Phi_i} r_i \nabla \Phi_i)$  es la fase inherente a la difusión turbulenta de  $\Phi_i$ , y esta sólo se presenta en la fase del gas. El último término es modelado de la misma manera como el caso de una sola fase del modelado de la correlación  $\overline{V' \phi'}$ .

Para la fase sólida de carbón, la ecuación (3) se resuelve para la entalpía, la velocidad en cada componente y las fracciones másicas de los componentes (carbón, carbonizado y agua). La fracción másica de la ceniza se obtiene de la suma de las otras componentes.

Para la fase gaseosa la ecuación (3) se resuelve para la entalpía, la velocidad de cada componente, la tasa de disipación, la energía cinética turbulenta, los flujos de radiación de cada componente, la energía cinética turbulenta y para las fracciones másicas de todas las especies químicas de la fase gaseosa ( $\text{CH}_4$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{O}_2$ ).

## 2.2. COMPONENTES DE LA PARTÍCULA DE CARBÓN Y DE LA FASE GASEOSA

La partícula de carbón se considera compuesta por cuatro componentes: carbón seco, agua, char y cenizas. Las composiciones de la partícula de carbón se encuentran por medio de la solución de la ecuación (3), que se calcula a través de las fracciones másicas de los componentes de la partícula.

La fracción másica de la ceniza se calcula por medio de la siguiente expresión:

$$y_2^{ceniza} = 1 - y_2^{carbón\ seco} - y_2^{agua} - y_2^{char} \quad (4)$$

Los procesos relacionados con la fase de la partícula son: el secado, la volatización del carbón seco, y las reacciones heterogéneas del char.

La fase gaseosa es modelada como una mezcla de siete especies químicas, representadas como sigue por sus fracciones másicas:  $y_1^{O_2}$  oxígeno,  $y_1^{H_2O}$  vapor de agua,  $y_1^{H_2}$  hidrógeno,  $y_1^{CO}$  monóxido de carbono,  $y_1^{CO_2}$  dióxido de carbono,  $y_1^{N_2}$  nitrógeno,  $y_1^{CH_x}$  hidrocarburo. La suma total de las fracciones másicas es igual a uno.

Las reacciones con sulfuro no se toman en cuenta, ya que este es considerado químicamente inerte y pasa directamente a las cenizas.

## 2.3. ECUACIONES DEL PROCESO DE GASIFICACIÓN

### 2.3.1. SECADO DE LA PARTÍCULA

Cada vez que la partícula contiene agua, todo el calor transferido de la fase gaseosa, es utilizado como calor latente de evaporización. La transferencia de masa asociada a este proceso es:

$$\dot{m}_{secado} = \frac{\dot{q}_{1 \rightarrow 2}}{L} \text{ para } y_2^{agua} > 0; \quad (5)$$

$$\dot{m}_{secado} = 0 \text{ para } y_2^{agua} = 0 \quad (6)$$

donde  $L$  es el calor latente de evaporización del agua, y  $\dot{q}_{1 \rightarrow 2}$  representa el calor transferido de la fase gaseosa a fase sólida.

### 2.3.2. PIRÓLISIS (VOLATIZACIÓN)

En el proceso de volatización de carbón, se considera que el carbón seco se consume para formar char y ceniza en la fase sólida, y materia volátil en la fase gaseosa.

$$1 \text{ kg de carbón seco} \rightarrow Y \text{ kg volátiles} + (1 - Y) \text{ kg char} \quad (7)$$

En la materia volátil se considerará un hidrocarburo general ( $\text{CH}_x$ ). En  $\text{CH}_x$ , el subíndice “x”, representa la relación de carbono/hidrógeno; y se calcula por medio del análisis intermedio y final del carbón.

La rapidez de volatización de la ecuación (7), se modela por medio de la siguiente ecuación:

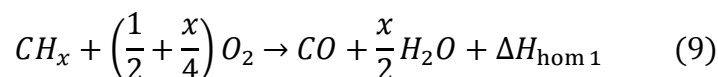
$$\dot{m}_{\text{volatización}} = -A_v Y r_1 \rho_2 y_2^{\text{coal}} e^{-\frac{E_{p1}}{RT_2}} \quad (8)$$

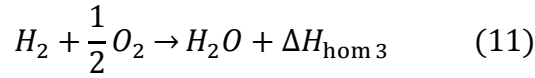
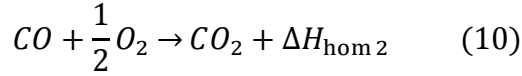
donde  $A_v$  es una constante,  $E_v$  es la energía de activación,  $R$  es la constante universal del gas,  $\rho_2$  es la densidad del carbón,  $E_{p1}$  es la energía de activación,  $T_2$  es la temperatura en la fase sólida. Las constantes  $A_v$  y  $E_v$  son constantes cinéticas y dependen del tipo de carbón. Los valores de estas constantes se obtienen de la literatura de Smith, Ryback y Zembruski [15].

### 2.3.3. COMBUSTIÓN Y GASIFICACIÓN

#### 2.3.3.1. REACCIONES HOMOGÉNEAS

La combustión de volátiles (ecuaciones homogéneas) incluye reacciones de hidrocarburo genérico, monóxido de carbono e hidrógeno. La combustión se desarrolla a través de las siguientes reacciones:





donde

$$\Delta H_{\text{hom}2} = 23.59 \frac{MJ}{kg}, \Delta H_{\text{hom}3} = 120.9 \frac{MJ}{kg} \quad y \quad (12)$$

$$\Delta H_{\text{hom}1} = \frac{PCI}{\left[ (1 - y_2^{\text{agua}}) - (y_c^{\text{char}})(\Delta H_{\text{hetero}} + \Delta H_{\text{hom}2}) \right] (y_c^{\text{volatiles}})} \quad (13)$$

donde PCI es el valor de calorífico inferior,  $y_2^{\text{agua}}$  es la fracción correspondiente al agua en la partícula de carbón,  $y_c^{\text{char}}$  es la fracción másica de carbono (C) en la reacción del carbón al char,  $y_c^{\text{volatiles}}$  es la fracción másica de carbono que se convierte en volátil.

Las tasas de reacciones químicas son calculadas por:

$$k = \min(k_{ar}, k_{EBU}) \quad (14)$$

donde  $k_{ar}$  y  $k_{EBU}$  son las tasas de mezcla cinética y turbulenta.  $k_{EBU}$  es calculada con el modelo de Eddy Break-Up:

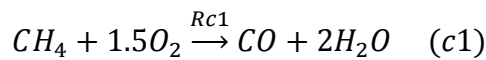
$$k_{EBU} = C_{EBU} \frac{\varepsilon}{k} \min\left(\frac{y_1^i}{S_i}, \frac{y_1^j}{S_j}\right) \quad (15)$$

donde  $y_1^i$  e  $y_1^j$  son las fracciones másicas de las especies participantes en la etapa de reacción,  $S_i$  y  $S_j$  son los coeficientes estequiométricos,  $k$  y  $\varepsilon$  son la energía cinética turbulenta y la tasa de disipación. El término  $k_{ar}$  se determina de:

$$k_{ar} = A\rho_1 e^{-\frac{E}{RT_i}} \quad (16)$$

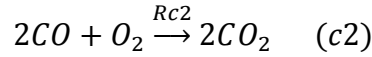
Por lo tanto, las reacciones de oxidación que se llevan a cabo son:

- Oxidación del Metano.



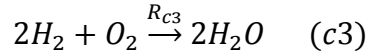
$$R_{c1} = k_{c1} T_m C_{CH_4} C_{O_2} = A_{c1} e^{\left(-\frac{E_{c1}}{RT_m}\right)} T_m C_{CH_4} C_{O_2} \quad (17)$$

- Oxidación del Monóxido de Carbono.



$$R_{c2} = k_{c2} C_{O_2} C_{CO} C_{H_2O}^{0.5} = A_{c2} e^{\left(-\frac{E_{c2}}{RT_m}\right)} C_{O_2} C_{CO} C_{H_2O}^{0.5} \quad (18)$$

- Oxidación del Hidrógeno.

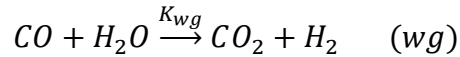


$$R_{c3} = k_{c3} C_{O_2} C_{H_2} = A_{c3} e^{\left(-\frac{E_{c3}}{RT_m}\right)} C_{O_2} C_{H_2} \quad (19)$$

$T_m$  depende de la relación de la temperatura del gas con la temperatura del sólido:

$$T_m = \begin{cases} T_g + T_s; & \text{si } T_g \leq T_s \\ T_g; & \text{si } T_g > T_s \end{cases} \quad (20)$$

-Reacción de separación del CO<sub>2</sub> con vapor de agua.



$$R_{wg} = \alpha_g K_{wg} \left( C_{CO} C_{H_2O} - \frac{C_{CO_2} C_{H_2}}{K_E} \right) \quad (21)$$

$$K_{wg} = A_{wg} e^{\left(-\frac{E_{wg}}{RT_g}\right)} \quad (22)$$

$$K_E = A_E e^{\left(\frac{E_E}{RT_g}\right)} \quad (23)$$

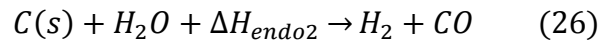
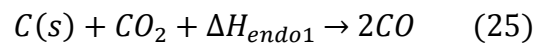
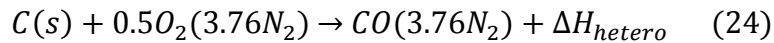
### 2.3.3.2. REACCIONES HETEROGÉNEAS

Las reacciones heterogéneas son las únicas consideradas para el proceso de transferir masa, que contribuye a la disminución del tamaño de la partícula.

Las reacciones de combustión y gasificación del carbonizado son descritas por el modelo de núcleo no reactivo y partícula reducida, el cual se fundamenta en el modelo de contracción de núcleo inerte de la partícula de carbonizado. El modelo establece el concepto de velocidad de reacción debida a los efectos simultáneos

de las diferentes resistencias internas a la transferencia de masa de una fase a otra (difusión a través de la película de gas en torno a la partícula y la cinética química intrínseca en la superficie). Las limitaciones de transferencia de masa durante una reacción heterogénea o disminución del tamaño de partícula por medio del modelo de núcleo no reactivo dependen del contenido de cenizas en el combustible.

El char producido a través del proceso de volatización es consumido por las reacciones heterogéneas de combustión y gasificación. Las reacciones heterogéneas son modeladas acorde a las siguientes ecuaciones:



CO y H<sub>2</sub> resultan de las reacciones (24) a la (26) y son incorporadas para la fase gaseosa y si las condiciones estequiométricas lo permiten, son oxidados para producir CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>O, respectivamente.

La velocidad de reacción se calcula como sigue:

$$\dot{m}_{heterogeneo} = \frac{6r_2k_c}{2Dk_d} [-k_c + (k_c^2 + 4k_d^2P_i)^{1/2}] \quad (27)$$

donde D es el diámetro de la partícula,  $P_i$  es la presión parcial de O<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>O, y  $k_c$  y  $k_d$  son las tasas cinéticas y de difusión, respectivamente. Los valores de  $k_c$  y  $k_d$  se calculan por medio de las siguientes ecuaciones:

$$k_c = A_h e^{-\frac{E_h}{RT_2}} \quad (28)$$

$$k_d = \frac{ShD_kM_c}{RT_1D} \quad (29)$$

donde Sh es el número de Sherwood,  $M_c$  es el peso molecular del carbón, y  $D_k$  es el coeficiente de difusión para el O<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O y CO<sub>2</sub>.

## 2.4. TAMAÑO DE PARTÍCULA

Como se mencionó anteriormente, a través de los procesos de combustión y gasificación, el tamaño de la partícula cambia. El tamaño de partícula se calcula por medio de un método desarrollado por Fueyo, basado en el método de Spalding. Se utiliza un escalar adicional de la fase sólida  $\Phi_s$  en dicho método, que representa la inversa de una fracción desaparecida debido a la transferencia de masa. Este método permite la selección del proceso de transferencia de masa que contribuirá al cambio del tamaño de la partícula. La variable  $\Phi_s$  es calculada por la siguiente ecuación de transporte:

$$\frac{\partial(\rho_2 r_2 \Phi_s)}{\partial t} + \nabla(\rho_2 r_2 \Phi_s V_2) - \nabla(\Gamma_{r_2} \nabla r_2) = S_{\Phi_s} \quad (30)$$

La ecuación anterior incluye todas las fuentes asociadas a la fase de las partículas, en todos los procesos que no contribuyen al cambio de tamaño de partícula. Después de obtener la variable  $\Phi_s$ , se calcula el diámetro medio, el cual se determina con la siguiente expresión:

$$D = D_i \Phi_s^{-1/3} \quad (31)$$

## 2.5. COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA DE CALOR ENTRE LA PARTÍCULA Y LA FASE GASEOSA

El flujo de calor en la interfase sólido-gas se modela como:

$$q_{j \rightarrow i} = 6 \frac{r_2}{D^2} \rho_1 Nu k_1 (T_j - T_i) \quad (32)$$

donde  $k_1$  es la conductividad térmica del gas, y  $Nu$  es el número de Nusselt, que se calcula conforme a la siguiente expresión:

$$Nu = 2.0 + 0.65 Re^{1/2} Pr^{1/3} \quad (33)$$

donde  $Re$  es el número de Reynolds y  $Pr$  el número de Prandtl.

## 2.6. FUERZA DE ARRASTRE ENTRE LA PARTÍCULA Y LA FASE GASEOSA

La fuerza de arrastre en la interfase sólido-gas se modela como sigue:

$$f_{i \rightarrow j} = f_{j \rightarrow i} = \frac{3r_2}{4D} \rho_1 C_d |V_r| \quad (34)$$

donde  $|V_r|$  es la velocidad relativa entre el gas y la partícula, y  $C_d$  es el coeficiente de arrastre, el cual se calcula como sigue:

$$C_D = \frac{24(1 + 0.15Re^{0.687})}{Re} \quad (35)$$

## 2.7. MODELO DE TURBULENCIA

El flujo turbulento es modelado usando el modelo estándar  $k - \varepsilon$ . La viscosidad turbulenta  $\nu_T$ , se calcula mediante la siguiente expresión:

$$\nu_T = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (36)$$

donde  $C_\mu$  es una constante,  $k$  y  $\varepsilon$ , son la energía cinética turbulenta y la tasa de disipación, respectivamente. Los valores de  $k$  y  $\varepsilon$  son calculados con las ecuaciones de transporte. Las ecuaciones de momentum turbulento son:

$$\frac{\partial k}{\partial t} + u_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = (P_k - \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial j} \left( \frac{\nu_T}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) \quad (37)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + u_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} = \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial j} \left( \frac{\nu_T}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) \quad (38)$$

$$P_k = \nu_T \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \left( k + \nu_T \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \quad (39)$$

Las constantes se muestran en la tabla (2).



**Tabla 2. Constantes del modelo  $k - \varepsilon$**

$C_\mu$	0.09
$\sigma_k$	1.0
$\sigma_\varepsilon$	1.314
$C_{g1}$	1.44
$C_{g2}$	1.92

## 2.8. DISPERSIÓN TURBULENTA DE LA PARTÍCULA

Las partículas son dispersas por las fluctuaciones turbulentas en el campo del flujo. La dispersión es el resultado de la correlación  $\overline{r_2'V_2'}$ . El modelo de gradiente de difusión es utilizado:

$$r_2'V_2' = -\frac{v_t}{\sigma_{r_2}} \nabla r_2 \quad (40)$$

donde  $\sigma_{r_2}$  es calculado acorde Rizk y Elgobashi, como se muestra en la siguiente ecuación:

$$\sigma_{r_2} = \left[ 1 + \frac{3}{2} 0.85 \frac{|V_r|^{2.1}}{k} \right]^{0.5} \quad (41)$$

Las ecuaciones de conservación anteriores deben ser suplementadas con ecuaciones de estado que relacionen la presión, densidad, temperatura y capacidades específicas. Para calcular la densidad de la fase gaseosa, una mezcla de gases ideales es asumida, por lo que la ley del gas ideal puede ser utilizada.

$$P = \frac{\rho_g RT_g}{W_g} \quad (42)$$

$$W_g = \sum_i W_{gi} Y_{gi}; \quad i = N_2, O_2, CO_2, CO, H_2, CH_4, H_2O \quad (43)$$

donde  $T_g$  es la temperatura de la mezcla,  $\rho_g$  la densidad de la mezcla y  $P$  la presión del sistema. La temperatura del gas se determina a partir de una mezcla de entalpías:

$$h = \sum_{k=1}^n y_k h_k \quad (44)$$

donde el término  $h_k$  es la entalpía de cada especie química de la mezcla y  $y_k$  son las fracciones másicas de los gases que componen dicha mezcla. La entalpía  $h_k$  considera tanto a la entalpía térmica como a la entalpía química.

$$h_k = \int_{T^0}^T C_{pk} dT + \Delta h_{f,k} \quad (45)$$

donde  $T^0$  es la temperatura de referencia,  $C_{pk}$  es la capacidad térmica a presión constante para cada especie química  $k$  que compone la mezcla de gases,  $\Delta h_{f,k}$  es la entalpía de formación para cada especie  $k$ .

Para el carbón, tanto la densidad como la capacidad térmica específica se consideran constantes y la temperatura es determinada por medio de la entalpía.

### 3 MÉTODO DE SIMULACIÓN DE LAS ECUACIONES

La solución de las ecuaciones que rigen el movimiento del flujo (ecuaciones de transporte), presentadas en el capítulo 2, se obtiene mediante el método de volúmenes finitos, que se describe a continuación.

#### 3.1. MÉTODO DE VOLÚMENES FINITOS

Las ecuaciones medias de continuidad, cantidad de movimiento, energía, modelo de turbulencia y demás ecuaciones que gobiernan el comportamiento del flujo, se pueden representar mediante una ecuación general, donde la variable dependiente está representada por  $\tilde{\phi}$ :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{\phi}) + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\phi}\tilde{u}_i) - \nabla \cdot (\Gamma_\phi \nabla \tilde{\phi}) = \bar{S}_\phi \quad (46)$$

donde  $\Gamma_\phi$  es el coeficiente de difusión, y  $\bar{S}_\phi$  es el término fuente. Los términos del lado izquierdo de la ecuación (46) son el término transitorio, convectivo y de difusión respectivamente. Los términos  $\Gamma_\phi$  y  $\bar{S}_\phi$  están especificados para cada variable  $\tilde{\phi}$ . En el caso de la ecuación de continuidad  $\tilde{\phi} = 1$ .

La ecuación anterior se puede discretizar con el método de volúmenes finitos. Con dicho método, el dominio se divide en pequeños volúmenes de control, como se observa en la figura 5, asociando a cada uno de ellos un punto nodal. De forma similar se discretiza el tiempo en intervalos temporales. La ecuación diferencial resultante se integra en cada volumen de control y cada intervalo temporal y el resultado es una ecuación discretizada que relaciona los valores de  $\tilde{\phi}$  para un determinado grupo de puntos nodales. Esta ecuación algebraica expresa el principio de conservación de  $\tilde{\phi}$  en el volumen finito, de la misma manera que la ecuación diferencial lo expresa para un volumen infinitesimal. La ecuación algebraica para un nodo P puede expresarse en forma general como:

$$a_P \tilde{\phi}_P = \sum_{i,I=B,W,N,S,H,L} a_i \tilde{\phi}_I + a_T \tilde{\phi}_T + B \quad (47)$$

donde el subíndice  $I$  representa las celdas vecinas,  $i$  la cara entre las celdas  $P$  e  $I$ ,  $T$  el valor correspondiente en el intervalo temporal anterior, y  $B$  el término de fuente. La deducción detallada de la ecuación anterior puede consultarse en numerosos textos de fluido-dinámica computacional, por ejemplo en Patankar, Ferziger y Peric [7].

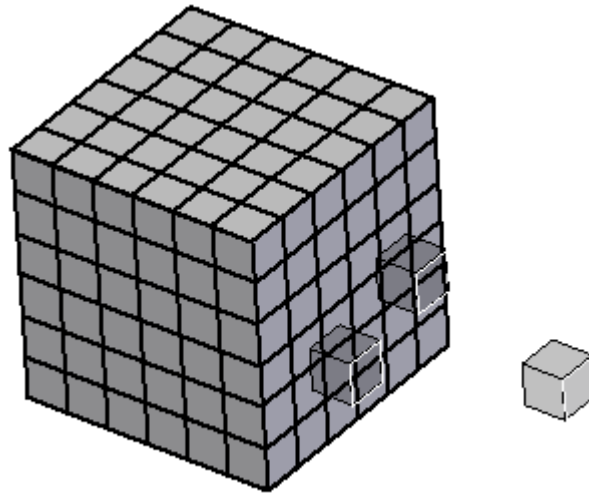


Figura 5. Representación del sistema discretizado en volúmenes finitos.

En el caso de una malla cartesiana, escalonada (“staggered”) y uniforme (celdas de iguales dimensiones espaciales), se puede emplear por sencillez un volumen de control bidimensional, como el que se muestra en la figura 6 (el espesor de la celda en dirección  $z$  puede considerarse la unidad.) En una malla escalonada, las variaciones se encuentran definidas en el centro de la celda, mientras que las componentes de velocidad en cada dirección, correspondientes a la celda, se encuentran desplazadas a las caras de la celda.

En la figura 6, se muestra la notación de la celda y de sus vecinas. Dada una celda  $P$ , sus vecinas se nombrarán según las iniciales de los puntos cardinales (en inglés) en las direcciones “ $x$ ” e “ $y$ ” y como “Low” y “High” en la dirección  $z$ . Las caras de la celda se nombran con la misma nomenclatura, pero con letras minúsculas. A su vez, el tiempo también se discretiza. Las celdas en la dirección temporal se llaman intervalos temporales. La celda  $P$  en el paso temporal se nota como  $T$ .

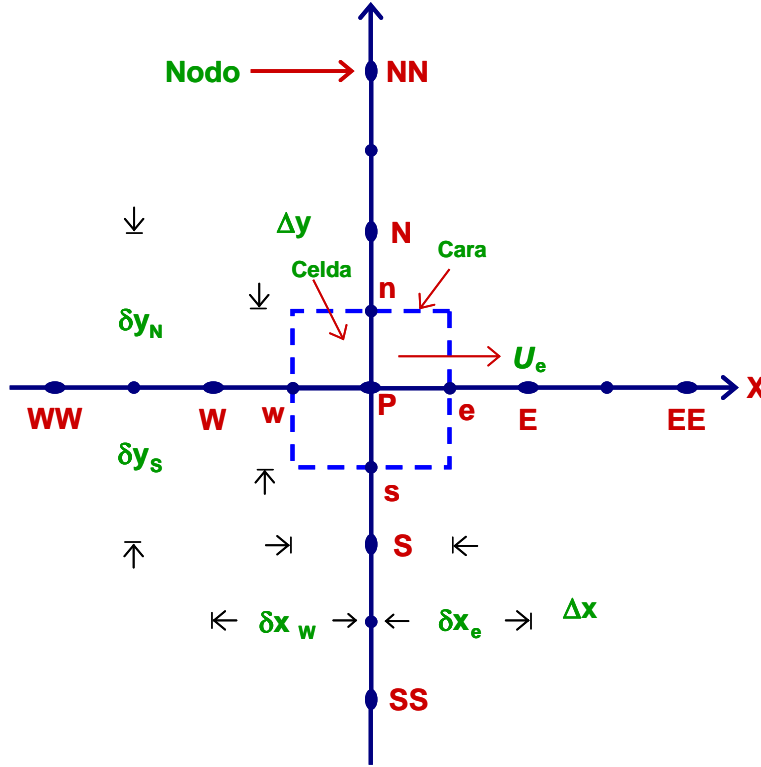


Figura 6. Diagrama esquemático de un volumen de control bidimensional

A continuación, se presentan los términos de la ecuación discretizada (47).

Definiendo tres expresiones mediante los símbolos F, D, y Pe como:

$$F = \overline{\rho \tilde{v}}_i \quad D = \frac{\Gamma}{\delta_i} \quad Pe = \frac{F}{D} \quad (48)$$

donde  $\tilde{v}_i$  es la velocidad en la cara i,  $\delta_i$  es la densidad entre los nodos que incluyen la cara i y Pe es el número de Peclet, que es la fracción entre la convección y la difusión,  $\tilde{v}$  es la velocidad de la cara i y  $x_i$ . Las expresiones F y D representan el efecto de los términos convectivo y difusivo de la ecuación de transporte (46) respectivamente.

Los coeficientes  $a_i$  de la ecuación (47) son:

$$a_i = D_i f(|Pe|_i) + \max(-F_i, 0) \quad (49)$$

Los valores F y D en la cara de la celda de la ecuación (48) son:

$$F_i = (\overline{p\tilde{v}})_i \Delta_i, \quad D_i = \frac{\Gamma_i \Delta_i}{(\delta_i)}, \quad i = n, s, e, w \quad (50)$$

donde  $\Delta_i$  es la longitud de la cara  $i$ .

Para determinar  $F_i$  se necesitan conocer  $\bar{\rho}$  y  $\tilde{u}_i$  en la cara de la celda. El cálculo del término convectivo de la ecuación de transporte (46) requiere también el conocimiento de la variable escalar,  $\tilde{\phi}$ , en la cara de la celda. La velocidad  $\tilde{v}_i$  está calculada en la cara de la malla secuenciada; pero  $\tilde{\rho}$  y  $\tilde{\phi}$  están calculados en el nodo y necesitan ser interpolados a la cara para calcular los coeficientes  $a_i$  de la ecuación discretizada (47).

La obtención de estas variables en la cara de la celda es importante para la precisión y convergencia de la solución. El cálculo de  $\tilde{\rho}$  y  $\tilde{\phi}_i$  da lugar a los llamados esquemas de discretización. La función  $f(|Pe|)$  de la ecuación (47) depende del esquema de interpolación, Apéndice B. Por ejemplo, en el esquema de diferencias desplazadas  $f(|Pe|) = 1$ , y para el sistema híbrido:

$$f(|Pe|) = \max(0.1 - 0.5|Pe|) \quad (51)$$

El coeficiente para el término transitorio es:

$$a_T = \frac{\rho_T \Delta x \Delta y}{\Delta t} \quad (52)$$

Para obtener el coeficiente  $D_i$  (49) se necesita calcular el coeficiente de difusión  $\Gamma$ , en la cara de la celda. El coeficiente  $\Gamma$  no es necesariamente una constante, sino probablemente una función de los valores variables que se conocen en los nodos, y, por lo tanto, es necesario interpolarlo a la cara. Esta interpolación puede ser aritmética o armónica. Por ejemplo, para la cara  $e$ , estas son las interpolaciones:

$$\Gamma_e = \frac{\Delta x (\Gamma_p + \Gamma_E)}{2\delta x_e} \quad (53)$$

$$\Gamma_e = \frac{2\delta x_e}{\Delta x \left( \frac{1}{\Gamma_p} + \frac{1}{\Gamma_E} \right)} \quad (54)$$

El término fuente de la ecuación general (46)  $\delta_\phi$ , se linealiza como:

$$\bar{S}_\phi = \bar{S}_{\phi,c} + \bar{S}_{\phi,v} \bar{\phi} P \quad (55)$$

donde el término  $\bar{S}_{\phi,v}$  se elige de acuerdo con la relación existente entre  $\bar{S}_{\phi}$  y  $\tilde{\phi}$ , en el caso de depender el primero del segundo. El objetivo de la linealización del término fuente es mejorar la convergencia de la solución.

Con esta suposición, los términos B y  $a_p$  de la ecuación (47) son:

$$B = \bar{S}_{\phi,c}\Delta x\Delta y + a_T\tilde{\phi}_T \quad (56)$$

$$a_p = a_e + a_w + a_n + a_s + a_T - \bar{S}_{\phi,y}\Delta x\Delta y \quad (57)$$

La ecuación (46) se aplica en cada celda del dominio, para cada  $\phi$  y para cada paso temporal  $\Delta t$ , por lo que se tiene un sistema de ecuaciones lineales (los coeficientes de  $a$  pueden depender, directa o indirectamente de  $\tilde{\phi}$ , por lo que el sistema es realmente pseudo-lineal). Para resolver el sistema de ecuaciones se puede utilizar cualquier método de resolución de ecuaciones diferencial.

En el cálculo de las velocidades a partir de las ecuaciones de cantidad de movimiento, se tiene el inconveniente de que la presión, cuyo gradiente aparece como término fuente en las ecuaciones de cantidad de movimiento, no tiene una ecuación propia para calcularla. Una solución ampliamente utilizada, es transformar la ecuación de continuidad en una ecuación para la presión.

Entre los algoritmos iterativos que se basan en este procedimiento, están los de la familia SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations). El algoritmo utilizado en esta tesis para resolver el problema de acoplamiento velocidad-presión pertenece a esta familia.

El proceso de solución de este sistema de ecuaciones es iterativo y durante éste, las ecuaciones del sistema, en general, no se cumplen; el balance entre la parte izquierda y derecha de la ecuación se denomina residuo. La convergencia del proceso iterativo se da cuando los residuos disminuyen.

Para procurar acelerar esta convergencia, se utiliza un método de relajación de algunas de las variables dependientes y propiedades. Se emplean dos tipos de relajación: la inercial y la lineal. La relajación inercial se emplea para las velocidades y los parámetros de turbulencia, y aumenta la diagonal de la matriz de coeficientes el agregar a la ecuación de cualquier variable  $\tilde{\phi}$ , el término fuente:

$$\bar{S}_{\phi,T} = \frac{\rho V_p}{\Delta t_f} (\tilde{\phi}_P^{(n-1)} - \tilde{\phi}_P^{(n)}) \quad (58)$$

donde  $V_p$  es el volumen de la cara P,  $\Delta t_f$  es el intervalo de tiempo falso y el superíndice n se refiere al número de iteración.

Para la presión y la densidad se emplea la relajación lineal dada por:

$$\tilde{\phi}_p^{(n)} = \alpha \tilde{\phi}_p^{sol} + (1 - \alpha) \tilde{\phi}_p^{(n-1)} \quad (59)$$

donde  $\alpha$  es el factor de relajación, el superíndice *sol* se refiere al valor de la propiedad proporcionado por el “solver” en la iteración actual. El factor de relajación  $\alpha$ , normalmente toma valores entre 0 y 1.

El criterio de convergencia utilizado para detener el proceso iterativo para un paso temporal dado y pasar al siguiente es tal que, para cada variable, la suma de los valores absolutos de los residuos en todo el dominio sea menor que un determinado porcentaje de un valor de referencia.

En el presente trabajo, se usa un código de fluido-dinámica computacional para resolver las ecuaciones que describen la dinámica del flujo: continuidad, cantidad de movimiento, de energía, especies químicas y turbulencia. Por lo tanto, el método de volúmenes finitos, se resuelve de manera exacta y rápida mediante el CFD, *Phoenix*.

### 3.2 MÉTODO DE LA CELDA CORTADA (CUT-CELL METHOD)

Ya se ha presentado el método de los volúmenes finitos utilizando una malla cartesiana, sin embargo, dada la complejidad de la geometría, una malla cartesiana no representa adecuadamente un dominio computacional tan complejo, por tanto es necesario recurrir a una alternativa que permita el uso de una malla cartesiana, con lo cual se facilitará la convergencia del método numérico.

Este trabajo ha planteado utilizar el método de la celda cortada, con la intención de evitar una excesiva deformación de la malla, lo cual mejora el tiempo de cálculo y el alcance de la convergencia.

El método de la celda cortada desarrollado por Ingram et al. [18] se basa en el método de los volúmenes finitos, pues divide el dominio computacional en pequeños volúmenes de control, sin embargo, su ventaja principal radica en poder utilizar geometrías muy complejas. El método divide el dominio computacional en tres tipos de celdas, celdas sólidas, celdas de flujo y celdas parcialmente sólidas.



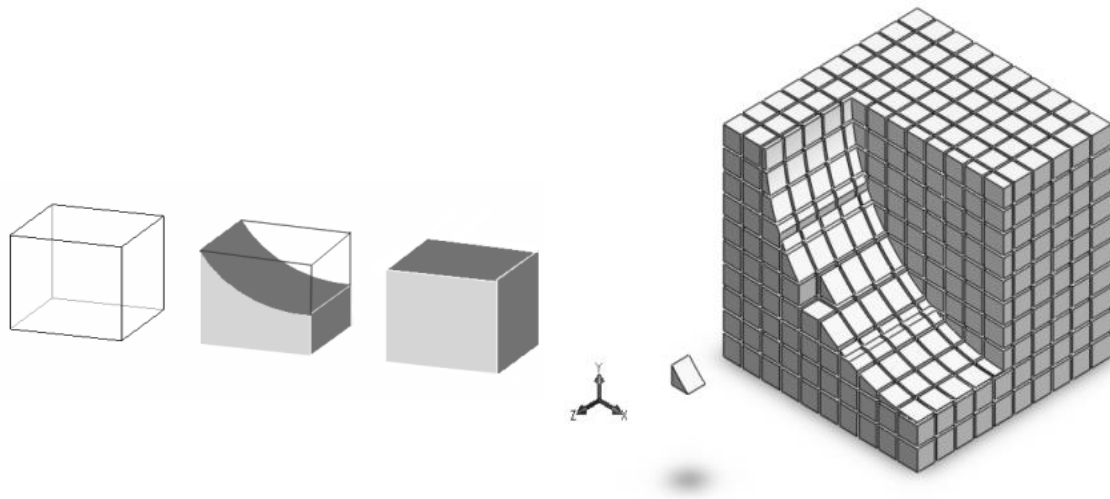


Figura 7. Representación esquemática de los tres tipos de celdas que se pueden encontrar en un dominio computacional que utiliza el método Cut-Cell [Ingram, 2003]

El tratamiento matemático para las celdas vacías es el mismo que se ha presentado al inicio de este capítulo, para las celdas sólidas al no existir ningún flujo a través de ellas no son consideradas dentro del cálculo y en las celdas parcialmente sólidas es necesario llevar a cabo interpolaciones que cuantifiquen el flujo que atraviesa por estas y lo relacionen con las propiedades de sus vecinos.

## **4 ANÁLISIS DE RESULTADOS DE SIMULACIÓN Y DISCUSIÓN**

En este trabajo se presenta un modelo numérico para la representación de los principales procesos, físicos y químicos, en un gasificador de carbón por flujo de arrastre. Se simulará los procesos internos de gasificación de carbón mediante el modelo de dinámica de fluidos computacional *Phoenix* para reproducir, de manera cuantitativa, el comportamiento real de las variables de operación.

El proceso a simular consiste en una alimentación de carbón y aire por las diferentes entradas del reactor. La combustión tiene lugar dentro del reactor, además de los procesos de gasificación, pirólisis, y secado.

### **4.1 CARACTERÍSTICAS Y DIMENSIONES DEL SISTEMA**

El gasificador del modelo es del tipo up-flow y contiene tres secciones principales: combustor, difusor y reductor (ver figura 8). La cámara de combustión se localiza en la parte baja. En esta sección, el 80% de aire y alrededor del 20 al 40% de carbón pulverizado/char reciclado se introducen a través de 2 niveles de quemadores integrados por 4 inyectores cada uno localizados a 0.30 y 0.60 m por encima del fondo. Cuando la zona de difusión es alcanzada, el carbón pulverizado es volatizado y reacciona con el oxígeno para alcanzar una alta temperatura, esto es simultáneamente usado para producir la reacción endotérmica como char-H<sub>2</sub>O y char-CO<sub>2</sub>. La sección superior corresponde a la zona de reducción donde el carbón pulverizado es volatizado bajo condiciones pobres de oxígeno (O<sub>2</sub>). Esta reacción produce mayormente hidrógeno (H<sub>2</sub>) y monóxido de carbono (CO), con la menor posible concentración de dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>). En el reductor, el 20% del aire total junto con el resto del carbón pulverizado/char reciclado se inyectan al tercer nivel de quemadores que también consiste de 4 inyectores a una altura de 2.80 metros del fondo. De este modo, los dos primeros niveles tienen condiciones de combustión y el tercer nivel condiciones de gasificación.

La figura a simular se desarrolló originalmente usando el software Solid Edge ST2 y posteriormente se llevó al código de dinámica de fluidos computacional,

*Phoenics*. La figura 8 muestra el reactor en 3D con sus respectivas dimensiones. Las propiedades del reactor, composiciones y propiedades de transporte pueden verse en la *Tabla 3*.

**Tabla 3. Propiedades del reactor, composiciones y propiedades de transporte.**

Constantes y Propiedades del proceso	Valor
Altura del reactor	$L = 13.0 \text{ m}$
Diámetro interno del reactor	$D = 1.2 \text{ m}$
Porosidad	$\varepsilon = 0.5$
Tamaño inicial de partícula	$d_{p0} = 0.00005 \text{ m}$
Contenido de cenizas	$\chi_{ash} = 0.105$
Densidad de la masa entrante	$\rho_{carbón} = \rho_{s0} = 1300 \text{ kg/m}^3$
Densidad del aire entrante	$\rho_{aire} = \rho_{g0} = 1.18 \text{ kg/m}^3$
Temperaturas de las paredes del reactor	$T_w = 600 \text{ K}$
Temperatura de los flujos entrantes	$T_w = T_{g0} = T_{s0} = 600 \text{ K}$
Presión de operación	$P_0 = 1 \text{ atm}$
Factores de corrección de los coeficientes de transferencia	$\zeta = \frac{1}{2}$ y $k^*_m = 0.045 \text{ m/s}$
Humedad del carbón entrante	$Y_{L0} = 5\% \text{ (biomasa seca)}$
Composición del aire	$Y_{N_2O} = 0.764, Y_{O_2O} = 0.23, Y_{H_2O0} = 0.006$
Composición del carbón (análisis aproximado)	$Y_{humedad} = 0.053, Y_{char} = 0.358$ $Y_{volatil} = 0.467, Y_{ash} = 0.121$
Composición del carbón sin humedad (análisis final)	$Y_{carbón} = 0.776, Y_H = 0.065$ $Y_{O_2} = 0.139, Y_N = 0.0113$
Composición del carbonizado	$\alpha = 0.2526, \beta = 0.0237, \gamma = 0.8013$

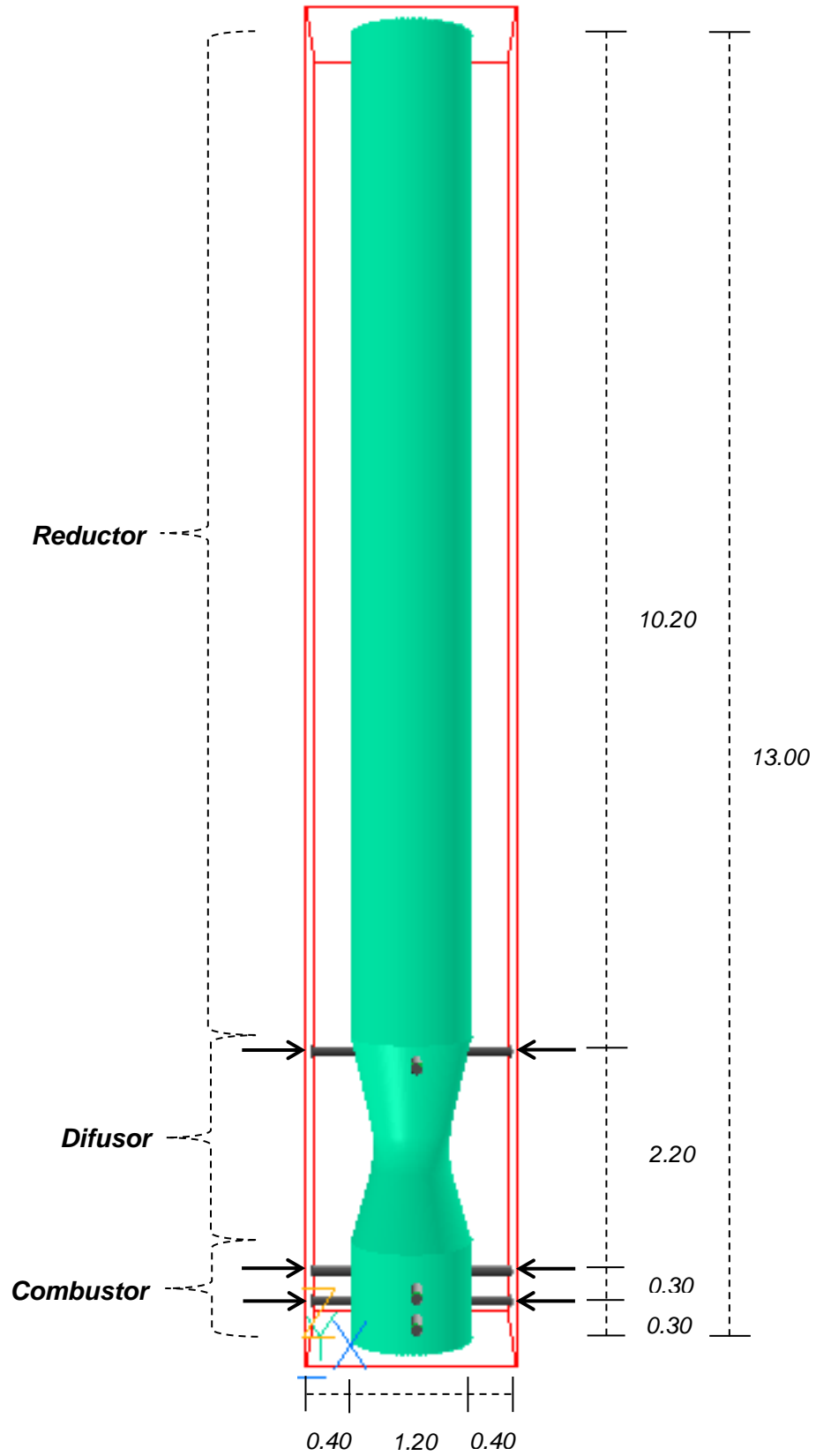


Figura 8. Gasificador de carbón por flujo de arrastre del modelo.  
 Dimensiones en metros (m)

## 4.2 DETALLES NUMÉRICOS

El sistema ha sido discretizado por medio de una malla conteniendo 9 regiones en la dirección “X”, 9 regiones en la dirección “Y” y 7 regiones en la dirección “Z”. El número de celdas en cada región se muestra detallado en las *Tablas 4, 5, y 6* en la sección siguiente.

Durante la creación del código en CFD, se han tomado especial cuidado en la definición de las condiciones de frontera del sistema, así como la correcta inicialización de las variables, límites de las variables, la cantidad de iteraciones y la relajación requerida para la convergencia adecuada de la solución. Respecto al diseño de la malla se ha puesto mayor énfasis en la zona de los quemadores definiendo una malla más fina para una mejor predicción en las distribuciones de temperatura.

Asimismo se han definido, distribuciones uniformes de temperatura y velocidad para las entradas, las condiciones de flujo completamente desarrollado a la salida, y condiciones de no deslizamiento en las paredes.

**Tabla 4. Malla (X-direction)**

<b>Regiones</b>	<b>Celdas</b>
1	9
2	1
3	1
4	15
5	3
6	15
7	1
8	1
9	9

**Tabla 5. Malla (Y-direction)**

<b>Regiones</b>	<b>Celdas</b>
1	9
2	1
3	1
4	15
5	3
6	15
7	1
8	1
9	9

**Tabla 6. Malla (Z-direction)**

<b>Regiones</b>	<b>Celdas</b>
1	7
2	3
3	4
4	3
5	40
6	3
7	150

En la figura 9 puede apreciarse el mallado aplicado. Hay que tomar en cuenta que las líneas en color “naranja” delimitan las regiones mientras que las líneas en color “azul” representan líneas ordinarias que conforman las celdas individuales dentro de cada región.

Se ha definido el punto de monitorización en base a ser un lugar apropiado (grandes cambios en las propiedades, gradientes de propiedades alto,  $\nabla P$ ) para asegurar la convergencia de la solución. Por lo tanto, el punto ha sido definido en las coordenadas siguientes:

$$X = 1 \quad Y = 1 \quad Z = 2.4$$

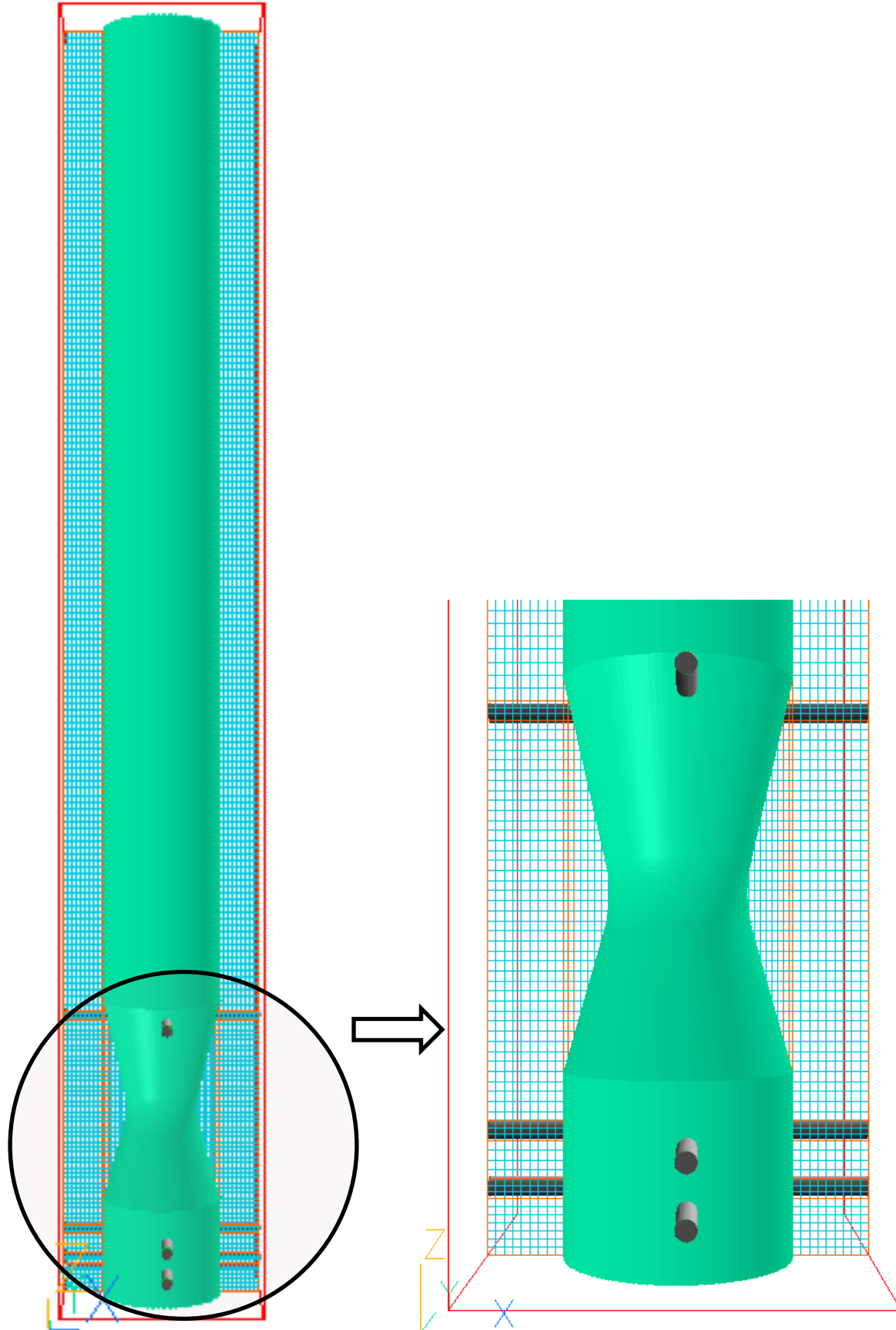
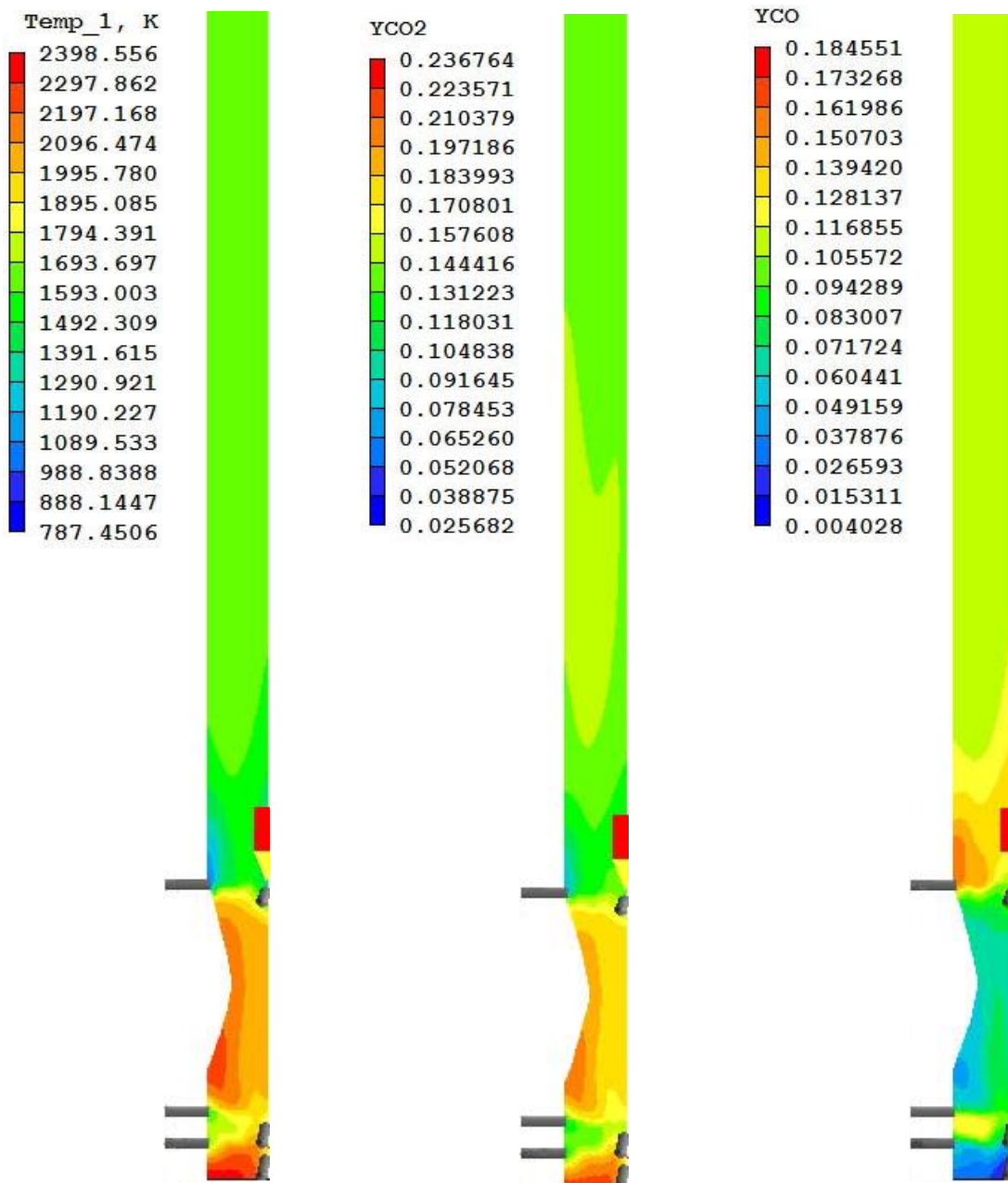


Figura 9. Malla del sistema discretizado

### 4.3 ANÁLISIS DE RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN

En general, las distribuciones simuladas muestran tener simetría radial mientras demuestran ser altamente no uniformes a lo largo de la dirección axial. Con el fin de resolver las regiones con mayor intensidad de reacciones y rápidos cambios en las variables, los resultados de la parte baja del gasificador hasta una altura de 4 m se exploran a detalle en la figura 11. En la parte más alta, el reductor (por encima de los 4 m), las distribuciones simuladas para la temperatura del gas y las composiciones del gas se muestran relativamente uniformes ambas en la dirección radial y axial.





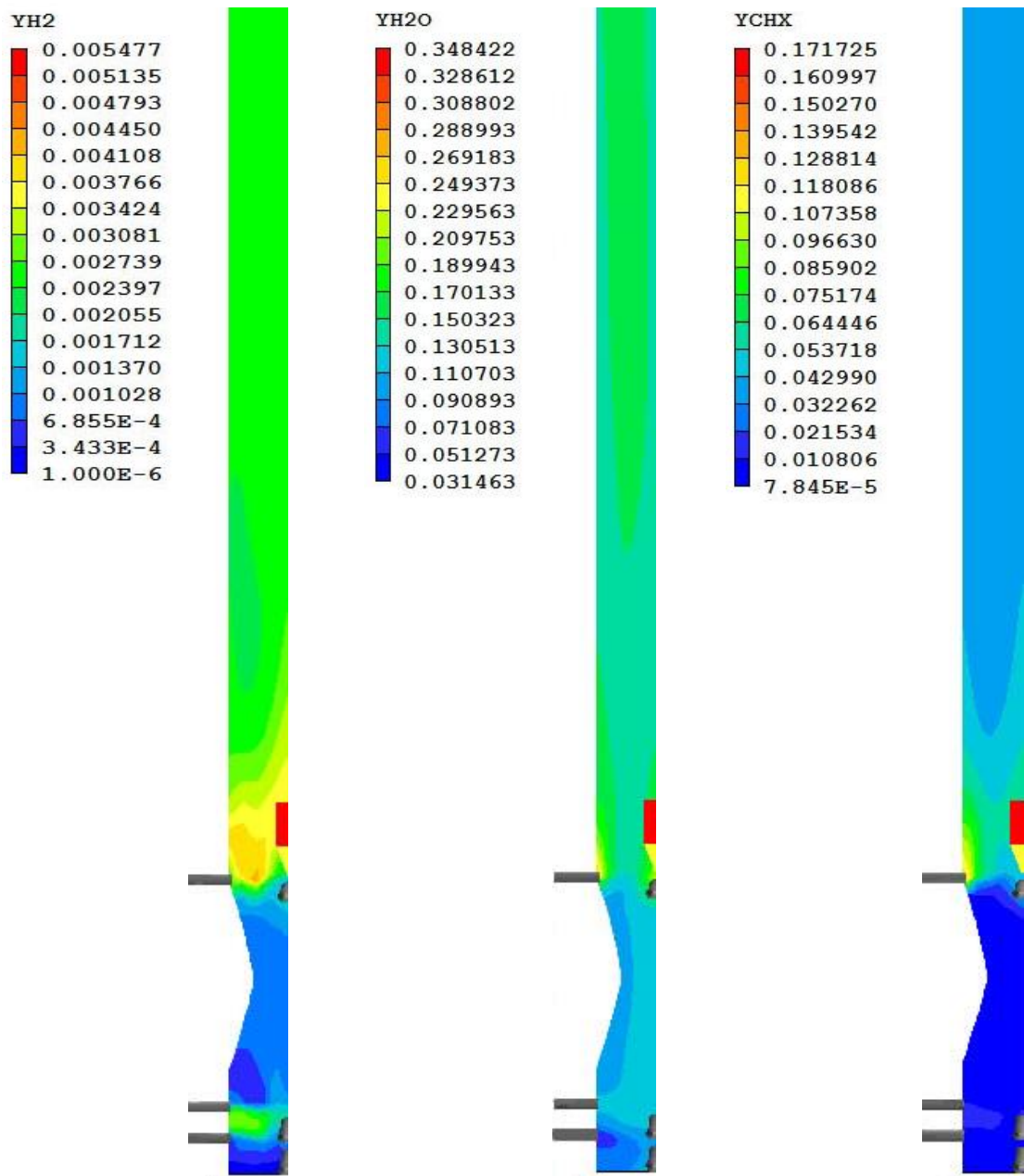
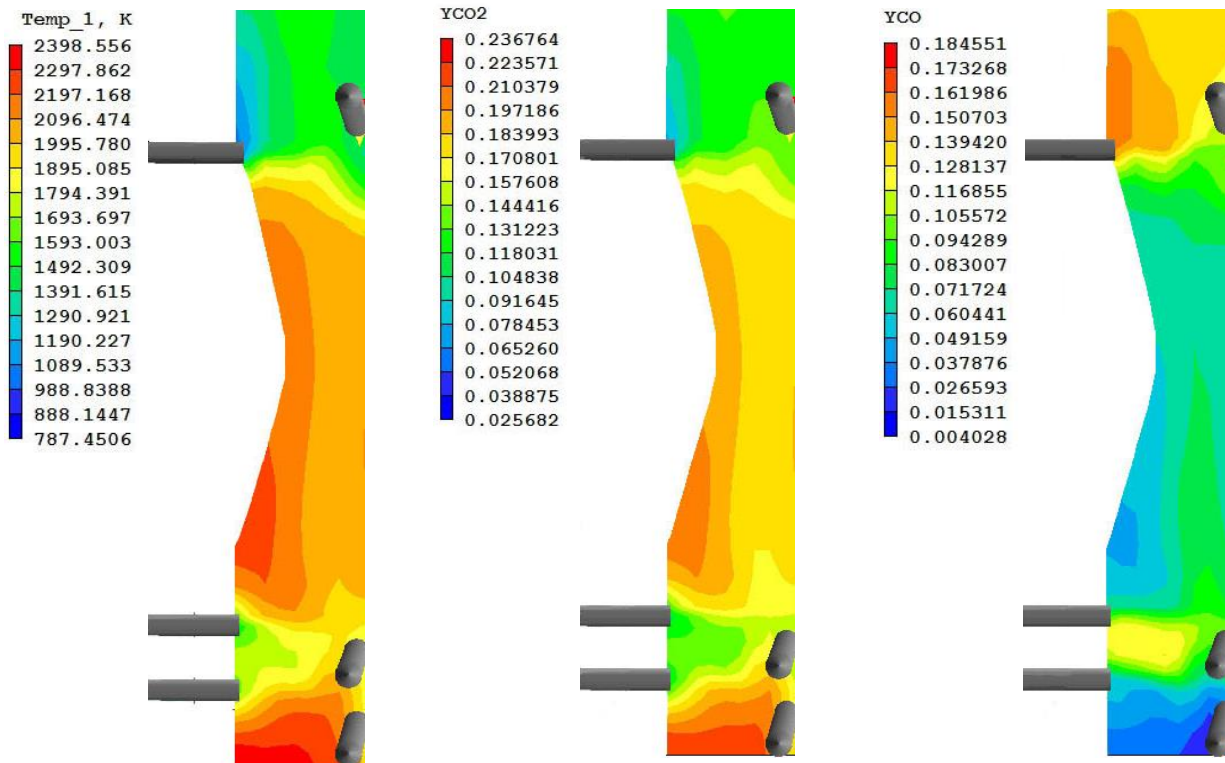


Figura 10. Contornos de la temperatura del gas (K) y las concentraciones de CO<sub>2</sub>, CO, H<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O y CH<sub>x</sub> (fracciones másicas).

En la figura 10 se muestran las distribuciones simuladas para la temperatura y la composición del gas. Puede observarse que la temperatura del gas generalmente decrece a lo largo de la altura del gasificador y está relacionada con la composición del gas.

Esto significa que altas concentraciones de  $\text{CO}_2$  y  $\text{H}_2\text{O}$  en la cámara de combustión son responsables de la alta temperatura en el combustor, mientras que la alta producción de  $\text{CO}$  y  $\text{H}_2$  en el reductor ocasionan la baja temperatura en el reductor. Las diferencias de temperatura entre el combustor y el reductor están dadas por las condiciones de alimentación del combustible, puesto que los quemadores de los niveles 1 y 2 operan bajo una condición menos rica de combustible que el reductor donde se ubican los quemadores del nivel 3.

Pasando a través del combustor, la temperatura del gas gradualmente decrece mientras alcanza los quemadores del nivel 3, donde este presenta un cambio abrupto debido a la alimentación de carbón y aire. La temperatura del gas alcanza el valor más bajo dentro del reductor en adición a bajas concentraciones de  $\text{CO}_2$  y  $\text{H}_2\text{O}$  y altas concentraciones de  $\text{CO}$  y  $\text{H}_2$ . En oposición al comportamiento del  $\text{CO}_2$ , el  $\text{CO}$  se incrementa cerca de los quemadores del nivel 3 y posteriormente decrece una vez que los gases son mezclados.



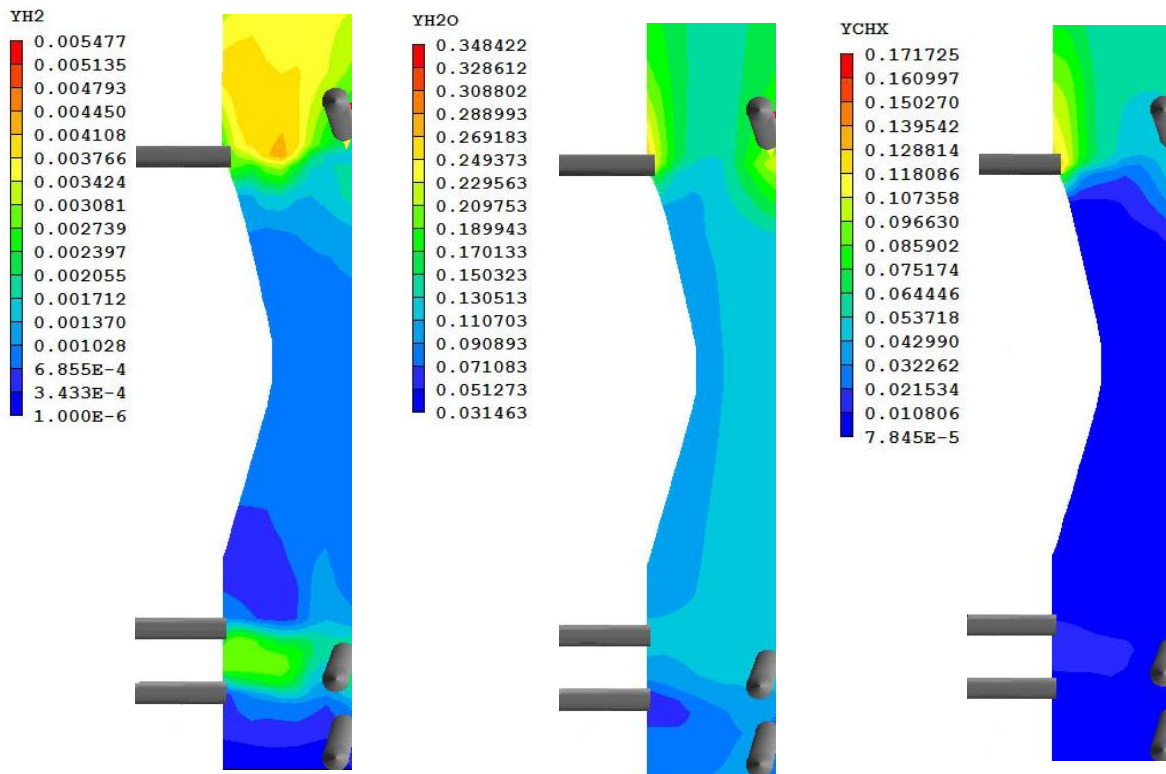


Figura 11. Contornos de la temperatura del gas (K) y las concentraciones de  $\text{CO}_2$ , CO,  $\text{H}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  y  $\text{CH}_x$  (fracciones másicas). Sección baja del gasificador.

Dado que el aire seco se asume como el agente oxidante, el  $\text{H}_2\text{O}$  producido proviene de la humedad de la partícula sólida y como un producto de la combustión de la materia volátil. Este vapor que se forma principalmente en la zona de combustión, es una de las causas en la producción de  $\text{H}_2$  en el reductor.

En la salida del gasificador, todos los componentes del gas alcanzan una concentración uniforme y una temperatura del gas también uniforme alrededor de 1600 K aproximadamente. La figura 11 muestra con detalle los lugares en donde los procesos de transferencia de masa son más intensos. La temperatura del gas incrementa rápidamente hacia el centro del combustor, alcanzando aproximadamente 2200 K.

Las distribuciones de las composiciones del gas concuerdan con la distribución de la temperatura. En los sitios en los cuales se tienen los valores más altos de temperatura del gas aparecen los valores pico de  $\text{H}_2\text{O}$  y  $\text{CO}_2$ . El oxígeno ( $\text{O}_2$ ) es consumido rápidamente después de entrar al equipo y la materia volátil es oxidada en esta región (ver figura 11). El  $\text{CO}_2$  tiende a decrecer mientras que el CO y  $\text{H}_2$  incrementan debido a las reacciones de char-  $\text{CO}_2$  y char-  $\text{H}_2\text{O}$ . La alta

temperatura dentro de la cámara de combustión se mantiene con las altas concentraciones de  $\text{CO}_2$  y una prácticamente nula concentración de  $\text{CO}$  y  $\text{H}_2$ . Esto posteriormente implica que en estas regiones la reacción de gasificación entre el  $\text{char-CO}_2$  y  $\text{char-H}_2\text{O}$  sean nulificadas por la combustión homogénea que se presenta.

Para ilustrar los diferentes procesos que toman lugar en la partícula de carbón, la figura 12 muestra cómo el tamaño promedio de la partícula decrece desde un valor inicial de  $85.7 - 9 \mu\text{m}$  debido a la combustión/gasificación heterogénea.

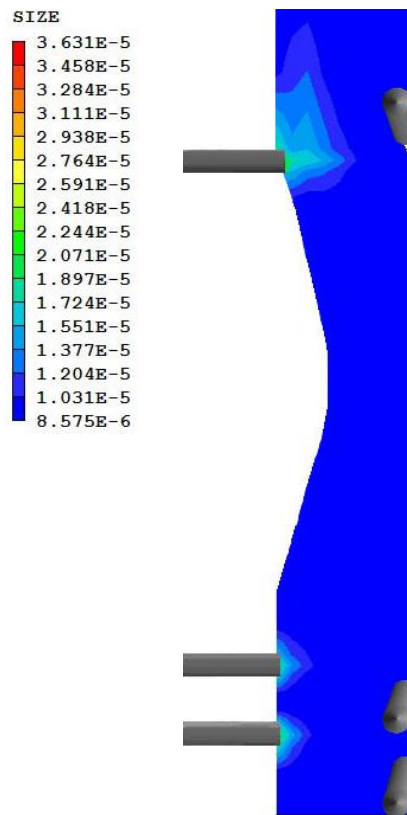


Figura 12. Contornos del tamaño de la partícula (metros).

La fase gaseosa es modelada como una mezcla de siete especies químicas, representadas como sigue por sus fracciones másicas:  $y_1^{O_2}$  oxígeno,  $y_1^{H_2O}$  vapor de agua,  $y_1^{H_2}$  hidrógeno,  $y_1^{CO}$  monóxido de carbono,  $y_1^{CO_2}$  dióxido de carbono,  $y_1^{N_2}$  nitrógeno,  $y_1^{CH_x}$  hidrocarburo. La suma total de las fracciones másicas es igual a uno.

Revisando la composición del gas a la salida del gasificador, los valores promedio de las siete especies químicas por sus fracciones másicas resultan:

$$y_1^{CO} + y_1^{N_2} + y_1^{CO_2} + y_1^{H_2O} + y_1^{H_2} + y_1^{O_2} + y_1^{CH_x} = 1 \quad (60)$$

Calculando la molalidad total  $n_T$  al dividir cada fracción másica entre su peso molecular obtenemos:

$$\frac{y_1^{CO}}{w_1^{CO}} + \frac{y_1^N}{w_1^N} + \frac{y_1^{CO_2}}{w_1^{CO_2}} + \frac{y_1^{H_2O}}{w_1^{H_2O}} + \frac{y_1^{H_2}}{w_1^{H_2}} + \frac{y_1^{O_2}}{w_1^{O_2}} + \frac{y_1^{CH_x}}{w_1^{CH_x}} = n_T \quad (61)$$

Ambos, la temperatura del gas y las propiedades del producto del gas son comparados con resultados experimentales a la salida del gasificador (ver figura 13).

Los resultados que se presentan muestran buena concordancia para los componentes de esta fase del gas, sin embargo, existen diferencias con los obtenidos experimentalmente (Araki, 1993; MHI, 1994) en el caso del vapor de agua, metano y el monóxido de carbono, por ejemplo.

La producción de vapor de agua ( $H_2O$ ) depende principalmente de la cantidad de humedad contenida en la partícula. Después del proceso de secado, se lleva a cabo el proceso de pirólisis, el cual libera una gran cantidad de metano que inmediatamente reaccionará con el oxígeno para formar  $CO$  y  $H_2O$ , incrementando los niveles de vapor de agua. Por otra parte, se obtiene la mayor cantidad del monóxido de carbono ( $CO$ ) y metano ( $CH_4$ ) durante los procesos de pirólisis y combustión del carbonizado, por esto, se requieren ajustes en los modelos químicos empleados en el presente trabajo para tener una concordancia aun mayor con los datos experimentales.

La figura 14 muestra la evolución axial de la temperatura del gas (hacia el centro del gasificador). La temperatura tiene una variación cercana  $\pm 100$  K contra los datos experimentales, esto se debe a que no fue considerado el fenómeno de transferencia de calor por radiación.

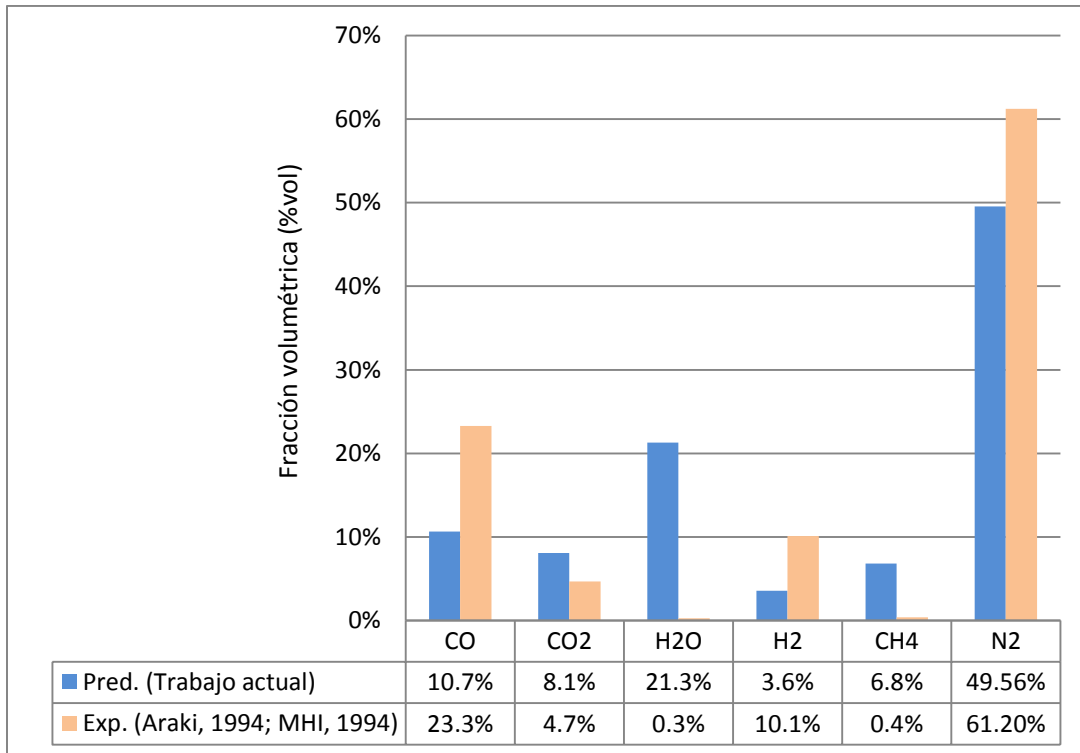


Figura 13. Comparaciones entre los datos experimentales y las predicciones (%mol). La concentración de CH<sub>4</sub> se ha usado para comparar con las concentraciones de CH<sub>x</sub>.

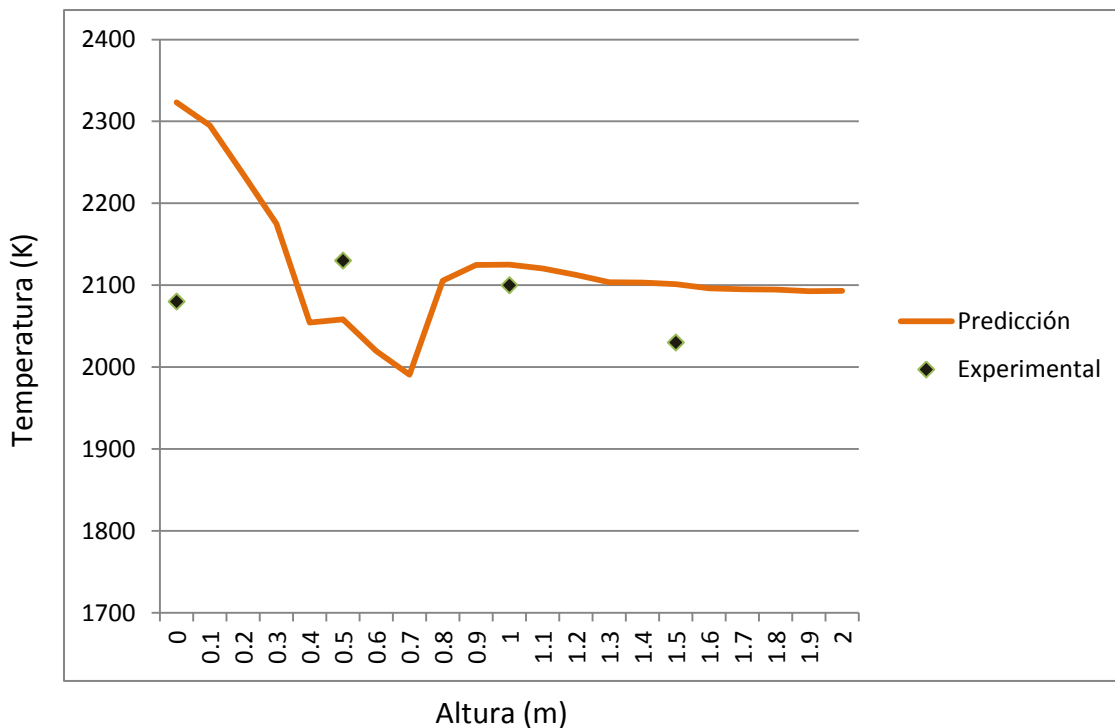


Figura 14. Evolución axial de la temperatura del gas (K) a lo largo del gasificador.

## **5 CONCLUSIONES**

El intentar quemar carbón directamente como combustible sólido dentro de un combustor de una turbina de gas es una tarea que no es posible por diversas limitaciones técnicas, además de que se produciría hollín y cenizas dentro del combustor lo cual no es conveniente para su funcionamiento. Esto aunado con afectaciones en la sección de la turbina donde se podrían desarrollar incrustaciones, erosión y corrosión en los alabes.

Es por ello que se buscan procesos donde se pueda obtener un gas útil a partir del carbón y con cierto valor calorífico para poder ser quemado en un combustor de una turbina de gas. Después de su obtención, dicho gas de síntesis lleva un proceso de purificación donde se eliminan las partículas sólidas y líquidas arrastradas por la corriente del gas. Para cumplir con las regulaciones medioambientales se filtran los contaminantes gaseosos que podrían dar lugar a corrosión en las turbinas de gas o ser contaminantes atmosféricos.

El trabajo realizado aborda esta situación. Se estudió cómo en un gasificador con medidas experimentales en tres dimensiones se desarrolla una combustión incompleta con la intención de producir un gas de síntesis con valor calorífico a partir de un combustible sólido como el carbón, eliminando los problemas que se presentarían si uno quisiera quemar el combustible sólido directamente. Esto orientado a proporcionar una alternativa de generación de energía calorífica a bajo costo y con reducidos índices de contaminación, comparados con los generados por los combustibles derivados del petróleo.

Así, en el presente trabajo se desarrolló un primer modelo numérico de simulación computacional para un gasificador de carbón por flujo de arrastre para la representación de los principales procesos físicos y químicos. Los procesos internos de gasificación de carbón fueron simulados mediante un modelo de dinámica de fluidos computacional para reproducir, de manera cuantitativa, el comportamiento real de las variables de operación.

Por lo anterior, se presenta un modelo multifase Euleriano de gasificación de carbón-aire, el cual puede ser usado en predicciones y análisis de gasificadores de carbón por flujo de arrastre con geometría compleja. Con el fin de modelar el proceso que la partícula sólida lleva a cabo desde que entra al gasificador, el modelo incorpora ecuaciones multifase adecuadamente suplementadas con leyes propias y fuentes variables descritas en secciones anteriores. El modelo fue

construido usando un código de CFD, *Phoenix*. El modelo Euleriano fue aplicado a un caso en tres dimensiones representando un gasificador de carbón por flujo de arrastre para probar su funcionalidad.

La temperatura del gas y las de las especies químicas para los componentes de esta fase del gas predichas se encuentran en buena concordancia con las mediciones reportadas experimentalmente, sin embargo, existen diferencias con los obtenidos experimentalmente [Araki, 1993; MHI, 1994] en el caso del vapor de agua, metano y el monóxido de carbono. Debido a las incertidumbres asociadas con los procesos complejos de este tipo de equipo y la precisión de las mediciones hechas en tan difícil ambiente, los resultados de esta comparación son cualitativamente correctos y satisfactorios.

La producción de vapor de agua ( $H_2O$ ) depende principalmente de la cantidad de humedad contenida en la partícula y seguido del proceso de secado se lleva a cabo el proceso de pirólisis, el cual libera una gran cantidad de metano ( $CH_4$ ) que inmediatamente reaccionará con el oxígeno para formar  $CO$  y  $H_2O$ , incrementando los niveles de vapor de agua. Por otra parte, se obtiene la mayor cantidad del monóxido de carbono ( $CO$ ) y metano ( $CH_4$ ) durante los procesos de pirólisis y combustión del carbonizado, por esto, se requieren ajustes en los modelos químicos empleados en el presente trabajo para tener una concordancia aun mayor con los datos experimentales, pudiéndose realizar ello en trabajos posteriores.

En trabajos futuros se pueden hacer nuevos cálculos haciendo variar la relación carbón-aire dentro del proceso de gasificación y la afectación de otros parámetros tales como el tamaño de la partícula y la composición del combustible sólido, así como la inclusión de un modelo para el fenómeno de transferencia de calor por radiación.



## APÉNDICE A - PROMEDIADO DE LAS ECUACIONES

En la mayor parte de los problemas de interés práctico, así como en este trabajo, el flujo es turbulento. Una de las características de este tipo de flujos es la variación aleatoria e irregular tanto en el espacio como en el tiempo de las propiedades del fluido.

Una de las alternativas para poder simular los flujos turbulentos reactivos es el promediado de las ecuaciones instantáneas de conservación. Con este método, se promedian todas las fluctuaciones de las escalas temporales y se resuelven ecuaciones de transporte para los valores medios de las propiedades del fluido. Estas ecuaciones no son cerradas, por lo cual se requieren modelos que reemplacen los términos no cerrados.

Si el flujo presenta variaciones en la densidad, se pueden usar dos tipos de promedio. Uno es el promedio de Reynolds, el cual toma a la densidad como constante. El otro es el promedio de Favre, que es ponderado con la densidad.

En este método, se presenta con el símbolo  $\Phi$  a cualquier propiedad transportada, tal como la fracción másica de cualquier especie, la entalpía y las componentes de velocidad. Los valores instantáneos de estas propiedades en términos de un promedio y una fluctuación turbulenta son:

$$\Phi = \bar{\Phi} + \Phi' \quad (62)$$

$$\Phi = \tilde{\Phi} + \Phi'' \quad (63)$$

Los dos promedios  $\bar{\Phi}$  y  $\tilde{\Phi}$  están definidos por:

$$\bar{\Phi} = \lim_{n_e \rightarrow \infty} \frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{n_e} \Phi^i \quad \text{Promediado de Reynolds} \quad (64)$$

$$\tilde{\Phi} = \lim_{n_e \rightarrow \infty} \frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{n_e} \rho^i \Phi^i \quad \text{Promediado de Favre} \quad (65)$$

En donde  $\Phi^i$  es la muestra  $i$  del conjunto de realizaciones  $n_e$  de un experimento.

Por definición:

$$\overline{\rho\Phi''} = 0; \quad \overline{\Phi''} \neq 0 \quad (66)$$

Por lo tanto, para la definición de los dos promedios se tiene:

$$\overline{\Phi} = \tilde{\Phi} + \overline{\Phi'} \quad (67)$$

$$\overline{\Phi''} = -\frac{\overline{\rho'\Phi''}}{\bar{\rho}} \quad (68)$$

$$\overline{\rho'\Phi''} = \overline{\rho'\Phi'} \quad (69)$$

$$\overline{u_i\Phi'} = u_i\Phi'' + \frac{\rho'u_i\Phi''}{\bar{\rho}} + \overline{u_i\Phi''} \quad (70)$$

Unos de los motivos para aplicar el promediado de Favre en las ecuaciones instantáneas de transporte es la forma más sencilla de las ecuaciones resultantes, que no incluyen correlaciones con fluctuaciones de la densidad. Si se aplica el promedio de Favre a las ecuaciones instantáneas de continuidad, cantidad de movimiento, energía y especies químicas, se obtienen las siguientes ecuaciones:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\mathbf{v}}) = 0 \quad (71)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{\mathbf{v}}) + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\mathbf{v}}\tilde{\mathbf{v}}) \\ = -\nabla \bar{P} + \nabla \cdot \underbrace{\left[ \mu \left\{ \nabla \tilde{\mathbf{v}} + (\nabla \tilde{\mathbf{v}})^T - \frac{2}{3}(\nabla \cdot \tilde{\mathbf{v}})\tilde{\delta} \right\} \right]}_I - \underbrace{\nabla \cdot (\bar{\rho}\widetilde{\mathbf{v}''\mathbf{v}''})}_{II} + \bar{\rho}\tilde{\mathbf{g}} \end{aligned} \quad (72)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{Y}_\alpha) + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\tilde{Y}_\alpha) = \underbrace{\nabla \cdot \bar{\Gamma}_\alpha \nabla \tilde{Y}_\alpha}_I - \underbrace{\nabla \cdot (\bar{\rho}\widetilde{\mathbf{v}''Y''_\alpha})}_{II} + \bar{S}_\alpha \quad (73)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{h}) + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\tilde{h}) = \underbrace{-\nabla \cdot \tilde{\mathbf{j}}_h}_I - \underbrace{\nabla \cdot (\bar{\rho}\widetilde{\mathbf{u}''h''})}_{II} \quad (74)$$

Aplicando el promedio de Favre en la ecuación homogénea se obtiene:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{\phi}_z) + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\tilde{\phi}_z) = \underbrace{\nabla \cdot (\bar{\Gamma}\nabla \tilde{\phi}_z)}_I - \underbrace{\nabla \cdot (\bar{\rho}\widetilde{\mathbf{u}''\phi''_z})}_{II} \quad (75)$$

Las ecuaciones anteriores tiene una forma idéntica a las correspondientes ecuaciones instantáneas, con un término adicional ( $\widetilde{u''_i\Phi''}$ ), que involucra las fluctuaciones de la velocidad y del escalar  $\Phi$ , y que representa físicamente el transporte convectivo de  $\Phi$  por movimientos turbulentos. En flujos turbulentos, el término de difusión laminar (I), de las ecuaciones anteriores, es generalmente

despreciable frente al término de difusión turbulenta (II), por lo tanto las ecuaciones anteriores se escriben como:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \vec{u}) = 0 \quad (76)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \vec{u}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \vec{u} \vec{u}) = -\nabla \bar{P} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \vec{u}'' \vec{u}'') + \bar{\rho} \vec{g} \quad (77)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{Y}_\alpha) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \vec{u} \tilde{Y}_\alpha) = -\nabla \cdot (\bar{\rho} \vec{u}'' \tilde{Y}_\alpha'') + \bar{S}_\alpha \quad (78)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{h}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \vec{u} \tilde{h}) = -\nabla \cdot (\bar{\rho} \vec{u}'' \tilde{h}'') \quad (79)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{\phi}_z) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \vec{u} \tilde{\phi}_z) = -\nabla \cdot (\bar{\rho} \vec{u}'' \tilde{\phi}_z'') \quad (80)$$

Las ecuaciones anteriores tienen una forma idéntica a las correspondientes ecuaciones instantáneas, con un término adicional  $u_i'', \Phi'$ , que involucra las fluctuaciones de la velocidad y el escalar  $\Phi$  que representa físicamente el transporte convectivo de  $\Phi$  por movimientos turbulentos.

Si el flujo es de baja velocidad ( $Ma \ll 1$ ), generalmente se supone que las fluctuaciones de la presión son despreciables. Por lo tanto, los valores medios de la densidad y la tasa de reacción química se pueden expresar como función de una presión de referencia  $p_0$ . Donde  $\tilde{\phi}_\alpha$  representa la fracción másica de las especies químicas y la entalpía, por lo tanto  $\alpha=1, \dots, N+1$ .

$$\bar{\rho} = p_0 \left( R_c T \sum_{\alpha=1}^N \frac{Y_\alpha}{W_\alpha} \right)^{-1} \quad (81)$$

$$\bar{S}_\alpha(p, \rho, \phi_\alpha) = S_\alpha(p_0, \bar{\rho}, \tilde{\phi}_\alpha) \quad (82)$$

Los flujos turbulentos  $\vec{u}'' \tilde{\Phi}''$  de las ecuaciones (77), (78), (79) y (80) son términos desconocidos que requieren modelización. El cierre del término  $\bar{\rho} \vec{u}'' \vec{u}''$  de la ecuación media de cantidad de movimiento (77) se trata con modelos de turbulencia.

Para hacer el cierre de las ecuaciones (76), (77), (78) y (79) hace falta conocer el valor medio de la tasa de reacción de la especie química  $\bar{S}_\alpha$  y la densidad  $\bar{\rho}$ . Estas cantidades se pueden escribir como:

$$\bar{\rho} = \rho(\tilde{T}, \tilde{\phi}_1, \dots, \tilde{\phi}_N) \quad (83)$$

$$\bar{S}_\alpha \approx S_\alpha(\tilde{h}, \bar{\rho}, \tilde{Y}_1, \tilde{Y}_2, \dots, \tilde{Y}_N) \quad (84)$$

La tasa de reacción media se puede representar mediante expansiones en serie de Taylor entorno a los valores medios. Sin embargo, este método tiene el inconveniente de que es necesario modelar un gran número de correlaciones de alto orden de la temperatura. Además la convergencia de la serie de Taylor es mala. Otra aproximación es la evaluación de la tasa de reacción media con valores medios, pero esta aproximación puede solamente ser válida para reacciones que son muy lentas comparadas con los cambios en el campo de flujo turbulento local. En la combustión, las principales reacciones son muy rápidas para hacer esta aproximación.

La falta de información sobre la forma de las fluctuaciones es el inconveniente que se presenta en la evaluación de estas cantidades.

## APÉNDICE B - ESQUEMAS DE DISCRETIZACIÓN

En este apéndice se presentan los esquemas lineales que se usan en la discretización del término convectivo de la ecuación general de continuidad del capítulo 2.

En la formulación de la ecuación discretizada (46), se requiere conocer la densidad  $\rho$  y la variable escalar  $\phi$  en la cara de la celda. Estas variables se calculan en el nodo de la celda, por lo que es necesario interpolar entre celdas para conocer su valor en la cara. De tal modo, el cálculo de  $\rho$  y  $\phi$  en la cara de la celda da lugar a los llamados esquemas de discretización. La determinación de los valores de estas variables en la cara es importante para la precisión  $dy$  de convergencia de la solución numérica.

A continuación se muestran los esquemas de discretización lineales y no lineales utilizados en este trabajo.

Estos esquemas se describirán en base al sistema de celdas que se ilustra en la figura 15. Como ejemplo, se obtendrá el valor de  $\phi$  en la cara  $e$  de la celda P. La velocidad en la cara  $e$  se considerará, positiva ( $u_e > 0$ ).

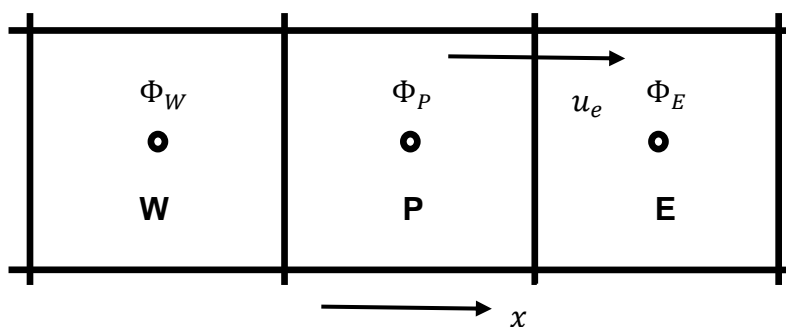


Figura 15. Diagrama esquemático de celdas.

## B.1 Esquemas lineales

### B.1.1 Diferencias desplazadas de primer orden

Con este esquema se supone que el valor de la variable  $\phi$  en la cara  $e$  es igual al nodo adyacente aguas arriba, es decir, para  $u_e > 0$ :

$$\phi_e = \phi_P$$

Esta alternativa es de implementación sencilla, acotada y altamente estable casi bajo cualquier situación, pero tiene como inconvenientes, su precisión, ser de primer orden y presentar problemas de difusión numérica. Esta falsa difusión es mayor si en el flujo hay un desalineamiento en la dirección del flujo y las líneas de malla, como, por ejemplo, en flujos de recirculación.

### B.1.2. Diferencias centradas

Este esquema supone la variación lineal de  $\phi$  entre los nodos P y E; por tanto, el valor de la cara  $e$  es:

$$\phi_e = \frac{\phi_E + \phi_P}{2}$$

Este esquema tiene una precisión de segundo orden, pero tiene el inconveniente de no estar acotado, por lo que puede presentar inestabilidades numéricas. El límite de estabilidad de este esquema viene dado en función del número de Peclet, ecuación (48) en el capítulo 3, que es un parámetro comparativo entre los procesos convectivo y difusivo.

Para situaciones en que los procesos convectivos dominan sobre los difusivos  $Pe > 2$ , por ejemplo, flujos con número de Reynolds altos, el esquema presenta oscilaciones numéricas.

### B.1.3. Híbrido

Este esquema consiste en combinar los esquemas de diferencias desplazadas y centradas para calcular el valor de la propiedad  $\phi$  en la cara del volumen de control y fue introducido por Spalding. La selección del esquema se hace en función del número de Peclet de la celda:

- ❖ Si  $P_e \leq 2$  , se usan diferencias centradas:

$$\phi_e = \frac{\phi_E + \phi_P}{2}$$

- ❖ Si  $P_e > 2$  , se utilizan diferencias desplazadas:

$$\phi_e = \phi_P$$

Para flujos con bajo número de Reynolds/Peclet, el esquema utilizado es el de diferencias centradas y, por tanto, resulta de orden 2; sin embargo, el esquema presenta problemas asociados al esquema de diferencias desplazadas cuando el flujo está dominado por los procesos de convección  $P_e > 2$ .

Los esquemas lineales de alto orden presentan una buena precisión, pero no están acotados, por lo que pueden presentar oscilaciones numéricas. Su uso no es recomendado en el cálculo de cantidades que no aceptan valores negativos, o en general de cantidades acotadas, tales como concentraciones, pues las oscilaciones introducidas por el modelo pueden sacar al escalar de su dominio de definición.

## **BIBLIOGRAFÍA**

- [1] WHITE, Frank M. (2008), *Mecánica de fluidos*, 6ta ed., McGraw-Hill/INTERAMERICANA DE ESPAÑA, S.A.U., Madrid.
- [2] FOX, Robert W. (1995), *Introducción a la mecánica de fluidos*, ed. McGraw-Hill. México.
- [3] WARK, Kenneth (1993), *Termodinámica*, ed. McGraw-Hill. México.
- [4] INCROPERA, Frank P. (1990), *Fundamentos de transferencia de calor y masa*, 3a edición, ed. PEARSON.
- [5] CENGEL, M. Boles (2006), *Termodinámica*, ed. Mc Graw Hill.
- [6] SOLTEO, Gilberto A. (2008), *Hidráulica general, Fundamentos Volumen 1*, ed. LIMUSA, Balderas 95, México, D.F.
- [7] PATANKAR, Suhas V. (1980), *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, ed. Hemisphere Publishing Corporation.
- [8] JONES, W. P. (1994), *Turbulence Modeling and Numerical Solutions Methods for Variable Density and Combustion Flows*. pp. 306-374, ed. Academic Press.
- [9] WEEBER, N. B. (1965), *Fluid Mechanics for engineers*, ed. E. & F.N. Spon Ltd. Londres.
- [10] SPALDING, D. B. (1979) *Combustion and Mass transfer*, ed. Pergamon.
- [11] SPALDING, D. B. (1980) *Mathematical Modeling of Fluid Dynamics, Heat Transfer and Mass Transfer Process, Technical Report HTS/8011*, ed. Imperial College of Science Technology and Medicine.
- [12] VICENTE, W., ESTEBAN, B., JAVIER, A. SALVADOR, O. (2003), *Modelo euleriano para la simulación de un gasificador de flujo arrastrado de carbón*, ed. Pergamon.
- [13] COLOMBA DI BLASI (NOV. 1999) *Dynamic behavior of stratified downdraft gasifiers*, ed. Pergamon.
- [14] SOUZA-SANTOS, Marcio L. (2010), *Solid Fuels Combustion and Gasification*, 2nd edition, ed. CRC Press Taylor and Francis Group.



[15] RYBAK, W., ZEMBRZUSKI, M., SMITH I.W. (1986), *Kinetics of combustion of petroleum coke and sub-bituminous coal chars: results of ignition and steady-state techniques*, Twenty-first Symposium on Combustion, The Combustion Institute.

[16] CAIXIA, Chen, MASAYUKI, Horio, TOSHINORI, Kojima (1999), *Numerical Simulation of entrained flow coal gasifiers*, Chemical Engineering Science, ed. Pergamon

[17] HIGMAN, Christopher, VAN DER BURGT, Maarten (2008), *Gasification*, 2nd edition, ed. Gulf Professional Publishing

[18] INGRAM, D.M., CAUSON, D.M., MINGHAM, C.G. (2003). *Developments in Cartesian Cut-cell methods, Mathematics and computers in simulation*, (p. 561-572), ed. Elsevier