

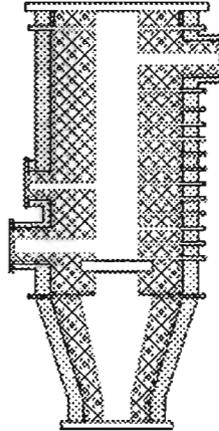


Universidad Nacional Autónoma de México

Facultad de Estudios Superiores

Zaragoza

Modelado matemático para un equipo de gasificación que opera con residuos sólidos biomásicos (madera)



Tesis

que para obtener el título

De Ingeniero Químico

Presentan

Nazario Deviana Ramírez
Oscar Posadas Mondragón

Director: M. en I. Alejandro Rogel Ramírez



F. E. S. ZARAGOZA

México D. F., Mayo de 2005

m350401



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



**FACULTAD DE ESTUDIOS
SUPERIORES ZARAGOZA**

**JEFATURA DE LA CARRERA
DE INGENIERIA QUIMICA**

OFICIO: FESZ/JCIQ/023/05

ASUNTO: Asignación de Jurado

ALUMNO: DEVIANA RAMÍREZ NAZARIO

P r e s e n t e.

En respuesta a su solicitud de asignación de jurado, la jefatura a mi cargo, ha propuesto a los siguientes sinodales:

PRESIDENTE	M. en I. Alejandro Rogel Ramírez
VOCAL	I.Q. Eduardo Vázquez Zamora
SECRETARIO	Mtro. Genaro Altamirano García
SUPLENTE	M. en C. Esteban Minor Pérez
SUPLENTE	I.Q. José Benjamín Rangel Granados

Sin más por el momento, reciba un cordial saludo.

A t e n t a m e n t e

“POR MI RAZA HABLARA EL ESPIRITU”

México, D.F., 19 de Mayo del 2005.

EL JEFE DE LA CARRERA

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'M. en C. Andrés Aquino Canchola'.

M. EN C. ANDRES AQUINO CANCHOLA



**FACULTAD DE ESTUDIOS
SUPERIORES ZARAGOZA**

**JEFATURA DE LA CARRERA
DE INGENIERIA QUIMICA**

OFICIO: FESZ/JCIQ/024/05

ASUNTO: Asignación de Jurado

ALUMNO: POSADAS MONDRAGÓN OSCAR

P r e s e n t e.

En respuesta a su solicitud de asignación de jurado, la jefatura a mi cargo, ha propuesto a los siguientes sinodales:

PRESIDENTE	M. en I. Alejandro Rogel Ramírez
VOCAL	I.Q. Eduardo Vázquez Zamora
SECRETARIO	Mtro. Genaro Altamirano García
SUPLENTE	M. en C. Esteban Minor Pérez
SUPLENTE	I.Q. José Benjamín Rangel Granados

Sin más por el momento, reciba un cordial saludo.

A t e n t a m e n t e

“POR MI RAZA HABLARA EL ESPIRITU”

México, D.F., 19 de Mayo del 2005.

EL JEFE DE LA CARRERA

A handwritten signature in black ink, appearing to be 'M. En C. Andrés Aquino Canchola', written over a circular scribble.

M. EN C. ANDRES AQUINO CANCHOLA

AGRADECIMIENTOS

A mis padres:

*Atanasio Deviana Ramírez
Guillermina Ramírez Sánchez*

Dedico el presente trabajo a los seres que más quiero y admiro, mis padres, quienes han dado gran parte de su vida para hacer de mi una persona responsable y profesionalista; por estas y muchas razones más les doy las gracias a mi mamá Guillermina Ramírez Sánchez y a mi papá Atanasio Deviana Ramírez, y esto es una prueba de lo que ellos han sembrado en mí ya que gracias a ellos he logrado uno de mis objetivos que marcan el inicio en el difícil camino de la vida.

A mis hermanos:

*Elfego Deviana Ramírez
María Laura Deviana Ramírez
Olga Lidia Deviana Ramírez*

Gracias por su apoyo, al acompañarme en el camino de mi carrera, por su comprensión y apoyo, por ser realmente ustedes y quererme como yo a ustedes.

A mi asesor Alejandro Rogel Ramírez así como a mis sinodales por su invaluable cooperación en la realización de este trabajo.

Muchas Gracias.

Nazario Deviana Ramírez

AGRADECIMIENTOS

A mis padres:

*CANDELARIO POSADAS TELLEZ
JOSEFA MONDRAGÓN HERNANDEZ*

Mi infinito agradecimiento por su apoyo incondicional. Siendo ustedes un ejemplo para mi vida de honradez, generosidad, sencillez y trabajo.

A mis profesores:

Por sus conocimientos compartidos durante mi formación académica.

A mi asesor Alejandro Rogel Ramírez así como a mis sinodales por su invaluable cooperación en la realización de este trabajo.

*Si pude ver más lejos es por que gigantes me alzaron en sus hombros
(Isaac Newton)*

Oscar Posadas Mondragón

Índice

	Página
Resumen	I
Introducción	1

Capítulo 1 Energías Renovables

1.1	Antecedentes	5
1.2	Tipos de energías renovables	6
1.2.1	La energía solar y sus diversas manifestaciones	6
1.2.1.1	Energía solar directa	6
1.2.1.2	Sistemas fotovoltaicos	7
1.2.1.3	Sistemas solares térmicos	7
1.3	Energía del viento eólica	7
1.4	Energía hidráulica	8
1.5	Potencial y aprovechamiento de las energías renovables en México	8
1.5.1	Aprovechamiento de la energía solar	9
1.5.1.1	Calentamiento solar	9
1.5.1.2	Sistemas térmicos de concentración solar	10
1.5.1.3	Sistemas fotovoltaicos	10
1.5.2	Aprovechamiento de la energía eólica	10
1.5.3	Aprovechamiento de energía minihidráulica	11
1.6	La biomasa	12
1.6.1	Bioenergía	13
1.6.2	Potencial del recurso a escala mundial	13
1.6.3	Potencial del recurso en México	14
1.6.4	Formas de aprovechamiento de la biomasa	14
1.7	Métodos de conversión de la biomasa	15
1.7.1	Métodos termoquímicos	15
1.7.2	Métodos biológicos	16
1.8	Aplicaciones de la biomasa	16
1.8.1	Producción de energía térmica	17
1.8.2	Producción de energía eléctrica	17
1.8.3	Producción de biocombustibles	17
1.8.4	Producción de gases combustibles	19

Capítulo 2 Tecnologías de Gasificación

2.1	Proceso de gasificación	21
2.2	Clasificación de los gasificadores	23
2.2.1	Gasificador a contracorriente	26
2.2.2	Gasificador de flujos concurrentes	27
2.2.3	Gasificador a flujo cruzado	28

Índice

2.2.4	Gasificador de lecho fijo	29
2.2.5	Gasificador de lecho fluidizado	29
2.2.6	Gasificador de flujo por arrastre	30
2.3	Sistemas comerciales de gasificación	31
2.3.1	Sistema Lurgi	31
2.3.2	Sistema Winkler	32
2.3.3	Sistema Koppers–Totzek	32
2.3.4	Sistema Texaco	33
2.3.5	Sistema Shell	34
2.4	Investigaciones recientes	35

Capítulo 3

Aspectos Químicos y Físicos de la Gasificación

3.1	Procesos durante la gasificación	37
3.2	Combustión de sólidos	37
3.2.1	Secado y calentamiento	38
3.2.2	Pirólisis	39
3.2.3	Carbonizado	42
3.3	Secuencia de combustión	42
3.3.1	Modelo de conversión progresiva	42
3.3.2	Modelo de núcleo sin reaccionar	42
3.4	Comparación de los modelos y la operación real	43
3.5	Modelo de núcleo sin reaccionar para partículas esféricas de tamaño constante	44
3.6	Limitaciones del modelo de núcleo sin reaccionar	44
3.7	Reacciones de gasificación	45
3.8	Otros aspectos que influyen en el proceso de gasificación	47

Capítulo 4

Ecuaciones Básicas de Flujos Multicomponentes Reaccionantes.

4.1	Relaciones básicas de gases multicomponentes	49
4.2	Leyes básicas de la cinética química	53
4.3	Ecuaciones básicas de conservación	55
4.4	Ecuación de continuidad	56
4.5	Ecuación de conservación de especies (ecuación de difusión)	57
4.6	Ecuación de momento	58
4.7	Ecuación de energía	59
4.8	Condiciones a la frontera en la interfase sólido-gas	65
4.9	Tamaño de partícula y distribución de tamaño	65
4.10	Densidad aparente y fracción volumétrica	66
4.11	Dinámica de una sola partícula	68
4.11.1	Ecuación de movimiento para una sola partícula	68
4.11.2	Movimiento de una sola partícula en un campo de un flujo uniforme	68
4.12	Ecuación generalizada de la partícula en movimiento	70

Índice

4.13	Ecuaciones básicas de flujos turbulentos que contienen el modelo de turbulencia $k - \epsilon$	70
------	--	----

Capítulo 5 Modelado matemático

5.1	Técnicas de modelización	73
5.2	Modelo	74
5.3	Ecuaciones para las fracciones volumétricas	75
5.4	Ecuaciones de conservación para propiedades	75
5.4.1	Ecuación de continuidad para la fase gaseosa en el lecho empacado:	76
5.4.2	Partícula	78
5.4.3	Secado	81
5.4.4	Pirólisis primaria	81
5.4.5	Pirólisis secundaria	83
5.4.6	Reacciones homogéneas en la fase gas	83
5.4.7	Reacciones heterogéneas	84
5.5	Modelos de combustión	86
5.5.1	Modelo de Arrhenius	86
5.5.2	Modelo de Eddy Break Up (EBU)	87
5.5.3	Modelo del concepto de disipación turbulenta (EDC)	87
5.6	Componentes de la partícula de combustible	88
5.7	Tamaño de la partícula de combustible	88
5.8	Transferencia de calor entre gas y partículas	89
5.9	Arrastre en la interfase	89
5.10	Modelado de la turbulencia	89
5.11	Dispersión turbulenta de partículas	90
5.12	Componentes de la fase gaseosa	91
5.13	Radiación térmica	91
5.14	Otras ecuaciones utilizadas	93

Capítulo 6 Implementación Del Modelo Para Su Resolución En CFD PHOENICS

6.1	La dinámica de fluidos computacional (CFD)	94
6.2	Código CFD PHOENICS	95
6.2.1	Descripción general	95
6.3	Componentes de PHOENICS	98
6.4	Como PHOENICS describe los fenómenos	100
6.4.1	Variables dependientes	100
6.4.2	Variables independientes	101
6.4.3	Variables auxiliares	101
6.5	Discretización del continuo	101
6.6	Las ecuaciones de transporte	103
6.7	Diagrama de flujo del proceso de solución	104
6.8	El método de volúmenes finitos	105
6.9	Discretización de las ecuaciones	107

Índice

6.10	Acoplamiento entre velocidad y presión	111
6.11	Convergencia	111

Capítulo 7 Resultados Y Conclusiones

7.1	Descripción del sistema	113
7.2	Discretización del dominio de cálculo	114
7.3	Resultados y discusiones	119
	7.3.1 Valor calorífico de la mezcla	120
7.4	Conclusiones y recomendaciones	122

APENDICES

Apéndice I	Archivo de instrucción a CFD PHOENICS Q1	123
Apéndice II	Caracterización de maderas	136
Apéndice III	Normas oficiales mexicanas de emisiones contaminantes a la atmósfera	141
	Bibliografía	145

Resumen

La biomasa es un recurso abundante en la mayor parte del mundo. Por su contenido energético, diversidad y por ser renovable, su potencial para contribuir a la satisfacción de la demanda energética de la sociedad es importante, de ahí la necesidad de desarrollar tecnologías limpias y eficientes para un uso sustentable de la biomasa. Dentro de los procesos posibles de transformación de esta fuente alterna de energía, se encuentra la gasificación que ha experimentado un desarrollo considerable en las últimas décadas sobre todo en los países altamente industrializados, teniendo como objetivo principal la generación de energía eléctrica en turbinas de gas a partir de combustibles sólidos como la biomasa.

La gasificación consiste en una oxidación parcial de combustibles sólidos o líquidos pesados para formar un gas compuesto principalmente de monóxido de carbono (CO) e hidrógeno (H₂) con algunas trazas de hidrocarburos como metano (CH₄), esto es posible bajo ciertas condiciones de temperatura y una atmósfera reductora, por sus características puede considerarse como un gas combustible de poder calorífico medio que varía en un rango de 6 a 20 MJ/m³ dependiendo de si se utiliza como agente oxidante aire u oxígeno puro y también de las características propias del combustible utilizado.

Por lo tanto es necesario generar o adoptar modelos que faciliten el diseño o escalado de gasificadores que acoplados a otros dispositivos permitan la generación de electricidad a un costo competitivo, de tal manera que se resuelvan los problemas energéticos. Tales modelos permiten estudiar algunas de las diversas influencias sobre la conversión total de la biomasa: presión, tiempo de residencia del sólido y composición del gas. Adicionalmente el rendimiento en gases de interés como hidrógeno, monóxido y dióxido de carbono, metano y agua pueden ser estimados usando el modelo desarrollado en esta tesis.

Objetivos De Esta Tesis

- ❖ Revisar el aspecto tecnológico de la gasificación.
- ❖ Describir los principales fenómenos involucrados en el proceso de gasificación.
- ❖ Generar un modelo matemático que represente los fenómenos que ocurren en el proceso de gasificación y en particular para un equipo de tipo lecho fijo downdraft estratificado (flujos paralelos descendentes) que opera con madera y utiliza como agente oxidante aire.
- ❖ Obtener las condiciones de operación y composición del gas resultante para el gasificador mencionado en el objetivo anterior utilizando nuestro modelo.

Introducción

En los últimos años sucesos relevantes a nivel mundial han puesto de manifiesto que existe una gran problemática, por un lado en el sector energético y por el otro en cuestiones ambientales, estas disyuntivas representadas en una creciente demanda de energía que es ocasionada principalmente por el crecimiento de la población y la mejora paulatina de los niveles de vida, que suponen mayores consumos de energía eléctrica, aunado el eminente agotamiento de los combustibles fósiles y más aún al deterioro ambiental consecuencia de su uso indiscriminado sin tener en consideración el impacto en el entorno, dan como consecuencia una serie de problemas que se resumen en la necesidad de hacer cambios drásticos en materia de energía y transformación que conlleven a un uso sustentable de los recursos energéticos y a mitigar los problemas ambientales. Tal situación plantea un reto a ingenieros e investigadores, el cual debe ser resuelto en el menor tiempo posible y este implica diversos aspectos entre los cuales la optimización de los procesos de transformación y el uso sustentable de fuentes de energías alternas a los combustibles fósiles y de carácter renovable parecen ser la solución a tal problema.

Por lo anterior, valorar el desarrollo de las fuentes alternas renovables de energía se presenta como una necesidad cada vez más apremiante, en este contexto la biomasa, ha sido contemplada como una prometedora alternativa y es considerada como la fuente de energía renovable con el más alto potencial para contribuir a la satisfacción de las necesidades energéticas de la sociedad moderna. Madera y otras formas de biomasa como cosechas energéticas, residuos sólidos municipales, residuos agrícolas y forestales, son algunos de los recursos principales disponibles que están favoreciendo esta importante fuente de energía para el futuro. La biomasa puede ser transformada por métodos termoquímicos y biológicos por medio de los cuales se obtienen combustibles sólidos, líquidos o gaseosos. Dentro de los métodos termoquímicos la gasificación es un método que ha mostrado una mayor eficiencia de conversión de la biomasa, mediante este proceso es posible obtener un gas combustible a partir de combustibles sólidos como la madera o el carbón entre otros, el gas obtenido es una mezcla de monóxido de carbono, dióxido de carbono e hidrogeno principalmente, aunque algunas trazas de metano y otros compuestos son obtenidas. Este gas puede tener diferentes usos como por ejemplo, en motores de combustión interna. La gasificación de la biomasa es de especial interés sobre todo para países en donde las emisiones de CO₂ son objeto de presión internacional en materia ambiental. Un considerable número de proyectos de este tipo está en operación o en desarrollo, principalmente en el norte y centro de Europa [DTI, 1998].

Los gasificadores de carbón mineral, madera y carbón vegetal han sido empleados, desde el comienzo del siglo XIX. La utilización alcanzó un máximo durante la segunda guerra mundial, cuando se emplearon en el mundo casi un millón de gasificadores, principalmente vehículos que funcionaban con combustibles sólidos nacionales, en vez de gasolina. Sin embargo el interés por esta tecnología se perdió debido a la disponibilidad y comodidad del uso de combustibles fósiles de ahí que el interés por la gasificación este estrechamente relacionado con el costo relativo y la disponibilidad de estos.

En los últimos años, el sector eléctrico en el ámbito mundial ha sido transformado por la aparición de grandes turbinas de gas para la generación de potencia. Esta

tecnología ya se ha empleado en sistemas abiertos o en conjunto con recuperadores de calor en ciclos combinados, que han demostrado poseer una mayor eficiencia, facilidad de operación y limpieza para generar electricidad. Sin embargo, la principal desventaja de las turbinas de gas es que solo pueden operar con combustibles gaseosos (como el gas natural) o que puedan ser evaporados fácilmente (destilados de combustibles y aceites ligeros).

La gasificación a gran escala constituye un puente entre combustibles sólidos como la biomasa, carbón, coque o aceites pesados y las turbinas de gas, ya que convierte estos materiales en un gas con un poder calorífico, que después de limpiarse, puede ser usado en las turbinas de cualquier planta generadora. La combinación de la gasificación con un ciclo combinado (comúnmente conocido como IGCC, por sus siglas en inglés) es una tecnología que basada en el uso de biomasa podría aproximarse al diseño de un sistema que emplea gas natural.

La implementación de esta tecnología en la industria de la transformación energética en México conlleva a la necesidad de construir herramientas que tengan por objetivo el diseño y optimización de estos equipos.

El mejor aprovechamiento e implementación de esta tecnología, requiere en primer lugar, la descripción, comprensión y análisis de los fenómenos involucrados en este proceso de transformación, para poder después proponer algún modelo que tenga como finalidad predecir el comportamiento de tales fenómenos en un equipo de gasificación.

El sistema puede ser abordado mediante dos técnicas: ensayos experimentales y la simulación numérica en computadora. Debido a los altos costos que implica la investigación experimental y construcción de prototipos, la simulación numérica en computadora esta cobrando mayor importancia, al permitirnos de igual manera hacer una descripción más completa y detallada de los fenómenos involucrados, siendo la dinámica de fluidos computacional (CFD) la herramienta adecuada para abordar problemas de flujos complejos (turbulentos y/o reaccionantes). Existen tres alternativas: la simulación numérica directa (DNS), Ecuaciones promediadas (RANS); y simulación de grandes escalas (LES).

La DNS consiste en discretizar completamente mediante Series de Fourier, las ecuaciones instantáneas que gobiernan el movimiento de flujo, y son válidas para flujo laminar y flujo turbulento, las ecuaciones que se resuelven son las de conservación de masa, las cantidades de movimiento, la de energía y el tamaño y componentes de la partícula sólida, y las de especies químicas. Sin embargo, se ha determinado que en flujo turbulento sin reacción, para capturar todas las escalas el número de puntos de discretización es función del número de Reynolds elevado prácticamente al cubo [Moin & Mahesh, 1998; Tennekes & Lumley, 1977].

La aproximación de la Simulación de Grandes Escalas (LES) trata de resolver para las fluctuaciones de mayor tamaño, modelando el efecto de las pequeñas fluctuaciones sobre ellas [Jiménez, 1998].

Otra posibilidad de simulación es la técnica de Ecuaciones Promediadas (RANS), extensamente utilizada en casos prácticos de interés industrial ya que consiste en promediar todas las escalas espaciales y temporales de las fluctuaciones turbulentas, y resolver las ecuaciones de transporte en términos de variables medias del sistema.

El sistema a analizar en esta tesis es geoméricamente multidimensional y consta de una mezcla bifásica sólido-gas reaccionando químicamente. El mecanismo de reacción detallado contempla una gran variedad de reacciones, por lo que se recurrirá a un esquema simplificado que contemple las características más importantes de los fenómenos presentes. Esta cinética de reacción junto con las ecuaciones gobernantes conformará el modelo que será resuelto utilizando un código numérico computacional llamado CFD PHOENICS que nos permitirá conocer el comportamiento de algunas variables, como pueden ser campos de velocidad, presión, temperaturas y concentración entre otras posibles.

Esta tesis esta estructurada en siete capítulos, tras la sección introductoria, se presenta el capítulo uno, en el cual se describen de manera breve los diferentes tipos de energías renovables alternas a los combustibles fósiles, dándole un mayor énfasis a la biomasa por ser objeto de este estudio, se presenta de igual manera una revisión acerca del aprovechamiento y potencial de estas fuentes de energía. En el siguiente capítulo, se aborda el tema de la gasificación, en este apartado describimos el proceso de gasificación y se da una revisión tecnológica, dando primeramente una clasificación referente a las posibles configuraciones en los equipos de gasificación para después presentar algunos de los sistemas comerciales. El capítulo tres, menciona los aspectos químicos y físicos de la gasificación para dar un mejor entendimiento sobre los fenómenos ocurridos durante este proceso, haciendo hincapié en las diferencias entre gasificación y combustión, este capítulo es la base, pues el entendimiento de dichos fenómenos es indispensable para su representación matemática. El capítulo cuatro presenta las ecuaciones básicas que rigen el comportamiento de flujos turbulentos reaccionantes, ya que nuestro fenómeno presenta tales características creemos conveniente dar una revisión de estas. El capítulo cinco presenta de manera particular las ecuaciones que conformaran el modelo contemplando los diferentes fenómenos y características de flujo. En el siguiente capítulo se da una revisión breve a cerca del código numérico CFD PHOENICS pues es en este donde se implementara el modelo para su resolución, finalmente en el capítulo siete se describe el sistema a resolver en particular y se muestran los resultados así como las conclusiones.

Energías Renovables

Uno de los problemas más acuciantes que enfrenta la humanidad es el de encontrar una solución al deterioro de las condiciones medioambientales a escala global, como consecuencia de la actividad industrial de las últimas décadas, donde la política seguida para el desarrollo se ha basado en la explotación indiscriminada de los combustibles fósiles, sin tener en consideración su impacto en el entorno.

Desde el Protocolo de Kyoto (Japón), convocado por la Organización de Naciones Unidas, en la Comisión de Cambios Climáticos muchas naciones acordaron la reducción de emisiones que contribuyen al llamado efecto invernadero, entre 5 y 8 % para el 2012, tomando como base de comparación los niveles existentes en 1990, con lo cual se pone en evidencia la necesidad de buscar alternativas de obtención de energías «limpias», que hagan posible una vía «suave» de desarrollo energético, único camino posible para un desarrollo sostenible para la humanidad. Aproximadamente 40 % de la emisión de gases de efecto invernadero proviene del transporte y la generación de energía eléctrica. Entre los gases que contribuyen a este efecto invernadero, que trae como consecuencia la elevación de la temperatura a escala global, se encuentran el dióxido de carbono (CO_2), los óxidos de nitrógeno (NO_x) y el vapor de agua (H_2O). Otro problema que se presenta por la actividad industrial y por el transporte son las emisiones de dióxido de azufre (SO_2), que producen las llamadas lluvias ácidas, que tienen un impacto negativo en los bosques.

El CO_2 es producido durante la quema de combustibles fósiles, como el carbón, el petróleo, la turba y el gas natural, producto que fue fijado durante millones de años y retirado de la atmósfera por la acción de las plantas, y ahora es liberado nuevamente como producto de la combustión. Actualmente, como consecuencia de la actividad humana se han alcanzado valores de CO_2 en la atmósfera superiores a los existentes hace 160 000 años; y los científicos coinciden en que se están elevando las temperaturas promedio en el planeta, lo que provoca un aumento del nivel del mar.

Contrario a lo que sucede con los combustibles fósiles, en el uso de la biomasa como combustible el CO_2 liberado a la atmósfera forma parte del ciclo natural del carbono, pues anteriormente había sido fijado por las plantas. Además, el empleo de biomasa tiene como ventaja su bajo contenido de azufre, por lo que no favorece las lluvias ácidas.

La energía es la base de la civilización industrial; sin ella, la vida moderna dejaría de existir. Durante la década de 1970, el mundo empezó a ser consciente de la vulnerabilidad de los recursos de energéticos. A largo plazo es posible que las prácticas de conservación de energía proporcionen el tiempo suficiente para explorar nuevas posibilidades tecnológicas. Mientras tanto el mundo seguirá siendo vulnerable a trastornos en el suministro de petróleo, que después de la segunda guerra mundial se convirtió en la principal fuente de energía.

1.1 Antecedentes

Cuando en 1973 se produjeron eventos importantes en el mercado del petróleo mundial, que se manifestaron en los años posteriores como un encarecimiento notable de esta fuente de energía no renovable, resurgieron las preocupaciones sobre el suministro y precio futuro de la energía. Resultado de esto, los países consumidores, enfrentados a los altos costos del petróleo y a una dependencia casi total de este energético, tuvieron que modificar costumbres y buscar opciones para reducir su dependencia de fuentes no renovables.

Entre las opciones para reducir la dependencia del petróleo como principal energético, se reconsideró el mejor aprovechamiento de la energía solar y sus diversas manifestaciones secundarias tales como la energía eólica, hidráulica y las diversas formas de biomasa; es decir, las llamadas energías renovables.

Así, hacia mediados de los años setenta, múltiples centros de investigación en el mundo retomaron viejos estudios, organizaron grupos de trabajo e iniciaron la construcción y operación de prototipos de equipos y sistemas operados con energéticos renovables. Asimismo, se establecieron diversas empresas para aprovechar las oportunidades que se ofrecían para el desarrollo de estas tecnologías, dados los altos precios de las energías convencionales.

En la década de los ochenta, aparecen evidencias de un aumento en las concentraciones de gases que provocan el efecto invernadero en la atmósfera terrestre, las cuales han sido atribuidas, en gran medida, a la quema de combustibles fósiles.

Esto trajo como resultado una convocatoria mundial para buscar alternativas de reducción de las concentraciones actuales de estos gases, lo que llevó a un replanteamiento de la importancia que pueden tener las energías renovables para crear sistemas sustentables. Como resultado de esta convocatoria, muchos países, particularmente los más desarrollados, establecen compromisos para limitar y reducir emisiones de gases de efecto de invernadero renovando así su interés en aplicar políticas de promoción de las energías renovables.

Hoy en día, a más de un cuarto de siglo después de la llamada crisis del petróleo, muchas de las tecnologías de aprovechamiento de energías renovables han madurado y evolucionado, aumentando su confiabilidad y mejorando su rentabilidad para muchas aplicaciones. Como resultado, países como Estados Unidos, Alemania, España e Israel presentan un crecimiento muy acelerado en el número de instalaciones que aprovechan la energía solar de manera directa o indirectamente a través de sus manifestaciones secundarias.

Además de la riqueza en energéticos de origen fósil, México cuenta con un potencial muy importante en cuestión de recursos energéticos renovables, cuyo desarrollo permitirá al país contar con una mayor diversificación de fuentes de energía, ampliar la base industrial en un área que puede tener valor estratégico en el futuro, y atenuar los impactos ambientales ocasionados por la producción, distribución y uso final de las formas de energía convencionales.

Para analizar y plantear estrategias nacionales sobre energías renovables, la Secretaría de Energía se ha apoyado en la Comisión Nacional para el Ahorro de Energía, CONAE, creada como comisión intersecretarial en 1989 y elevada a la categoría de órgano desconcentrado de la Secretaría de Energía en 1999. A su vez, reconociendo su invaluable participación en el tema, la CONAE estableció, desde hace más de tres años, una alianza con la Asociación Nacional de Energía Solar, ANES, y juntas han operado el Consejo Consultivo para el Fomento de las Energías Renovables, COFER.

La importancia en la búsqueda de fuentes energéticas que satisfagan a futuro las necesidades de la población abre un abanico de posibilidades en donde es necesario contemplar todas las posibles formas de obtención de energía y enfocarse a las de mayor potencial en aspectos económicos, de disponibilidad y de eficiencia de conversión.

En el siguiente apartado se da un breve resumen de las diferentes formas de energías renovables, dando mayor importancia a la biomasa por ser el combustible empleado en la tecnología de gasificación.

1.2 Tipos De Energías Renovables

1.2.1 La Energía Solar Y Sus Diversas Manifestaciones

La energía solar se manifiesta de diversas formas y su aplicación ha sido fundamental para el desarrollo de la humanidad. A estas formas se les conoce como energías renovables, ya que son formas de energía que se van renovando o rehaciendo con el tiempo o que son tan abundantes en la tierra, que perdurarán por cientos o miles de años, las usemos o no.

1.2.1.1 Energía Solar Directa

La energía solar que recibe nuestro planeta es resultado de un proceso de fusión nuclear que tiene lugar en el interior del Sol. De toda la energía que produce ese proceso nuestro planeta recibe menos de una milmillonésima parte. Esa energía, que en ocho minutos recorre los más de 145 millones de kilómetros que separan al Sol de la Tierra resulta, sin embargo, una cantidad enorme en proporción al tamaño de nuestro planeta.

La energía solar se manifiesta en un espectro que se compone de radiación ultravioleta, visible e infrarroja. Al llegar a la Tierra, pierde primero su parte ultravioleta, que es absorbida por una capa de ozono que se presenta en el límite superior de la atmósfera. Ya en la atmósfera, la parte infrarroja se pierde ya sea por dispersión al reflejarse en las partículas que en ella se presentan o al llegar a las nubes, que son capaces de reflejar hasta un 80% de la radiación solar que a ellas llega. El resto llega a la superficie, ya sea de manera directa o indirectamente como reflejo de las nubes y partículas en la atmósfera.

La radiación solar que llega a la superficie terrestre se puede transformar directamente en electricidad o calor. El calor, a su vez, puede ser utilizado directamente para calentamiento para producir vapor y generar electricidad.

1.2.1.2 Sistemas Fotovoltáicos

Las celdas fotovoltaicas son placas fabricadas principalmente de silicio. Cuando al silicio se le añaden cantidades relativamente pequeñas de ciertos materiales con características muy particulares, obtiene propiedades eléctricas únicas en presencia de luz solar: los electrones son excitados por los fotones asociados a la luz y se mueven a través del silicio produciendo una corriente eléctrica; este efecto es conocido como fotovoltaico. La eficiencia de conversión de estos sistemas es de alrededor de 15%, por lo que un metro cuadrado puede proveer 150 Watts, potencia suficiente para operar un televisor mediano.

Las celdas fotovoltaicas, para poder proveer de energía eléctrica en las noches, requieren de baterías donde se acumula la energía eléctrica generada durante el día, lo cual encarece su aplicación. Sin embargo, en la actualidad se están desarrollando sistemas fotovoltaicos conectados directamente a la red eléctrica, evitando así el uso de baterías, por lo que la energía que generan se usa de inmediato por el propio usuario que la genera, con la posibilidad de vender los excedentes de electricidad a las compañías generadoras.

1.2.1.3 Sistemas Solares Térmicos

Los sistemas solares térmicos pueden clasificarse en planos y de concentración o enfoque.

Los sistemas solares planos, o colectores solares planos, son dispositivos que se calientan al ser expuestos a la radiación solar y que transmiten el calor a un fluido. Con el colector solar plano se pueden calentar fluidos a temperaturas de hasta 200 ° C (para el caso de sistemas de tubos evacuados) pero, en general, se aprovecha para calentar hasta los 75 ° C.

Los sistemas solares de concentración son aquellos que funcionan concentrando la radiación solar directa en un área focal, pudiéndose ubicar ésta alrededor de un punto o a lo largo de una línea. Este conjunto de dispositivos requiere de procedimientos o mecanismos de seguimiento, ya que la línea de incidencia varía durante el día y durante el año. Estos sistemas pueden lograr temperaturas de varios centenares de grados centígrados y en casos especiales hasta los miles de grados.

1.3 Energía Del Viento O Eólica

Los vientos ocurren por diferencias de presión generadas por un calentamiento no uniforme de la atmósfera terrestre, desplazándose grandes masas de aire de las zonas de alta presión a las de baja. Aproximadamente el 2% del calor del Sol que llega a la Tierra se convierte en viento, pero sólo una fracción muy pequeña puede ser aprovechada, ya que buena parte de estos vientos ocurre a grandes alturas o sobre los océanos, mar adentro. Además, se requieren condiciones de intensidad y regularidad en el régimen de vientos para poder aprovecharlos. Se considera que vientos con velocidades promedio entre 5.0 y 12.5 metros por segundo son los aprovechables.

El viento contiene energía cinética (de las masas de aire en movimiento) que puede convertirse en energía mecánica o eléctrica por medio de aeroturbinas, las cuales se

componen por un arreglo de aspas, generador y torre, principalmente. Las aeroturbinas pueden ser clasificadas, por la posición de su eje, en horizontales y verticales.

De manera muy general, con un aerogenerador cuyas aspas tienen un diámetro de 40 metros y sujeto a vientos con velocidad promedio de 8 metros por segundo, se pueden tener 600 kW de capacidad, lo cual es suficiente para proveer de electricidad a un conjunto habitacional de 200 departamentos.

1.4 Energía Hidráulica

La energía que llega del sol da lugar, entre otros fenómenos, a la evaporación del agua contenida sobre su superficie, principalmente en los océanos. Esta humedad se acumula en nubes que viajan largas distancias y se deposita en forma de lluvia sobre montañas, muchas alejadas del mar. El agua, acumulada en corrientes y por gravedad, busca de nuevo el mar, formando ríos. Este caudal, que se puede manifestar en grandes caídas o en muchas corrientes, es la fuente de la energía hidroeléctrica.

En muchos casos, esta energía se deposita en forma potencial en embalses y se transforma en energía aprovechable al desplazarse hacia niveles inferiores. El agua en movimiento empuja dispositivos giratorios que la convierten en energía mecánica, o para mover generadores de electricidad. Por ejemplo, para lograr una capacidad de 3,000 kW, que es la suficiente para satisfacer, por ejemplo, 1,000 departamentos, se requiere tener una caída de agua de 100 metros con un gasto de 3 metros cúbicos por segundo. Esto se logra ampliamente en cualquier zona montañosa del planeta con un régimen regular de lluvias.

1.5 Potencial Y Aprovechamiento De Las Energías Renovables En México

En general, dada la dispersión y la baja densidad energética de las fuentes renovables de energía, se requiere de grandes extensiones de tierra para lograr un nivel de aprovechamiento similar al de los sistemas que operan con combustibles fósiles. Igualmente, los sistemas de aprovechamiento de energías renovables tienen que ubicarse en el lugar donde se dispone del recurso, lo que muchas veces ocurre lejos de donde está la necesidad. Estas circunstancias, sin embargo, no ha sido un impedimento para su desarrollo, como lo demuestran los proyectos en operación en el país.

De una manera muy general se puede afirmar que la República Mexicana recibe, en seis horas de exposición al Sol, la misma cantidad de energía que consumirá durante todo un año. Esta energía se transforma en calor, viento, agua evaporada y en diversas formas de biomasa y solo una fracción pequeña es aprovechable para el uso que los humanos le damos a la energía.

En México, existen actividades tendientes al aprovechamiento de la energía solar y sus diversas manifestaciones desde hace varias décadas, aunque es particularmente significativo el avance e interés de instituciones e industrias en las últimas tres décadas, periodo en el que se han desarrollado investigaciones y diversos proyectos, prototipos, equipos y sistemas para el mejor aprovechamiento de las energías renovables.

De manera general, resalta la investigación y desarrollo en energías renovables que arranca en la mitad de la década de los setentas y que continúa hasta la fecha. En este sentido, son importantes las actividades de universidades e institutos, nacionales y regionales, a lo largo y ancho del país. Igualmente importante ha sido el trabajo de difusión y promoción de la Asociación Nacional de Energía Solar (ANES), la cual ha unificado a esta comunidad, particularmente a través de sus semanas y reuniones nacionales celebradas anualmente desde 1977.

Por otro lado, son importantes los trabajos para la manufactura y comercialización de equipos y sistemas relacionados con las energías renovables, en donde resalta la gran cantidad de fabricantes de calentadores solares planos en el territorio nacional. Finalmente, para analizar y plantear estrategias nacionales sobre energías renovables, la Secretaría de Energía se ha apoyado en la Comisión Nacional para el Ahorro de Energía, CONAE, quien a su vez, estableció, desde hace más de tres años, una alianza con la ANES, y juntas han operado el Consejo Consultivo para el Fomento de las Energías Renovables, COFER, al cual concurren reconocidos especialistas de los sectores público y privado y en cuyo contexto se han organizado media docena de foros públicos sobre asuntos relacionados con la promoción de las energías renovables.

1.5.1 Aprovechamiento De La Energía Solar

El conocimiento general que se tiene de la energía solar en nuestro país indica que más de la mitad del territorio nacional presenta una densidad en promedio energética de 5 kWh por metro cuadrado al día.

Esto significa que para un dispositivo de colección y transformación de energía solar a energía eléctrica que tuviera una eficiencia de 100%, bastaría un metro cuadrado para proporcionar energía eléctrica a un hogar mexicano promedio que consume 150 kWh por mes. De manera más precisa, considerando eficiencias de 10% para los dispositivos en el mercado, se puede decir que con 200 millones de m² de área de colección de radiación solar podríamos dar electricidad a todos los hogares mexicanos.

Esto no significa, sin embargo, que la energía solar directa sea la más económica para el universo de usuarios de energía en el país, ya que su costo actual sólo lo justifica para un número limitado de usuarios, particularmente los que viven alejados de la red eléctrica.

1.5.1.1 Calentamiento Solar

En México se fabrican calentadores solares planos desde hace más de cincuenta años y en la actualidad existen cerca de 50 fabricantes registrados de estos equipos. Igualmente, la investigación sobre este tema es amplia y existe un gran número de ingenieros y técnicos que pueden diseñar este tipo de sistemas. Esto se ha reflejado en el crecimiento de la producción de calentadores solares planos desde 1997, habiéndose logrado para 1999, 35,000 m² instalados. De esta manera, en 1999, se contaba en el país con 328,000 m² de este tipo de sistemas, la mayoría de ellos instalados en la Ciudad de México, Guadalajara, Cuernavaca y Morelia.

1.5.1.2 Sistemas Térmicos De Concentración Solar

En México existen instalaciones de este tipo de colectores, resaltando la que se construyó en el Instituto de Ingeniería de la UNAM a principios de los ochenta en la Ciudad de México, y que ha sido la base para investigaciones posteriores en nuestro país. Actualmente, esta tecnología se desarrolla en México en cuando menos dos centros de investigación aplicada y en una universidad: el Instituto de Investigaciones Eléctricas, IEE; el Centro de Investigaciones en Energía, CIE, de la UNAM y en la Facultad de Ingeniería de la Universidad Autónoma del Estado de México.

1.5.1.3 Sistemas Fotovoltaicos

En el contexto nacional, los pioneros en el desarrollo de tecnología de generación de electricidad, a partir de celdas fotovoltaicas, fueron investigadores del Centro de Investigación y Estudios Avanzados del Instituto Politécnico Nacional (CINVESTAV), quienes desarrollaron una pequeña planta piloto con una capacidad de producción de fotoceldas que permitió, en los años setenta, proveer de electricidad a un número significativo de aulas dentro del sistema nacional de telesecundarias.

El gobierno federal junto con la participación de instituciones como Comisión Federal de Electricidad (CFE), y los Gobiernos estatales y municipales, entre otros, instalaron en México alrededor de 40,000 sistemas fotovoltaicos, y otros diez mil por la iniciativa privada, para proveer de electricidad a zonas alejadas de la red eléctrica. Esto ha permitido que miles de pequeños poblados cuenten con iluminación eléctrica durante las noches y, en algunos casos, con electricidad para bombeo de agua. Igualmente, el uso de estos sistemas se ha generalizado para la comunicación en sistemas de auxilio e iluminación en carreteras federales, para dar energía a estaciones del sistema de comunicación por microondas y a la telefonía rural.

Asimismo, en México se aplican ampliamente los sistemas fotovoltaicos en sistemas de comunicación telefónica rural. La capacidad instalada en sistemas fotovoltaicos en México, según datos de la ANES, fue de 0.9 MW para el año de 1999, con lo que el acumulado, hasta ese mismo año, es de 12.92 MW.

1.5.2 Aprovechamiento De La Energía Eólica

Se estima que el potencial eoloeléctrico técnicamente aprovechable de México alcanza los 5,000 MW, lo que equivale a 14% de la capacidad total de generación eléctrica instalada actualmente. Este potencial tiene ahora mayores posibilidades de desarrollarse, por la disminución de sus costos que han llegado a ser casi competitivos con las energías convencionales y por las modificaciones a la Ley del Servicio Público de Energía Eléctrica y su Reglamento. En este sentido, resaltan los potenciales identificados en la región del Istmo de Tehuantepec.

Oaxaca, en la parte correspondiente a la costa del Pacífico. Se han identificado también sitios en los estados de Baja California, Baja California Sur, Coahuila, Hidalgo, Quintana Roo y Zacatecas.

En nuestro país existe desarrollo tecnológico importante en relación con la generación de electricidad a partir del viento. En particular, resalta el trabajo del Instituto de Investigaciones Eléctricas (IIE), con más de 20 años de experiencia en el tema. En el sector privado, destaca la capacidad de diseño y manufactura nacionales de este tipo de

equipos desarrollados por una empresa que los exporta ensamblados en el Distrito Federal.

Por su parte, la Comisión Federal de Electricidad (CFE), a partir del conocimiento y de la experiencia desarrollada en el IIE construyó y opera dos plantas eólicas piloto, con el objetivo de adentrarse en esta tecnología, reconocer sus ventajas y limitaciones, y validar su integración al sistema eléctrico nacional.

En agosto de 1994, la CFE puso en operación una central eoloeléctrica de 1.5 MW de capacidad en La Venta, Oaxaca. En diciembre de 1998, entró en operación la central eólica Guerrero Negro que se ubica en la península de Baja California Sur y tiene una capacidad de 600 kW. Asimismo, en algunos estados de la República tales como Chihuahua y Sonora, se utilizan sistemas eólicos para bombeo de agua denominados aerobombas, muy útiles en localidades rurales aisladas de la red de suministro, o cuyas condiciones geográficas impiden la electrificación convencional. Finalmente, y desarrolladas con capital privado, se tienen 5 permisos de la Comisión Reguladora de Energía, CRE, para instalar 148 MW a partir de energía eólica.

1.5.3 Aprovechamiento De Energía Minihidráulica

En 1999, la energía hidráulica aportada fue aproximadamente el 14.4 % de la generación de electricidad en nuestro país. El potencial nacional minihidráulico, es decir, de pequeñas centrales hidroeléctricas de menos de 5 MW es, de acuerdo con estudios realizados por la CONAE y la CFE, de alrededor 3,000 MW. Tan sólo para una importante región montañosa de México, comprendida entre los estados de Veracruz y Puebla, se han identificando 100 sitios de aprovechamiento que alcanzarían una generación de 3,570 GWh anuales, equivalentes a una capacidad media de 400 MW. Es importante señalar que las condiciones del entorno a esta tecnología han cambiado, permitiendo que su aplicación sea una alternativa viable en muchos casos. Los cambios en la Ley del servicio público de energía eléctrica y su reglamento así como el incremento en los costos de los energéticos convencionales y la demanda creciente de energía eléctrica así lo indican.

Actualmente, en México existen minicentrales en operación en la CFE, Luz y Fuerza del Centro (LFC), y en los sistemas independientes de particulares.

Tabla 1. Resumen de centrales en operación en México

Institución o empresa	Número de centrales	Número de unidades	Potencia instalada (MW)	(%)	Generación media (GWh)	(%)
CFE	13	30	21.7	28.4	70.3	32
LFC	9	14	11	14.4	32	14.4
Independientes	61	77	43.5	57	118	53.5
Total	83	121	76.3	100	220.2	100

Fuente: Estudio de situación actual de la mini hidráulica nacional y potencial en una región de los estados de Veracruz y Puebla CONAE, 1997.

Las cifras anteriores nos indican que en México la producción mini hidroeléctrica es mayoritariamente privada y que lo ha sido desde principio de siglo. Este es un factor en favor de la futura constitución de nuevas empresas particulares que decidan dedicarse al autoabastecimiento de energía eléctrica por este medio.

De las minicentrales fuera de servicio, sólo se conocen con certeza los datos de la CFE. Se sabe de 36 centrales que han dejado de operar debido, principalmente, a sus altos costos operativos y la obsolescencia de su equipo principal. Su potencia conjunta asciende a 36.78 MW, con una generación estimada en 125.65 GWh.

En resumen, hasta 1994, las posibilidades en el país de aumentar la participación de la energía mini hidráulica en la producción de electricidad eran de 158 MW.

Tabla 2. Resumen de posibilidades de la mini hidráulica en México

Concepto	Potencia (MW)	Generación media anual (GWh)	Comentario
Centrales fuera de servicio	36.78	125.65	Capacidad instalada
Proyectos de rehabilitación (con estudio)	8.50	37.67	Incremento de potencia y generación
Proyecto de rehabilitación (por estudiar)	21.40	63.00	Capacidad instalada
Proyectos para equipamiento CNA	91.60	323.20	Capacidad instalada
Totales	158.28	549.52	

Fuente: Estudio de la situación actual de la mini hidráulica nacional y potencial en una región de los estados de Veracruz y Puebla, CONAE 1997.

1.6 La Biomasa

La biomasa puede proveer combustibles líquidos, sólidos y gaseosos de poder calorífico medio, la transformación en bio-combustibles pueden ser por medio de tres procesos principalmente: la conversión física, conversión biológica, y conversión térmica, todas ellas emplean reactores químicos con diseños y configuraciones muy variadas. La tecnología de conversión termoquímica atrajo grandes intereses al ofrecer mayores eficiencias. Este trabajo se enfoca en la conversión termoquímica y en particular a la gasificación.

En la actualidad la biomasa es aceptada como la provisión energética con mayor potencial a futuro. Madera y otras formas de biomasa como pueden ser residuos de la agricultura, cosechas energéticas, residuos animales, desperdicios municipales, subproductos de la industria mueblera y aserraderos entre otros, forman un recurso renovable con un alto potencial para la contribución a la satisfacción de la demanda energética necesaria para el desarrollo y manutención de la sociedad moderna y por supuesto de las economías; contribuyendo significativamente a objetivos mundiales de enfoque ecológico como la disminución de emisiones contaminantes gaseosas a causa de la quema de combustibles fósiles (ciclo ranking) y a los problemas relacionados a cambios climáticos (efecto invernadero).

1.6.1 Bioenergía

Las plantas acumulan energía a través de la fotosíntesis donde, alimentadas por la energía solar, separan las moléculas de bióxido de carbono, acumulando el carbono en forma de hidrocarburos y soltando el oxígeno. La eficiencia de conversión de energía solar en energía almacenada en forma de materia orgánica (a través de la fotosíntesis) es muy baja, estimándose su límite máximo en cerca de 3%, aunque algunas especies forestales en explotación comercial alcanzan eficiencias de conversión de hasta 10%.

Desde principios de la historia de la humanidad, la biomasa ha sido una fuente energética esencial para el hombre y con la llegada de los combustibles fósiles, este recurso energético perdió importancia en el mundo industrial. En la actualidad los principales usos que tiene son domésticos.

1.6.2 Potencial del recurso a escala mundial.

Es difícil cuantificar con exactitud la disponibilidad de este recurso ya que en muchos países no existen estudios adecuados aunque pueda hacerse un cálculo aproximado de estos a través de la cosechas y bosques existentes, el potencial de energía de estas se cuantifica rara vez basándose en las tecnologías de conversión disponibles.

La biomasa es la fuente más grande de energía del mundo y tiene una potencialidad de energía que excede a la actual fuente de energía mundial.

Esta disponible en la mayoría de los países y representa un recurso valioso para mucha gente especialmente indígena, principalmente en los países en desarrollo.

Con un estimado de 14,000 MW de capacidad instalada alrededor del mundo, la biomasa es la mayor fuente de potencia para generación de energía eléctrica con energías renovables, después de la hidroeléctrica. Estados Unidos es el más grande generador de potencia con biomasa con 7,000 MW instalados. Las expectativas de crecimiento de la generación con biomasa alrededor del mundo son de más de 30,000 MW para el año 2020. China y la India son considerados candidatos para instalar sistemas con biomasa de manera masiva. Las estimaciones muestran que para el 2015 China deberá tener entre 3,500 y 4,100 MW instalados, y la India entre 1,400 y 1,700 MW. Esto representa un crecimiento acelerado de sus niveles actuales de capacidad instalada de 154 y 59 MW respectivamente.

Otros países que muestran un promisorio crecimiento por la variedad de sus sistemas de biomasa son Brasil, Malasia, Filipinas, Indonesia, Australia, Canadá, Inglaterra, Alemania y Francia.

Es indudablemente Europa quien ha asumido con mayor responsabilidad el proceso de transición a un sistema energético sustentable, siendo Alemania, Dinamarca y España quienes más se han destacado en estos esfuerzos. El caso de Dinamarca merece ser ejemplificado. Actualmente cubre 7% de su oferta energética con energías renovables, 5% corresponde a biomasa y para el año 2020 planea cubrir 20% con renovables.

Expectativas de crecimiento mundial de la generación con biomasa para el año 2020.	30,000 MW
--	-----------

1.6.3 Potencial del recurso en México

La cuantificación del recurso de la biomasa es una tarea complicada y no existen en México datos precisos para este tipo de recurso, no obstante hay un amplio potencial de aprovechamiento de las diversas formas de biomasa. Las comunidades aisladas del país, satisfacen la mayor parte de sus necesidades energéticas con biomasa. Se estima que la leña provee cerca del 75% de la energía de los hogares rurales. En el sector agroindustrial, específicamente la industria azucarera, se ha establecido un potencial de generación de electricidad, a partir del bagazo de la caña, superior a 3000 GWh al año. Las estadísticas que presenta anualmente el balance nacional de energía en el que se consignan las cantidades consumidas de leña y bagazo, se estima que el consumo anual de los particulares fue de 87,820 TJ de bagazo y 247,400 TJ de leña, dando un total de 335,220 TJ.

Actualmente, se tienen 12 permisos de la Comisión Reguladora de Energía (CRE) para instalar 135MW en plantas de generación eléctrica a partir de biomasa.

1.6.4 Formas de aprovechamiento de la biomasa

La biomasa puede aprovecharse de diversas formas, mediante los llamados procesos de conversión, y en general se quema directamente en plantas energéticas tradicionales con ciclos de vapor, como sucede desde antaño en las centrales azucareras; o en sistemas más avanzados y eficientes que emplean la gasificación en ciclos combinados, en los que se usan los gases de escape de las turbinas de gas, el cual alimenta un generador de tipo ordinario. Esta última es la vía más eficiente de aprovechamiento de la biomasa y la que tiene un futuro más prometedor.

Otra vía de obtener combustible de la biomasa es mediante la fermentación, como el biogás y la obtención de combustibles como el etanol por fermentación y el metanol por hidrólisis, así como el bio-Diesel a partir de la extracción de aceites vegetales. En países como Brasil existe una vasta experiencia en la producción de etanol para su uso en los motores de combustión interna.

Entre las posibles fuentes de biomasa se encuentran los residuos agrícolas; los cultivos energéticos, como la caña energética y los bosques de eucalipto; los desechos de la industria maderera, como el aserrín; el bagazo de caña; los desechos urbanos, como cajas de embalaje, cartón, muebles rotos y papel; los residuos de madera de la construcción; y las aguas residuales urbanas.

Como desventajas comunes de la biomasa se significan su falta de uniformidad y su baja densidad, de ahí que debe utilizarse cerca de su lugar de producción, ya que el empleo de transporte a largas distancias minimizaría sus ventajas. Ambas dificultades pueden eliminarse mediante la peletización o la construcción de briquetas, pero esto implicaría un incremento en el costo de explotación. Otra desventaja es su bajo valor calórico comparado con otros combustibles. Dos ejemplos concretos se verifican en la industria azucarera, donde setenta millones de toneladas de caña se convierten en siete millones de toneladas de azúcar y diecisiete y medio millones de toneladas de bagazo; y en la industria maderera es posible que hasta 75 % del árbol original termine convertido en residuos. En los bosques energéticos se cultivan árboles de rápido crecimiento, como los sauces y los eucaliptos.

Con la utilización de la biomasa, así como de cualquier tipo de energía renovable debemos hacer un análisis total del «ciclo de vida», o sea, la cadena completa, pues si en el proceso existen pasos intermedios contaminantes en la fabricación y transportación de equipos y componentes necesarios, o se emplea en algunas etapas energía no renovable, esto debe ser valorado para conocer realmente cuán limpia es esta forma de energía. Un buen ejemplo de esto es la energía hidroeléctrica que precisa de la construcción de grandes embalses que transforman completamente el ecosistema, con los trastornos que esto crea.

1.7 Métodos De Conversión De La Biomasa En Energía

Aparte del caso excepcional de *Brotryococcus braunii*, que produciría directamente petróleo, la utilización práctica de las diferentes formas de biomasa requiere unas técnicas de conversión.

1.7.1 Métodos termoquímicos:

Estos métodos se basan en la utilización del calor como fuente de transformación de la biomasa. Están bien adaptados al caso de la biomasa seca, y, en particular, a los de la paja y de la madera.

La combustión

Es la oxidación completa de la biomasa por el oxígeno del aire, libera simplemente agua y gas carbónico, y puede servir para la calefacción doméstica y para la producción de calor industrial.

La pirólisis

Es la combustión incompleta de la biomasa en presencia de cantidades limitadas de oxígeno, a unos 500 °C, se utiliza desde hace mucho tiempo para producir carbón vegetal. Aparte de éste la pirólisis lleva a la liberación de un gas pobre, mezcla de monóxido y dióxido de carbono, de hidrógeno y de hidrocarburos ligeros. Este gas de débil poder calorífico, puede servir para accionar motores diesel, o para producir electricidad, o para mover vehículos. Una variante de la pirólisis, llamada pirólisis flash, se lleva a 1000 °C en menos de un segundo, tiene la ventaja de asegurar una gasificación casi total de la biomasa. De todas formas, la gasificación total puede obtenerse mediante una oxidación parcial de los productos no gaseosos de la pirólisis. Las instalaciones en las que se realizan la pirólisis y la gasificación de la biomasa reciben el nombre de gasógenos. El gas pobre producido puede utilizarse directamente como se indica antes, o bien servir de base para la síntesis de un alcohol muy importante, el metanol, que podría sustituir las gasolinas para la alimentación de los motores de explosión (carburol).

Los productos de gasificación tienen ventajas con respecto a la biomasa original:

1. el gas producido es más versátil y se puede usar para los mismos propósitos que el gas natural;
2. puede quemarse para producir calor y vapor y puede alimentar motores de combustión interna y turbinas de gas para generar electricidad;
3. produce un combustible relativamente libre de impurezas y causa menores problemas de contaminación al quemarse.

1.7.2 Métodos Biológicos

Fermentación alcohólica

Es una técnica muy antigua que es empleada con los azúcares, que puede utilizarse también con la celulosa y el almidón, a condición de realizar una hidrólisis previa (en medio ácido) de estas dos sustancias. Pero la destilación, que permite obtener alcohol etílico prácticamente anhidrido, es una operación muy costosa en energía. En estas condiciones, la transformación de la biomasa en etanol y después la utilización de este alcohol en motores de explosión, tienen un balance energético global dudoso. A pesar de esta reserva, ciertos países (Brasil, E.U.A.) tienen importantes proyectos de producción de etanol a partir la biomasa con un objetivo energético (propulsión de vehículos; cuando el alcohol es puro o mezclado con gasolina, el carburante recibe el nombre de gasohol).

Fermentación metánica

Es la digestión anaerobia de la biomasa por bacterias, es idónea para la transformación de la biomasa húmeda (más del 75 % de humedad relativa). En los fermentadores, o digestores, la celulosa es esencialmente la sustancia que se degrada en un gas que contiene alrededor de 60 % de metano y 40 % de gas carbónico. El problema principal consiste en la necesidad de calentar el equipo, para mantenerlo a la temperatura óptima de 30-35°C. No obstante, el empleo de digestores es un camino prometedor hacia la autonomía energética de las explotaciones agrícolas, por recuperación de las deyecciones y camas del ganado. Además, es una técnica de gran interés para los países en vías de desarrollo. Así, millones de digestores ya son utilizados por familias campesinas chinas.

1.8 Aplicaciones De La Biomasa

La gran variedad de biomasa existente unida al desarrollo de distintas tecnologías de transformación de ésta en energía (combustión directa, pirolisis, gasificación, fermentación, digestión anaeróbica,...) permiten plantear una gran cantidad de posibles aplicaciones (ver figura 1.1) entre las que destacan la producción de energía térmica, electricidad, biocombustibles y gases de combustión.

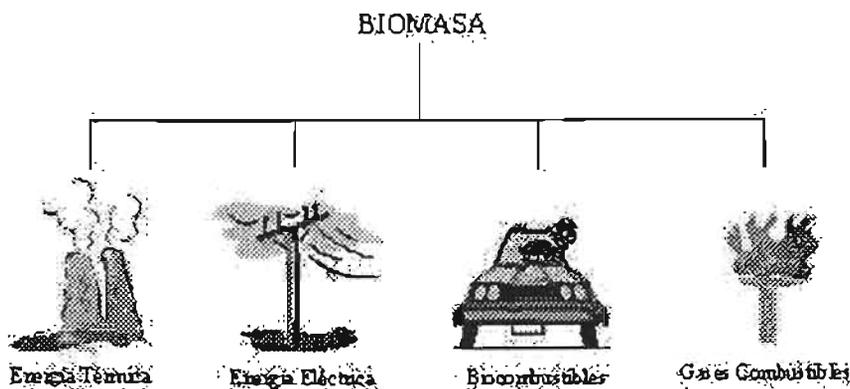


Figura 1.1 Aplicaciones de la biomasa.

1.8.1 Producción De Energía Térmica

Aprovechamiento convencional de la biomasa natural y residual. Los sistemas de combustión directa son aplicados para generar calor, el cual puede ser utilizado directamente, como por ejemplo, para la cocción de alimentos o para el secado de productos agrícolas. Además, éste se puede aprovechar en la producción de vapor para procesos industriales y electricidad.

Los procesos tradicionales de este tipo, generalmente, son muy ineficientes porque mucha de la energía liberada se desperdicia y pueden causar contaminación cuando no se realizan bajo condiciones controladas.

1.8.2 Producción De Energía Eléctrica

Obtenida minoritariamente a partir de biomasa residual (restos de cosecha y poda) y principalmente a partir de cultivos energéticos leñosos, de crecimiento rápido (Chopo, Sauce, Eucalipto, Robinia, Coníferas, Acacia, Plátano,...) y herbáceos (Cardo lleno, Miscanto, Caña de Provenza, Euforbias, Chumberas,...). También se utiliza el biogás resultante de la fermentación de ciertos residuos (lodos de depuradora, Residuos Sólidos Urbanos...) para generar electricidad.

El rendimiento neto de la generación de electricidad en las plantas de biomasa es bajo, del orden de un 20% referido a su poder calorífico inferior. Ello se debe fundamentalmente al pequeño tamaño de la planta de producción. La caldera tiene un rendimiento moderado al quemar un combustible de alto contenido en humedad, y su consumo en servicios auxiliares es alto, por encima del 8% de la producción total de electricidad en salida de un alternador.

Una posibilidad de incrementar el rendimiento energético en el uso de la biomasa es la cogeneración de calor y electricidad. La condensación del vapor supone una evacuación de calor cercano a la mitad de la energía contenida en la biomasa; la recuperación de parte de ese calor de condensación en forma de vapor de baja temperatura o agua caliente, para usos industriales o domésticos, supone un aumento de la eficiencia energética. Para ello se puede disponer de una turbina de contrapresión o bien hacer una extracción de vapor con volumen significativo en la zona de baja presión de la turbina. Se instalan los intercambiadores de calor adecuados y se pueden obtener rendimientos globales de entre un 40 y un 60%.

La gasificación es una alternativa con mejores rendimientos que la combustión en calderas. El empleo de motores diesel o de turbinas de gas para quemar el gas producido puede elevar el rendimiento a valores por encima del 30%, sin embargo ésta es una opción poco extendida.

1.8.3 Producción de Biocombustibles

Existe la posibilidad, ya legislada, de alimentar los motores de gasolina con bioalcoholes (obtenidos a partir de Remolacha, Maíz, Sorgo dulce, Caña de azúcar, Patata, Pataca,...) y los motores diesel con bioaceites (obtenidos a partir de Colza, Girasol, Soja,...). Esta aplicación se verá de forma detallada más adelante.

Los biocombustibles han dejado de ser una fantasía, para convertirse en una realidad. Ya podemos ver por las calles automóbiles que funcionan con estos biocombustibles. En Brasil, por ejemplo, hay unos 2,000 de vehículos que se mueven con alcohol casi puro, el cual se obtiene de la caña de azúcar, y 8,000 más utilizan una

mezcla de gasolina y alcohol. Este alcohol se realiza a partir de melazas de caña de azúcar o de la pulpa de mandioca, para ser utilizado como combustible. Gran parte del etanol se mezcla con gasolina, y constituye el 20 % del combustible que utilizan los automóviles, con el consiguiente ahorro de energía fósil (gasolina).

Básicamente se trabaja en dos alternativas comerciales: el biodiesel y el bioalcohol

- ❖ **Biodiesel:** son ésteres monoalquílicos de ácidos grasos de cadena larga derivados de lípidos renovables tales como aceites vegetales y que se emplean en los motores de ignición de compresión (motores diesel) o en calderas de calefacción (definición de American Standards for Testing and Materials).

El biodiesel está formado por ácidos grasos y ésteres alcalinos, obtenidos de aceites vegetales, grasa animal y aceites usados. A partir de un proceso llamado "transesterificación", los aceites se combinan con un alcohol (etanol o metanol) y se alteran químicamente para formar ésteres grasos como el etil o metilo éster. Los productos originados son: glicerina y metiléster. Éste tiene un comportamiento en los motores de combustión de diese similar al del gasoil. Esta línea es una vía de salida para los excedentes de colza, girasol y otros productos alimentarios. La glicerina, en este caso, es un subproducto que puede venderse a las fábricas de jabón.

El inconveniente que tiene el biodiesel es el alto precio de mercado que tienen los aceites para uso alimenticio.

- ❖ El bioetanol es el alcohol etílico producido a partir de la fermentación de los azúcares que se encuentran en los productos vegetales (cereales, remolacha, caña de azúcar o biomasa) combinados en forma de sacarosa, almidón, hemicelulosa y celulosa.

Los usos del bioetanol son:

1. mezcla directa con gasolina,
2. como combustible principal en los motores de gasolina o
3. Mezcla directa con diesel.

- ❖ Etanol, es utilizado como biocombustible, es hecho fermentando la biomasa en un proceso similar a la elaboración de la cerveza. Actualmente, la mayoría de los 1,5 mil millones de galones de etanol usados en los ESTADOS UNIDOS cada año se hacen de maíz y se mezclan con gasolina para mejorar el funcionamiento de los vehículos y para reducir la contaminación atmosférica.
- ❖ Metanol – derivado de biomasa, el metanol se produce con la gasificación. La biomasa se convierte en un gas de síntesis (syngas) que se procesa en el metanol. De los 1,2 mil millones galones de metanol producidos anualmente en los ESTADOS UNIDOS se hace más del gas natural y se utiliza como solvente, del anticongelante, o a la síntesis otros productos químicos. Sobre 38% se utiliza para el transporte como mezcla o en gasolina reformulada.

1.8.4 Producción de gases combustibles

Es una aplicación poco utilizada actualmente que consiste en la descomposición de la biomasa en un digestor para obtener un gas, cuyo compuesto combustible es básicamente metano, pero también contienen nitrógeno, vapor de agua y compuestos orgánicos. El proceso es adecuado para tratar biomasa de elevado contenido en humedad y poco interesante en otras aplicaciones, bien por su calidad o por la poca cantidad disponible.

El gas obtenido es de bajo poder calorífico, pero útil en aplicaciones térmicas en el propio entorno ganadero o agrícola, suministrando luz y calor. En el caso de instalaciones de mayor tamaño, se puede llegar a colocar motores diesel de hasta varios cientos de kilovatios de potencia para la generación de electricidad; existen ya ejemplos industriales de ello. La producción de gas se puede controlar adecuándola a la demanda; incluso puede hacerse que durante varias horas el digestor se mantenga embotellado, sin producir gas, durante los periodos en los que no exista consumo energético.

Otra posibilidad para la producción de gas es el empleo de un gasificador, que inyecta aire u oxígeno y vapor de agua. Opera a elevada temperatura, entre 800 y 1200°C, con lo cual la cinética de las reacciones es más alta. El gas contiene CO, H₂, pequeñas concentraciones de metano, nitrógeno y vapor de agua. Tiene un poder calorífico medio. Existen varias alternativas de gasificación; el lecho fijo sirve para tratar pequeñas cantidades de biomasa, mientras que los de lecho fluidizado tratan mayores cantidades, siendo éstos utilizados para la generación de electricidad.

Al problema operativo de la gasificación, se une el de la producción de alquitranes y otros compuestos orgánicos pesados. Esto hace posible la combustión del gas en equipos industriales, calderas y hornos o en motores diesel para generación eléctrica, pero dificulta la extensión a turbinas de gas en sistemas eléctricos de alta eficiencia, la alternativa es purificar el gas mejorando el diseño del gasificador para obtener cantidades mínimas de alquitranes siendo estos el mayor problema.

Tecnología De Gasificación

La gasificación es un proceso termoquímico cuyo objetivo es la obtención de gases combustibles a partir de un combustible sólido. Cuando una fuente de carbono reacciona con una de oxígeno, en ciertas condiciones, es posible obtener un gas combustible compuesto principalmente de monóxido de carbono, hidrógeno, metano y alquitranes. Este producto denominado generalmente como gas de síntesis o syngas, se puede usar como combustible para generar vapor o electricidad o bien puede funcionar como combustible en motores de combustión interna por mencionar algunos de sus usos. Entre los principales atractivos de la gasificación se encuentra el producir un gas que se puede emplear como combustible o materia prima para otros procesos a partir de residuos de escaso valor comercial.

Los gasificadores de carbón mineral, madera y carbón vegetal han sido empleados, desde el comienzo del siglo XIX, para el funcionamiento de motores de combustión interna en diversas aplicaciones. La utilización alcanzó un máximo durante la segunda guerra mundial, cuando se emplearon en el mundo casi un millón de gasificadores, principalmente en vehículos que funcionaban con combustibles sólidos nacionales, en vez de gasolina. Es importante recordar que los pequeños gasificadores se han utilizado bastante en el pasado y que han desempeñado en algunos países un papel muy importante en la reducción o eliminación de las necesidades de importación de combustibles

El interés por la tecnología de gasificación ha mostrado una serie de altibajos durante los últimos ochenta años, de ello resulta que el interés por la investigación sobre la gasificación está estrechamente relacionado con el costo relativo y la disponibilidad de combustibles fósiles, líquidos y gaseosos hay, sin embargo, una importante diferencia entre los períodos anteriores de gran interés y el actual, el aumento de la actividad científica se correspondió con un aumento en el número de gasificadores en uso. El reciente incremento del interés científico no se ha traducido todavía en una gran actividad práctica y comercial.

La gasificación de la biomasa y de otros combustibles sólidos y líquidos en los últimos dieciocho años se ha desarrollado como una alternativa ideal para la generación eficiente y limpia de electricidad en sistemas de cogeneración y para la generación de gas de síntesis empleado en la elaboración de productos petroquímicos.

La disminución y control de emisiones contaminantes es una de las actividades más importantes que se ejecutan a escala mundial en todas y cada una de las ramas industriales. Entre los mecanismos más comúnmente utilizados para lograr dichos objetivos se encuentran: el de mejorar la eficiencia de transformación y el de utilizar combustibles "limpios", esto es, con bajo contenido de componentes contaminantes, como el gas natural. Tal situación es una de las causas principales de esta búsqueda de alternativas energéticas sustentables.

La utilización de combustibles alternativos permite mitigar el uso excesivo de combustibles fósiles, evitando su agotamiento. Asimismo, el empleo de combustibles biomásicos resulta un medio eficaz para reducir las emisiones de gases que ocasionan el efecto invernadero. Por otra parte, la utilización de residuos como combustible constituye una alternativa para solucionar el problema de su acumulación y consecuente impacto ambiental negativo (Bonelli y col., 2001). Sin embargo, la misma presenta algunos inconvenientes como el transporte, secado, almacenaje, molienda, ignición, bajo poder

calorífico de los residuos, etc. La co-combustión de carbón y biomasa es una de las opciones más prometedoras que permite, a corto plazo, el uso de residuos así como combustibles renovables. Este proceso conduce a reducir el consumo de combustibles fósiles empleando los quemadores diseñados originalmente para carbón, que pueden adaptarse al nuevo combustible con pequeñas modificaciones (Biagini y col., 2002).

Por otra parte, la gasificación es una importante vía de utilización de los combustibles sólidos para obtener combustibles gaseosos y productos químicos (Ochoa y col., 2000; Cukierman y col., 1996). El carbón mineral tiene un alto contenido de energía; sin embargo, su utilización ocasiona un serio impacto ambiental, la biomasa tiene un menor contenido energético pero es mucho menos perjudicial para el medio; su alta reactividad termoquímica facilita su conversión además de ser una fuente renovable. Por estas razones, resulta interesante utilizar estos combustibles a fin de mejorar la eficiencia tendiendo al uso sustentable de los combustibles fósiles (Sjöström y col., 1999; Ochoa y col., 2000).

2.1 Proceso De Gasificación

La gasificación permite la conversión de un combustible sólido, tal como la biomasa en un combustible gaseoso. El proceso de gasificación consta de tres etapas básicas: el secado, la pirólisis y la gasificación.

Cuando el combustible sólido es calentado a 300–400° C en una atmósfera reductora, se piroliza a carbonizado sólido (char), hidrocarburos o alquitranes condensables y gases. Los rendimientos relativos de gas, líquido y carbonizado dependen en mayor medida de la rapidez de calentamiento y la temperatura final. Generalmente, la pirólisis ocurre más rápido que la gasificación y ésta última es el paso que controla la reacción. Los productos sólidos, líquidos y gaseosos de la pirólisis reaccionan con el agente oxidante, usualmente aire, la gasificación del carbonizado es la combinación interactiva de varias reacciones sólido-gas y gas-gas en las cuales el carbonizado sólido es oxidado a CO y CO₂ y el hidrógeno se produce por la reacción con vapor de agua. Las reacciones gas-sólido de la oxidación del carbonizado son las más lentas y limitan la rapidez total del proceso de gasificación. Muchas de las reacciones son catalizadas por los metales alcalinos presentes en la ceniza de la madera, pero sin alcanzar el equilibrio mediante un proceso de oxidación parcial. La composición de la mezcla gaseosa final está determinada por factores como la composición y contenido de agua de la alimentación, temperatura de reacción y el grado de oxidación de los productos de la pirólisis. El alquitrán es un problema especial y significa una barrera técnica significativa. Básicamente, existen dos formas de destruir los alquitranes [1], ambas han sido extensivamente estudiadas:

- ❖ Por pirólisis catalítica, usando dolomita o níquel, por ejemplo,
- ❖ Por pirólisis térmica, por oxidación parcial o por contacto directo.

Sin embargo después de un proceso de purificación se pretende obtener un gas resultante con una composición rica en monóxido de carbono (CO) hidrógeno (H₂) con pequeñas cantidades de dióxido de carbono (CO₂), metano (CH₄), alquitrán, agua y de hidrocarburos tales como el etano. Este gas posee un bajo poder calórico, del orden de 4 a 7 MJ/m³, en cambio, si se emplea como agente oxidante el oxígeno (O₂) se pueden alcanzar de 10 a 18 MJ/m³. La tecnología más empleada es, sin embargo, la que utiliza aire como agente oxidante por razones económicas y tecnológicas. El gas pobre resultante puede ser

utilizado en turbinas de gas o en motores de combustión interna. Ambos motores térmicos pueden ser acoplados a un generador para la producción de electricidad. La figura 2.1 muestra las diferentes calidades de gas que pueden ser obtenidas mediante esta tecnología.

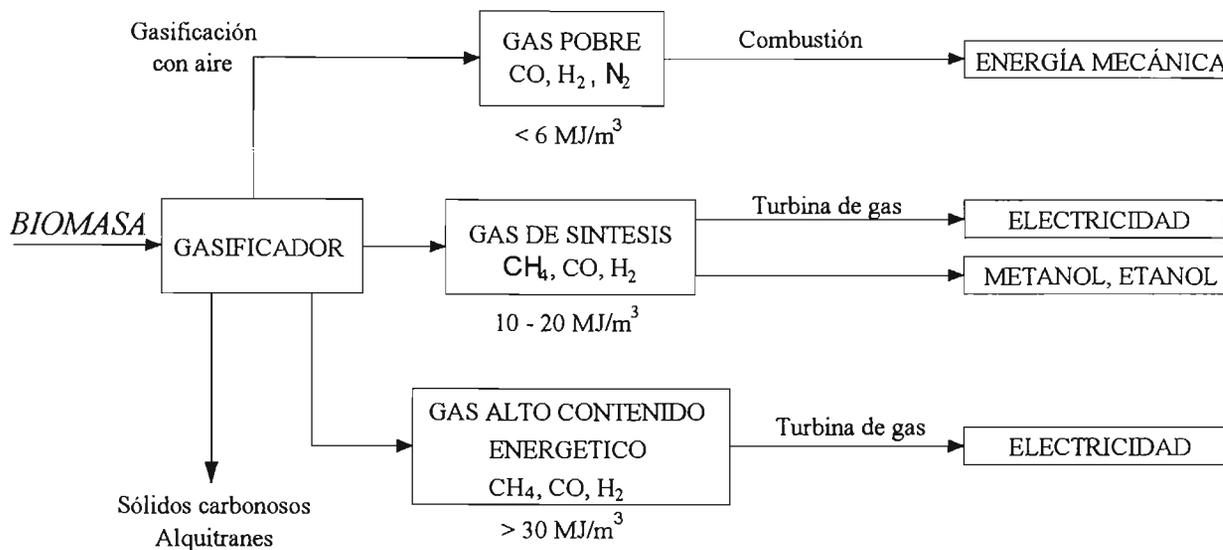


Figura 2.1

Aquellas instalaciones que incluyen un gasificador y que se integran a un ciclo combinado requieren, además del reactor y del sistema de enfriamiento para el gas crudo, de una unidad para separación de aire (cuando el agente gasificante es oxígeno), de un sistema para limpieza de gases, del sistema para manejo y preparación de los combustibles, así como de los sistemas para el manejo de los desechos producidos en forma de escoria y cenizas. La electricidad se produce quemando el gas de síntesis limpio en la turbina de combustión, y en la turbina de vapor de un ciclo combinado utilizando parte o todo el vapor generado en el enfriador del gas de síntesis, así como en el recuperador de calor de los gases de combustión conectado a la descarga de la turbina de gas. El vapor de proceso se obtiene del enfriador del reactor y/o del ciclo de vapor.

En el caso de que el reactor y sus auxiliares estén totalmente integrados al ciclo combinado, se designa a la instalación como Gasificación Integrada a Ciclo Combinado (ver figura 2.2) o IGCC por sus siglas en inglés (Integrated Gasification Combined Cycle).

En una instalación donde el ciclo combinado no está integrado térmicamente a la unidad de gasificación, lo único que se alimenta es el gas de síntesis para ser quemado en la cámara de combustión de la turbina de gas. La unidad de separación de aire cuenta con sus propios equipos para proveerse del aire para obtener el oxígeno necesario para la gasificación.

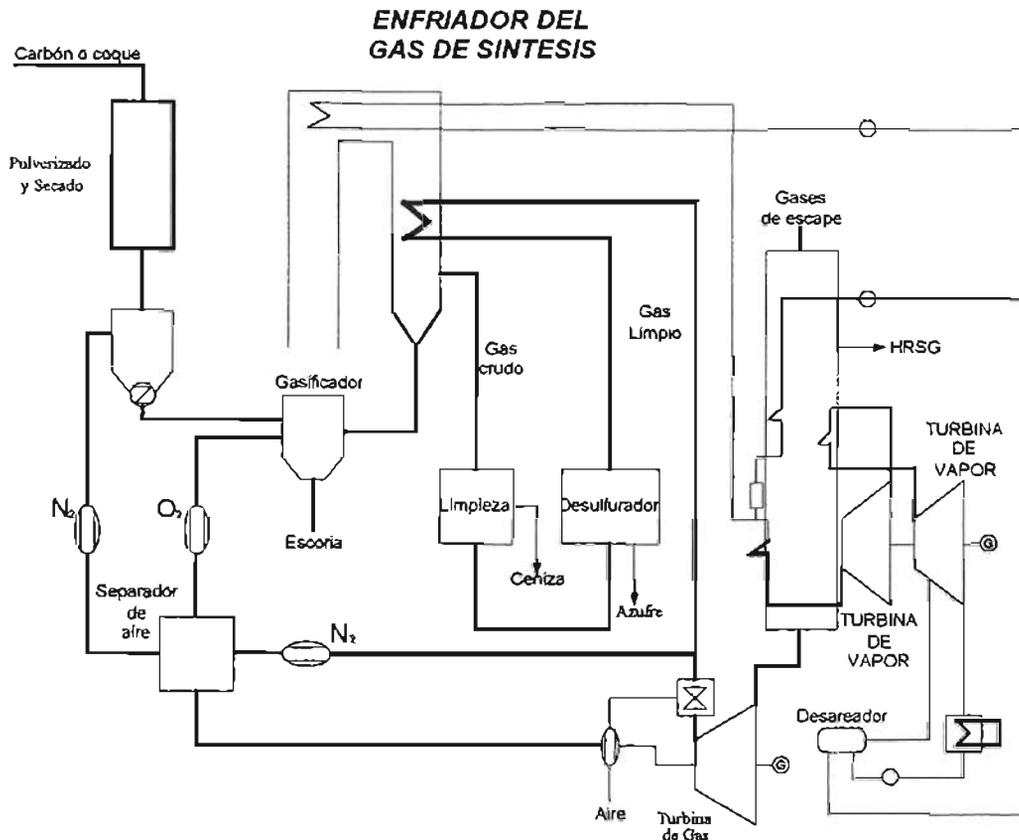


Figura 2.2. Gasificación integrada a ciclo combinado

Es importante aclarar que cuando el combustible tiene bajos contenidos de oxígeno, como el coque de refinería, se utiliza vapor de agua para aumentar la reactividad de la carga y como moderador de la reacción. También cuando el mismo combustible tiene bajos contenidos de cenizas es necesario utilizar aditivos para proteger los interiores de los reactores.

2.2 Clasificación De Los Gasificadores

De acuerdo a la Organización Latinoamericana de Energía (OLADE, 1997), los procesos y equipos de gasificación pueden ser clasificados de la siguiente manera.

❖ Según la fuente de energía:

- Alotérmico: Fuente externa de energía, es decir, que no sea el propio combustible
- Autotérmico: La combustión parcial del combustible proporciona la energía para el proceso de gasificación

❖ Según la presión de operación en el gasificador:

- Baja presión: Gasificador que opera a presión atmosférica ligeramente positiva (más alta que la presión atmosférica), o negativa (un poco más baja que la presión atmosférica).
- Alta presión: Trabaja con presión más alta que la atmosférica. Usados en grandes instalaciones generando cantidades considerables de gas de síntesis.

❖ Según el movimiento relativo de los gases y el combustible (Figura 2.3):

- Flujo descendentes paralelos (downdraft): El combustible sólido y los gases generados se mueven en la misma dirección y, en general, hacia abajo (downdraft).
- Flujo contracorriente: El combustible y los gases se desplazan en direcciones contrarias y, en general los gases se mueven hacia arriba (updraft).
- Flujo cruzado: Los gases generados se mueven transversalmente al flujo de combustible (Crossflow).

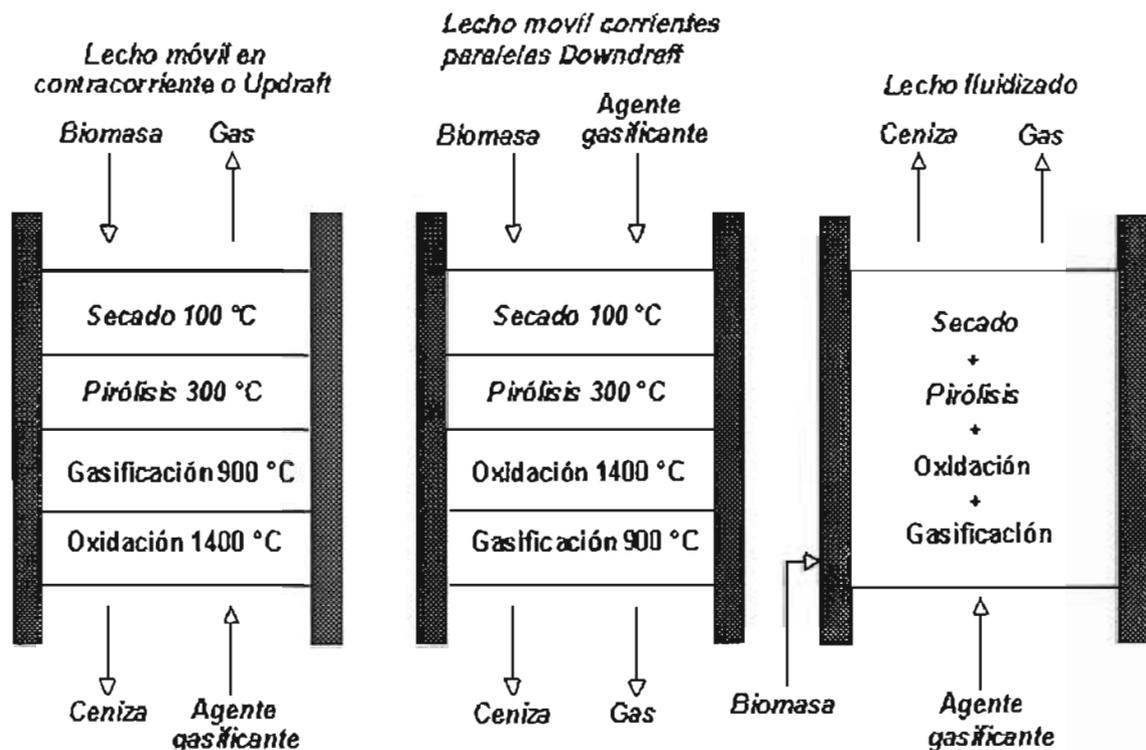


Figura 2.3. Clasificación según la dirección del movimiento de las fases.

❖ Según el régimen de flujo en el gasificador:

- Lecho fijo: Considerado por diversos autores como referencia a la zona de reacción fija en los gasificadores convencionales, en los cuales, se lleva el combustible sólido a dicha zona.
- Lecho fluidizado: Cuando las partículas del combustible se mantienen en suspensión en un fluido.
- Flujo por arrastre: Cuando se mezclan las partículas del combustible con el agente de gasificación y la mezcla es inyectada en una cámara en donde ocurren las reacciones.

De los tres, el más desarrollado y el que está listo para usarse a nivel industrial es el de flujo por arrastre, por lo que se le conoce como de primera generación. Algunas diferencias del proceso de corriente por arrastre sobre los otros dos son:

- a) Requiere de oxígeno como agente gasificante, lo que implica que las dimensiones de los equipos (reactor, compresores, equipos de limpieza, etc.) sean menores respecto a aquéllos en los que se utiliza directamente aire para gasificar. A cambio, usa una planta criogénica para obtener el O₂ del aire.
- b) No requiere de elementos mecánicos para evitar la aglomeración de las cargas como sucede en los equipos que operan bajo el esquema de lecho fijo.
- c) Las temperaturas a las que se lleva a cabo el proceso permiten que se forme menor cantidad de escoria. Esto evita que se procesen posteriormente los desechos del reactor, tal como sucede en los gasificadores de lecho fluidizado.

❖ En cuanto a la forma de cargar combustibles y descargar cenizas:

- Intermitentes: Carga en grandes cantidades y descarga con los gasificadores inoperantes.
- Continuo o semicontinuo: La carga del combustible y la descarga de cenizas se hace de manera continua o discreta y con el gasificador en operación, sin interferir en su desempeño.

❖ En cuanto a la clase de comburente:

- Oxígeno
- Aire
- Oxígeno/vapor
- Aire/vapor.

En la siguiente sección se realiza una descripción más amplia de las características de los gasificadores que corresponde a la clasificación por el movimiento relativo entre gases y combustible, así como el régimen de flujo.

2.2.1 Gasificador A Contracorriente

Es el tipo de gasificador más antiguo y sencillo, se presenta en la figura 2.4

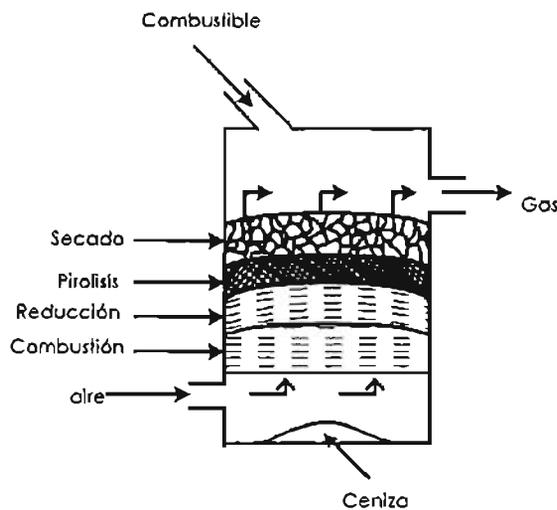


Figura 2.4 gasificador de flujos a contracorriente.

La toma de aire se encuentra en el fondo, la carga de combustible en la parte superior y los productos gaseosos así como vapores salen por arriba, este gasificador tiene la ventaja de secar el combustible que desciende al reactor por el gas ascendente, eliminando la humedad de la carga introducida. En la parte más alta del gasificador tiene lugar el calentamiento y pirólisis de la carga, como resultado de la transferencia de calor, por convección forzada y radiación, de las zonas inferiores. Los alquitranes y productos volátiles producidos durante este proceso son transportados por la corriente de gas, los productos sólidos de pirólisis (char) caen a una zona libre de oxígeno en donde participan en reacciones de gasificación, y el material sobrante de las etapas anteriores pasa a la zona de oxidación. Las cenizas se remueven por el del fondo del gasificador.

Las principales ventajas de este tipo de gasificador consisten en su simplicidad, alta proporción de combustible sólido quemado e intercambio interno de calor que motiva unas bajas temperaturas de salida del gas y alta eficiencia del equipo y también la posibilidad de funcionar con muchos tipos de carga (aserrín, cáscaras de cereales, etc.). Los principales inconvenientes provienen de la posibilidad de que se produzcan "chimeneas" en el equipo, lo que puede motivar la salida de oxígeno y situaciones explosivas peligrosas y la necesidad de instalar parrillas de movimiento automático y también problemas relacionados con la eliminación de líquidos condensados que contienen alquitranes, resultantes de las operaciones de depuración del gas. Esto último tiene poca importancia si el gas se emplea para aplicaciones directas de calor, en cuyo caso se queman los alquitranes simplemente.

Trabajan generalmente con material muy seco, proporcionando condiciones para la obtención de un elevado rendimiento térmico, con un gas limpio y seco que posee un poder calorífico inferior (PCI) del orden de 6300 kJ/Nm^3 (OLADE).

En condiciones operacionales el gas que sale por la parte superior del gasificador, arrastra gran cantidad de volátiles, constituidos por vapor de agua, ácidos y alquitranes, así también como polvo. Este hecho reduce el rendimiento del equipo en 20 a 25 % y requiere de dispositivos que eliminen estos volátiles para proteger el ambiente. El gas de síntesis generado presenta temperaturas de 500 a 600 °C. Esta variación es función de la temperatura de la zona de oxidación, altura del lecho sobre la zona de pirólisis y de la humedad del combustible sólido.

Las temperaturas en el interior del gasificador a contracorriente son:

- ❖ Zona de oxidación (900 a 1200 ° C)
- ❖ Zona de reducción (650 a 900 ° C)
- ❖ Zona de pirólisis (400 a 650 ° C)

El control de las temperaturas en este gasificador requiere la adición de vapor de agua en el flujo de aire, ya que la humedad del combustible sólido, una vez siendo evaporada, es arrastrada con los gases generados. La granulometría del combustible sólido debe estar entre 20 y 100mm, pudiendo llegar a 150mm como dimensión máxima.

2.2.2 Gasificador Concurrente

Se ha encontrado una solución al problema del arrastre de alquitrán con la corriente de gas, diseñando gasificadores de corriente descendente (downdraft), en los cuales los gases y vapores de primera gasificación se introducen en la zona de oxidación del gasificador o por encima de esta. En este sistema el gas fluye en el mismo sentido descendente que el combustible sólido como se muestra en la figura 2.5.

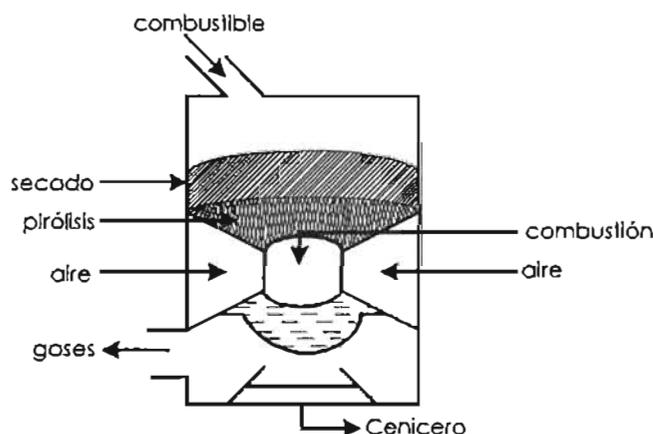


Figura 2.5 Gasificador concurrente tipo Inbert.

Las zonas de pirólisis y secado se encuentran inmediatamente arriba de la zona de oxidación. El calor se transmite por radiación, convección y conducción, secando

parcialmente la materia prima. El vapor de agua es forzado a moverse en el sentido descendente hasta la zona de reducción, en donde participa en las reacciones de gasificación.

En su camino hacia abajo, los productos ácidos y alquitranes de la pirólisis procedentes del combustible deben pasar a través de un lecho incandescente de carbón vegetal y se transforman por ello en gases permanentes de hidrogeno, dióxido de carbono y metano. Dependiendo de la temperatura de la zona incandescente y del tiempo de paso de los vapores con alquitrán, se logra una descomposición más o menos completa de los alquitranes.

La principal ventaja de los gasificadores de tipo concurrente radica en la posibilidad de producir un gas sin alquitrán apropiado para aplicarlo a motores. Sin embargo, en la práctica es muy raro lograr un gas libre de alquitranes, en todo el funcionamiento del equipo se considera normal un índice tres de relación entre los alquitranes existentes y los remanentes al final de la operación; se considera excelente un factor 5 a 6. Debido al menor contenido de componentes orgánicos en el líquido condensado, los gasificadores concurrentes sufren menos objeciones ambientales que los gasificadores a contracorriente. Un inconveniente importante de los equipos de flujos paralelos descendentes es la imposibilidad de funcionar con una serie de combustibles no elaborados. En particular, los materiales blandos y de baja densidad ocasionan problemas de circulación y una caída excesiva de presión y, el combustible sólido hay que convertirlo en gránulos o briquetas antes de utilizarlo. Este tipo de gasificadores sufren también los problemas relacionados con los combustibles de alto contenido de cenizas (formación de escoria), en mayor proporción que los gasificadores a contracorriente.

Un pequeño inconveniente de este sistema en comparación con el sistema a contracorriente es su eficiencia algo inferior debido a la falta de intercambio interno de calor y al menor valor calorífico del gas. Además de esto, la necesidad de mantener unas temperaturas altas uniformes en una sección transversal determinada, hace imposible el uso de los gasificadores en una serie de potencias superior a los 350 kW (potencia de eje).

2.2.3 Gasificador a flujo cruzado

En este sistema el flujo de aire y gases generados es transversal al movimiento del combustible sólido. Operan a temperaturas muy elevadas (alcanzando aproximadamente 2000 ° C). Requieren un combustible con bajo contenido de alquitrán y de fina granulometría, a causa del bajo tiempo de contacto entre el aire y el combustible.

Los gasificadores de flujo cruzado, que se ilustran esquemáticamente en la figura 2.6 son una adaptación para el empleo de carbón vegetal. La gasificación del carbón vegetal produce temperaturas muy elevadas (1500 °C y más) en la zona de oxidación que pueden producir problemas en los materiales. En los gasificadores de flujo cruzado, el propio combustible (carbón vegetal) sirve de aislamiento contra estas altas temperaturas. Las ventajas del sistema están en poder funcionar en muy pequeña escala, su simplicidad de construcción y rapidez de arranque, pudiendo resultar económicamente viables, en ciertas condiciones, instalaciones inferiores a 10 kW (potencia en el eje). La razón está en la gran sencillez del conjunto de depuración del gas (sólo un quemador ciclón y un filtro caliente) que se puede emplear cuando se utiliza este tipo de gasificador junto con motores pequeños.

Un inconveniente de los gasificadores de flujo cruzado es su capacidad mínima de transformación del alquitrán y la necesidad consiguiente de emplear carbón vegetal de alta calidad (bajo contenido de productos volátiles). Debido a la incertidumbre de la calidad del carbón, cierto número de gasificadores de carbón vegetal emplean el sistema de corriente descendente para mantener al menos una capacidad mínima de cracking de alquitrán.

En los siguientes párrafos, se describen los gasificadores que corresponden a la clasificación que se hace en base al tipo de lecho utilizado.

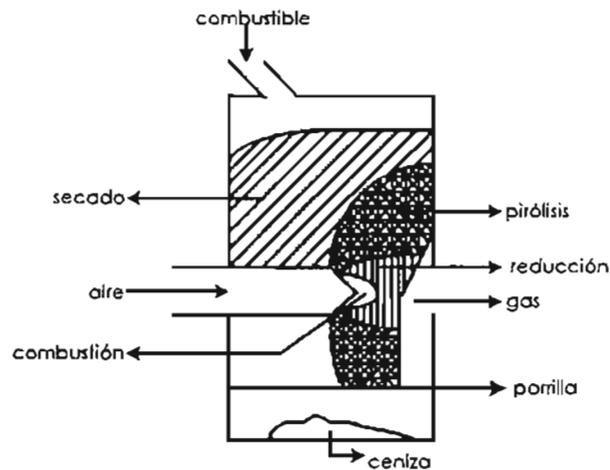


Figura 2.6 Gasificador de flujos cruzados.

2.2.4 Gasificador De Lecho Fijo

En los gasificadores de lecho fijo se presenta una zona de reacción fija hacia la cual, tanto combustible como oxidante son conducidos. En este gasificador el carbón se suministra por la parte superior del equipo y es calentado conforme cae sobre una parrilla rotatoria, mientras que el aire y el vapor entran por la parte inferior del equipo. La gasificación ocurre en toda la cama de combustión, donde los gases son desalojados en una región cercana a la parte superior del gasificador. Normalmente se utilizan tamaños de partícula del orden de 3 a 50 milímetros.

La gasificación en el lecho fijo es un proceso comercial. Según cálculos, cerca del 87 % de la gasificación a pequeña escala en el mundo, es hecha a través de esta tecnología (Radulovic & Smoot, 1993). Esto se debe a que el combustible necesita menos tratamiento antes de introducirse a estos equipos, lo que permite una mayor diversidad de materia prima a gasificar (por ejemplo residuos municipales). Este tipo de gasificadores puede subdividirse y clasificarse a su vez, de acuerdo a los patrones de flujo combustible-oxidante; en donde los del tipo de contracorriente son los más comunes. Las tecnologías de gasificación de este tipo están siendo desarrolladas principalmente en EUA y Europa.

2.2.5 Gasificador De Lecho Fluidizado

El funcionamiento de los gasificadores de lecho fijo (a contracorriente y concurrente), se ve afectado por las propiedades morfológicas físicas y químicas del combustible. Los problemas que se encuentran corrientemente son: la falta de tiro en el depósito, la formación

de escoria y la excesiva caída de presión en el gasificador. Un sistema de diseño que pretende eliminar tales dificultades es el gasificador de lecho fluidizado.

El gasificador de lecho fluidizado se compone de un reactor vertical dotado de una parrilla en la parte inferior, a través de la cual, se inyecta el oxidante o aire. Las partículas de combustible (<8mm) se inyectan por encima de la parrilla, al entrar en contacto con la corriente ascendente de aire, las partículas sólidas son suspendidas, formando un lecho fluidizado. Se comienza por calentar externamente el lecho y el material de alimentación se introduce tan pronto como se alcanza una temperatura suficientemente elevada. Las partículas del combustible se introducen por el fondo del reactor, se mezclan muy rápidamente con el material del lecho y se calientan casi instantáneamente alcanzando la temperatura del lecho. Como resultado de este tratamiento, el combustible se piroliza muy rápidamente, dando como resultado una mezcla de componentes, con una cantidad relativamente elevada de materiales gaseosos. En la fase gas, se produce una nueva gasificación y reacciones de transformación de los alquitranes. La mayoría de los sistemas van equipados con un ciclón interno, a fin de reducir al mínimo el escape de alquitrán por soplado. Las partículas de ceniza se transportan también por la parte superior del reactor, debiendo extraerse de la corriente de gas si este se emplea en aplicaciones para motores.

Normalmente opera en un intervalo de 800-1100 ° C (Radulovic et al, 1993), esta temperatura de operación impide la sinterización de la ceniza, facilitando su remoción. Adicionalmente, debido a la temperatura uniforme en el reactor se produce poca formación de alquitrán.

Las principales ventajas de los gasificadores de lecho fluidizado tal como lo indican Van der Versen (44) y otros, proceden de su flexibilidad en cuanto al material de alimentación debida al fácil control de la temperatura que puede mantenerse por debajo del punto de fusión de las cenizas (cáscaras de arroz) y a su capacidad de funcionar con materiales blandos y de grano fino (aserrín) sin necesidad de un proceso previo. Debido especialmente al equipo de control necesario, no se prevén gasificadores muy pequeños de lecho fluidizado, debiendo establecerse su campo de aplicación, en principio, por encima de los 500kW (potencia en el eje). Los gasificadores de lecho fluidizado están actualmente disponibles con carácter semicomercial en varios fabricantes de Europa y EUA.

2.2.6 Gasificador De Flujo Por Arrastre

En el gasificador de flujo por arrastre, el combustible y oxidante se mezclan y entran a la cámara de gasificación presurizada. Este gasificador requiere partículas finas de carbón (<100 μm) y opera normalmente a temperaturas de aproximadamente de 1500 K. Esta tecnología aún se encuentra en investigación.

La selección del tipo de gasificador que se va a emplear depende de la potencia que se desee. Los de lecho fluidizado se utilizan para instalaciones de gran escala, mientras que para pequeñas potencias se prefieren los de flujos paralelos downdraft. Otros tipos de reactores son los de lecho fluidizado burbujeante, los de lecho fluidizado circulante, y los de lecho fluidizado presurizados. Otros tipos de reactores son los ciclónicos y los rotatorios, además de diferentes tipos de reactores de cama móvil.

Hasta potencias de 1 MW se recomienda la utilización de gasificadores de flujos descendentes, casi exclusivamente. Este tipo de gasificador es, además, el más sencillo de todos; y para potencias mayores de 10 y hasta alrededor de 50 MW compiten los reactores de tipo updraft y los de lecho fluidizado burbujeante. Para potencias mayores de 100 MW se usan exclusivamente los de lecho fluidizado presurizados.

2.3 Sistemas Comerciales De Gasificación

2.3.1 Sistema Lurgi

Las tecnologías de gasificación de lecho fijo ya han sido aplicadas extensivamente. El más importante gasificador de este tipo disponible comercialmente es el gasificador desarrollado por la compañía Lurgi en Alemania alrededor de los años 30's. El sistema Lurgi figura 2.9 usualmente opera a presiones entre 30 y 35 atmósferas. Las partículas del carbón tienen una granulometría grande (5 a 50 milímetros) y es alimentado a través de una tolva cerrada en la parte de arriba. El oxidante es una mezcla de oxígeno y vapor, y se introduce por medio de una rejilla en la parte inferior del gasificador. La carga de carbón y el medio gasificante se mueven en direcciones opuestas, es decir, a contracorriente. La temperatura de operación a este patrón de flujo no es uniforme. En la parte baja (zona de combustión) la temperatura se sitúa entre los 1400 K, mientras que en las partes altas es alrededor de 800 K y el gas de síntesis presenta una temperatura aproximadamente de 600 K (Simbeck et al., 1993). La reacción del oxígeno con el carbón para formar dióxido de carbono produce el calor necesario para sostener las reacciones endotérmicas vapor-carbón y carbón - CO₂. El gas de síntesis, que consta principalmente de monóxido de carbono, hidrogeno y algunas trazas de metano, sale del gasificador hacia un proceso de limpieza en donde se desulfuriza. Un gasificador Lurgi típico tiene cuatro metros de diámetro y posee una capacidad nominal de 55000 m³/hr de gas seco a condiciones estándar.

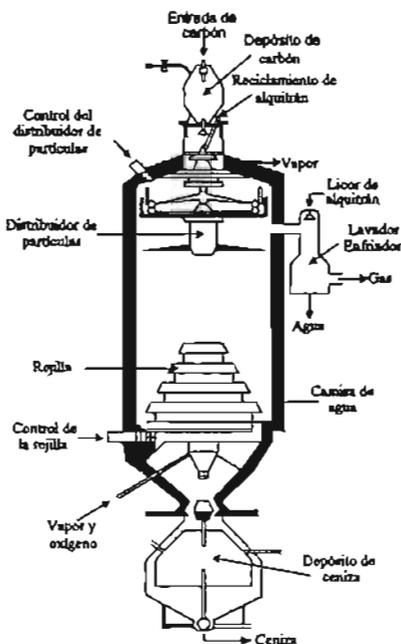


Figura 2.9. Sistema de gasificación Lurgi

2.3.2 Sistema Winkler

Las tecnologías de gasificación de lecho fluidizado están aún en fase de desarrollo e investigación. El sistema más representativo y que ha sido comercialmente probado es el gasificador Winkler. Esta tecnología, mostrada en la figura 2.10, es un gasificador de lecho fluidizado a presión atmosférica, aunque también se encuentran equipos que trabajan a presiones arriba de cuatro atmósferas. La temperatura del lecho es usualmente mantenida entre 1070 y 1370 K para evitar la fusión de cenizas. A estas temperaturas, el combustible es convertido principalmente a monóxido de carbono, hidrógeno y dióxido de carbono con pequeñas cantidades de metano; los alquitranes u otros hidrocarburos pesados no se presentan. Estas temperaturas relativamente restringen al gasificador Winkler a los carbones más reactivos. El gas producido a temperaturas entre 600 y 800 K es enfriado a través de un intercambiador de calor instalado en la parte alta del gasificador para finalmente ser desulfurizado en un sistema removedor de azufre. Un gasificador comercial Winkler típico tiene 5.5 m de diámetro y 23 m de altura y posee la capacidad de gasificar aproximadamente 110 toneladas por día a presión atmosférica y 1800 ton/día a cuatro atmósferas (Parekh, 1982; Nowaki, 1981).

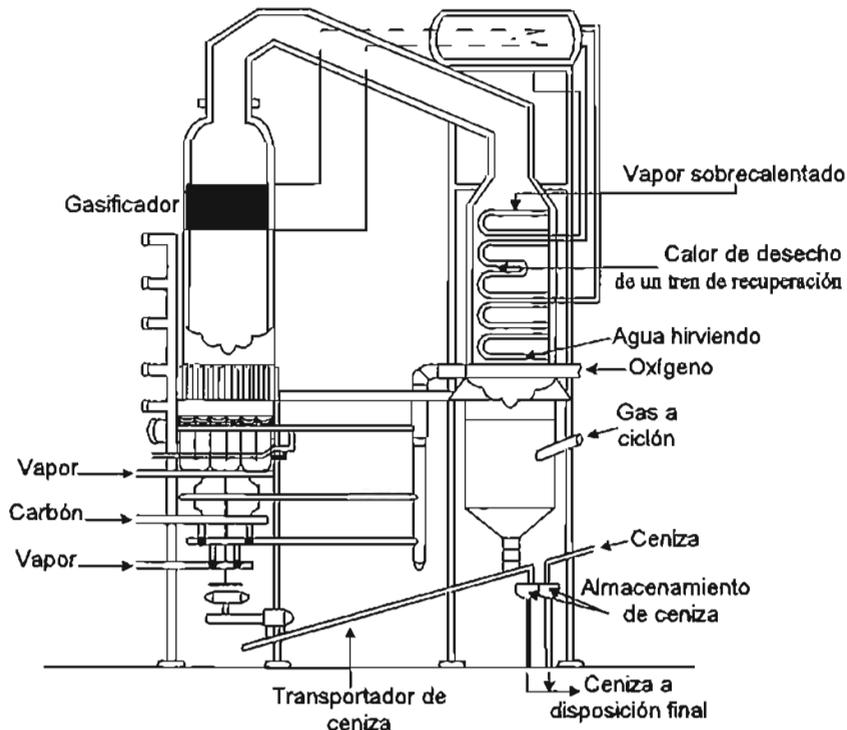


Figura 2.10. Sistema de gasificación Winkler

2.3.3 Sistema Koppers-Totzek

Este sistema se muestra en la figura 2.11 y es un gasificador de flujo por arrastre a presión atmosférica. El carbón a alimentar se seca y pulveriza. Típicamente 70 a 80 % de este carbón pasa a través de 200 mallas de 74 μm de apertura y se inyecta por medio de dos quemadores opuestos entre sí. El combustible reacciona con oxígeno y vapor para producir una temperatura de aproximadamente 2200 K en la zona de flama. La temperatura del gas se reduce alrededor de 1760 K a través de intercambio de calor con vapor que circula por alrededor de las paredes. A esta temperatura, el carbón se convierte principalmente a CO ,

H_2 y CO_2 y mucha de la ceniza es fundida. El gas de síntesis que sale del gasificador se enfría con agua a una temperatura de 1200 K lo que contribuye a la solidificación de las cenizas. El gas entonces se procesa en un sistema removedor de azufre. Los gasificadores Koppers-Totzek que poseen dos quemadores procesan alrededor de 210 toneladas por día de carbón, mientras que los de cuatro quemadores a 90° procesan 430 toneladas por día. Las aplicaciones más comunes de estos equipos hasta ahora han sido en la producción de amoníaco y metanol (Parekh, 1982)

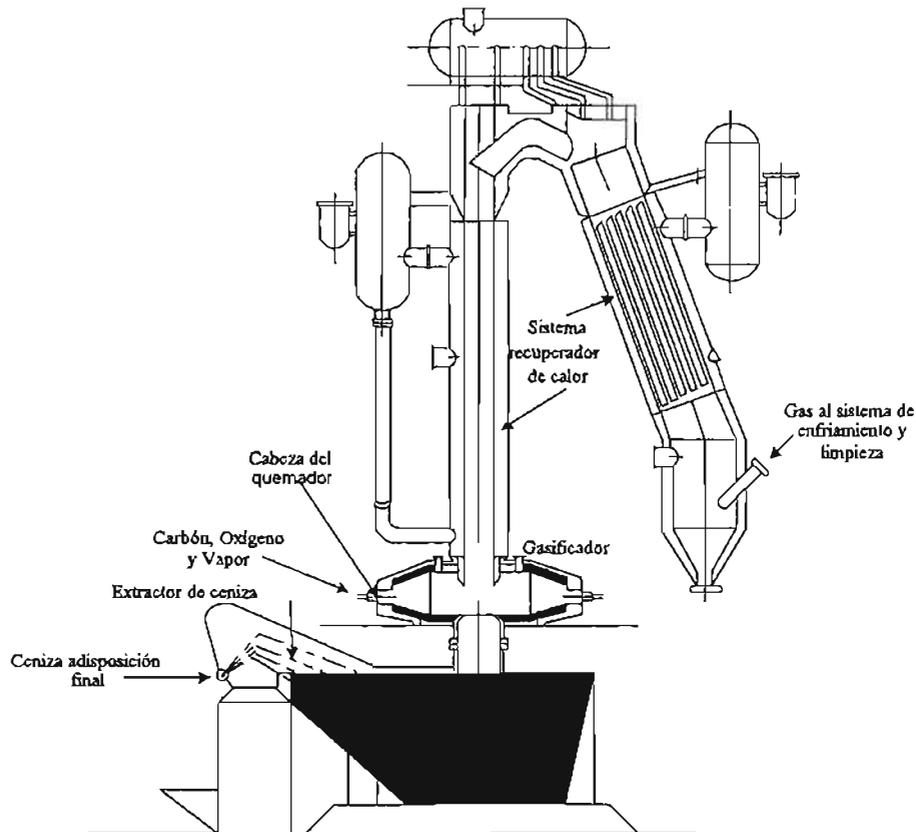


Figura 2.11. Sistema de gasificación Koppers - Totzek

2.3.4 Sistema Texaco

El sistema Texaco, mostrado con sus auxiliares en la figura 2.12 posee un gasificador de flujo por arrastre, presurizado y de alimentación lechosa. El carbón se mezcla con agua y condensados reclusos en un tanque con agitador. Esta mezcla carbón-agua, junto con el oxígeno o aire, se bombea a un quemador en la parte alta del gasificador. El agua de la mezcla se evapora y reacciona con el carbón, moderando la temperatura. La gasificación se da a temperaturas entre 1530 y 1760 K. A estas condiciones el carbón se transforma principalmente a CO , H_2 y CO_2 con pequeñas trazas de CH_4 ; no se presentan alquitranes u otros aceites. El nitrógeno del combustible se convierte a N_2 con algo de NH_3 , mientras que el azufre se reduce a H_2S y pequeñas cantidades de COS . La ceniza se funde y abandona el gasificador. El gas producido se enfría y se lava con agua. Una importante aplicación de la gasificación Texaco ha sido en plantas de ciclo combinado, Las cuales emplean esta tecnología para convertir aproximadamente 900 toneladas de carbón por día a un gas de poder calorífico medio, que se quema en una turbina de gas para producir electricidad.

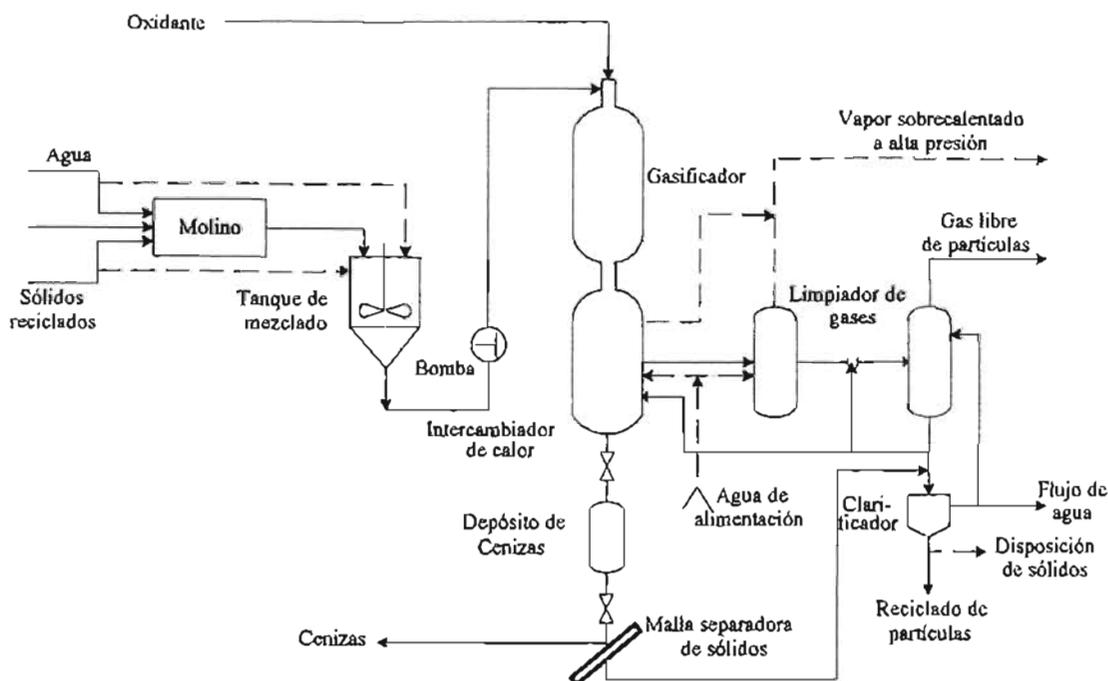


Figura 2.12 Sistema de gasificación Texaco

2.3.5 El Sistema Shell

El proceso de gasificación Shell, mostrado en la figura 2.13 fue desarrollado por la Shell Oil Company. Se compone esencialmente de cuatro partes: 1) el reactor de gasificación; 2) el recuperador de efluentes, que incluye un intercambiador con el fin de recuperar el calor liberado por las gases calientes de salida del gasificador; 3) el intercambiador economizador que precalienta el agua que se alimenta al calentador; y 4) el sistema de recuperación de carbón para su reciclaje. En el gasificador, El hidrocarburo o carbón alimentado se atomiza en una mezcla de oxígeno (o aire) con vapor y reaccionan para formar CO , H_2 , H_2O y pequeñas trazas de CO_2 y ceniza en la porción más baja del reactor. El azufre que acompaña a la alimentación se convierte en ácido sulfhídrico H_2S y monóxido de carbono azufrado COS , mientras una porción del nitrógeno se pasa a amoníaco NH_3 y trazas de ácido cianhídrico HCN . Aunque los gasificadores de este proceso generalmente son diseñados para operar a presiones bajas, se ha visto que un aumento en la presión beneficia los resultados (Ortiz & Hidalgo, 1995). El gas obtenido se enfría en el intercambiador de calor a una temperatura de 400°C , generando vapor sobrecalentado de alta presión para su posterior integración al ciclo combinado. Los gases fríos son llevados al sistema de remoción y recuperación de sólidos; para que una vez limpios de partículas, pasen a un hidrolizador catalítico para la conversión de COS a H_2S . Posteriormente pasan por un sistema para la eliminación de gases ácidos (Rectisol), donde se separa el H_2S y el CO_2 , los cuales son enviados a un proceso Claus para la recuperación de azufre. Los gases finalmente pueden ser incorporados a un ciclo combinado.

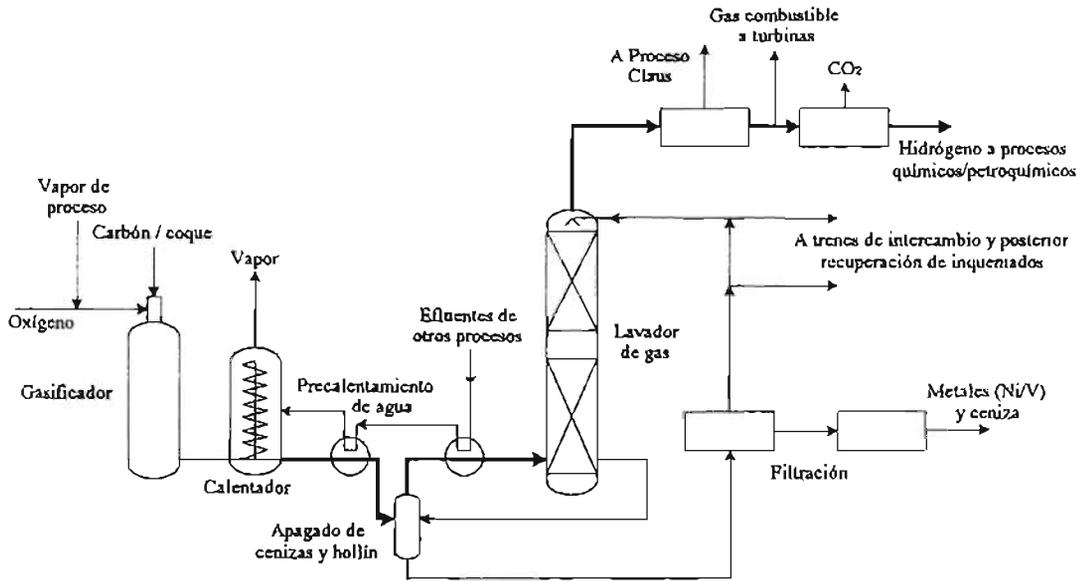


Figura 2.13 Sistema de gasificación Shell

2.4 Investigaciones Recientes

En el Centro de Estudio de Tecnologías Energéticas Renovables (CETER), del Instituto Superior Politécnico José Antonio Echevarría, Cuba, se diseñó, construyó y se encuentra en fase de montaje un reactor de tipo downdraft, con la finalidad de producir gases que se emplearán en un motor de combustión interna para suministrar electricidad a una comunidad rural, con el objetivo de generar una potencia eléctrica de 20 KW, lo que cubriría las necesidades básicas de la población. El esquema de la instalación se muestra en la Figura 2.14.

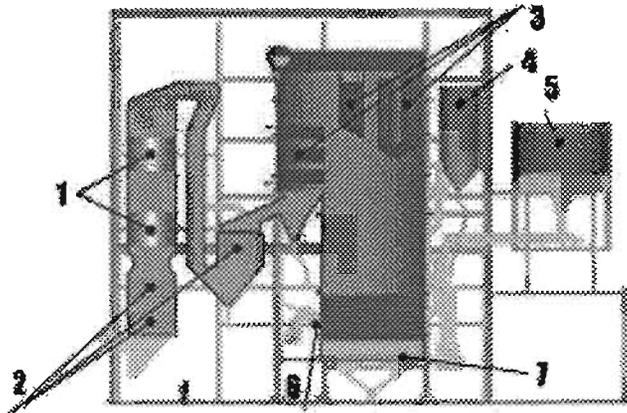


Figura 2.14. Esquema de un reactor de lecho fluidizado burbujeante: catalizadores (1), economizadores (2), sobrecalentadores (3), silo de arena (4), silo de combustible (5), arranque del quemador (6) y piso (7).

En este tipo de reactor la biomasa y el aire entran por la parte superior, y en la parte inferior se obtienen los gases que a una temperatura de 800 °C salen por la camisa exterior Fig. 2.15. El reactor estará aislado térmicamente. Se observa en la parte inferior una pantalla donde caen parte de las cenizas. Con posterioridad estos gases pasan a un ciclón separador de partículas, y las cenizas se colectan en la parte inferior del ciclón.

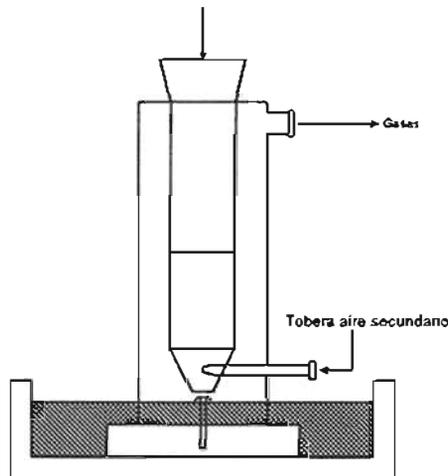


Fig. 2.15. Esquema simplificado de un reactor downdraft.

Para tener una idea de cómo funciona la instalación en su totalidad se muestra la figura 2.16, en una proyección isométrica. Los gases salen del ciclón y van hacia una torre de enfriamiento o scrubber. De aquí pasarán a través de un filtro compuesto por dos secciones, una de arena sílice y la otra de fibra vegetal. Para simular el motor de combustión interna se ha colocado todo el sistema a la succión de un ventilador centrífugo, por lo que la instalación funciona al vacío.

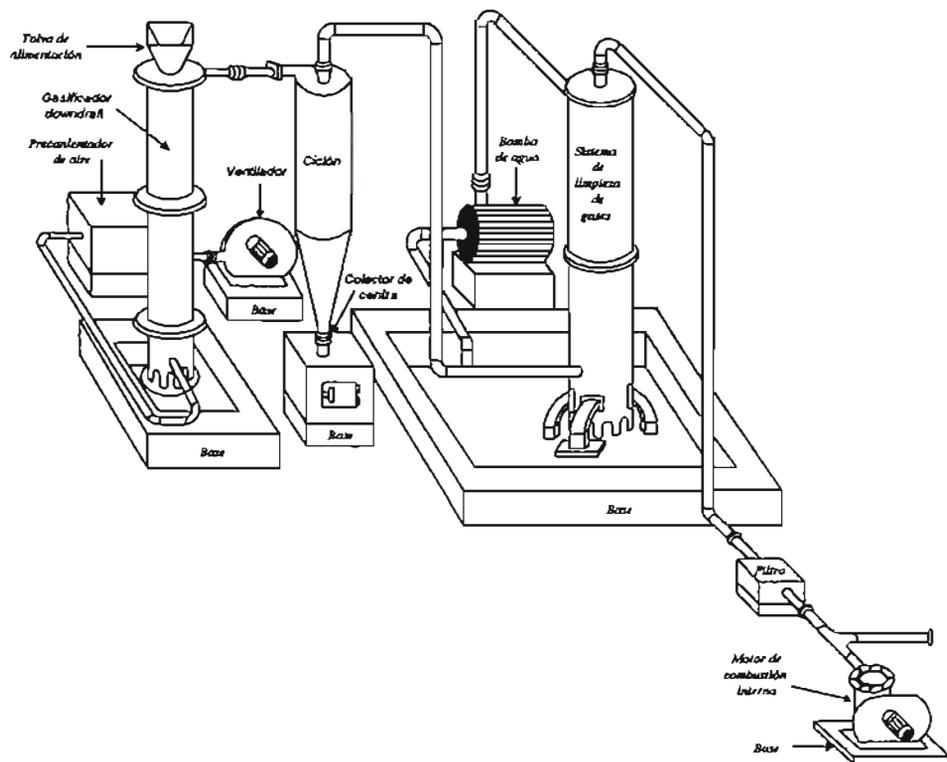


Figura 2.16 Esquema de la instalación de prueba para la gasificación

Aspectos Químicos Y Físicos De La Gasificación

Hasta ahora, se ha presentado el estado tecnológico de la gasificación, así como su potencial de aplicación. Son muchos los factores que intervienen en el proceso de gasificación. El tratar de entenderlos implica un estudio de los diversos factores físicos y químicos que intervienen. El presente capítulo considera en primera instancia algunos aspectos de la combustión de materiales sólidos como el carbón, ya que las reacciones que son importantes en la combustión de este, son igualmente importantes en los procesos de gasificación. La diferencia estriba en que, mientras la meta de la combustión es producir una máxima cantidad de calor, el objetivo de la gasificación es producir grandes cantidades de gases combustibles con el poder calorífico deseado.

3.1 Procesos Durante La Gasificación

Los procesos que le ocurren a una partícula de combustible sólido (carbón) durante la combustión o gasificación son variados y complejos. Estas dificultades, se suman a la naturaleza multifásica (gas-sólido) del y de los procesos que ocurren en la interfase.

Una partícula de carbón se puede considerar compuesta básicamente de cuatro materiales: 1) carbón "crudo", 2) agua o humedad, 3) carbonizado (char) y 4) ceniza (figura 3.1). Cuando la partícula se inyecta al gasificador se calienta por medio de la conducción de calor que proviene de la fase gaseosa, esto causa que el contenido de humedad se transfiera a la corriente gaseosa en forma de vapor de agua (proceso de secado). Las temperaturas presentes en el equipo causan la pirólisis del carbón crudo. De este proceso, se obtiene algunos volátiles que son incorporados a la fase gaseosa y un sólido o residuo carbonizado (char) que permanece en la partícula. Este último dará origen a reacciones heterogéneas de superficie con los componentes de la corriente gaseosa, lo que provocará una disminución de la partícula de carbón. La ceniza es el contenido de material inerte de la partícula y durante los procesos de gasificación se considera que no se transforma. Los cuatro componentes de la partícula están dados por medio de sus fracciones máxicas. Los procesos anteriores se llevan a cabo dentro de un régimen turbulento inducido por la fase gaseosa.

En las siguientes secciones se explican con mayor detalle dichos procesos. Aunque están referidos como procesos de combustión, los conceptos son igualmente aplicables para la gasificación de un combustible sólido.

3.2 Combustión De Sólidos

Por combustión se entiende como toda reacción química relativamente rápida de combustibles, de carácter notablemente exotérmico, que se desarrolle en fase gaseosa o en fase heterogénea (gas- líquido, gas-sólido), con o sin manifestaciones del tipo de llamas o de radiaciones visibles.

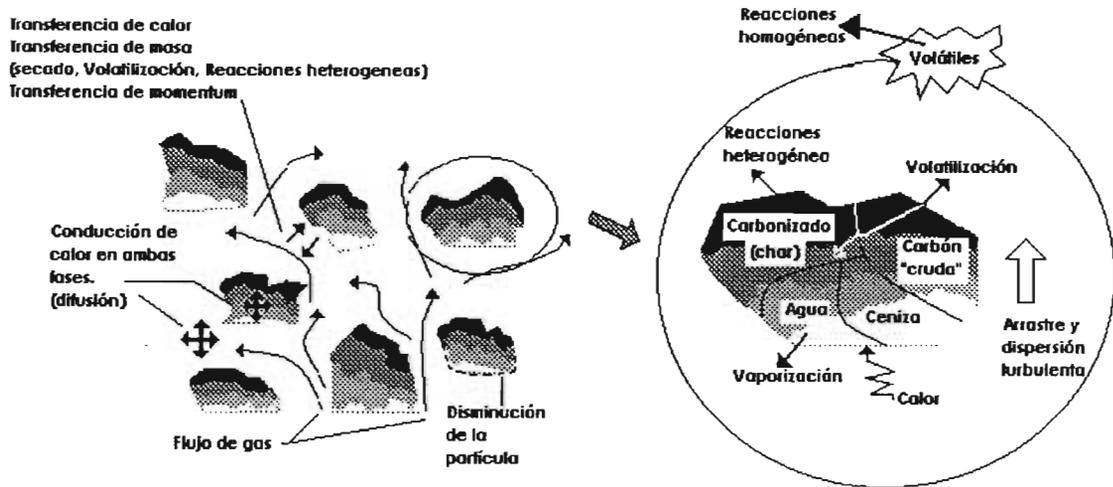
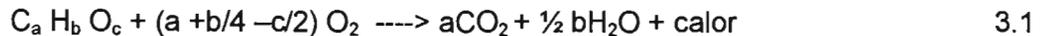


Figura 3.1 Procesos en la interfase y componentes de la partícula

Estequiométricamente la combustión de sólidos puede representarse en un paso de reacción de acuerdo a la ecuación 3.1:



Donde se tiene la siguiente secuencia de reacción o fases (válido para combustibles porosos):

- 1) Secado de la partícula de combustible y calentamiento de la misma a la temperatura de reacción de pirólisis;
- 2) Pirólisis de la partícula de combustible que produce volátiles combustibles y no combustibles, así como carbonizados y aceites (alquitrán); y
- 3) Oxidación del carbonizado con los volátiles combustibles

A continuación se describen brevemente las tres fases.

3.2.1 Secado y Calentamiento

Durante este proceso, las partículas de combustible sufren cambios físicos, ya que éstas se contraen y pueden fracturarse. El grado de contracción es una función del contenido de humedad y del tipo de combustible, donde además ocurre una reducción en el diámetro de los poros. La fracturación se presenta cuando el líquido contenido en las partículas (humedad) se evapora y genera una presión lo suficiente grande para romper la estructura de las mismas, o también, cuando este vapor no puede escapar suficientemente rápido.

Es un proceso endotérmico (necesita calor para llevarse a cabo) donde se controla la transferencia de calor, que depende del contenido de humedad, contenido de cenizas, dimensiones de las partículas, calor específico, conductividad térmica, difusividad y la

geometría del equipo de combustión. El secado ocurre cuando la temperatura en la reacción excede los 105 °C al punto en que la humedad se convierte en vapor y se traslada a través de la estructura del poro a la superficie de la partícula (pasando la capa límite de ésta), como se muestra en la figura 3.2, siendo la conducción el mecanismo de transferencia de calor (Q) que se evalúa mediante la siguiente expresión:

$$Q = k_t S \left[\left(\frac{T_1 - T_2}{r_p} \right) \right] \quad (3.2)$$

Donde:

T_1 → temperatura en la superficie de la partícula;

T_2 → temperatura al centro de la partícula;

r_p → radio de la partícula;

k_t → conductividad térmica; y

S → superficie de la partícula.

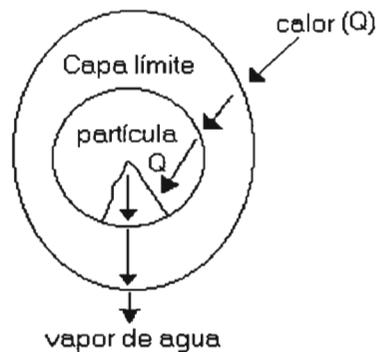


Figura 3.2 Esquema del proceso de calentamiento y secado de la partícula

3.2.2 Pirólisis

La pirólisis produce tres productos principales que son los volátiles (que pueden ser condensables e incondensables), alquitranes que son generalmente hidrocarburos pesados (en la práctica se tratan como productos intermedios) y carbonizado (char) que es un combustible sólido rico en carbón con pequeñas cantidades de hidrógeno y oxígeno.

Este proceso inicia cuando parte de las partículas del combustible alcanzan la temperatura de reacción, que es aproximadamente de 400-500 ° C, dependiendo del tipo de madera.

Los cambios físicos sufridos son la contracción que se origina cuando los volátiles producidos se trasladan a la superficie de la partícula y ocurren reacciones químicas secundarias, originando alquitranes que pueden tapan los poros y por lo tanto se genera una presión interna que rompe la estructura de la partícula del combustible. Los cambios difieren para materiales que exhiben ablandamiento, la estructura del poro cambia, según

análisis estadísticos, como una serie de árboles (familia de poros) como se muestra en la figura 3.3. Para combustibles que exhiben un comportamiento de ablandamiento, ocurre un cambio físico durante la pirólisis, formándose un metaplast (sólido fundido), el cual puede alterar la transferencia de masa asociada a la combustión del carbón crudo.

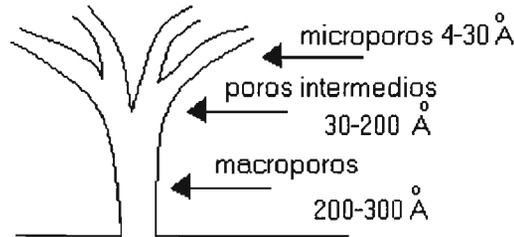
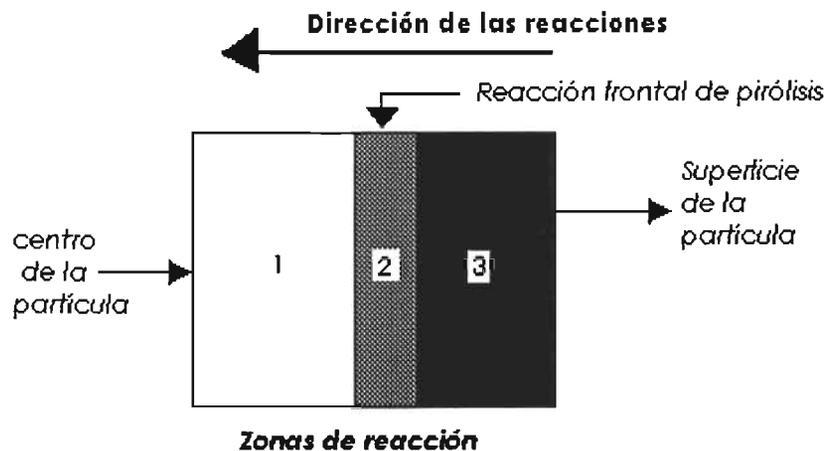


Figura 3.3 Estructura del árbol de poros de la madera.

Los cambios químicos modifican las propiedades termodinámicas y de transporte en las partículas de combustible, por medio de reacciones que ocurren en la zona activa de pirólisis, siendo la temperatura de reacción la que se tiene entre la zona no reactiva del combustible y la zona activa de pirólisis (figura 3.4).



- 1) Zona no reactiva de partícula
- 2) Zona activa de pirólisis
- 3) Zona de carbonizado

Figura 3.4 Zonas de reacción de la partícula

Suuberg propone un modelo que explica el proceso de pirólisis, como se indica a continuación:

Carbón -----> metaplast + carbonizado inerte + gases

“Metaplast” -----> alquitranes + H₂ + gases y líquidos ligeros

Alquitranes -----> “metaplast mayor + H₂

Este proceso de oxidación inicia con una reacción primaria del carbón, donde existe una ruptura en las uniones débiles del compuesto, particularmente en las uniones C-C y C-O, como se muestra en la primera parte de la figura 3.5, obteniéndose el sólido fundido o metaplast y gases volátiles condensables e incondensables. En la segunda parte de la figura antes citada se muestra la división de la estructura del material.

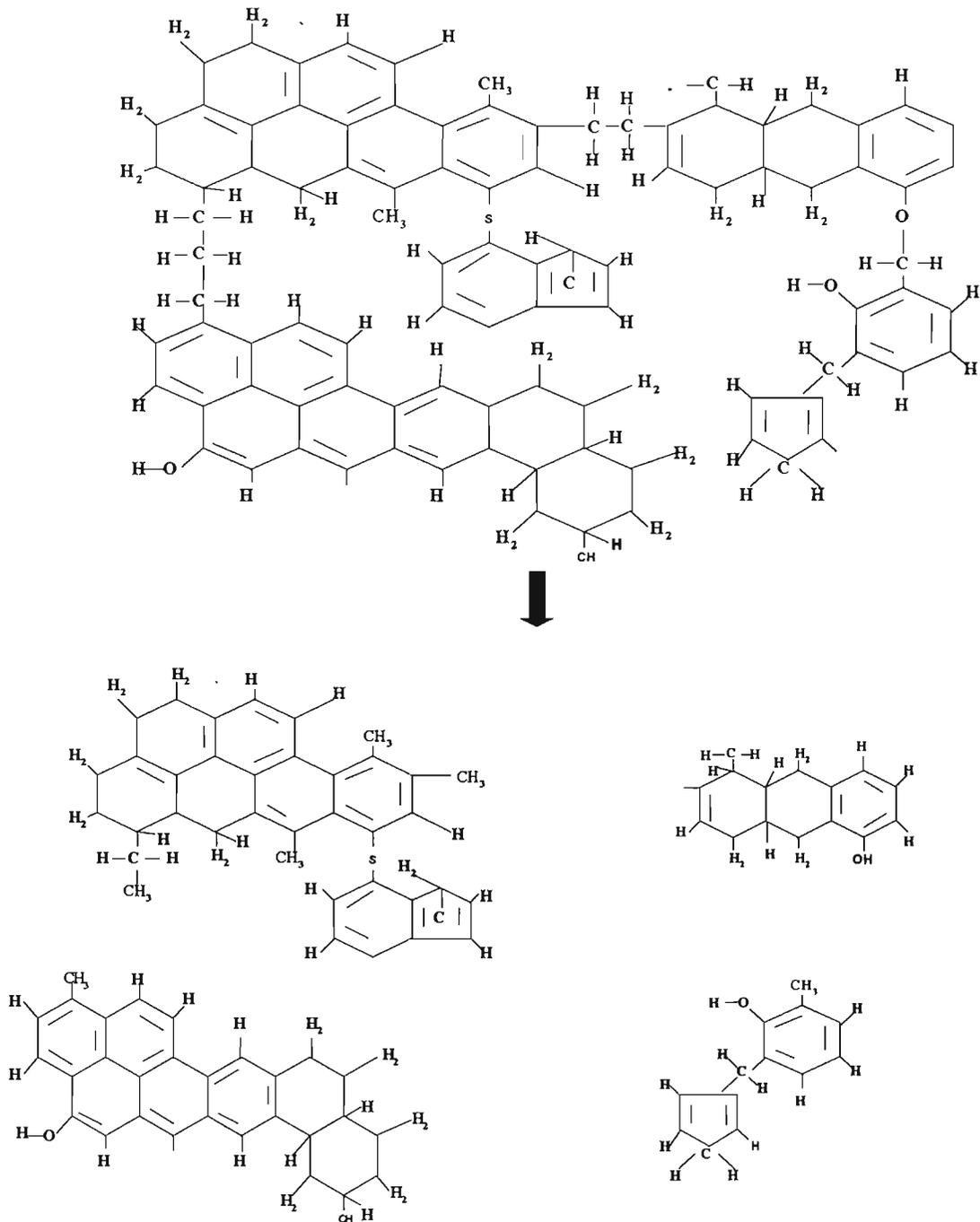


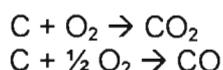
Figura 3.5 Ruptura primaria de cadenas

Posteriormente, ocurre una reacción secundaria en la estructura central del material, continuando la ruptura entre la partícula central y las funcionalidades, resultando en la formación de gases adicionales, como alquitranes, hidrógeno, gases y líquidos ligeros. Además existe una repolimerización en algunas partículas, resultando en la formación de una matriz de carbonizado (char).

3.2.3 Carbonizado (Char)

El carbonizado contiene cantidades de carbono, hidrogeno, oxígeno, nitrógeno, así como materiales residuales inertes. Físicamente tiene una serie de árboles de poros, cuyo diámetro es mayor. El proceso de oxidación es por difusión de oxígeno controlado (control por transferencia de masa), donde esta difusión se efectúa del medio ambiente a la capa límite del carbonizado. A altas temperaturas (1204 °C) la difusión se lleva a cabo en la superficie del carbonizado, a temperaturas intermedias (816 - 1204 °C) la difusión se efectúa en los macroporos de la partícula y a bajas temperaturas (menores a 816 °C) la difusión no tiene límite.

En general, el proceso químico de oxidación del carbonizado se rige por las reacciones:



3.3 Secuencia De Combustión

La oxidación parcial de una partícula de combustible sólido sigue la secuencia de secado y pirólisis, descritas en la sección anterior, y se llevan a cabo en un recipiente presurizado, mediante reacciones fluido-sólido no catalíticas (el sólido es un reactante). La fase sólida se transforma en una fase gaseosa (excepto por la cantidad de cenizas que se forma). El análisis del proceso de reacción, se efectúa por medio del comportamiento de una partícula sólida, que presenta dos modelos teóricos idealizados: el de conversión progresiva y el de núcleo sin reaccionar

3.3.1 Modelo de conversión progresiva

Aquí consideramos que el gas reaccionante penetra y reacciona simultáneamente en toda la partícula sólida, aunque lo más probable es que las velocidades de reacción sean diferentes en distintos lugares de esta partícula sólida. Por consiguiente, el reactante sólido se está convirtiendo continua y progresivamente en toda la partícula, como se muestra en la figura 3.6.

3.3.2 Modelo de núcleo sin reaccionar

En este caso la reacción tiene lugar primero en la superficie exterior de la partícula sólida; después la zona de reacción se desplaza hacia el interior del sólido, dejando atrás el material completamente convertido y sólido inerte (al que denominaremos ceniza). De este modo, durante la reacción existirá un núcleo de material sin reaccionar, cuyo tamaño ira disminuyendo a medida que transcurre la reacción, como se muestra en la figura 3.7.

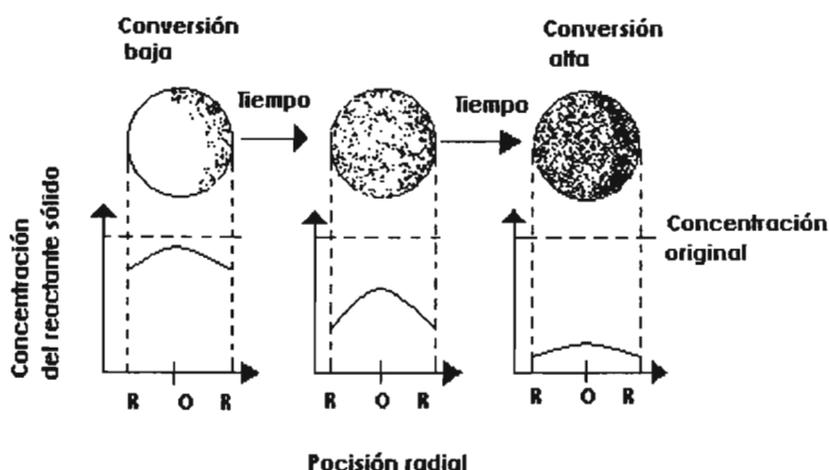


Figura 3.6 De acuerdo con el modelo de conversión progresiva la reacción se efectúa de modo continuo en toda la partícula sólida

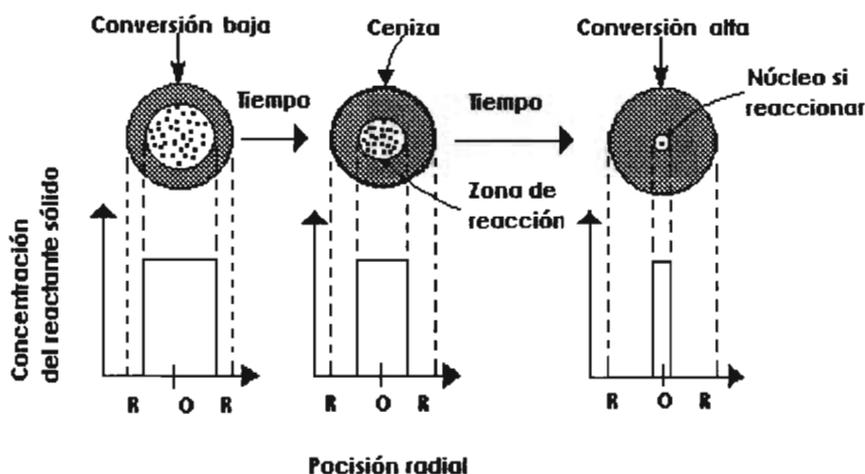


Figura 3.7 De acuerdo con el modelo de núcleo sin reaccionar la reacción se efectúa en una capa estrecha que se va desplazando hacia el interior de la partícula sólida. El reactante se convierte a medida que la capa se va desplazando.

3.4 Comparación de los modelos y la operación real

Al cortar y examinar la sección transversal de las partículas que han reaccionado parcialmente, en general encontramos material sólido que no ha reaccionado, rodeado de una capa de cenizas. El contorno de este núcleo que no ha reaccionado puede no siempre estar perfectamente definido como se presenta en el modelo, sin embargo, la observación de un elevado número de casos, indica que la mayor parte de las veces, el modelo de núcleo sin reaccionar se ajusta mejor al comportamiento real que el modelo de conversión progresiva. Las experiencias sobre combustión de carbón, madera, briquetas y periódicos prensados, confirman también la bondad del modelo de núcleo sin reaccionar.

Como el modelo de núcleo sin reaccionar parece que, en la inmensa mayoría de los casos, representa con mayor aproximación el comportamiento real, en la sección siguiente se presentan las ecuaciones básicas para este modelo. Aunque en esta deducción suponemos por conveniencia que el fluido que rodea al sólido es un gas, se puede extender con facilidad a todos los fluidos, tanto gases como líquidos.

3.5 Modelo de núcleo sin reaccionar para partículas esféricas de tamaño constante

Este modelo fue primeramente desarrollado por Yagi y Kunii (1955), considerando que durante la reacción se presentan sucesivamente las cinco etapas siguientes:

Etapa 1. Difusión del reactante gaseoso A, hasta la superficie del sólido a través de la película gaseosa que lo rodea.

Etapa 2. Penetración y difusión de A, a través de la capa de ceniza hasta la superficie del núcleo que no ha reaccionado o superficie de reacción.

Etapa 3. Reacción del reactante gaseoso A con el sólido en la superficie de reacción.

Etapa 4. Difusión de los productos gaseosos formados a través de la capa de cenizas hacia la superficie exterior del sólido.

Etapa 5. Difusión de los productos gaseosos de reacción a través de la capa gaseosa hacia el seno del fluido.

Es frecuente que no se presente alguna de estas etapas; por ejemplo, si no se forman productos gaseosos si la reacción es irreversible, las etapas 4 y 5 no contribuyen directamente a la resistencia a la reacción.

Por otra parte, las resistencias de las distintas etapas suelen ser muy diferentes; en tales casos hemos de tener en cuenta que la etapa que presente mayor resistencia constituye la etapa controlante de velocidad.

3.6 Limitaciones Del Modelo De Núcleo Sin Reaccionar

La hipótesis en que esta basado este modelo puede no ajustarse a la realidad, por ejemplo, la reacción puede efectuarse a lo largo de un frente difuso en lugar de hacerlo en una superficie nítida entre el sólido sin reaccionar y las cenizas. Por consiguiente, corresponde a un comportamiento intermedio entre los modelos de núcleo sin reaccionar y de conversión progresiva. Por otra parte, para reacciones rápidas, la intensidad de desprendimiento de calor puede ser suficientemente grande para dar lugar a un gradiente de temperaturas significativo dentro de las partículas o entre la partícula y el seno del fluido.

A pesar de estas complicaciones, Wen (1968) e Ishida y col., (1971) basándose en el estudio de numerosos sistemas llegaron a la conclusión de que el modelo de núcleo sin reaccionar constituye la mejor representación sencilla para la mayor parte de sistemas reaccionantes gas-sólido, sin embargo, hay dos amplios tipos de excepciones a la conclusión anterior. El primero corresponde a la reacción lenta de un gas con un sólido muy poroso; en este caso la reacción puede efectuarse en todo el sólido y cabe esperar que el modelo de conversión progresiva se ajuste mejor al comportamiento real. La segunda excepción corresponde al caso en el que el sólido se convierte por la acción del calor sin necesidad de contacto con el gas; por ejemplo en la cocción de pan o de ladrillos. En este caso también el modelo de conversión progresiva se ajusta mejor al comportamiento real.

Los dos modelos son válidos para integrar las velocidades de reacción. El modelo empleado en esta tesis es el de núcleo sin reaccionar, ya que es capaz de estimar valores adecuados con el fenómeno y puede evaluarse con cierta facilidad. Cabe señalar que el comportamiento de las partículas sólidas durante la reacción tiende a disminuir en su tamaño hasta desaparecer.

3.7 Reacciones De Gasificación

Durante la gasificación se presenta una oxidación parcial del carbono contenido en una partícula de combustible, es de esperarse entonces, que algunas de las reacciones que se realizan en la combustión del carbón se llevan de igual manera en el proceso de gasificación. Una de las principales diferencias entre estos dos procesos estriba en la presencia (o ausencia) de gas oxidante en algunas zonas del proceso. Dentro de un gasificador existen generalmente tres zonas diferenciadas por la cantidad de oxidante:

- ❖ Zona de combustión (se favorece la oxidación total del combustible mediante reacciones exotérmicas de oxidación total, se proporciona la energía necesaria en el proceso);
- ❖ Zona de oxidación parcial (muy poco oxidante, predominan las reacciones exotérmicas de gasificación); y
- ❖ Zona de reducción (no hay oxidante, predominan los procesos de degradación térmica como la volatilización y las reacciones endotérmicas de gasificación).

Las principales reacciones durante la gasificación, que envuelven al carbono, hidrogeno y oxígeno, se presentan en el cuadro 3.1. Las reacciones de (A) a (F) involucran oxígeno libre, mientras que las reacciones de (G) a (N) envuelven oxígeno combinado, generalmente con vapor de agua.

Como se puede observar, las reacciones de gasificación son complejas y el sistema se vuelve aún más complejo cuando se utiliza madera u otros residuos celulósicos, que producen alquitrán y ácidos piroleñosos durante la fase de pirólisis del combustible.

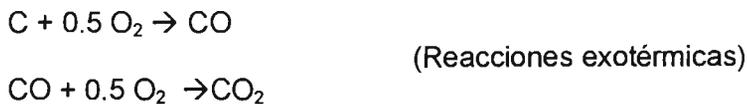
Cuadro 3.1 Reacciones clásicas de gasificación y combustión.

Reacciones químicas	Variación de la entalpía ΔH (kJ/kmol)	Ecuación
Con oxígeno libre		
$C + O_2 \rightarrow CO_2$	414602	(A)
$H_2 + 0.5 O_2 \rightarrow H_2O$	241700	(B)
$CO + 0.5 O_2 \rightarrow CO_2$	282940	(C)
$CH_4 + 2 O_2 \rightarrow 2 H_2O$	802954	(D)
$C + 0.5 O_2 \rightarrow CO$	110732	(E)
$CH_4 + 0.5 O_2 \rightarrow CO + 2 H_2$	36615.	(F)
Con oxígeno combinado		
$CO + H_2O \rightarrow CO_2 + H_2$	41240	(G)
$C + CO_2 \rightarrow 2 CO$	172208	(H)
$C + 2 H_2 \rightarrow CH_4$	74117	(I)
$C + H_2O \rightarrow CO + H_2$	172827	(J)
$C + 2H_2O \rightarrow CO_2 + 2 H_2$	89727	(K)
$CH_4 + H_2O \rightarrow CO + 3 H_2$	205085	(L)
$CH_4 + 2 H_2O \rightarrow CO + 4 H_2$	163844	(M)
$CH_4 + 2 CO_2 \rightarrow CO + 2 H_2$	246325	(N)

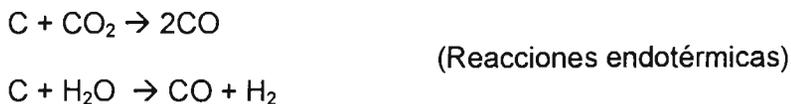
Notas: Entalpía para agua en fase vapor
Fuente: Meunier, J (1958)

No obstante la complejidad de las reacciones que implican la gasificación del carbono, es posible elaborar un modelo matemático que permita simular el proceso, considerando las reacciones más representativas, por ejemplo:

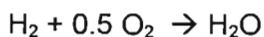
A. Reacciones de combustión



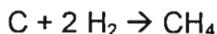
B. Reacciones de gasificación



C. Otras reacciones



(Reacciones exotérmicas)



Las reacciones exotérmicas proporcionan calor, lo que posibilita la realización de las reacciones endotérmicas. Durante la gasificación existe, de alguna manera, la necesidad de suministro de energía, la cual, lo más común es que sea mediante la combustión de parte de la materia prima a ser gasificada.

3.8 Otros Aspectos Que Influyen En El Proceso De Gasificación

Existen Otros muy diversos aspectos que influyen en el comportamiento de los gasificadores. A continuación se mencionaran algunos.

❖ Temperatura

La temperatura en la zona de reacción afecta directamente a las constantes de equilibrio de las reacciones en proceso. Las temperaturas elevadas, favorecen las reacciones endotérmicas, posibilitando la producción de gas de mejor calidad (más rico en CO, H₂ y CH₄). Sin embargo, pueden provocar la fusión de las cenizas formando escoria y, en algunos casos, solidificando la sílice sobre la parrilla causando obstrucción parcial, lo que provoca la salida de funcionamiento del gasificador.

La temperatura de operación del gasificador usualmente determina la forma de remoción de cenizas. Temperaturas de operación debajo de los 1000 ° C permiten la evacuación de cenizas secas, mientras que en el rango de 1000-1200 °C se presenta la fundición parcial de la ceniza formando conglomerados. Temperaturas arriba de los 1200 °C provocan que casi toda la escoria tenga que ser removida en forma líquida.

❖ Presión

Los gasificadores de lecho fijo que operan a presión atmosférica, pueden soportar una ligera presión positiva cuando se presenta un aumento en el flujo de oxidante, o con presión negativa cuando existe succión.

Los gasificadores de flujo a contracorriente (updraft) operan generalmente con inyección del oxidante, ya que los ácidos piroleñosos arrastrados en los gases traen serios problemas a los escapes. Los gasificadores con presión positiva, presentan mayores problemas de perdidas, particularmente durante la carga.

Los sistemas de succión presentan menores problemas de perdidas y son más utilizados en gasificadores de flujos paralelos descendentes (downdraft), en los cuales, los contenidos de ácido piroleñoso y alquitrán son menores.

En general, se puede afirmar que los gasificadores pueden operar tanto a presión atmosférica, como a elevadas presiones, pero la influencia de tanto la temperatura como de la presión, afectan la composición final del gas de síntesis.

❖ Materia prima para la gasificación

El uso de un determinado combustible, implica la selección de una clase de gasificador, de un comburente, de sistemas de salida de gases, etc. Un factor muy importante es la granulometría de la materia prima empleada.

❖ Humedad del combustible

La humedad del combustible es un factor muy importante, principalmente cuando se utiliza madera. El poder calorífico del gas que se produce es altamente influenciado por la humedad del combustible, y de no existir suministro externo de calor, el sistema no puede operar eficientemente con humedad superior a 30 %. Así también, la temperatura de reacción disminuye con el aumento de la humedad.

Ecuaciones Básicas De Flujos Multicomponentes Reaccionantes

4.1 Relaciones Básicas De Gases Multicomponentes

Es bien sabido que la combustión o la reacción de los flujos es siempre multicomponente. Por ejemplo, en la combustión del gas hay por lo menos una clase de combustible, una clase de oxidante, productos de combustión, gases inertes, varios átomos, radicales libres, iones y electrones. Las características termodinámicas y de transporte de los fluidos multicomponentes que reaccionan son funciones no solamente de la presión y de la temperatura, si no, también de la concentración de las especies. Además, la ecuación de difusión debe presentarse en las ecuaciones básicas para describir tal clase de flujos y habrá términos de masa en la fuente o de la fuente de calor en las ecuaciones de difusión y de energía. Por lo tanto, antes de ir a discutir las ecuaciones básicas es necesario entender las relaciones básicas de las propiedades termodinámicas y de los procesos de transporte para los fluidos multicomponentes reaccionantes.

Para los gases multicomponentes la densidad (ρ) total debe ser la suma de las densidades (ρ_s) de cada especie y la presión total (P) es la suma de las presiones parciales (P_s) de cada especie, esto es:

$$\rho = \sum_s \rho_s \quad (4.1)$$

$$P = \sum_s P_s \quad (4.2)$$

La fracción masa Y y la fracción molar X de especies "s" son

$$Y_s = \frac{\rho_s}{\rho} \quad X_s = \frac{P_s}{P} \quad (4.3)$$

La relación entre la densidad de la masa y la densidad molar (concentración molar) de la mezcla del gas y especies "s" son

$$\rho = nM \quad (4.4)$$

$$\rho_s = n_s M_s \quad (4.5)$$

M : Peso molecular de la mezcla

M_s : Peso molecular de la especie s

n : moles totales en la mezcla

n_s : moles totales de la especie s en la mezcla

Excepto de muy baja temperatura o de muy alta presión, porque la mayoría de las combustiones o reacciones de los flujos de la mezcla del gas y sus especies pueden ser tratadas como gases ideales o perfectos, así que podemos escribir:

$$p_s = \rho_s RT / M_s = n_s RT \quad (4.6)$$

$$p = \rho RT / M = nRT$$

T : Temperatura

R : Constante universal de los gases

Y por lo tanto tenemos

$$X_s = \frac{p_s}{p} = \frac{n_s}{n}$$

Debido ha:

$$\rho = \sum \rho_s = \sum n_s M_s = nM$$

El seguimiento de las relaciones entre el peso molecular medio y el peso molecular de cada especie, la fracción másica y la fracción molar pueden obtenerse de la siguiente manera:

$$M = \sum X_s M_s \quad (4.7)$$

$$X_s = Y_s M / M_s \quad (4.8)$$

$$\sum (Y_s M / M_s) = 1 \quad (4.9)$$

$$M = \left(\sum Y_s / M_s \right)^{-1} \quad (4.10)$$

$$M / M_s = \left(M_s \sum Y_s / M_s \right)^{-1} \quad (4.11)$$

Si los pesos moleculares de las especies del gas son casi iguales ($M_1 \approx M_2 \approx M_s \approx \dots$) o el peso molecular de una especie es mucho mayor que las otras especies ($(Y_s) \gg (Y_1, Y_s) \gg (Y_2, \dots)$), entonces tenemos:

$$M \approx M_s \quad X_s \approx Y_s$$

Ahora, consideremos el movimiento y la difusión en las reacciones de gases multicomponentes. Generalmente hablando, hay tres clases de velocidades macroscópicas en los gases multicomponentes estos son;

v – Velocidad de la mezcla con referencia al eje coordenado situado en el equipo en cuestión.

v_s – Velocidades de especies "s" con referencia al eje coordenado situado en el equipo en cuestión.

V_s – Velocidad de especies "s" con referencia al movimiento de la mezcla, causada por la derivada de la difusión del movimiento del peso molecular al azar.

Obviamente debe de ser:

$$V_s = v_s - v \quad (4.12)$$

Correspondiendo a las tres clases antes mencionadas de velocidades lineares, hay tres clases de flujos de masa:

$\rho v = g$ – Flujo de masa total de la mezcla gas

$\rho_s v_s = g_s$ – Flujo de masa de cada especie

$\rho_s V_s = J_s$ – Flujo de difusión de cada especie

El flujo de masa de la especie debe ser igual al flujo de la difusión más el flujo total de cada especie llevada por el movimiento de la mezcla, esto es:

$$g_s = \rho_s v_s = J_s + Y_s \rho v = \rho_s V_s + \rho_s v \quad (4.13)$$

El flujo de masa de la mezcla es la suma de los flujos de masa de todas las especies:

$$g = \rho v = \sum g_s = \sum \rho_s v_s = \sum \rho_s V_s = v_s \sum \rho_s = \sum \rho_s V_s + \rho v$$

Y donde se tiene:

$$\sum \rho_s V_s = \sum J_s = 0 \quad (4.14)$$

Las ecuaciones (4.13) y (4.14) precisan que el flujo de masa de la especie no es un flujo de difusión y la suma de los flujos de difusión es cero, o la difusión no afecta a la mezcla en movimiento. Sin embargo, la suma de las velocidades de difusión linear no es cero.

$$\sum V_s \neq 0$$

Después, discutiremos las leyes orgánicas de los procesos de transporte. Para las especies en difusión (difusión molecular) en una mezcla binaria (de dos componentes) causada por el gradiente de concentración, en la ley fenomenológica de difusión o la ley de Fick puede ser expresada como:

$$J_{1j} = -\rho D_{12} \frac{\partial Y_1}{\partial x_j} \quad (4.15)$$

Para una mezcla multicomponente la ley de Fick puede aún tener la forma similar siguiente:

$$J_{sj} = -\rho D_{s2} \frac{\partial Y_s}{\partial x_j} \quad (4.16)$$

Pero la difusividad molecular es una función de la concentración de especies:

$$D_s = D_s(Y_1, Y_2, Y_{31}, \dots, Y_s, \dots)$$

Para la conducción de calor en gases multicomponentes reaccionantes la ley de Fourier necesita ser modificada para explicar la diferencia de entalpía que se incorpora y el elemento del volumen llevado por los flujos de difusión. En este caso el flujo total de calor es:

$$q = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} + \sum \rho_s V_{sj} h_s \quad (4.17)$$

Donde h_s es la entalpía de la especie "s", incluyendo la entalpía química, esto es:

$$h_s = h_{0s} + \int_{r_0}^r c_{ps} dt \quad (4.18)$$

La entalpía de la mezcla es:

$$h = \sum Y_s h_s = \sum Y_s h_{0s} + \int_{r_0}^r \sum Y_s c_{ps} dt = h_0 + \int_{r_0}^r c_p dt \quad (4.19)$$

Donde h_{0s} es la entalpía de formación de las especies "s" y c_{ps} es el calor específico de las especies "s" cuando también es función de la P y T . Se debe de notar que: (1) la entalpía de la especie y la entalpía de la mezcla incluyen dos partes, la entalpía física (térmica) y la entalpía química; (2) la entalpía de formación de las especies es constante, pero la entalpía de formación de la mezcla es función de la concentración de especies; (3) el calor específico de las especies es independiente de la concentración de especies, pero el calor específico de la mezcla depende de la concentración de especies; y (4) puede haber tres clases de entalpía de mezcla que se pueden utilizar en flujos multicomponentes reaccionantes, la entalpía térmica, la entalpía térmica más entalpía química, y la entalpía acumulada = entalpía térmica + entalpía química + energía cinética.

Para la transferencia de momento la relación entre la tensión y la rapidez de deformación pueden ser descritas por la ley generalizada de Newton-Stokes usando un solo componente en un flujo no reaccionante:

$$p_{ij} = 2\mu S_{ij} - p\delta_{ij} - \frac{2}{3}\mu \left(\frac{\partial v_j}{\partial x_j} \right) \delta_{ij} \quad (4.20)$$

Donde:

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right)$$

Sin embargo aquí la viscosidad molecular es una función no solamente de la temperatura y la presión, si no que también de la concentración de especies.

Según la aproximación de primer orden de la teoría cinética, la difusividad molecular, la viscosidad y la termoconductividad para una mezcla binaria de un solo componente gas puede obtenerse como:

$$[D_{12}]_h = \frac{3}{8n\sigma_{12}^2} \left[\frac{KT(M_1 + M_2)}{2\pi M_1 M_2} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (4.21)$$

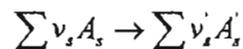
$$[\mu]_h = 5\sqrt{kMT} / (16\pi^{\frac{1}{2}} \sigma^2) \quad (4.22)$$

$$[\lambda]_h = \frac{5}{2} [\mu]_h c_v = \frac{75}{64\sigma^2} \left(\frac{k^3 T}{\pi M} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.23)$$

Donde k es la constante de Boltzman y σ es la sección transversal de colisión de las partículas.

4.2 Leyes Básicas de la Cinética Química

La relación estequiométrica de la reacción química puede ser expresada por:



Donde A_s y A'_s son símbolos químicos para los reactivos y los productos respectivamente, y v_s y v'_s son los coeficientes estequiométricos correspondientes a los símbolos químicos. La rapidez de reacción de las especies "s" que se define como la masa consumida o producida por unidad de volumen por unidad de tiempo se puede expresar como:

$$w_s = - \left(\frac{d\rho_s}{dt} \right)_{Quim.}$$

Obviamente debe haber:

$$\frac{w_1}{v_1} = \frac{w_2}{v_2} = \dots = - \frac{w'_1}{v'_1} = - \frac{w'_2}{v'_2} = \dots$$

La ley de acción de masas es:

$$w_s = k_s \prod_{s=1}^z C_s^{\nu_s}$$

Donde C_s es la concentración de la masa ρ_s o concentración molar $X_s M_s$, k_s es el coeficiente de rapidez, z es el número total de especies, $\nu = \nu_1 + \nu_2 + \dots = \sum \nu_s$ es el orden de reacción aparente, Esto es:

$$w_s = k_s \prod_{s=1}^z C_s^{m_s} \quad (4.24)$$

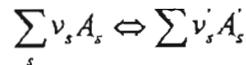
Donde $m_s \neq \nu_s$ y $m = \sum m_s \neq \nu = \sum \nu_s$, m es el orden de reacción actual. Si hay varias reacciones simultáneas del elemento la rapidez de reacción es:

$$\sum_{s=1}^z \nu_{sr} A_s \rightarrow \sum_{s=1}^{z'} \nu'_{sr} A'_s$$

Entonces la rapidez total de reacción es:

$$w_s = \sum_r w_{sr} = \sum_r k_{sr} \prod_{s=1}^z C_s^{m_{sr}} \quad (4.25)$$

Para una reacción reversible:



La rapidez de la reacción principal es:

$$w_{s+} = k_s \prod_s C_s^{m_s}$$

Y la rapidez de la reacción posterior es:

$$w_{s-} = k'_s \prod_s C_s^{m'_s}$$

La rapidez total de la reacción es:

$$w_s = w_{s+} - w_{s-} = k_s \prod_s C_s^{m_s} - k'_s \prod_s C_s^{m'_s} \quad (4.26)$$

La rapidez total de reacción de diferentes reacciones reversibles simultáneas es:

$$w_s = \sum_r w_{sr} = \sum_r \left(k_{sr} \prod_x C_s^{m_{sr}} - k'_{sr} \prod_s C_s^{m'_{sr}} \right) \quad (4.27)$$

El coeficiente de rapidez k , es una función altamente no lineal de la temperatura y puede ser expresado por la ley de Arrhenius como:

$$k_s = k_{0s} \exp(-E/RT) \quad (4.28)$$

Donde E es la energía de activación cuyo significado físico es una barrera de energía para que la reacción ocurra, R es la constante universales de los gases, y $k_{0s} = BT^{0.5}$, B es un factor preexponencial del factor de frecuencia. Un tratamiento de los problemas de combustión se usa para considerar la reacción como un equivalente de un paso de la reacción, de aquí en adelante la rapidez global de la reacción puede ser expresada por:

$$w_s = k_{0s} \rho^{\sum m_s} \exp\left(\frac{E}{RT}\right) \prod_s Y_s^{m_s} \quad (4.29)$$

Donde k_{0s} , E , m_s y $\sum m_s$ son puras constantes empíricas.

4.3 Ecuaciones Básicas De Conservación

Una descripción de un fluido en movimiento o el cambio de cualquier propiedad en el campo del fluido, el tratamiento Euleriano considera el cambio punto por punto en el espacio, el tratamiento Lagrangiano sigue el cambio de movimiento de un elemento en el fluido que puede ser utilizado. Para el elemento de un fluido el tratamiento Lagrangiano es relacionado al tratamiento Euleriano por:

$$\frac{d\phi}{dt} = \frac{\partial \phi}{\partial t} + v_j \frac{\partial \phi}{\partial x_j}$$

Una relación similar se llama el Teorema de Transporte de Reynolds el cual se puede derivar para un volumen de control. Considerando la integral generalizada de las propiedades del fluido ϕ sobre un volumen de control V en movimiento en las coordenadas Lagrangianas;

$$\Phi(t) = \int_V \phi(x_i, t) \delta V$$

El cambio de Φ es debido al movimiento del fluido por el seguimiento de la trayectoria del volumen de control esto es:

$$\begin{aligned} \frac{D\Phi}{Dt} &= \frac{D}{Dt} \int_V \varphi \delta V = \int_V \frac{D}{Dt} (\varphi \delta V) = \int_V \frac{D\varphi}{Dt} \delta V + \int_V \varphi \frac{D\delta V}{Dt} \delta V \\ &= \int_V \left(\frac{D\varphi}{Dt} + \varphi \frac{\partial v_j}{\partial x_j} \right) \delta V = \int_V \left[\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\varphi v_j) \right] \delta V \end{aligned}$$

Tenemos:

$$\frac{D}{Dt} \int_V \varphi \delta V = \int_V \left[\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\varphi v_j) \right] \delta V \quad (4.30)$$

o

$$\frac{D\Phi}{Dt} = \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \int_V \varphi v_r dS \quad (4.31)$$

La ecuación (4.30) o (4.31) es llamada la ecuación del Teorema de transporte de Reynolds, la cuál indica que el cambio de cualquier propiedad en el fluido φ integrado sobre el volumen de control por la trayectoria del volumen de control en movimiento es igual a la rapidez de cambio estático con el tiempo más la rapidez de cambio causada por la convección en las coordenadas Eulerianas. La ley generalizada de conservación es:

$$\frac{D\Phi}{Dt} + \int_V S_\varphi \delta V = 0$$

Donde S_φ es la fuente térmica de φ , esto es la producción o la destrucción de φ por unidad de volumen.

4.4 Ecuación De Continuidad

Para la ecuación de continuidad o para la conservación de masa, el seguimiento de $\varphi = \rho$ y $S_\varphi = 0$, $\frac{D\Phi}{Dt} = 0$, es:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho v_j) = 0 \quad (4.32)$$

o

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \frac{\partial v_j}{\partial x_j} = 0 \quad (4.33)$$

Se puede ver que de la ecuación de continuidad para gases multicomponentes que reaccionan tienen la misma forma que como para un solo componente de flujos no reaccionantes.

4.5 Ecuación De Conservación De Especies (Ecuación De Difusión)

Para la conservación de especies o ecuación de difusión, el seguimiento de $\varphi = \rho_s = Y_s \rho$ y considerando que el cambio total en el volumen de control en movimiento es debido a la reacción química y al flujo total de la difusión a través de la superficie incluida en el volumen de control:

$$\int_V S_\varphi \delta V = \int_V j_s dS + \int_V w_s \delta V$$

Tenemos:

$$\frac{D}{Dt} \int_V \rho Y_s \delta V + \int_V \left(\frac{\partial j_{sj}}{\partial x_j} + w_s \right) \delta V = 0$$

Usando el Teorema de Transporte de Reynolds y la ley de Fick:

$$\frac{D}{Dt} \int_V \rho Y_s \delta V = \int_V \left(\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_s) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho Y_s v_j) \right) \delta V$$

$$\frac{\partial j_{sj}}{\partial x_j} = - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D \rho \frac{\partial Y_s}{\partial x_j} \right)$$

La ecuación de conservación de especies puede obtenerse así:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_s) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho Y_s v_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D \rho \frac{\partial Y_s}{\partial x_j} \right) - w_s \quad (4.34)$$

O

$$\rho \frac{\partial Y_s}{\partial t} + \rho v_j \frac{\partial Y_s}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D \rho \frac{\partial Y_s}{\partial x_j} \right) - w_s \quad (4.35)$$

$$\rho \frac{DY_s}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D \rho \frac{\partial Y_s}{\partial x_j} \right) - w_s \quad (4.36)$$

El primero y segundo término del lado izquierdo y el segundo término del lado derecho de la ecuación (4.34) se llaman índice de rapidez de cambio con el tiempo, como término de convección, término de difusión y término de reacción correspondientemente. La suma de todas las ecuaciones de conservación de especies da la ecuación de continuidad es debido a $\sum w_s = 0$, tan, si hay totalmente especies de " z ", sólo la conservación de la especie " z-1 " será independiente.

4.6 Ecuación De Momento

Para la ecuación de momento, el seguimiento de $\phi = \rho v_i$ y la consideración del cambio de momento en el volumen de control en movimiento es igual a la suma de las fuerzas superficiales y a las fuerzas ejercidas por el cuerpo.

$$\int_V S_\phi \delta V = \int_V \left(\frac{\partial p_{ij}}{\partial x_j} + \sum \rho_s F_{si} \right) \delta V$$

La ecuación de momento puede escribirse así:

$$\frac{D}{Dt} \int_V \rho v_i \delta V = \int_V \left(\frac{\partial p_{ij}}{\partial x_j} + \sum \rho_s F_{si} \right) \delta V$$

Usando el Teorema de Transporte de Reynolds y la Ley generalizada de las Fuerzas de Viscosidad de Newton.

$$\frac{D}{Dt} \int_V \rho v_i \delta V = \int_V \left(\frac{\partial}{\partial t} (\rho v_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho v_i v_j) \right) \delta V$$

$$p_{ij} \approx \mu \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) - p \delta_{ij}$$

La forma final de la ecuación de momento toma la forma siguiente:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho v_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho v_i v_j) = - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial v}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \right] + \sum \rho_s F_{si} \quad (4.37)$$

o

$$\rho \frac{Dv_i}{Dt} = - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial v}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \right] + \sum \rho_s F_{si} \quad (4.38)$$

La fuerza del cuerpo podría ser la fuerza gravitacional, la fuerza eléctrica o la fuerza magnética ($J \times B$).

Como se puede ver en la forma de la ecuación de momento para gases multicomponentes reaccionantes es casi idéntica a la de un solo componente, aunque solo difiere en el término de la fuerza del cuerpo.

4.7 Ecuación De Energía

La ecuación de la conservación de energía se basa en la primera ley de la termodinámica

$$\sum dQ_i = d\varepsilon + \sum dW_i,$$

Donde $\sum dQ_i$ es la suma de diferentes formas de calor agregadas al sistema, por ejemplo la conducción de calor, calor por radiación, calor de reacción y calor de Joule's; $\sum dW_i$, es la suma del trabajo realizado por varias fuerzas, y $d\varepsilon$ es el cambio de energía en el sistema. La energía por unidad de masa de la mezcla gas es:

$$\varepsilon = e + \frac{v^2}{2} \quad \varepsilon = e + \frac{v^2}{2}$$

Donde e es la energía interna por unidad de masa y

$$e = e_{trans} + e_{rot} + e_{vibr} + e_{spin} + e_{nucl} + \dots$$

Donde $v^2/2$ es la energía cinética por unidad de masa. La energía por unidad de masa de la especie "s" es:

$$\varepsilon_s = e_s + \frac{v^2}{2}$$

Se debe de tener en cuenta que $\varepsilon_s \neq e_s + v^2/2$, por que e_s , incluye la energía cinética del movimiento al azar. La energía por unida de volumen de la mezcla gas es:

$$\rho\varepsilon = \sum_s \rho_s e_s = \sum_s \rho_s (e_s + v^2/2) = \sum_s \rho_s e_s + \rho_s v^2/2 = \rho(e + v^2/2)$$

El seguimiento de $\varphi = \rho\varepsilon$, usando el Teorema de transporte de Reynolds para la ecuación de continuidad, el cambio de energía en el volumen de control en movimiento es:

$$\begin{aligned} \frac{D}{Dt} \int_V \rho \varepsilon \delta V &= \int_V \left[\frac{\partial}{\partial t} (\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \varepsilon v_j) \right] \delta V \\ &= \int_V \left[\frac{D}{Dt} (\rho \varepsilon) + \rho \varepsilon \frac{\partial v_j}{\partial x_j} \right] \delta V = \int_V \rho \frac{D}{Dt} \varepsilon \delta V \\ &= \int_V \rho \frac{D}{Dt} \left(e + \frac{v^2}{2} \right) \delta V \end{aligned}$$

El intercambio de calor total en el volumen del control por conducción, radiación y difusión multicomponente es:

$$\begin{aligned} \int_V \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} + \sum_s D \rho \frac{\partial Y_s}{\partial x_j} k_s + q_j \right) \delta V \\ v_i \rho \frac{D v_i}{Dt} = \rho \frac{D}{Dt} \left(\frac{v^2}{2} \right) = v_i \frac{\partial p_{ij}}{\partial x_j} + v_i \sum_s \rho_s F_{si} \end{aligned}$$

El trabajo hecho por las fuerzas del cuerpo es:

$$\int_V \sum_s \rho_s F_s \cdot v \delta V = \int_V \left(v \cdot \sum_s \rho_s F_s + \sum_s \rho_s F_s \cdot V_s \right) \delta V$$

El trabajo hecho por las fuerzas superficiales es:

$$\int_V p_i v_i \delta S = \int_V \frac{\partial}{\partial x_j} (p_{ij} \cdot v_i) \delta V$$

La ecuación de energía puede escribirse también como:

$$\begin{aligned} \rho \frac{D}{Dt} \left(e + \frac{v^2}{2} \right) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\sum_s D \rho \frac{\partial Y_s}{\partial x_j} h_s \right) - \frac{\partial q_j}{\partial x_j} \\ &+ v_i \sum_s \rho_s F_{si} + \sum_s \rho_s F_{si} V_{si} + \frac{\partial}{\partial x_j} (p_{ij} v_i) \end{aligned} \tag{4.39}$$

Ahora, el trabajo por la fuerza superficial se puede dividir en dos partes.

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (p_{ij} v_i) = v_i \frac{\partial p_{ij}}{\partial x_j} + p_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j}$$

Donde la primera parte $v_i \frac{\partial p_{ij}}{\partial x_j}$ es la relación de energía cinética y el trabajo debido por las fuerzas del cuerpo de acuerdo con la velocidad de la mezcla por la ecuación de momento. Esta relación puede ser obtenida por la multiplicación v_i de cada término en la ecuación de momento, esto es:

$$v_i \rho \frac{Dv_i}{Dt} = \rho \frac{D}{Dt} \left(\frac{v^2}{2} \right) = v_i \frac{\partial p_{ij}}{\partial x_j} + v_i \sum \rho_s F_{s_i} \quad (4.40)$$

Por otra parte, la segunda parte $p_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j}$, o el trabajo de la deformación de sí mismo se puede dividir en dos partes:

$$p_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} = (-p\delta_{ij} + \tau_{ij}) \frac{\partial v_i}{\partial x_j} = -p \frac{\partial v_i}{\partial x_i} + \tau_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j}$$

Donde $-p \frac{\partial v_i}{\partial x_i}$ es la compresión/expansión del trabajo, y $\tau_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j}$ se llamada energía de disipación viscosa, o trabajo de la deformación de tijeras. En donde tenemos:

$$\Phi \equiv \tau_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} = \left[2\mu S_{ij} - \left(\frac{2}{3} \mu \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \right) \delta_{ij} \right] \frac{\partial v_i}{\partial x_j}$$

Debido ha:

$$\frac{\partial v_i}{\partial x_j} = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) + \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \right] = S_{ij} + \xi_{ij}$$

Y

$$\dot{S}_{ij} * \dot{\xi}_{ij} = 0, \quad S_{ij} * \dot{\xi}_{ij} = 0, \quad \tau_{ij} * \xi_{ij} = 0 \quad \delta_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} = \frac{\partial v_j}{\partial x_j}$$

Finalmente la energía de disipación puede ser expresada por:

$$\Phi = 2\mu S_{ij}^2 - \frac{2}{3} \mu \left(\frac{\partial v_j}{\partial x_j} \right)^2 \quad (4.41)$$

O

$$\Phi = 2\mu(S_{11}^2 + S_{22}^2 + S_{33}^2 + S_{23}^2 + S_{31}^2) - \frac{2}{3} \mu (S_{11}^2 + S_{22}^2 + S_{33}^2)^2 \quad (4.42)$$

Substituyendo la expresión siguiente:

$$p_{ij} \frac{\partial v_j}{\partial x_i} = -p \frac{\partial v_i}{\partial x_i} + \Phi$$

Y la ecuación (4.40) en la ecuación (4.39), finalmente obtenemos la ecuación de energía en forma de energía interna la cual puede ser obtenida así:

$$\rho \frac{De}{Dt} + p \frac{\partial v_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial q_{rj}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\sum_s D \rho \frac{\partial Y_s}{\partial x_j} h_s \right) + \Phi + \sum_s \rho_s F_{sj} V_{sj} \quad (1.43)$$

Note esto comparado con la ecuación de energía para los flujos no reaccionantes de un solo componente, la ecuación de energía para los flujos multicomponentes que reaccionan tienen dos términos adicionales: el flujo total de la entalpía causado por el flujo de la difusión de las especies y el trabajo hecho por las fuerzas del cuerpo derivada de la velocidad de difusión, esto es;

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\sum_s D \rho \frac{\partial Y_s}{\partial x_j} h_s \right), \quad \sum_s \rho_s F_{sj} V_{sj}$$

Aunque la suma de los flujos de difusión son cero, pero la entalpía total llevada en los flujos por la difusión de los flujos y en el trabajo hecho por las fuerzas del cuerpo relacionado con los flujos de difusión no son cero.

Debe también ser mencionado que la ecuación (4.39) es por completo la forma total de la ecuación de energía cuando incluye el cambio interno de energía, así como el cambio de energía cinética, mientras que la ecuación (4.43) incluye solamente el cambio de energía interna cuando es relacionada ala transferencia de calor y ala parte del trabajo mecánico, y la ecuación (4.40) incluye únicamente el cambio de energía cinética, cuando es relacionado a otra parte de trabajo mecánico y no es relacionado con la transferencia de calor.

Convencionalmente, en estudios teóricos y modelos numéricos se prefiere el uso de la ecuación de energía en forma de cambio de entalpía. Para usar la relación entre la entalpía y la energía interna y la ecuación de continuidad se tiene:

$$\frac{Dh}{Dt} = \frac{De}{Dt} + \frac{D}{Dt} \left(\frac{p}{\rho} \right) = \frac{De}{Dt} + \frac{1}{\rho} \frac{Dp}{Dt} - \frac{p}{\rho^2} \frac{D\rho}{Dt}$$

Y

$$p \frac{\partial v_j}{\partial x_j} = - \frac{p}{\rho} \frac{D\rho}{Dt}$$

Así, la ecuación de energía en forma de cambio de entalpía es:

$$\rho \frac{Dh}{Dt} - \frac{Dp}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\sum_s D\rho \frac{\partial Y_s}{\partial x_j} h_s \right) + \Phi + \sum_s \rho_s F_{st} V_{st} \quad (4.44)$$

Para flujos bajos en el número de Mach ($Ma \approx 0$), Si ignoramos las fuerzas del cuerpo y la radiación. Tenemos:

$$\rho \frac{Dh}{Dt} - \frac{Dp}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\sum_s D\rho \frac{\partial Y_s}{\partial x_j} h_s \right) \quad (4.45)$$

Considerando que:

$$h = \sum Y_s h_s \quad h_s = \int c_{ps} dT + h_{0s}$$

Y

$$\frac{\partial h}{\partial x_j} = \sum_s h_s \frac{\partial Y_s}{\partial x_j} + \sum_s Y_s c_{ps} \frac{\partial T}{\partial x_j} = \sum_s h_s \frac{\partial Y_s}{\partial x_j} + c_p \frac{\partial T}{\partial x_j}$$

La ecuación (4.45) puede ser escrita como:

$$\rho \frac{Dh}{Dt} - \frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\mu}{Pr} \frac{\partial h}{\partial x_j} + \mu \left(\frac{1}{Sc} - \frac{1}{Pr} \right) \sum_s h_s \frac{\partial Y_s}{\partial x_j} \right] \quad (4.46)$$

Si en caso de que $Pr = Sc = Le = 1$, se reducirá a:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho h v_j) = \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) \quad (4.47)$$

En la teoría clásica de combustión se está acostumbrado a usar la ecuación de energía en forma de cambio de temperatura. La entalpía de la mezcla gas es:

$$h = \sum_s Y_s h_s = \sum_s Y_s h_{0s} + \int_{T_0}^T \sum_s Y_s c_{ps} dT = h_0 + \int_{T_0}^T c_p dT$$

Y la derivada substancial es:

$$\rho \frac{Dh}{Dt} = \rho \frac{D}{Dt} \left(\sum_s Y_s h_{0s} + \int c_p dT \right) = \rho c_p \frac{dT}{dt} + \sum_s h_{0s} \rho \frac{DY_s}{DT}$$

$$= \rho c_p \frac{dT}{Dt} + \sum h_{0s} \left[\frac{\partial}{\partial x_j} \left(D\rho \frac{\partial Y_s}{\partial x_j} \right) - w_s \right] = \rho c_p \frac{dT}{dt} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\sum_s D\rho \frac{\partial Y_s}{\partial x_j} h_{0s} \right) - \sum h_{0s} w_s$$

Debido ha:

$$h_s - h_{0s} = \int c_{ps} dT$$

Y $\sum h_{0s} w_s = w_s Q_s$ es el calor por reacción, la ecuación de energía tomará la forma:

$$\rho c_p \frac{DT}{Dt} - \frac{Dp}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial q_{\eta}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\sum_s D\rho \frac{\partial Y_s}{\partial x_j} \int c_{ps} dT \right) + w_s Q_s + \Phi + \sum_s \rho_s F_{si} V_{si} \quad (4.48)$$

En caso de que el número de Mach sea mucho más pequeño que la unidad, el cambio de presión y de energía de disipación pueden ser insignificantes comparadas con el cambio de entalpía, y si la fuerza del cuerpo y la transferencia de calor radiactiva son insignificantes, se considera:

$$c_{p1} = c_{p2} = c_{p3} = \dots c_{ps} = c_p$$

La ecuación de energía puede ser reducida ha:

$$\rho c_p \frac{DT}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + w_s Q_s \quad (4.49)$$

La ecuación (4.49) es llamada por algunos investigadores ecuación de Zeldovich-Shvab siendo esta una forma de energía. Las ecuaciones básicas para este caso son escritas a continuación:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho v_j) &= 0 \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} (\rho v_j) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho v_j v_i) &= -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial v_j}{\partial x_i} + \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) \right] + \rho g_i \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_s) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho v_j Y_s) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D\rho \frac{\partial Y_s}{\partial x_j} \right) - w_s \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} (\rho c_p T) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho v_j c_p T) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + w_s Q_s \\ w_s &= B\rho^2 Y_F Y_{Ox} \exp(-E/RT) \\ p &= \rho RT \sum Y_s / M_s \end{aligned} \right\} \quad (4.50)$$

4.8 Condiciones A La Frontera En La Interfase Sólido-Gas

Para la interfase sólido-gas podemos tener las condiciones a la frontera por medio de la ecuación de momento (Figura 4.1)

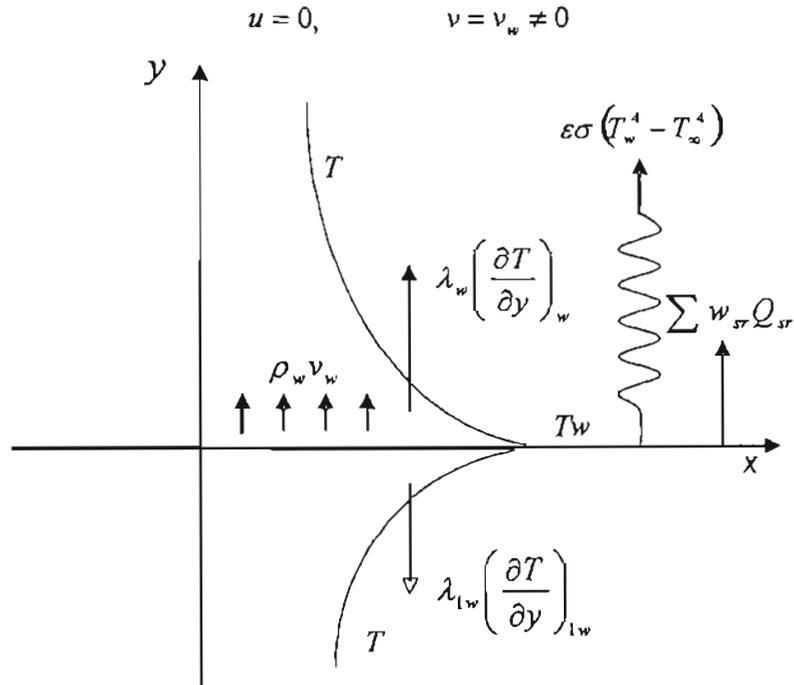


Figura 4.1

La ecuación para la conservación de especies es:

$$g_{sw} = D\rho \left(\frac{\partial Y_s}{\partial y} \right)_w + Y_{s,w} \rho_w v_w = \sum_r w_{sr} \quad (4.51)$$

$$g_{iner,w} = D\rho \left(\frac{\partial Y_{iner}}{\partial y} \right)_w + Y_{iner,w} \rho_w v_w = 0 \quad (4.52)$$

$$\sum g_{sw} = \rho_w v_w \quad (4.53)$$

$$\alpha g_{Rw} = \beta g_{\alpha\alpha,w} = \dots \quad (4.54)$$

4.9 Tamaño De Partícula Y Distribución De Tamaño

Frecuentemente el tamaño de la partícula puede ser expresado por la fórmula semiempírica de Rosin-Rammler:

$$R(d_k) = \exp\left[-(d_k/\bar{d})^n\right] \quad (4.55)$$

Donde $R(d_k)$ es la fracción peso de la partícula cuando los tamaños son mayores que d_k , n es el índice de no uniformidades, \bar{d} es una característica de tamaño. Cuando n y \bar{d} son determinados experimentalmente. La derivada de $R(d_k)$ es:

$$\frac{dR}{d(d_k)} = \frac{n}{(\bar{d})^n} (d_k)^{(n-1)} \exp\left[-(d_k / \bar{d})^n\right] \quad (4.56)$$

Cuando se llama el tamaño de distribución diferencial, cuando $R(d_k)$ es llamada la integral de tamaño de distribución.

El tamaño medio de la partícula puede ser definida como:

Radio promedio $d_{10} = \sum n_k d_k / \sum n_k \quad (4.57)$

Superficie promedio $d_{20} = \left(\sum n_k d_k^2 / \sum n_k \right)^{1/2} \quad (4.58)$

Volumen promedio $d_{30} = \left(\sum n_k d_k^3 / \sum n_k \right)^{1/3} \quad (4.59)$

Diámetro Sauter $d_{32} = \sum n_k d_k^3 / \sum n_k d_k^2 \quad (4.60)$

Entre ellos el diámetro de Sauter es usado más extensamente en ingeniería.

El tamaño típico de la partícula es:

Partículas de carbón en lechos fluidizados	1-10 mm
Aerosol	10-200 μm
Carbón pulverizado	1-100 μm
Hollín	1-5 μm

4.10 Densidad Aparente Y Fracción Volumétrica

Hay densidades diferentemente definidas en flujos de la partícula-gas.

La expresión que relaciona a estas densidades es:

$$\rho_m = \rho + \rho_p = \rho + \sum \rho_k = \rho + \left(\sum n_k \pi d_k^3 / 6 \right) \rho_p \quad (4.61)$$

Donde:

- ρ_m - Densidad de la mezcla
- ρ - Densidad aparente fluido/gas
- ρ_p, ρ_k - Densidad aparente de la partícula
- $\bar{\rho}_p$ - Densidad del material de la partícula

La fracción volumétrica de la partícula y de la fase gas es definida como:

$$\begin{cases} \Phi_p = \rho_p / \bar{\rho}_p \\ \Phi = 1 - \Phi_p = 1 - (\rho_p / \bar{\rho}_p) \end{cases} \quad (4.62)$$

Para un flujo diluido partícula-gas se tiene:

$$\rho = \bar{p} (1 - (\rho_p / \bar{\rho}_p)) \approx \bar{p}$$

Donde \bar{p} es la densidad del material gas. Obviamente, la densidad del gas aparente es casi igual a la densidad del material gas en un flujo diluido partícula-gas.

La rapidez del flujo masa, o la rapidez del flujo másico de la partícula sobre el flujo másico del gas es definido como:

$$\rho_{r0} u_{r0} / (\rho_0 u_0)$$

Cuando también se llama carga de masa. En caso de que la igualdad del gas inicial y la velocidad de la partícula la carga masa será igual a la rapidez de la densidad aparente ρ_{r0} / ρ_0 . Por ejemplo, el valor típico para el aerosol o carbón pulverizado a la flama es:

$$\rho_r / \rho \approx 1/15 = \rho_r / [\bar{p} / 1 - (\rho_p / \bar{\rho}_p)] = \frac{\bar{\rho}_p}{\bar{p}} \left(\frac{\Phi_p}{1 - \Phi_p} \right) \approx 1000 \frac{\Phi_p}{1 - \Phi_p}$$

○

$$\Phi_p \langle 0.01\%$$

Así el líquido de aerosol a la flama y el carbón pulverizado a la flama son flujos diluidos partícula-gas.

Otros ejemplos son:

Transportación neumática	$\Phi_p \langle 0.1\%$	(masa cargada ≈ 1)
--------------------------	------------------------	-----------------------------

$$\left. \begin{array}{l} \text{Lechos fluidizados} \\ \text{Flujo en barriles fósiles} \end{array} \right\} \Phi_p = 0-1$$

En caso de $\Phi_p < 0.1\%$, se tiene $l = 1000 n \pi d_p^3 / 6$, o la distancia media entre partículas es:

$$\Delta \approx n^{-\frac{1}{3}} = \left(\frac{1000\pi}{6} \right)^{\frac{1}{3}} d_p = 8.1 d_p$$

En flamas se tiene que $\Delta > 20 d_p$.

4.11 Dinámica De Una Sola Partícula

La manera más simple de estudiar los flujos partícula-gas es por medio de la dinámica de una sola partícula, en cuanto a los efectos de la partícula en un fluido el flujo es insignificante y las partículas son movidas separando la fluctuación en campo conociendo el flujo que se considera. Sin embargo, para un estudio de flujos turbulentos partícula-gas, el resultado obtenido por el análisis dinámico de una sola partícula puede ser considerado un fenómeno básico en flujos prácticos de partícula-gas.

4.11.1 Ecuación De Movimiento Para Una Sola Partícula.

En base a la ecuación (4.63), e ignorando la fuerza de elevación y el cambio de momento debido al cambio de fase, la ecuación de movimiento para una sola partícula puede obtenerse así como:

$$\int_A n_k v_{kn} dA = N_k = \text{const.} \quad (4.63)$$

$$\frac{dv_{ki}}{dt_k} = (v_i - v_{ki}) / \tau_{ik} + g_i \quad (4.64)$$

4.11.2 Movimiento De Una Sola Partícula En Un Campo De Un Flujo Uniforme

Suponiendo que una partícula con velocidad inicial v_{p0} se mueve en un campo de flujo uniforme (Figura 4.2), y la fricción de la partícula obedece la ley de Stokes. E ignorando la fuerza gravitacional, la ecuación de momento para la partícula en la dirección x es:

$$\frac{\pi d_p^3}{6} \rho_p \frac{du_p}{dt} = c_d \frac{\pi d_p^2}{4} \frac{\rho}{2} |u_\infty - v_p| (u_\infty - u_p) \quad (4.65)$$

Sustituyendo:

$$c_d = 24/Re, = 24\nu / (|u_\infty - u_p| d_p)$$

En la ecuación (4.65), tenemos:

$$\frac{du_p}{dt} = \frac{(u_\infty - u_p)}{\tau_r} \quad (4.66)$$

Donde:

$$\tau_r = d_p^2 \bar{\rho}_p / 18\mu$$

Integrando la ecuación (4.66) con las condiciones iniciales de $u_p = u_{p0}$ a $t = 0$ tenemos

$$u_p = u_\infty - (u_\infty - u_{p0}) \exp(-t/\tau_r) \quad (4.67)$$

Similamente, las velocidades transversales de las partículas pueden ser obtenidas como:

$$v_p = v_{p0} \exp(-t/\tau_r) \quad (4.68)$$

Integrando las ecuaciones (6.61) y (6.62) con respecto a t obtenemos las ecuaciones de trayectoria de la partícula:

$$\begin{cases} x_p = u_\infty t - (u_\infty - u_{p0}) \tau_r (1 - e^{-t/\tau_r}) & (4.69) \\ y_p = v_{p0} \tau_r (1 - e^{-t/\tau_r}) & (4.70) \end{cases}$$

Diferentes ecuaciones similares pueden ser obtenidas para la fricción de la partícula del tipo de ecuaciones no Stokesianas. Las ecuaciones de (4.67)-(4.68) indican que: la velocidad longitudinal de la partícula se acerca a la velocidad del fluido, la velocidad transversal de la partícula se acerca a cero, y la trayectoria de la partícula se acerca a la asíntota $y = v_{p0} \tau_r$. Cuando $t = \tau_r$, $v_p = v_{p0} / e$. Por lo tanto el significado físico del tiempo de la relajación τ_r es el tiempo necesario para la reducción de velocidad del fluido de la partícula $1/e$ a los tiempos de sus valores iniciales. El τ_r más pequeño. Así la partícula sigue más fácil al fluido.

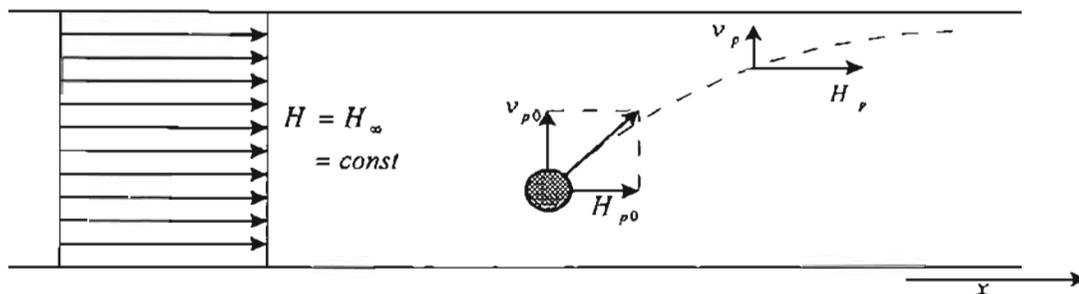


Figura 4.2

4.12 Ecuación Generalizada De La Partícula En Movimiento

La ecuación (4.64) es solamente una ecuación simple de la partícula en movimiento. S. M. Tchen, usa el método de superposición intuitiva de diferentes fuerzas posibles, proponiendo una ecuación generalizada para el movimiento de la partícula con la fricción Stokesiana como:

$$\begin{aligned}
 m_p \frac{dv_{pi}}{dt_p} &= F_{di} + F_{vmi} + F_{pi} + F_{Bi} = 3\pi d_p \mu (v_i - v_{pi}) \\
 &+ 0.5 \frac{\pi d_p^3}{6} \rho \frac{d}{dt_p} (v_i - v_{pi}) + \frac{\pi d_p^2}{6} \rho \frac{dv_i}{dt} \\
 &+ 1.5(\pi \rho \mu)^{\frac{1}{2}} d_p^2 \int_{-\infty}^t \frac{d}{d\tau} (v_i - v_{pi}) * (\tau - t)^{-\frac{1}{2}} * d\tau
 \end{aligned} \tag{4.71}$$

Donde F_{di} , F_{vmi} , F_{pi} , F_{Bi} son las fuerzas de fricción, fuerza total virtual, fuerza del gradiente de presión, fuerza de afloramiento (debido al flujo inestable) respectivamente. Después de la discusión de las fuerzas en un campo de un fluido no uniforme, la ecuación más generalizada para el movimiento de la partícula puede ser expresada como:

$$m_p \frac{dv_{pi}}{dt_p} = F_{di} + F_{vmi} + F_{pi} + F_{Bi} + F_{Mn} + F_{Si} + F_{Ti} + F_{Bi} + \dots \tag{4.72}$$

Se debe de notar que para la mayoría de los casos de las fuerzas como las fuerzas de fricción son de menor importancia, así que la aproximación hecha en la ecuación (4.64) sigue siendo válida.

4.13 Ecuaciones Básicas De Flujos Turbulentos Que Contienen El Modelo De Turbulencia K – E.

Cuando se usa el modelo $k - \epsilon$, las ecuaciones básicas de flujos turbulentos puede ser expresada en la forma generalizada siguiente:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho v_k \phi) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_k} \right) + S_\phi \tag{4.73}$$

Para un flujo de dos dimensiones se hace de la forma siguiente:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u \phi) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho v \phi) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + S_\phi \tag{4.74}$$

Donde: φ es la variable dependiente generalizada, Γ_φ es el coeficiente de transporte, y S_φ es la fuente térmica. El contenido de φ , Γ_φ y S_φ se obtienen en la tabla 4.1.

Tabla 4.1 Ecuaciones Generalizadas.

Ecuación	φ	Γ_φ	S_φ
Continuidad	1	0	0
x-momento	u	μ_e	$-\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_e \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_e \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \Delta \rho g_x$
y-momento	v	μ_e	$-\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_e \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_e \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \Delta \rho g_y$
Energía cinética turbulenta	k	$\frac{\mu_e}{\sigma_k}$	$G_k + G_b - \rho \varepsilon$
Rapidez de disipación TKE	ε	$\frac{\mu_e}{\sigma_\varepsilon}$	$\frac{\varepsilon}{k} (c_1 G_k - c_2 \rho \varepsilon)$
Especies	Y_s	$\frac{\mu_e}{\sigma_Y}$	$-w_s$
Energía	h	$\frac{\mu_e}{\sigma_k}$	$-q_r$

Donde:

$$G_k = \mu_T \left[2 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 \right]$$

$$G_b = -\beta \rho \left(g_x \frac{\mu_T}{\sigma_T} \frac{\partial T}{\partial x} + g_y \frac{\mu_T}{\sigma_T} \frac{\partial T}{\partial y} \right)$$

$$\mu_e = \mu + \mu_T, \quad \mu_T = c_\mu \rho k^2 / \varepsilon$$

Modelado Matemático

Una de las principales funciones de la ingeniería es optimizar los equipos y dispositivos tales como quemadores, intercambiadores de calor, bombas, tuberías, turbinas, aviones, barcos, naves espaciales, submarinos, reactores nucleares, etc. Por eso, es necesario contar con información relacionada con características propias de los fluidos en movimiento: cantidad de masa, movimiento, transferencia de calor y materia, reacciones químicas y en general cualquier proceso de intercambio y transformación.

La integración de un conjunto de expresiones que describan el proceso de gasificación en el seno de un equipo, involucra la interacción entre ecuaciones de conservación, transporte, modelos teóricos y empíricos, ecuaciones de estado, propiedades, etc. Lo anterior da como resultado la dependencia entre modelos, de tal forma que para obtener el comportamiento de algunos parámetros, se deben simular primeramente otros procesos. El objetivo del presente capítulo, es describir las ecuaciones y submodelos más representativos del proceso de gasificación de madera para su integración en un modelo matemático que sirva como herramienta para el análisis de esta tecnología para optimizar la eficiencia térmica y para predecir la composición del gas (figura 5.1). Todas las expresiones empleadas provienen de diversas literaturas.

El presente trabajo se enfoca a la gasificación de biomasa y en particular a la gasificación de madera en gasificadores de lecho fijo con flujos paralelos descendentes, la conversión del combustible toma lugar por varios mecanismos, que son, el secado, pirólisis primaria, cracking de alquitrán secundario, gasificación y combustión etapas que fueron descritas en el capítulo tres así como los aspectos físicos y químicos de estos procesos por lo que en los párrafos siguientes se mencionara la forma en que son simulados. Durante el secado, y evaporación de humedad del combustible la cual es seguida por la etapa de pirólisis, que es la etapa donde se da la descomposición térmica del combustible sólido en la que se forman gases y alquitrán. La gasificación comprende un arreglo complejo de reacciones heterogéneas entre CO_2 y H_2O , y el sólido char (carbonizado). El calor requerido para el secado, pirólisis gasificación es generado por reacciones exotérmicas de O_2 con char y gases combustibles. Todos los efectos ocurren simultáneamente, por tal motivo es necesario un modelado detallado siguiendo un orden para simular el comportamiento del lecho del gasificador y seguir el comportamiento del combustible. Una esencial simplificación es la suposición de partículas isotérmicas, los procesos son fuertemente controlados por la transferencia de masa y calor dentro de las partículas, y la producción de volátiles es función de las velocidades de transferencia de masa en la intra partícula, con grandes tiempos de residencia cambia la extensión de cracking secundarios. Entonces, una aproximación comprensiva para estudiar partículas grandes y velocidades rápidas de calentamiento, como ocurre en la biomasa, requiere un modelo detallado de una sola partícula combinado con un modelo del reactor de lecho empacado.

Los objetivos específicos de este capítulo son dos. Primero, la simulación de una sola partícula, desacoplada del modelo de lecho empacado, es diseñada. Segundo, condiciones de operación de un lecho combustor en movimiento son buscadas, la combinación de modelos de lecho empacado y de partícula serán usadas para predecir el comportamiento de este sistema.

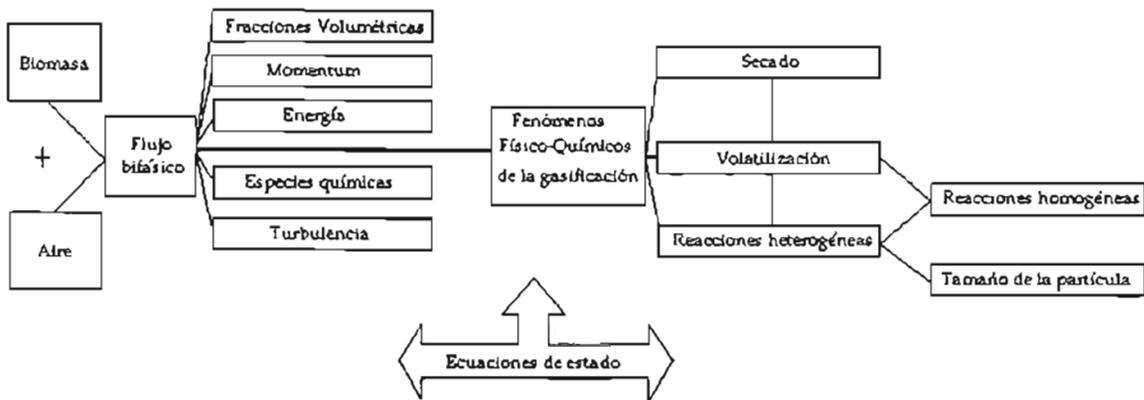


Figura 5.1 Esquema del modelo de gasificación

5.1 Técnicas De Modelización

La naturaleza del flujo dentro de los gasificadores es multifásica, ya que representa una combinación de sustancias sólidas, líquidas y gaseosas. Estrictamente hablando, un flujo es multifásico cuando en él coexisten varias fases de la materia. Sin embargo, desde el punto de vista del modelado en computadora, más importante que la fase de la materia es su velocidad local. De lo anterior se desprende que cuando en un punto del dominio existe una cierta probabilidad de que haya presencia de fluidos (o fluido y partículas) con distintas velocidades, se dice que la modelación de flujo es multifásica. Por lo tanto, lo que determina en un modelo el carácter multifásico del fluido es la necesidad de resolver un sistema de ecuaciones de Navier-Stokes para cada una de las fases.

Existen fundamentalmente dos tipos de modelos multifásicos, Los modelos llamados "eulerianos-eulerianos" y los "eulerianos-lagrangianos". Los primeros utilizan ecuaciones de conservación eulerianas para todas las fases. Estas ecuaciones son formalmente muy similares a una de las fases (líquida o gaseosa) que recibe el nombre de fase continua. En ella, se sigue el movimiento y las propiedades de una fase dispersa (gotas o partículas), que se mueve en la fase continua, utilizando ecuaciones lagrangianas.

Los modelos eulerianos-lagrangianos de gasificadores son más comunes en la literatura debido a que ofrecen algunas ventajas, sobre todo en la mayor simplicidad de las ecuaciones. Comparados con estos modelos, los eulerianos-eulerianos presentan algunas ventajas y desventajas. Entre las últimas, como ya se mencionó, los modelos son mucho más complicados y se ven afectados por la difusión numérica, la cual está ausente en los métodos lagrangianos. Sin embargo, los modelos eulerianos ofrecen también algunas ventajas sobre los lagrangianos, entre las cuales está el incluir una más completa formulación que facilita el uso de códigos paralelos y una mejor adaptabilidad a diferentes mallas. También, la dispersión de partículas debido a la turbulencia es mejor representada en estructuras eulerianas si el gradiente de difusión del modelo es aceptable (fueyo y Gambon, 1997). En esta tesis la naturaleza del flujo a estudiar se considera bifásica (sólido-gas) y se utiliza un modelo del tipo euleriano-euleriano.

5.2 Modelo

De acuerdo al funcionamiento de un gasificador downdraft. El combustible entra por la parte superior del gasificador y migra a través de este de manera descendente siendo la corriente gaseosa paralela a este. Bajo condiciones de operación, se desarrolla un estado pseudo estable. Un modelo transiente 2-D (r, z) se puede utilizar para describir el lecho entero del combustible.

Los modelos transientes 1-D de reactores de lecho empacado han sido usados por un gran número de investigadores incluyendo Liu y Admunson (1962). En todos estos modelos, las partículas sólidas son consideradas suficientemente pequeñas para ser isotérmicas. El hecho que las partículas son porosas y que las reacciones toman lugar dentro de esta estructura puede explicarse si se usan factores de efectividad (por ejemplo Stillman 1979).

El modelo presentado aquí considera gradientes en el lecho y en el interior de las partículas. Como se muestra en la figura 5.2, en cada celda la discretización en las direcciones r, Φ de una partícula representativa escogida y discretizada en la dirección radial y axial. Por lo tanto, el lecho completo es dividido en dos subsistemas, que es la fase gas en lecho y en las partículas. Esta aproximación es llamada modelo transiente 2-D+2-D. La fase gaseosa contenida en el lecho empacado es descrita por coordenadas cilíndricas 2-D (r, z), las partículas por coordenadas esféricas 2-D (r, Φ), Dieterich (1998) usa un modelo 1-D+1-D para simular sistemas de lechos catalíticos empacados, y Chejne y col., (2000) para el modelado de combustión de montones de carbón.

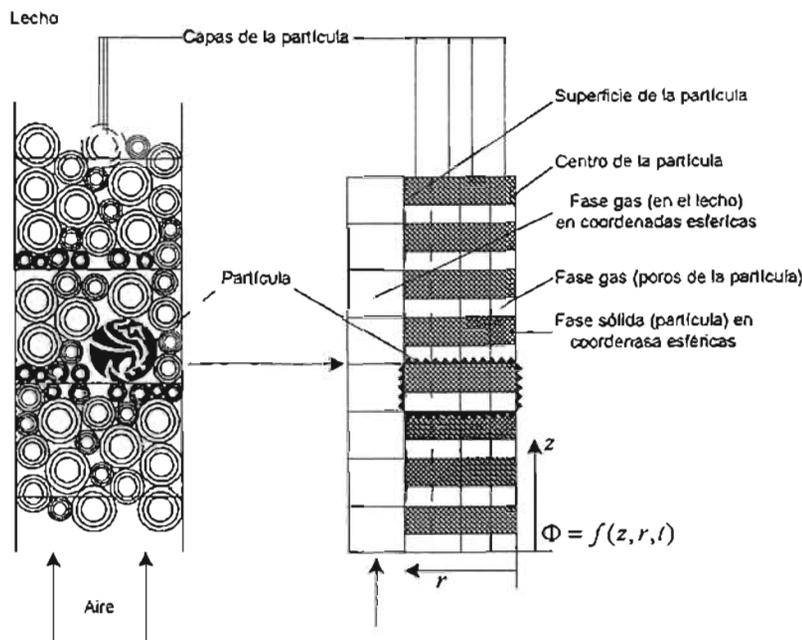


Figura 5.2 Esquema de discretización. En cada punto de la malla del modelo 2-D (Dirección del aire primario), una partícula representativa es elegida y discretizada alrededor del radio.

Nuestro modelo toma la explicación del calentamiento, secado, pirolisis, cracking secundario de alquitrán, reacciones homogéneas en fase gaseosa, y reacciones heterogéneas de combustión y de gasificación. En la fase gaseosa se consideran ocho especies (CO₂, N₂, CO, O₂, H₂, H₂O, CH₄ y alquitrán). La fase sólida es madera.

5.3 Ecuaciones Para Las Fracciones Volumétricas

La presencia de partículas de madera y gas (las fases) es comúnmente representada a través de la fracción local de volumen de cada fase. Las ecuaciones para la fracción volumétrica r_i son de la siguiente forma:

$$\frac{\partial(\rho_i r_i)}{\partial t} + \nabla(\rho_i r_i V_i) - \nabla(\Gamma_r \nabla r_i) = m_{j \rightarrow i} \quad (5.1)$$

transitorio Convección Dif. de la fase Fuente

Donde:

$i = 1$ en el caso del gas; $j = 2$ para la madera

ρ_i es la densidad de la fase;

V_i es el vector velocidad de la fase;

Γ_r es un coeficiente de difusión

$m_{j \rightarrow i}$ representa la masa transferida de la fase 2 (madera) a la fase 1 (gas).

Las fracciones volumétricas están sujetas siempre a la siguiente condición.

$$r_1(x, y, z, t) + r_2(x, y, z, t) = 1 \quad (5.2)$$

5.4 Ecuaciones De Conservación Para Propiedades

La ecuación para cualquier otra propiedad conservada de la fase i (Φ) es la siguiente:

$$\frac{\partial(\rho_i r_i \Phi_i)}{\partial t} + \nabla(\rho_i r_i \Phi_i V_i) - \nabla(\Gamma_r \nabla r_i) - \nabla(\Gamma_r \nabla r_i \nabla \Phi_i) = S_{\Phi_i}$$

Transitorio Convección Difusion de la fase Difusión de Φ_i Fuente

$$+ \|m_{j \rightarrow i}\| \Phi_+ - \|m_{i \rightarrow j}\| \Phi_- + f_{j \rightarrow i} (\Phi_j - \Phi_i)$$

Transporte entre fases

(5.3)

La propiedad conservada ϕ_i puede representar:

- ❖ Los componentes de la velocidad (ecuaciones de conservación de cantidad de movimiento en las tres componentes espaciales);
- ❖ La entalpía (conservación de la energía);

- ❖ Fracción másica de una especie química (conservación de especies); o
- ❖ Energía cinética turbulenta

Si Φ_j es la propiedad de una fase (por ejemplo la entalpía del gas), entonces Φ_i es la propiedad homologa en la otra fase (entalpía de la madera).

Φ_* representa el valor de Φ en la masa que proviene de la fase j a la fase i ($m_{j \rightarrow i}$) y que esta ingresando a la fase i ; Φ tiene un significado similar ya que representa la masa que sale de la fase i hacia la j ($m_{i \rightarrow j}$) la doble barra (\parallel) en la ecuación (5.3) es un operador upwind el cual toma el valor máximo entre cero y la cantidad encerrada.

$f_{j \rightarrow i}$ es un coeficiente de fricción para el transporte difusivo de Φ entre fases. En las ecuaciones de momentum representa el arrastre en las partículas; en la de entalpías la transferencia de calor.

Finalmente S_Φ representa otras fuentes, por ejemplo los gradientes de presión en las ecuaciones de momentum.

En la ecuación 5.3 aparecen dos términos de difusión en el lado izquierdo. El primero, determina la difusión turbulenta dentro de la fase, y sólo está presente en la fase gaseosa, por lo que es determinado como en los casos monofásicos, a partir de la modelación de las correlaciones $\overline{V'\phi}$ (la correlación entre las velocidades de fluctuación y la fluctuación de la propiedad). El segundo, es el transporte de Φ_j debido a la difusión turbulenta de r_i en la ecuación (5.1).

El flujo en el sistema analizado en esta tesis, como en la mayoría de los problemas de interés practico en ingeniería es turbulento.

5.4.1 Ecuación De Continuidad Para La Fase Gaseosa En El Lecho Empacado:

La ecuación de continuidad de la fase gaseosa en el lecho empacado es:

$$\frac{\partial \epsilon_{g,bed} \rho_{g,bed}}{\partial t} = \frac{1}{\partial r} \frac{\partial (\epsilon_{g,bed} \rho_{g,bed} v_{g,bed} r)}{\partial r} + \frac{\partial (\epsilon_{g,bed} \rho_{g,bed} w_{g,bed})}{\partial z} + \alpha_{par} m_{par} \quad (5.4)$$

Donde: $\rho_{g,bed}$ es la densidad de la fase gaseosa, $v_{g,bed}$ y $w_{g,bed}$ son las velocidades del gas en las direcciones r y z respectivamente y $\epsilon_{g,bed}$ es la porosidad del lecho. El término $\alpha_{par} m_{par}$ denota el intercambio de masa entre la fase gaseosa del lecho y cada una de las partículas. La caída de presión en el lecho es descrita por la ecuación de Ergun.

$$0 = \frac{dp_{g,bed}}{dz} - A_E v_{g,bed} - B_E v_{g,bed} |v_{g,bed}| \quad (5.5)$$

Donde $p_{g,bed}$ es la presión del sistema y A_g, B_g son parámetros del modelo. La ecuación de conservación de las especies esta dada por:

$$\begin{aligned} \epsilon_{g,bed} \rho_{g,bed} \frac{\partial C}{\partial t} = & -\epsilon_{g,bed} \rho_{g,bed} v_{g,bed} \frac{1}{r} \frac{\partial w_{j,g,bed}}{\partial r} r + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\epsilon_{g,bed} \rho_{g,bed} D_{eff,bed} \frac{\partial w_{j,g,bed}}{\partial r} r \right) \\ & -\epsilon_{g,bed} \rho_{g,bed} v_{g,bed} \frac{\partial w_{j,g,bed}}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\epsilon_{g,bed} \rho_{g,bed} D_{eff,bed} \frac{\partial w_{j,g,bed}}{\partial z} \right) \\ & + \underbrace{a_{par} (m_{j,par} - w_{j,g,bed} m_{par}) + \epsilon_{g,bed} MG_j \sum_i^{R_{hom}} v_{i,j,hom} r_{i,hom}} \end{aligned}$$

Ecuación (5.6)

Donde: $w_{j,g,bed}$ es la fracción másica de la especie j , $D_{eff,bed}$ es un coeficiente de difusión efectivo, y m_{par} , $m_{j,par}$ son el flujo másico total y el flujo másico por especie de las partículas. $r_{i,hom}$ Representa la velocidades molares de reacción de las reacciones homogéneas en fase gaseosa (incluyendo el cracking del alquitrán) con los coeficientes $v_{i,j,hom}$ estequiométricos. El balance de energía es:

$$\begin{aligned} \epsilon_{g,bed} \rho_{g,bed} C_{p,g,bed} \frac{\partial T_{g,bed}}{\partial t} - \frac{\partial \epsilon_{g,bed} p_{g,bed}}{\partial t} = & -\epsilon_{g,bed} \rho_{g,bed} C_{p,g,bed} v_{g,bed} \left(\frac{\partial T_{g,bed}}{\partial r} + \frac{\partial T_{g,bed}}{\partial z} \right) \\ & + \epsilon_{g,bed} \lambda_{eff,bed} \left(\frac{\partial^2 T_{g,bed}}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 T_{g,bed}}{\partial z^2} \right) + \epsilon_{g,bed} \rho_{g,bed} D_{eff,bed} \times \sum_j^s \frac{\partial h_{j,g,bed}}{\partial z} \frac{\partial w_{j,g,bed}}{\partial z} \\ & + a_{par} \left(\sum_j^s m_{j,par} (h_{j,g,par} - h_{j,g,bed}) + \lambda_{eff,par} \frac{\partial T_{par}}{\partial r} \Big|_{r=R} \right) \\ & + \underbrace{\epsilon_{g,bed} \sum_i^{R_{hom}} (-\Delta h_{i,hom}) r_{i,hom}} \end{aligned}$$

Ecuación (5.7)

Donde $T_{g,bed}$ es la temperatura del gas, $\lambda_{eff,bed}$ es la conductividad calorífica efectiva del lecho entero, y h_j es la entalpía del componente j . El intercambio de calor con las partículas que ocurre por convección $m_{j,par} (h_{j,g,par} - h_{j,g,bed})$, y por conducción $\lambda_{eff,par} / \partial r \Big|_{r=R}$ en la superficie de la partícula. Las reacciones homogéneas en fase gaseosa con entalpías $\Delta h_{i,hom}$ de reacción son consideradas.

El segundo término del lado izquierdo de esta ecuación (y también de la ecuación (5.11) y el tercer término del lado derecho representan presión y trabajo volumétrico y el transporte de entalpía debido a la difusión de especies, respectivamente. Pero estos términos serán despreciados en la presente aplicación, pero son mencionados en las ecuaciones del modelo por razón de complementación.

5.4.2 Partícula

Las ecuaciones de conservación de la fase gas en el sistema del poro de las partículas son similares a las ecuaciones (5.4 – 5.7), pero son escritas en coordenadas esféricas (ecuaciones 5.8 – 5.11). Aquí la ley de Darcy es utilizada. En las ecuaciones de conservación de especies $v_{i,j,het}$ es una masa específica del coeficiente estequiométrico, y $r_{i,het}$ denota las velocidades para las reacciones heterogéneas.

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[(1 - \epsilon_{g,bed}) \epsilon_g \rho_g \right] = - \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[r^2 (1 - \epsilon_{g,bed}) \epsilon_g \rho_g v_g \right] - \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial \left((1 - \epsilon_{g,bed}) \epsilon_g \rho_g v_g \right)}{\partial \Phi} + (1 - \epsilon_{g,bed}) \sum_j^{R_{het}} v_{i,j,het} r_{i,het} \quad (5.8)$$

$$0 = \frac{dp_g}{dr} + \frac{\eta}{C_D} v_g \quad (5.9)$$

$$(1 - \epsilon_{g,bed}) \epsilon_g \rho_g \frac{\partial w_{j,g}}{\partial t} = - (1 - \epsilon_{g,bed}) \epsilon_g \rho_g v_g \left(\frac{\partial w_{j,g}}{\partial r} + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial w_{j,g}}{\partial \Phi} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[r^2 (1 - \epsilon_{g,bed}) \epsilon_g \rho_g D_{eff,par} \frac{\partial w_{j,g}}{\partial r} \right] + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \Phi} \left[(1 - \epsilon_{g,bed}) \epsilon_g \rho_g D_{eff,par} \frac{\partial w_{j,g}}{\partial \Phi} \right] + (1 - \epsilon_{g,bed}) \left[\epsilon_g MG_j \sum_i^{R_{hom}} v_{i,j,hom} r_{i,hom} + \sum_i^{R_{het}} \left(v_{i,j,het} r_{i,het} - w_{j,g} \sum_j^S v_{i,j,het} r_{i,het} \right) \right]$$

Ecuación (5.10)

Bajo la suposición que en la partícula la fase líquida, sólida y gaseosa tienen la misma temperatura local, únicamente una ecuación de energía es requerida:

$$\begin{aligned}
 & (1 - \epsilon_{g,bed}) \rho_{par} c_{p,par} \frac{\partial T_{par}}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial t} [(1 - \epsilon_{g,bed}) \rho_{par}] = -(1 - \epsilon_{g,bed}) \epsilon_g \rho_g c_{p,g} v_g \left(\frac{\partial T_{par}}{\partial r} + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial T_{par}}{\partial \Phi} \right) \\
 & + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 (1 - \epsilon_{g,bed}) \lambda_{eff,par} \frac{\partial T_{par}}{\partial r} \right) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \Phi} \left((1 - \epsilon_{g,bed}) \lambda_{eff,par} \frac{\partial T_{par}}{\partial \Phi} \right) \\
 & + (1 - \epsilon_{g,bed}) \epsilon_g \rho_g D_{eff,par} \times \sum_j^s \frac{\partial h_{j,g,par}}{\partial r} \frac{\partial w_{j,g}}{\partial r} + (1 - \epsilon_{g,bed}) \epsilon_g \rho_g D_{eff,par} \times \sum_j^s \frac{\partial h_{j,g,par}}{\partial \Phi} \frac{\partial w_{j,g}}{\partial \Phi} + (1 - \epsilon_{g,bed}) \\
 & \times \left[\sum_j^{R_{hom}} (-\Delta h_{i,hom}) r_{i,hom} + \sum_i^{R_{het}} (-\Delta h_{i,het}) r_{i,het} \right] + (1 - \epsilon_{g,bed}) \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_{eff,bed} \frac{\partial T_{par}(z,r=R,t)}{\partial z} \right) \\
 & + (1 - \epsilon_{g,bed}) \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda_{eff,bed} \frac{\partial T_{par}(z,r=R,t)}{\partial r} \right)
 \end{aligned}$$

Ecuación (5.11)

Donde: T_{par} es la temperatura local en la partícula, $c_{p,par}$ es la capacidad calorífica de la partícula y $\lambda_{eff,par}$ es la conductividad calorífica. Los calores de las reacciones homogéneas y heterogéneas son $\Delta h_{i,hom}$ y $\Delta h_{i,het}$ respectivamente. Los términos anteriores en el lado derecho de esta ecuación contemplan la transferencia de calor por conducción entre las superficies de las partículas a diferentes alturas del lecho. Los balances totales másicos y por especie de sólido y líquido en las partículas son:

$$\frac{d}{dt} [(1 - \epsilon_{g,bed}) \epsilon_s \rho_s] = (1 - \epsilon_{g,bed}) \sum_i^{R_{het}} \bar{v}_{i,j,het} r_{i,het} \quad (5.12)$$

$$\frac{d}{dt} [(1 - \epsilon_{g,bed}) \epsilon_l \rho_l] = (1 - \epsilon_{g,bed}) \sum_i^{R_{het}} \bar{v}_{i,j,het} r_{i,het} \quad (5.13)$$

ρ_s , ρ_l son las densidades del sólido y el líquido respectivamente, y ϵ_s (ϵ_l) son las fracciones volumétricas correspondientes. La estructura de la madera se descompone durante la pirólisis en diversos compuestos gaseosos y char. El máximo rendimiento de los diferentes productos de pirólisis (ver figura 5.3) son obtenidos experimentalmente y pueden ser utilizados para simplificar el cálculo del cambio en la composición del sólido. Inicialmente, la madera es representada por el rendimiento máximo de los diferentes gases de pirólisis, char y cenizas (figura 5.3).

Para cada uno de esos componentes, un balance de masa en la fase sólida es escrito como:

$$(1 - \epsilon_{g,bed}) \epsilon_s \rho_s \frac{dw_{j,s}}{dt} = (1 - \epsilon_{g,bed}) \sum_i^{R_{het}} \left(\bar{v}_{i,j,het} \bar{r}_{i,het} - w_{i,g} \sum_i^{R_{het}} \bar{v}_{i,j,het} \bar{r}_{i,het} \right) \quad (5.14)$$

Donde $w_{j,s}$ es la fracción másica de las especies en la fase sólida. La descomposición de los sólidos volátiles es descrita por la cinética de pirólisis, y el char es consumido en reacciones heterogéneas.

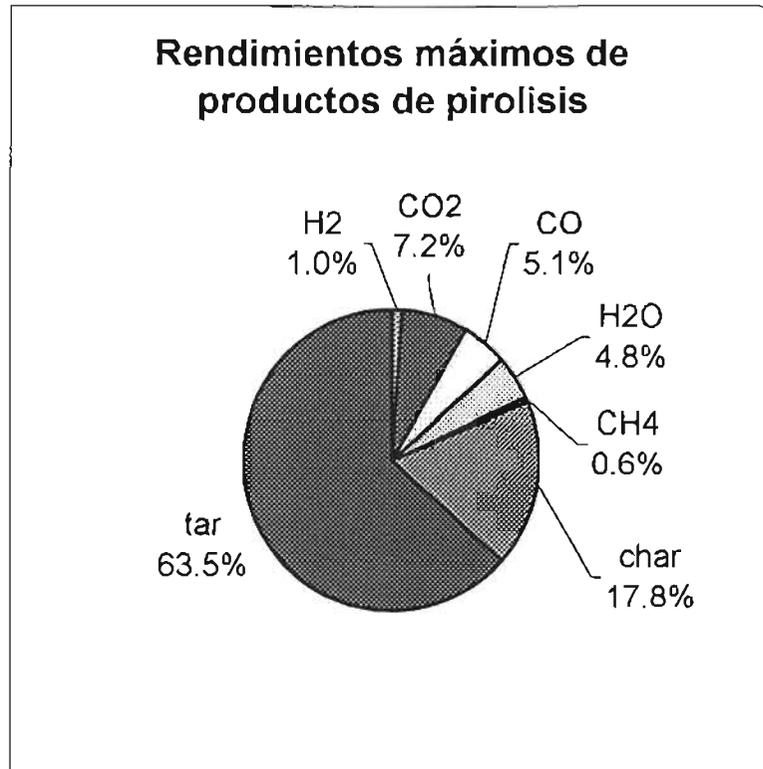


Figura 5.3

Las condiciones iniciales y a la frontera son escogidas de acuerdo a la aplicación específica. Una idea general, las condiciones a la frontera para una partícula son:

$$\rho \epsilon v \Phi_{par} \Big|_{r=R^-} - \Gamma \frac{\partial \Phi_{par}}{\partial r} \Big|_{r=R^-} = \rho \epsilon v \Phi_{par} \Big|_{r=R^+} + k \left[\rho \epsilon v \Phi_{par} \Big|_{r=R^+} - \Phi_{bed} \right] \quad (5.15)$$

Donde Φ es una conservación general de la variable, Γ representa el coeficiente de dispersión o la conductividad calorífica, y k es un coeficiente general de transferencia.

Las ecuaciones (5.4 – 5.15) son un sistema de ecuaciones diferenciales parciales (PDEs), ecuaciones diferenciales ordinarias (ODEs), y ecuaciones algebraicas (AEs). Todas AEs y espaciales ODEs (que es la ecuación de Ergún y la ley de Darcy) son sustituidas en la PDEs y en un sistema consistente de PDEs y ODEs (el cual es un balance de masa en la fase sólida) que es obtenido. Las PDEs son discretizadas en el

espacio usando el método de volúmenes finitos. El sistema resultante de ODEs consistente, es entonces resuelto usando CFD PHOENICS.

5.4.3 Secado

Típicamente la biomasa tiene un contenido de humedad considerablemente alto y, por consiguiente, una descripción precisa del secado es esencial en los procesos de gasificación. Los factores que impactan el proceso de secado son el tamaño de partícula, humedad inicial, la temperatura, humedad relativa, y la velocidad del gas circundante (Sasstamoinen y col., 1995). Cenkowski y col., 1993, reviso los diferentes modelos para el secado de granos en lechos empacados. Los modelos en equilibrio, no equilibrio y tipo logarítmico. En este estudio un modelo de tipo equilibrio es usado, donde el líquido (agua libre y absorbida) se considera que esta en equilibrio con la fase gas local en los poros. Numéricamente esto puede ser llevado acabo asumiendo una rapidez de secado:

$$r_{dry} = -k_0 \epsilon_g \cdot \left(\frac{p_{H_2O}^*}{RT_{por}} - \frac{w_{g,H_2O} \rho_g}{MG_{H_2O}} \right) \quad (5.16)$$

Con una constante muy grande de velocidad k_0 . Entonces, la concentración de vapor en la fase gas esta siempre en equilibrio con la fase liquida. La presión en equilibrio del agua $p_{H_2O}^*$ es la presión de saturación $p_{H_2O}^S$ multiplicada con una función de corrección $\varphi(c_1, T_{por})$ (Ec. 5.17). Cuando el contenido de humedad C_1 es menor que el punto de saturación de fibra c_{FSP} del sólido, φ reduce la presión de saturación. La presión de vapor $p_{H_2O}^S$ es calculada usando la ecuación de Antoine.

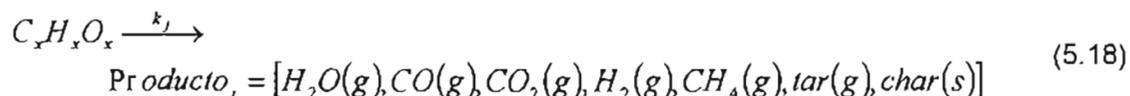
$$\begin{aligned} c_1 \leq c_{FSP} : p_{H_2O}^* &= p_{H_2O}^S \varphi(c_1, T_{por}) \\ c_1 > c_{FSP} : p_{H_2O}^* &= p_{H_2O}^S \end{aligned} \quad (5.17)$$

Una descripción detallada de la función φ es dada por Rummer (1998).

5.4.4 Pirólisis Primaria

La descomposición no oxidativa de la biomasa, llamada pirólisis, tiene una fuerte influencia sobre todo el proceso de gasificación y/o combustión, desde que los volátiles pueden ser de alrededor del 80% del completo de la masa sólida. En el primer paso, la pirólisis primaria, se descompone térmicamente en gases, alquitrán, y char. La conversión de alquitrán en gases y char es resumida como pirólisis secundaria (Di Blasi 1993). En la literatura varios modelos de pirólisis para madera son propuestos. Van Kevelen (1981) asume la existencia de metaplast y semi char como productos intermedios y desarrolla un modelo complejo que considera reacciones competitivas y consecutivas. Liliedahl y Sjostrom (1994) presentaron un modelo empírico para descomposición isotérmica. Un aproximamiento simplificado fue utilizado por Winter (1997), quien asume que la formación de todos los volátiles es igual, entonces, describiendo la formación de componentes individuales con una sola ecuación de velocidad. Alves y Figueredo (1984)

y Antal y col., (1980) usaron la aproximación de reacciones paralelas independientes. Este modelo es también utilizado en este estudio y puede ser descrito por:



Donde cada punto j es formado de acuerdo a una expresión de velocidad independiente. La pérdida de masa del sólido es descrita por reacciones irreversibles de primer orden, donde las energías de activación E_j son asumidas para las diferentes especies (Pitt, 1962). Entonces las velocidades individuales de pirólisis $r_{pyro,j}$ (Kg/m³/s) son dadas por:

$$r_{pyro,j} = k_{0,j} \cdot \exp^{-E_j/RT_{por}} \cdot (w_{j,s} \rho_s \epsilon_s) \quad (5.19)$$

El término $w_{j,s} \rho_s \epsilon_s$, es la cantidad de gas no volatilizado en la pirólisis en la fase sólida. La reacción se detendrá cuando una de las especies ha reaccionado por completo esto es específicamente el grado máximo de devolatilización. Los parámetros cinéticos usados en este estudio son tomados de mediciones termogravimétricas (TGA) y son mostrados en la tabla 5.1.

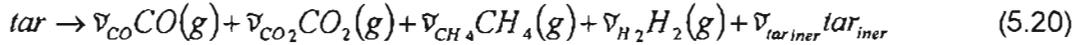
El calor de la pirólisis de madera es relativamente pequeño y es investigado por Rath y col., (2000), quien reporto una variabilidad del calor de reacción dependiendo del tipo de madera, tamaño de la partícula y rendimiento final de char. Para madera de haya, este calor de pirólisis se encuentra en rangos de 150 kJ/kg d.b., para un rendimiento final de char de 0.25 kg/kg d.b. Una explicación del cambio de calor de reacción puede ser la simultánea ocurrencia de una producción primaria de char con carácter exotérmico y una formación de volátiles endotérmica.

No.	Componente	$k_{0,j}$ (1/s)	E_j (Kj/mol)	$W_{s,max,j}$ (kg/kg db)
1	H ₂ O	3.68 x 10 ¹³	149.5	0.0480
2	CO	9.00 x 10 ⁹	111.0	0.0506
3	CO ₂	5.23 x 10 ⁹	105.0	0.0724
4	H ₂	4.73 x 10 ⁴	92.5	0.0060
5	CH ₄	1.09 x 10 ⁵	71.3	0.0106
6	tar	2.09 x 10 ¹⁰	112.7	0.6340

Tabla 5.1. Cinética para pirólisis primaria de madera

5.4.5 Pirólisis Secundaria

La pirólisis primaria es seguida por un cracking de alquitranes, el cual es una mezcla condensada de hidrocarburos (Calzón y Briggs 1985). Las reacciones crack ocurren homogéneamente en la fase gas o heterogéneamente en la superficie de la biomasa o partículas de char. En el presente estudio, el cracking de char es considerado un conjunto de reacciones, tal como en la ec. (5.20), grandes alifáticos tales como etano, eteno, o propano son en su totalidad transformados en metano.



Los coeficientes estequiométricos $\bar{\nu}_j$ de cada especie son reportados en la tabla 5.2. Para la rapidez de reacción $r_{j,crak}$ (Kg/Kg/s), el modelo cinético por Borson y Howard (1989) es usado como:

$$r_{j,crak} = \nu_j \cdot 10^{4.98} \cdot \exp\left(\frac{-93.37}{RT_{par}}\right) \cdot (w_{g,tar} \rho_g) \quad (5.21)$$

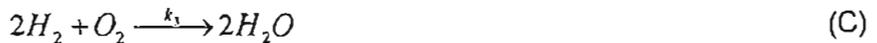
Donde $w_{g,tar} \rho_g$ es la cantidad de alquitrán en la fase gas. De acuerdo a la investigación experimental de Rath y Studinger (2001), sólo el 78 % del alquitrán remanente permanece inalterado (Ver tabla 5.2).

Componente	$\bar{\nu}_j$
CO	0.78 x 0.72222
H ₂	0.78 x 0.02222
alquitrán	-1.00000
CO ₂	0.78 x 0.14222
CH ₄	0.78 x 0.11334
alquitrán _{inerte}	0.22

Tabla 5.2. Rendimientos relativos de los productos del cracking de alquitrán

5.4.6 Reacciones Homogéneas En La Fase Gas

Las especies reactivas gaseosas son producidas durante el secado y pirólisis de la biomasa y reaccionan con cada otra (tal como en la reacción inversa (shift) del gas de agua) o con oxígeno del aire primario. El calor es generado por las reacciones exotérmicas, es importante para la liberación de gases de pirólisis, la ignición de char. En el presente trabajo las siguientes cuatro reacciones homogéneas son consideradas



La reacción (A) es una reacción limitada por el equilibrio (tabla 5.3). En bajas temperaturas, esta favorece la producción de CO₂ y H₂, y en altas temperaturas CO y H₂O. La constante de equilibrio k es calculada a partir la energía libre de Gibas usando entalpías de reacción. El equilibrio de las reacciones (C – D) esta lejos de los productos de lado y, sin embargo, reacciones irreversibles pueden ser insignificantes. Todos los parámetros cinéticos son tomados de literatura y son reportados en la tabla (5.3).

Tabla 5. 3. Expresiones de velocidad para reacciones homogéneas en fase gas (mol/m³/s)

de Souza – Santos (1989)

$$r_1 = 2.78 \times 10^{-3} \cdot \exp\left(\frac{-1,510}{T_g}\right) \cdot \left(y_{CO}y_{H_2O} - \frac{y_{CO_2}y_{H_2}}{K}\right) \cdot C_{mol}^2$$

Groppi y col., (2000)

$$r_2 = 3.98 \times 10^{-14} \cdot \exp\left(\frac{-20,119}{T_g}\right) \cdot y_{CO}y_{O_2}^{0.25}y_{H_2O}^{0.5} \cdot C_{mol}^{1.75}$$

Groppi y col., (2000)

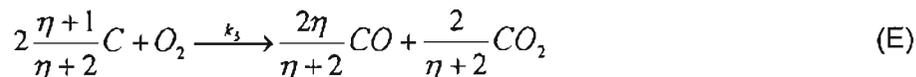
$$r_3 = 2.19 \times 10^{-12} \cdot \exp\left(\frac{-13,127}{T_g}\right) \cdot y_{H_2}y_{O_2} \cdot C_{mol}^2$$

Groppi y col., (2000)

$$r_4 = 1.58 \times 10^{-13} \cdot \exp\left(\frac{-24,343}{T_g}\right) \cdot y_{CH_4}^{0.7}y_{O_2}^{0.8} \cdot C_{mol}^{1.5}$$

5.4.7 Reacciones Heterogéneas

Las reacciones heterogéneas son aquellas de carbonizado (char) (que es un residuo sólido de pirólisis) con especies en la fase gas (tal como O₂, CO₂, H₂O). Estas reacciones complejas fueron investigadas por Fredersdorff y Elliot (1963), quienes asumieron que el O₂ se disocia y se absorbe en sitios activos libres de la retícula de carbono y crea un complejo C(O) y radicales libres de oxígeno O como productos intermedios. En un paso posterior de reacción, este complejo C(O) forma CO libres y CO₂. El mecanismo de reacciones char-CO₂-H₂O es similar a la reacción char-O₂ (Laurendeau, 1978). Esta tesis usa un modelo simplificado de reacción que considera el siguiente conjunto de reacciones.



La proporcionalidad en cuanto a cambios de producción de η de CO a CO₂ con la temperatura esta dada en la tabla 5.4. Las expresiones de velocidad y parámetros cinéticos son resumidas en la tabla 5.4. En esta tabla $(1-X_c)^{1.2}$ es la cantidad de carbón sin reaccionar y el exponente empirico 1.2 toma en cuenta las cantidades del cambio en la superficie reactiva disponible durante las reacciones (Dutta y col., 1977, Di Blasi y col., 1999). La densidad de la fase gas esta dada por la ley de los gases ideales y la densidad de la humedad es calculada como función de la temperatura. Dependiendo del grado de volatilización, la densidad de la fase sólida cambia desde uno para la madera hasta el char incluyendo la ceniza. La entalpía y la capacidad calorífica de la fase gas dependen de la temperatura y composición de la fase gas. La capacidad calorífica de las partículas es un promedio de madera, humedad, y ceniza y cambia de acuerdo al consumo de la partícula.

Tabla 5.4 Expresión de rapidez para reacciones de gasificación y combustión.

Di Blasi y col., (1999)

$$r_5 = 1.5 \times 10^6 \cdot \exp\left(\frac{-13,078}{T_{par}}\right) \cdot p_{O_2} \cdot (1 - X_c)^{1.2} \quad (1/s)$$

Monson y col., (1995)

$$\eta = 3 \times 10^8 \cdot \exp\left(\frac{-30,178}{T_{par}}\right)$$

Biggs and Agarwal (1997)

$$r_6 = 4,364 \times \exp\left(\frac{-29,844}{T_{par}}\right) \cdot c_{CO_2} \quad (\text{mol/m}^2/\text{s})$$

Mülhen y col., (1985)

$$r_7 = \frac{k_7 \cdot p_{H_2O}}{1 + k_8 \cdot p_{H_2O} + k_9 \cdot p_{H_2}} \quad (1/s)$$

$$r_7 = 4.39 \times 10^3 \cdot \exp\left(\frac{-18,522}{T_{par}}\right) \quad (1/\text{bar}/\text{s})$$

$$r_8 = 1.11 \times 10^1 \cdot \exp\left(\frac{-3,548}{T_{par}}\right) \quad (1/\text{bar})$$

$$r_9 = 1.53 \times 10^{-9} \cdot \exp\left(\frac{+25,161}{T_{par}}\right) \quad (1/\text{bar})$$

Las propiedades en el modelo comprenden los parámetros de Ergun y Darcy, coeficientes de transferencia de masa/calor, conducción, difusión. Los parámetros de Ergun son dados como una función de la geometría de la partícula, viscosidad del gas y porosidad del lecho. La permeabilidad de las partículas incrementa linealmente con el grado de devolatilización. Los coeficientes de difusión son basados en coeficientes de difusión binaria que son adaptados por la simplificación de Wilke para mezclas de gases multicomponentes. Dentro del lecho empacado, un coeficiente de difusión efectivo es aplicado e incorpora efectos de transporte dispersivo. La dispersión se debe a la turbulencia y retromezclado, y depende de la velocidad de flujo, tamaño de partícula y porosidad del lecho. Dentro de las partículas, un coeficiente de difusión efectiva para la partícula es usado donde para la tortuosidad de la partícula y la porosidad son tomadas en cuenta. La conductividad calorífica de las partículas de madera es calculada como una función de la porosidad de la partícula, y contenido de humedad por un medio aritmético de la conductividad calorífica.

Tabla 5.5 Propiedades físicas del combustible en el lecho

Densidad de la humedad	ρ_l	Verien Deutscher Ingenieure (1991)
Densidad del sólido	ρ_s	Simpson y Ten Wolde (1999)
Capacidad calorífica, entalpía del gas	$c_{p,g}, h_g$	Barin (1985)
Capacidad calorífica de la humedad	$c_{p,l}$	Verien Deutscher Ingenieure (1991)
Capacidad calorífica de la madera seca	$c_{p,s}$	Richardson (1993)
Parámetros de Ergun	A_E, B_E	Verien Deutscher Ingenieure (1991)
Permeabilidad	C_D	Siau (1984)
Coefficiente de difusión binaria	$D_{i,j,bin}$	Fuller et al. (1966)
Coefficiente de difusión en la mezcla	$D_{i,j}$	Taylor y Krishna (1993)
Efecto del coeficiente difusión en el lecho	$D_{eff,bed}$	Tsotsas y Schlünder (1988)
Efecto del coeficiente de difusión en la partícula	$D_{eff,par}$	Szekely et al. (1976)
Conductividad del calor en el gas	λ_g	Verien Deutscher Ingenieure (1991)
Conductividad de calor en la humedad	λ_l	Verien Deutscher Ingenieure (1991)
Conductividad de calor en el lecho	$\lambda_{eff,bed}$	Vortmeyer (1980)
Conductividad de calor en la partícula	$\lambda_{eff,par}$	Siau (1980)
Transferencia de masa y calor en el lecho	$\alpha_{bed}, \beta_{bed}$	Winterberg et al. (1999)
Transferencia de masa y calor en la partícula	$\alpha_{par}, \beta_{par}$	Verien Deutscher Ingenieure (1991)

5.5 Modelos De Combustión

Numerosos procesos de interés en ingeniería implican la reacción química de especies en el seno de un fluido. El modelado de la combustión turbulenta es de central importancia y esta considerado como uno de los más complicados y cambiantes problemas conocidos en las ciencias físicas; ya que además agrega la dificultad de considerar la interacción entre la cinética química y la turbulencia, aspecto que actualmente es motivo de una intensa actividad investigadora, y que esta lejos de ser elucidado (Fueyo, 1996). En esta sección se presentan las técnicas empleadas en el presente documento y que se utilizan comúnmente para modelar la combustión y tratar de representar el fenómeno.

5.5.1 Modelo De Arrhenius

Una primera clase de modelos de combustión turbulenta son los de la aproximación de Arrhenius. Este modelo esta basado en la cinética química mediante velocidades de reacción finitas y asume que la turbulencia no juega ningún rol en la combustión. Aquí, el término de producción está evaluado a partir de una forma típica de Arrhenius (5.22)

$$k_{Ar} = -A[X_i]^a[X_j]^b[X_k]^c e^{\frac{-E}{RT}} \quad (5.22)$$

Donde:

$[X]_{i,j,k}$ → son las concentraciones molares de las especies participantes;
 R, T → constante universal de los gases y temperatura
 A, a, b, c, E → son constantes empíricas.

5.5.2 Modelo De Eddy Break Up (EBU)

El modelo EBU propuesto por Spalding [1976] se basa en la idea de que la química es más rápida que el mezclado es decir, la velocidad de reacción media se modela considerando que la cinética química no juega un rol explícito (a diferencia del modelo de Arrhenius en donde la turbulencia es la que no juega un papel) y esta está dada en términos de tiempo de turbulencia típico y por la fluctuación local media cuadrática del combustible (ecuación 5.23)

$$k_{EBU} = C_{EBU} Y_k^{rms} \rho \frac{\epsilon}{k} \quad (5.23)$$

Donde C_{EBU} es una constante empírica y Y_k^{rms} es el valor cuadrático medio (rms) de las fluctuaciones locales en las especies k . Como una primera aproximación, el valor es obtenido como:

$$Y_k^{rms} = \min \{ Y_k, \alpha_k Y_{O_2} \} \quad (5.24)$$

Donde α_k es la fracción másica máxima de las especies k que son capaces de reaccionar con el oxígeno local.

5.5.3 Modelo Del Concepto De Disipación Turbulenta (EDC)

Este modelo es una combinación de las aproximaciones de Arrhenius y de Eddy Break Up. En el modelo de combustión turbulenta a menudo se asume que:

- ❖ La turbulencia no juega un papel (Modelo Arrhenius); o que,
- ❖ La cinética química no juega un rol explícito (Modelo Eddy Break Up)

Sin embargo, en ocasiones la validez de asumir exclusivamente una u otra condición puede no ser muy representativa del sistema. Una solución intermedia es el modelo EDC, aunque al ser combinación de los modelos anteriores, posee parte de las limitaciones anteriormente descritas. En esta aproximación la velocidad de reacción química se modela limitándose por el más pequeño de los valores de las ecuaciones (5.23) y (5.24):

$$k_{BDC} = \min \{ k_{Ar}, k_{EBU} \} \quad (5.25)$$

5.6 Componentes De La Partícula De Combustible

La composición de la partícula se representa en todo momento mediante la solución en todo el dominio de ecuaciones como la (5.3) para las fracciones másicas de los componentes de la partícula ($Y_2^{carbonizado}$, $Y_2^{carbón\ crudo}$, Y_2^{agua}). La fracción másica de la ceniza se calcula mediante la resta de éstas a la unidad de acuerdo a la siguiente relación:

$$Y_2^{ceniza} = 1 - Y_2^{carbonizado} - Y_2^{carbón\ crudo} - Y_2^{agua} \quad (5.26)$$

5.7 Tamaño De La Partícula De Combustible

Las partículas de madera cambian tanto química como físicamente a medida que va pasando por los procesos anteriormente descritos (ver capítulo 3). El cálculo del tamaño de partícula es uno de los principales ingredientes en la simulación de un sistema bifásico. Específicamente para el caso de la combustión o gasificación de madera, el tamaño de la partícula juega un rol importante en los procesos de interfase gas-sólido que controlan las reacciones en el carbón tales como el arrastre de las partículas y la dispersión turbulenta, el calentamiento y pirólisis y las reacciones heterogéneas. El tamaño de las partículas y la presencia de cenizas también tienen una clara influencia en la transferencia de calor radioactiva dentro de los equipos (Fueyo y col., 1996)

El modelado en la partícula en esta tesis se lleva a cabo mediante un método "shadow" creado por Spalding (1982). En este último, el tamaño de la partícula se calcula resolviendo para la fracción volumétrica de una fase adicional que se comporta como la fase de la partícula, pero no participa en la transferencia de masa. A diferencia del método original, la presente técnica permite seleccionar los procesos de transferencia de masa que contribuirán a un cambio de tamaño.

En este método, se usa un escalar adicional Φ de la fase 2 (sólida) que representa el inverso de la fracción de la fase sólida (es decir, r_2) calculando a través de la ecuación de transporte euleriana:

$$\frac{\partial(\rho_2 r_2 \Phi_s)}{\partial t} + \nabla(\rho_2 r_2 \Phi_s V_2) - \nabla(\Gamma_s \nabla r_2) = S_s \quad (5.27)$$

La ecuación (5.27) incluye todas las fuentes asociadas a la fase 2 debido a todos los procesos que no contribuyen a una disminución de tamaño de la partícula. En esta tesis, se considera que el único proceso de transferencia de masa que contribuye a una disminución en tamaño es dado por las reacciones heterogéneas (reacciones de superficie). Lo racional de este método es que el producto $r_2 \Phi_s$ es r_s la fracción volumétrica de la fase "Shadow" de método de Spalding.

Una vez que el escalar Φ_s se calcula, el diámetro promedio local D puede ser determinado de acuerdo a la expresión:

$$D = D_i \Phi_s^{\frac{1}{3}} \quad (5.28)$$

Donde D_i es el diámetro promedio inicial de la partícula en la entrada

5.8 Transferencia De Calor Entre Gas Y Partículas

Para la transferencia de calor entre la fase gaseosa y la fase sólida se usa un modelo basado en el número de Nusselt. El término fuente para las ecuaciones de las entalpías h_1 y h_2 es por unidad de volumen:

$$q_{j \rightarrow i} = 6 \frac{r_2}{D^2} \rho_1 Nu k_g (T_j - T_i) \quad (5.29)$$

Donde k_g es la conductividad térmica del gas y el número de Nusselt se calcula como (Fueyo y Gambon 1997):

$$Nu = 2.0 + 0.65 Re^{0.3} Pr^{0.333} \quad (5.30)$$

5.9 Arrastre En La Interfase

La fuerza de arrastre entre el gas y las partículas es modelada como una fuerza que actúa sobre partículas esféricas (la esfericidad es igual a uno). El algoritmo es tomado del modelo PCGC (pulverizad coal gasification or combustión) desarrollado por la universidad de Brigham Young (Smith y col., 1981; Soot y col., 1988; Brewster y col., 1993) La densidad del número de partículas, como función de la fracción volumétrica y del diámetro de la partícula es $\frac{6}{\pi} \frac{r_2}{D^3}$, y por lo tanto la fuerza total de arrastre (por unidad de volumen y velocidad de deslizamiento) es:

$$f_{i \rightarrow j} = f_{j \rightarrow i} = \frac{3r_2}{4D} \rho_1 C_D |V_1 - V_2| \quad (5.31)$$

Donde C_D es el coeficiente de arrastre definido como:

$$C_D = \frac{24(1 + 0.15 Re^{0.687})}{Re} \quad (5.32)$$

5.10 Modelado De La Turbulencia

A pesar de su importancia, la turbulencia es un fenómeno que esta todavía lejos de estar completamente caracterizado.

Dentro de las posibilidades de simulación de flujos turbulentos, están los llamados "modelos de turbulencia", que básicamente consisten en promediar las fluctuaciones turbulentas y resolver ecuaciones para los valores medios de las propiedades del fluido. Los modelos más empleados en la ingeniería son los modelos de viscosidad turbulenta, que se basan en una analogía entre el flujo turbulento (macroscópico) y el flujo molecular (microscópico). Por ejemplo, del mismo modo que el nivel molecular el flujo de calor es proporcional al gradiente de temperatura, el flujo de Φ se supone proporcional al gradiente de Φ . El factor de proporcionalidad es la viscosidad turbulenta, la cual, es el objeto de los modelos de turbulencia.

El modelo más popular de este tipo, es el modelo $k-\varepsilon$ (empleado en este trabajo), y en donde la viscosidad turbulenta se define como:

$$\nu_T = C\mu \frac{\bar{k}^2}{\bar{\varepsilon}} \quad (5.33)$$

Donde C es una constante determinada experimentalmente y los valores de \bar{k} y de $\bar{\varepsilon}$ se calculan a partir de ecuaciones de transporte (Jones & Launder, 1972; Rodi, 1984).

La ecuación para la energía cinética turbulenta, \bar{k} es:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{k}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \bar{u}_j \bar{k}) = \rho(P_k - \bar{\varepsilon}) + \frac{\partial}{\partial_j} \left(\rho \frac{\nu_T}{\sigma_k} \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_j} \right) \quad (5.34)$$

Donde:

$$P_k = \nu_T \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{3}{2} \left(k + \nu_T \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \quad (5.35)$$

La ecuación para la disipación de la energía cinética turbulenta, $\bar{\varepsilon}$ es:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{\varepsilon}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \bar{u}_j \bar{\varepsilon}) = \rho \frac{\bar{\varepsilon}}{\bar{k}} (C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} \bar{\varepsilon}) + \frac{\partial}{\partial_j} \left(\rho \frac{\nu_T}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \bar{\varepsilon}}{\partial x_j} \right) \quad (5.36)$$

Las constantes de las ecuaciones 5.34, 5.35, y 5.36 se muestran en el cuadro 5.1

Cuadro 5.1 constantes del modelo $k-\varepsilon$

C_μ	σ_k	σ_ε	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$
0.09	1.0	1.314	1.44	1.92

Las variables k y ε pertenecen a la fase 1 (gaseosa) y la generación es siempre calculada a partir de gradientes de velocidad en el gas. En este caso, la presencia de partículas también tiene un efecto en el campo de la turbulencia, el cual, no está incorporado en el modelo $k-\varepsilon$. Sin embargo, este efecto puede ser introducido mediante términos de fuentes adicionales.

5.11 Dispersión Turbulenta De Partículas

En ambientes de alta turbulencia, las partículas son dispersas por las fluctuaciones turbulentas del flujo. Matemáticamente, esta dispersión es el resultado de las correlaciones $\overline{r_2 V_2}$. En el presente modelo se emplea la hipótesis de un gradiente de difusión, con lo que:

$$\overline{r_2 V_2} = -\frac{\nu_T}{\sigma_s} \nabla r_2 \quad (5.37)$$

Donde la aproximación de Rizk y Elgobashi (1989) es usada para σ_s :

$$\sigma_s = \left[1 + \frac{3}{2} 0.85 \frac{|V_1 - V_2|^2}{k} \right]^{0.5} \quad (5.38)$$

Donde k es la energía cinética turbulenta.

5.12 Componentes De La Fase Gaseosa

La fase gaseosa se modela como una mezcla de ocho especies químicas:

- ◇ Oxígeno ($y_1^{O_2}$);
- ◇ Vapor de agua ($y_1^{H_2O}$);
- ◇ Monóxido de carbono (y_1^{CO});
- ◇ Dióxido de carbono ($y_1^{CO_2}$);
- ◇ Hidrógeno ($y_1^{H_2}$);
- ◇ Un hidrocarburo genérico ($y_1^{CH_x}$);
- ◇ Nitrógeno ($y_1^{N_2}$);
- ◇ Alquitrán

Ecuaciones de transporte como la (5.3) son resueltas para todas las especies excepto para el nitrógeno ($y_1^{N_2}$) el cual es determinado de la condición de que la suma de todas las fracciones másicas es igual a uno. Como se puede observar, el modelo no incorpora reacciones para el azufre del combustible. Este elemento se considera como "inerte" y pasa directamente a las cenizas.

5.13 Radiación Térmica

La radiación térmica es la transmisión de energía a través de ondas electromagnéticas en el rango de longitudes de onda de 0.1 a 100 micras (Fueyo, 1996). La radiación emitida (y el calor transferido por radiación) es proporcional a la temperatura del cuerpo a la cuarta potencia, por lo tanto, es un fenómeno muy importante a altas temperaturas y poco relevante a bajas temperaturas. La radiación esta presente en muchos sistemas de interés en ingeniería, y en muchos casos, es el principal modo de transferencia de calor.

La ecuación de la intensidad radiante I es una compleja expresión integro-diferencial que se muestra en la ecuación (5.39) en una forma integrada espectralmente (sin dependencia de la longitud de onda).

$$\frac{dI}{ds} = \underbrace{-dI}_A \quad \underbrace{-sI}_{\text{Emitida DD}} \quad + \quad \underbrace{a \frac{\sigma T^4}{\pi}}_E \quad \underbrace{\int p(\Omega, \Omega') d\Omega'}_{\text{Dispersión recogida DR}} \quad (5.39)$$

Donde:

I = intensidad radiante

a = se asume $a = \epsilon = \alpha$:

ϵ = emisividad (relación entre la energía emitida por un cuerpo y la que emitiría un cuerpo negro);

α = absorptividad (fracción de la energía radiante incidente que es absorbida);

s = Coeficiente de dispersión (scattering)

Ω, Ω' = direcciones de la dispersión de la radiación

σ = constante de Stefan-Boltzmann.

El significado de la ecuación es más evidente por referencia a la figura 5.4, que expresa las pérdidas y ganancias (por unidad de longitud) en intensidad I que sufre un rayo que viaja en una dirección determinada al atravesar un volumen de fluido.

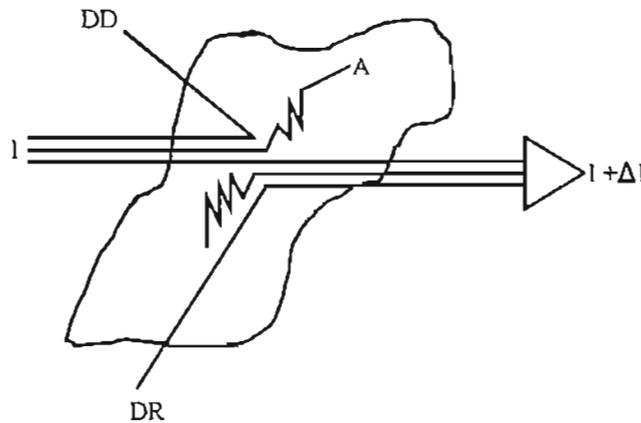


Fig. 5.4 Pérdidas y ganancias de la ecuación de intensidad de radiación I

Las pérdidas son de dos tipos: 1) una fracción de I , dada por la absorptividad, que es absorbida por el medio (componente A); y 2) una fracción de la intensidad que es dispersada por el medio en otras direcciones (componente DD). Las ganancias en intensidad son debidas a otros dos factores; 1) la emisión de radiación por el volumen del fluido que tiene lugar en la dirección del rayo que se considera (contribución E); y 2) la radiación que se recoge en la dirección del rayo proveniente de la dispersión (contribución DR). Esta última tiene la forma integral de la probabilidad de que un rayo que viaje en dirección Ω' disperse radiación de intensidad en I en la dirección Ω considerada.

En la ecuación (5.39), la dirección en la que viaja el rayo es una variable independiente que a su vez está determinada por dos cosenos directores. La solución de esta ecuación, incluso obviando el término integral, es muy compleja. Se han desarrollado varios métodos computacionales, entre los que se encuentran los métodos estocásticos de Montecarlo, el método de transferencia discreta y los métodos de flujo (Docherry & Fairweather, 1992). Esta última opción es la empleada en esta tesis.

5.14 Otras Ecuaciones Utilizadas

Las ecuaciones anteriores deben ser complementadas con ecuaciones de estado que relacionen presión, la densidad, la temperatura y las capacidades térmicas específicas.

Para la densidad de la fase gaseosa, se supone una mezcla de gases ideales, con lo cual

$$\rho = \frac{p}{RT \sum_{i=1}^n \frac{y_i}{W_i}} \quad (5.40)$$

Donde:

P = presión

R = constante universal de los gases

T = Temperatura

y_i y W_i = fracciones másicas y pesos moleculares de las especies k .

La temperatura del gas se determina a partir de la definición de la entalpía de la mezcla

$$h = \sum_{i=1}^n y_i h_i \quad (5.41)$$

Donde h es la entalpía de cada especie de la mezcla. La entalpía de la especie k es la suma de las entalpías térmica y química

$$h = \int_{T_0}^T C_{p,i} dt + \Delta h_{f,i} \quad (5.42)$$

Donde:

T_0 = temperatura de referencia

$C_{p,i}$ = calor específico a presión constante

$\Delta h_{f,i}$ = entalpía de formación de la especie, definida como el calor liberado cuando un kilomol de sustancia es formado a partir de sus elementos en el estado estándar.

Para el madera, tanto la densidad como el calor específico se consideran constantes; y la temperatura se determina igualmente a partir de la entalpía.

Implementación Del Modelo Para Su Resolución En CFD PHOENICS

Este capítulo presenta el método de solución de las ecuaciones que componen el modelo del flujo reactivo presentadas en el capítulo 5 para así obtener la información sobre campos de presiones, velocidades, temperaturas, especies, etc. Como se observó en el capítulo anterior, las ecuaciones que describen el fenómeno son complejas y hasta la fecha no hay solución analítica para la gran mayoría de éstas; motivo por el cual, es necesario recurrir a los métodos numéricos para encontrar soluciones óptimas

La Dinámica de Fluidos Computacional (conocida como CFD, por sus siglas en inglés) es la disciplina que se encarga de proporcionar soluciones a los problemas de la Mecánica de Fluidos por medio de algoritmos numéricos resueltos a través de una computadora. El empleo de las técnicas de CFD pueden proporcionar información sobre los diversos procesos que se llevan a cabo en equipos industriales mediante la simulación de su comportamiento, por lo cual, constituye una valiosa herramienta tanto para diseñadores como para operadores. Desafortunadamente, en muchas ocasiones su uso es escaso debido a la complejidad de los procesos físicos y la disparidad de escalas presentes en los equipos. Los anteriores aspectos requieren la utilización de modelos matemáticos de alto grado de dificultad y elevadas capacidades y tiempos de cómputo.

En esta tesis se utiliza el método numérico de volúmenes finitos o integración de volúmenes de control para dar solución a las expresiones que caracterizan la aerodinámica del flujo. El código CFD PHOENICS es la plataforma en la cual se integran los modelos de combustión con las ecuaciones de transporte y de estado.

6.1 La Dinámica De Fluidos Computacional (CFD)

Entre las ramas de la Mecánica de Fluidos, la Dinámica de Fluidos Computacional es quizá la que ha experimentado, comparativamente, un mayor desarrollo durante los últimos años. Desde su aparición en los años 60 y su desarrollo en centros especializados en los años 70 y 80, la simulación en computadoras del flujo de fluidos, la transferencia de calor y reacciones químicas está encontrando rápidamente su camino en un número creciente de departamentos de investigación y desarrollo de empresas de ingeniería. A ello, contribuyen sin duda el constante incremento de la relación potencia-precio de las computadoras y la aparición de métodos sofisticados de simulación, cada vez más precisos, a menudo atractiva y profesionalmente empaquetados en forma de códigos comerciales. Por tanto, la CFD se está convirtiendo rápidamente en un componente indispensable dentro de la gama de utilerías del ingeniero o investigador interesado en las simulaciones.

Los códigos *CFD* están estructurados en torno a algoritmos numéricos que pueden abordar problemas de fluidos. A fin de proporcionar acceso fácil a sus poderes de resolución, todos los paquetes *CFD* comerciales incluyen interfases de usuario sofisticadas para introducir los parámetros del problema y examinar los resultados.

De manera general podemos decir que todos los códigos *CFD* tienen tres elementos principales:

- Un pre-procesador,
- Un procesador (o resolvidor de las ecuaciones) y,
- Un post-procesador

En el pre-procesador, las actividades del usuario involucran principalmente el planteamiento del problema a ser modelado; la definición de la geometría de la región de interés (dominio computacional); la generación de la malla, es decir, la subdivisión del dominio en un número pequeño de subdominios; la definición de las propiedades del fluido; y las condiciones de frontera del problema.

El procesador es el módulo que se encarga de resolver las ecuaciones que describen el fenómeno. En general, se tienen cuatro corrientes de solución numérica: diferencias finitas, volumen finito, elemento finito y los métodos espectrales.

El post-procesador generalmente consta de un programa o conjunto de programas que retoma los valores de las variables resueltas, manipula los datos y representa el campo de variables gráficamente.

6.2 Código CFD PHOENICS

6.2.1 Descripción General

PHOENICS es un código computacional el cual simula flujos de fluidos, transferencia de calor, reacciones químicas y fenómenos relacionados.

Tales fenómenos ocurren en equipos de ingeniería, en el medioambiente, y en organismos vivos. Las simulaciones por PHOENICS además facilitan las predicciones de diseño de equipo, del comportamiento del medio ambiente y del funcionamiento de órganos humanos.

Las simulaciones hechas en PHOENICS pueden ser establecidas a diferentes escalas. Por ejemplo, un intercambiador de calor industrial puede ser representado completamente, o podemos poner atención a un solo banco de tubos dentro de este, o los detalles finos del flujo contenido en un solo tubo pueden ser simulados.

Las simulaciones PHOENICS son deducciones matemáticas a partir de los principios físicos establecidos. Ello sin embargo inevitablemente involucra la creación de una representación completa de ¿que toma lugar dentro de lo simulado?. Como una consecuencia, PHOENICS puede proporcionar toda la información para el diseño de ingeniería, una comprensiva percepción la cual ayuda a la imaginación y promueve el entendimiento.

El uso de PHOENICS puede beneficiar entonces a:

- ❖ Ingenieros, deseando diseñar más eficientemente equipos y procesos;

- ❖ Científicos ambientales, para predecir el flujo de calor, aire, agua y contaminantes en la atmósfera, hidrosfera y geósfera;
- ❖ Investigación médica donde es necesario comprender mejor los complejos sistemas hidráulicos-térmicos y flujos químicos del cuerpo humano; y
- ❖ Esto unido a la educación, ya sea maestro o alumnos, en las relevantes ramas de la ciencia aplicada.

Ejemplos De Simulaciones De Flujo De Fluidos

Equipo de ingeniería

- ❖ PHOENICS puede ser usado para diseñar un intercambiador de calor. Comparado con los programas de computadora convencionales para este propósito, PHOENICS hace una más completa simulación, y utiliza menos entradas empíricas o suposiciones idealizadas.
- ❖ PHOENICS puede predecir la aerodinámica de un vehículo. Esto se hace por simulación del flujo alrededor, bajo y dentro del vehículo, y para proporcionar información acerca de las velocidades y presiones con la que se encuentra en todos los puntos en estas inmediaciones. Comparado con un túnel de viento para tales predicciones, PHOENICS es económico y más rápido; y permite la inclusión de factores, tales como superficies de rodamiento y vehículos pasando, que son difíciles de representar experimentalmente.
- ❖ PHOENICS puede simular fenómenos de conducción de calor en estructuras. En comparación con los métodos de predicción analítica, PHOENICS tiene la ventaja de poder calcularlos para geometrías irregulares así como la dependencia de temperatura de propiedades térmicas. En comparación con los métodos de volúmenes finitos, para los cuales los mismos reclamos pueden ser hechos, PHOENICS usa un almacenamiento en computadora más económico; esto es además más competitivo en problemas tridimensionales, o cuando un gran número de puntos de malla son necesitados por las características intrínsecas de la geometría.
- ❖ PHOENICS puede simular fenómenos transientes en dos fases los cuales pueden ocurrir en un reactor nuclear con enfriamiento de agua presurizada. Esto puede hacerse por medio de una representación unidimensional, como es común para simulaciones del comportamiento completo; o, en el otro extremo, esto puede representar las complejidades tridimensionales de un flujo en un reactor real. Como comparación con muchos de los propósitos especiales de los programas usados por la industria nuclear, para simulaciones de este tipo, PHOENICS tiene las ventajas de expresar más realistas las representaciones de flujos en dos fases y usando algoritmos solución más eficientes; esto puede además proporcionar simulaciones detalladas y precisas a bajo costo. Es también más flexible, permitiendo métodos no convencionales de representación de los componentes del proceso a ser acomodados.

El ambiente

- ❖ PHOENICS puede ser utilizado para predecir la descarga de contaminantes por una planta química a la atmósfera o algún río, representando el fenómeno con varios grados de sofisticación y realismo. El usuario tiene el control acerca de que suposiciones son hechas y que limitaciones serán impuestas, muchos de los fluidos en el ambiente son multifásicos y por supuesto pueden ser simulados en PHOENICS, la turbulencia en la atmósfera difiere de los pequeños equipos por razón de la gran influencia gravitacional y PHOENICS ha sido usado para trabajar fuera de las implicaciones de muchos modelos de turbulencia.

Organismos vivos

- ❖ PHOENICS puede ser usado para la simulación de flujos de sangre en venas y arterias. Algunos desordenes de el sistema circulatorio son asociados con fenómenos de flujo de fluidos. Otros efectos de flujo en los fluidos cerebro-medula espinal, y orina; practicas medicas muestran que válvulas artificiales y otros dispositivos son introducidos en el cuerpo como remedio. La eficiencia de estos puede ser predecida, y su diseño y localización puede ser optimizado, si PHOENICS es usado para simular los fenómenos de flujo dentro de ellos, y dentro de los ductos biológicos.
- ❖ La extracción de humedad y nutrientes que hacen las plantas de los alrededores, y también la descarga de gases, polen y semillas. PHOENICS puede ser utilizado para la simulación de este interactivo intercambio de materia, con resultados los cuales pueden ser prácticamente ventajosos.

Que No Hace PHOENICS

PHOENICS tiene limitaciones así como capacidades

Primero, el realismo de estas simulaciones no puede exceder las suposiciones en las cuales están basadas. Cuando un flujo turbulento es modelado por ejemplo, PHOENICS debe ser instruido para usar uno u otro modelo de turbulencia los cuales expresan aproximadamente las leyes físicas de tales flujos: estas predicciones serán afectadas cuando el modelo seleccionado no se aproxime a la realidad.

Segundo, una simulación producida por PHOENICS tiene una precisión la cual depende sobre la cantidad de tiempo de cómputo utilizado que es directamente proporcional a que tan fina sea la malla considerada. Sí un fenómeno complejo es simulado por una malla conteniendo solamente pocas celdas computacionales, el efecto será como fotografiar un objeto complicado con un mal equipo quedando esta fotografía borrosa.

6.3 Componentes De PHOENICS

PHOENICS consiste de dos códigos de computación esenciales y cuatro auxiliares.

Los esenciales son un pre-procesador llamado SATELLITE y un procesador llamado EARTH. Los auxiliares son post-procesadores llamados PHOTON, AUTO PLOT, PINTO, y un programa separado de instrucción al usuario llamado GUIDE. Una breve descripción de sus funciones se dará a continuación.

SATELLITE es un interprete; desde las instrucciones proporcionadas por el usuario crea un archivo de datos conteniendo instrucciones las cuales, EARTH puede entender y obedecer.

SATELLITE puede recibir estas instrucciones del usuario en diferentes maneras, incluyendo:

- ❖ Leyendo un archivo instrucción llamado Q1, el cual ha sido proporcionado por el usuario;
- ❖ Cargando una instrucción de un archivo de la librería de entrada PHOENICS;
- ❖ Recibiendo Instrucción por medio del teclado de entrada durante una sesión interactiva con el usuario, quien es asistido como necesidad por una copia del archivo HELP; y
- ❖ Alguna combinación de los puntos anteriores.

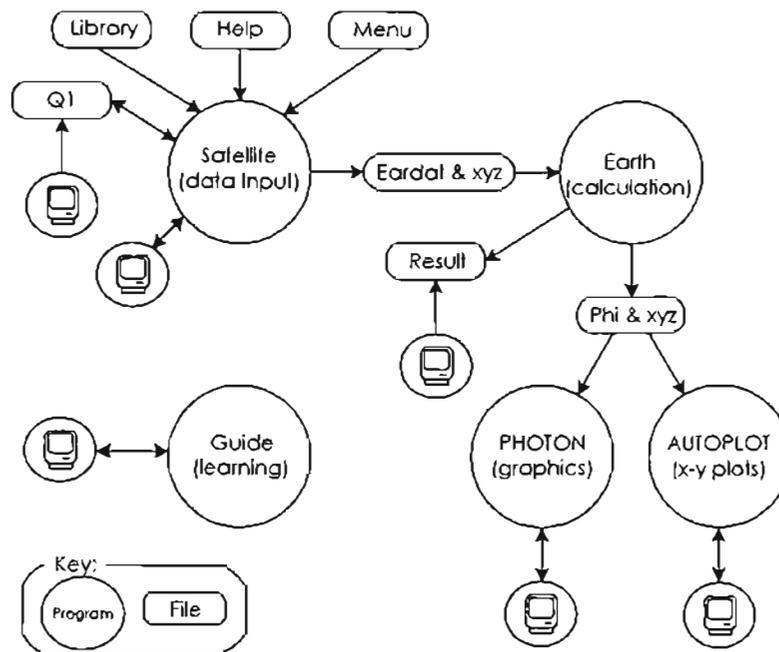
SATELLITE también posee una subrutina FORTRAN llamada SATLIT, en la cual los arreglos de datos pueden ser insertados por el usuario, y otra llamada MAIN la cual permite hacer cambios en DIMENSION. La re-compilación y re-organización de SATELLITE con tales cambios es efectiva.

EARTH contiene el principal software de simulación de flujos, este entonces incorpora secuencias de códigos los cuales representan las leyes relevantes de aplicación física a elementos de material distribuidos en el tiempo y espacio.

EARTH lee los datos del archivo proporcionado por SATELLITE y ejecuta la correspondiente computación, este entonces produce un archivo de salida llamado RESULT, el cual puede leer el usuario, y también (cuando es instruido) un archivo de resultados llamado PHIDA, el cual puede ser leído por PHOTON, AUTO PLOT o PINTO, o por EARTH cuando una nueva corrida es iniciada.

La relación entre EARTH a SATELLITE y otros componentes de PHOENICS son ilustrados en la figura 6.1.

Figura 6.1 Componentes de CFD PHOENICS



Fuente: Manual CFD PHOENICS

Como SATELLITE, EARTH procesa subrutinas FORTRAN las cuales son accesibles para el usuario. Ellas son representadas sobre los diagramas por las palabras MAIN y GROUND. MAIN es utilizada únicamente para hacer cambios en declaraciones en DIMENSION; pero GROUND, el cual esta colocado en "ground -station" es una colección de subrutinas, puede ser usado para una variedad de arreglos de datos y propósitos característicos adicionales.

La principal función del GROUND es proporcionar las condiciones a la frontera necesarias, fuentes, propiedades del fluido y características fuera de control, que no son contenidas dentro de EARTH, Si el usuario tiene necesidades especiales no satisfechas por las subrutinas estándar del GROUND ya contenidas, el puede adjuntar subrutinas FORTRAN e insertar secuencias de código, además la re-compilación y re-organización serán ejecutadas.

El código PHOTON es un programa interactivo el cual levanta el archivo PHIDA escrito por EARTH y entonces, en respuesta a las instrucciones dadas por el usuario a través del teclado, representa la malla de computación y dibuja el flujo gráficamente sobre la pantalla.

AUTO PLOT es un programa para producir gráficas interactivas, produce por ejemplo, plots (trazos) etiquetados de datos numéricos en forma de gráficas mostrando la variación de una o más variables contra otra variable, AUTO PLOT es un programa que dispone de todos los servicios, el cual puede ser usado para generar plots de algún dato numérico.

PINTO es un código autónomo el cual hace posible transferir datos PHOENICS de una malla a otras de diferente precisión.

6.4 Cómo PHOENICS Describe Los Fenómenos

6.4.1 Variables Dependientes

PHOENICS describe un fenómeno involucrando el flujo de calor o material en términos de distribuciones en el espacio y tiempo, de temperaturas, velocidades, presiones, concentraciones y otras cantidades medidas físicamente. Estas son también llamadas "variables dependientes".

Estas distribuciones involucran atribuyendo valores numéricos para la temperatura, velocidades, etc., en cada selección ordenada de localizaciones, llamadas "nodos" o "puntos de malla"; y, si el proceso es dependiente del tiempo, tales distribuciones son calculadas para cada instante de tiempo.

PHOENICS puede manipular ya sea una o dos "fases" coexistentes; distinguiendo los fluidos. El flujo del aire sólo es un flujo de una sola fase; también lo es el agua sola. Cuando sin embargo una burbuja, mezcla de aire y agua es la cuestión, o que el aire mezclado con gotitas de agua, entonces el flujo es llamado bifásico, y el aire y el agua son las llamadas fases.

EARTH es equipado para resolver más de 50 variables dependientes y tantas como muchas más cuidadosamente el usuario especifique. Ciertas de estas variables dependientes pueden ser referidas por nombre. Estos son:

Tabla 6.1 Nombres asignados a la variables en CFD PHOENICS

Nombre	Variable
P1	La presión de ambas fases;
U1	La velocidad en la dirección x de la primera fase;
U2	La velocidad en la dirección x de la segunda fase;
V1	La velocidad en la dirección y de la primera fase;
V2	La velocidad en la dirección y de la segunda fase;
W1	La velocidad en la dirección z de la primera fase;
W2	La velocidad en la dirección z de la segunda fase;
R1	La fracción volumétrica de la primera fase;
R2	La fracción volumétrica de la segunda fase;
Rs	La fracción volumétrica de la sombra (shadow) de la segunda fase;
KE	La energía cinética turbulenta de una de las fases (la primera fase por default);
EP	La rapidez de disipación de la energía cinética turbulenta para la misma fase;
H1	La entalpía específica de la primer fase;
H2	La entalpía específica de la segunda fase;
C1	Variable de concentración para la primera fase;
C2	Variable de concentración para la segunda fase;
C3	Otra variable de concentración para la primera fase;
C4	Otra variable de concentración para la segunda fase;
...	Y así consecutivamente, hasta
C35	Otra variable de concentración para la primera fase.

Fuente: Manual CFD PHOENICS

Sin embargo, las variables C1 a C35 no necesitan ser concentraciones; el mismo usuario decide que representaran ellas.

6.4.2 Variables Independientes

En general, un fenómeno simulado por PHOENICS debe ser en cuatro dimensiones, las cuatro dimensiones son el tiempo y tres dimensiones espaciales. Que después serán llamadas, para referirnos con facilidad, Norte-Sur, Este-Oeste; y Arriba-Abajo. Específicamente.

- t Es el tiempo medido en la dirección anterior a después.
- X Es la distancia medida (o ángulo) en la dirección de oeste a este
- Y Es la distancia medida en la dirección de sur a norte; y
- Z Es la distancia medida en la dirección de abajo a arriba

6.4.3 Variables Auxiliares

Las variables auxiliares son distinguidas de las variables dependientes por ser derivadas de ecuaciones algebraicas más rápidas que de diferenciales. Ejemplos de variables auxiliares son:

- ❖ Propiedades moleculares, tal como la viscosidad laminar, difusividad, número de Prandtl, etc.;
- ❖ Propiedades termodinámicas, tales como densidad, entalpía de saturación, temperatura (si no es una variable dependiente), etc.;
- ❖ Cantidades caracterizando el estado de turbulencia, tales como la viscosidad cinemática turbulenta, la velocidad de generación, etc.;y
- ❖ Parámetros de transporte en la interfase, tales como las velocidades de evaporación y condensación, el coeficiente de fricción de la interfase y transferencia de calor, etc.

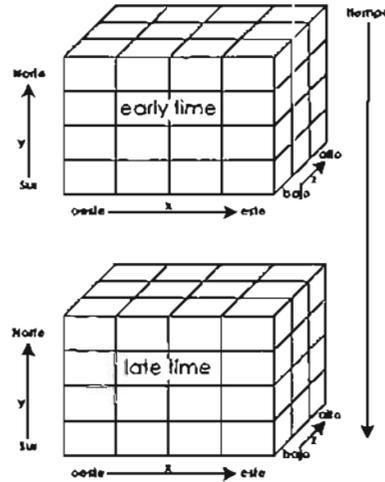
Cuando tales variables son constantes, ellas son representadas en PHOENICS como escalares. Cuando no son constantes, ellas pueden (si se desea) ser almacenadas como campo de variables por adopción para este propósito de una o más de las 50 variables dependientes almacenadas.

6.5 Discretización Del Continuo

Las localizaciones en espacio y tiempo en las que la presión y otras variables dependientes escalares son computadas en un número finito; y ellas son imaginadas para estar dentro de un arreglo de “celdas” el cual, agregado sin embargo, al dominio completo en tiempo y espacio que es considerado. El siguiente diagrama (figura 6.2) ilustra el

concepto para alguna extensión; pero no debe ser supuesto que las celdas son siempre iguales en tamaño, o en forma rectangular.

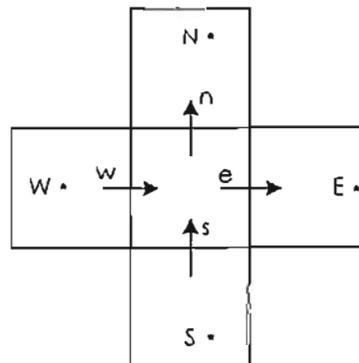
Figura 6.2 Discretización del continuo



Fuente: Manual CFD PHOENICS

Estrictamente hablando, la declaración anterior acerca de la localización de variables dependientes siendo dentro de las celdas requiere una modificación: Para PHOENICS el cómputo de valores de velocidades son localizadas sobre las paredes de la celda. El siguiente diagrama ilustra esto (Figura 6.3), una sola celda con cuatro vecinas son mostradas en una vista plana: temperatura, presiones y concentraciones son evaluadas por PHOENICS para las localizaciones como P, N, S, E, W las cuales están dentro de las celdas; pero las velocidades en dirección de oeste a este son evaluadas para la pared de la celda, localizadas como w y e; y la velocidad en dirección de sur a norte es evaluada para los puntos s y n. Un diagrama tridimensional puede mostrar en adición los puntos vecinos abajo y arriba para presiones, etc., a saber L y H; y para las velocidades en dirección de abajo a arriba podrían entonces ser representadas y señaladas con flechas en las paredes de las celdas l y h. Esta convención es llamada el arreglo "staggered-grid" (malla-espaciada).

Figura 6.3



Fuente: Manual CFD PHOENICS

Una inspección de alguna impresión fuera de PHOENICS debe permitir la anterior descripción para ser entendida. Los valores deben ser vistos para ser impresos para las coordenadas x, y, z de los centros de la celda; y los valores de las variables dependientes deben aparecer en tablas, en las cuales las locaciones son descritas por los índices IX, IY e IZ para las tres coordenadas espaciales, y por el índice ISTEP para el tiempo. En la computación de un flujo estable, ISTEP debe aparecer como 1.

PHOENICS tiene otras maneras de representar los resultados de estos cálculos. Por ejemplo, debe usarse la línea – impresión fácilmente para plots, curvas de variables dependientes contra distancia o tiempo; y esta facilidad puede también crear diagramas de contornos, representando la distribución instantánea de una variable dependiente alrededor de una sección a través del dominio de flujo, el cual es normal para una de las dimensiones espaciales. Los programas separados PHOTON y AUTOPLOT permiten realizar gráficas más elegantes y displays para ser construidas.

6.6 Las Ecuaciones De Transporte

Las ecuaciones de transporte de la mecánica de fluidos se pueden indicar mediante la ecuación general:

$$\frac{\delta(\rho\phi)}{\delta t} + \text{div}(\rho v\Phi) - \Gamma_{\phi} \text{grad}\Phi = S_{\phi} \quad (6.1)$$

Transitorio Convección Conducción Fuente

Esta afortunada circunstancia permite un tratamiento sistemático y generalizado de todos los problemas de CFD. Como puede verse, la ecuación consta de 4 términos. El primero, es el término temporal que recoge las variaciones locales en el tiempo de $\rho\phi$ y representa por lo tanto la acumulación o disminución local de esa magnitud. El segundo, es el término convectivo, y es el responsable del transporte de la propiedad ϕ (o propiamente, de $\rho\phi$) entre dos puntos próximos del dominio por medio de la velocidad del fluido. El tercer término es el difusivo, y expresa la tendencia del fluido al equilibrio mediante la destrucción de los gradientes de la propiedad ϕ . Para la cantidad de movimiento, la energía o una especie química, este término no es sino la consecuencia de las leyes de Newton, Fourier y Fick. Los tres términos hasta ahora enumerados no son suficientes para representar con la generalidad requerida todas las ecuaciones de la mecánica de fluidos. Por esta razón se introduce un término adicional, llamado "fuente" en el que se incluyen los otros términos que no estén incluidos en los primeros tres de una ecuación determinada.

De este modo, dependiendo del tipo de propiedad ϕ_i representada, la expresión general se convierte en la ecuación de conservación de dicha cantidad física. Así, se puede construir la tabla 6.2.

Finalmente, el término fuente S_{ϕ_i} representará las contribuciones a las ecuaciones de transporte tales como:

- ❖ Variación de presiones en el tiempo,
- ❖ Gradientes de presión,

- ❖ Términos de producción o destrucción de especies químicas,
- ❖ Fuerzas de gravedad o electromagnéticas,
- ❖ Fuerzas de fricción o centrífugas, etc.

Tabla 6.2 Términos más comunes de ϕ_i para la ecuación general de conservación

<i>Si ϕ_i es igual a...</i>	<i>Representa la conservación de...</i>
1	Masa
r_i	La fracción volumétrica de la fase i
$m_{i,j}$	Alguna especie en la fase i
h_i	Entalpía de la fase i
u_i, v_i, w_i	Momentum en las direcciones x, y, z de la velocidad de la fase i
y_k	Especies químicas
K, ϵ	Cantidades de turbulencia

6.7 Diagrama De Flujo Del Proceso De Solución

Los códigos CFD generalmente abordan un problema de manera similar. El proceso en general consta de seis etapas que pueden observarse en la figura 6.4. Las etapas 1 y 2 forman parte del pre-procesamiento; en éstas, se debe plantear el sistema de ecuaciones diferenciales que define nuestro problema, la geometría debe quedar perfectamente acotada y el dominio es dividido en pequeños subdominios. Las etapas 3, 4 y 5 integran la parte medular del procesamiento e involucran el método de discretización que convierte las ecuaciones diferenciales a un conjunto de ecuaciones algebraicas lineales así como el método de solución de estas últimas. Y el paso 6, es el post-procesamiento del campo calculado en las etapas posteriores y la manipulación de éste.

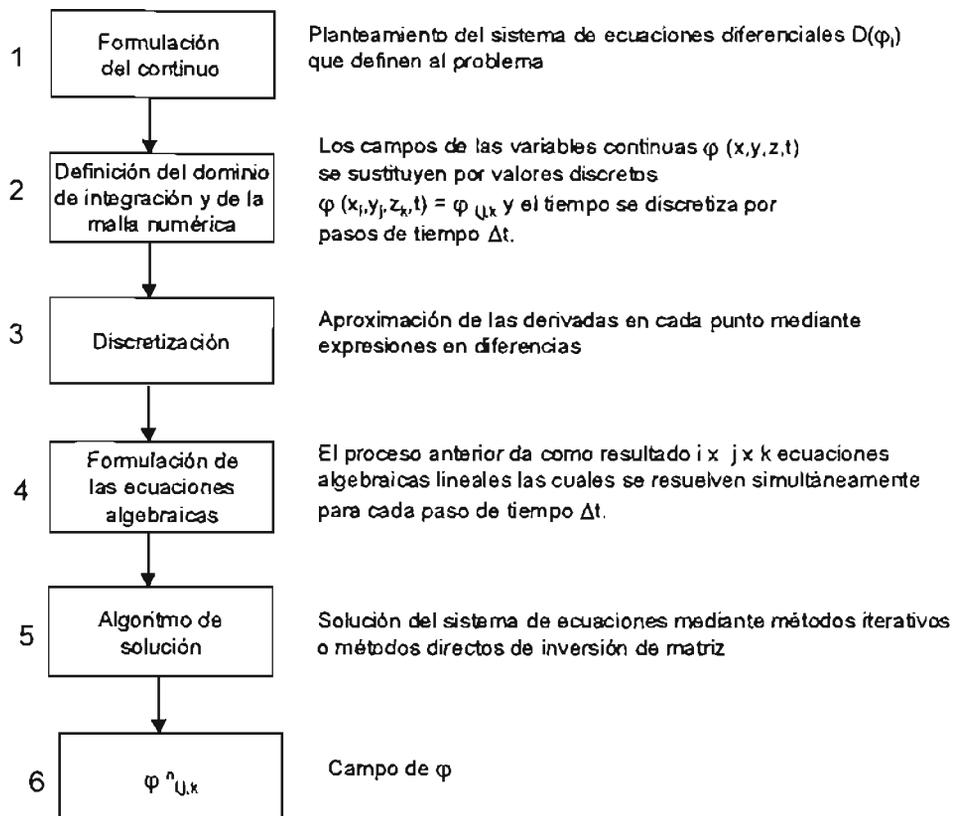


Figura 6.4 Proceso para la solución de un problema mediante CFD

6.8 El Método De Volúmenes Finitos

En este trabajo se resuelven las ecuaciones de transporte (representadas por la ecuación 6.1) mediante el método de la integración de volúmenes de control o volúmenes finitos. Este método consiste de los siguientes pasos:

- ❖ Integración formal de la ecuación que rige el fenómeno sobre todos los volúmenes de control.
- ❖ La discretización involucra la substitución de una variedad de aproximaciones del tipo de diferencias finitas para los términos de la ecuación integrada que representa los procesos transitorios, convectivos, difusivos y de fuentes. Este proceso es el que convierte la ecuación integral en un sistema de ecuaciones algebraicas.
- ❖ Solución de las ecuaciones algebraicas por un método iterativo.

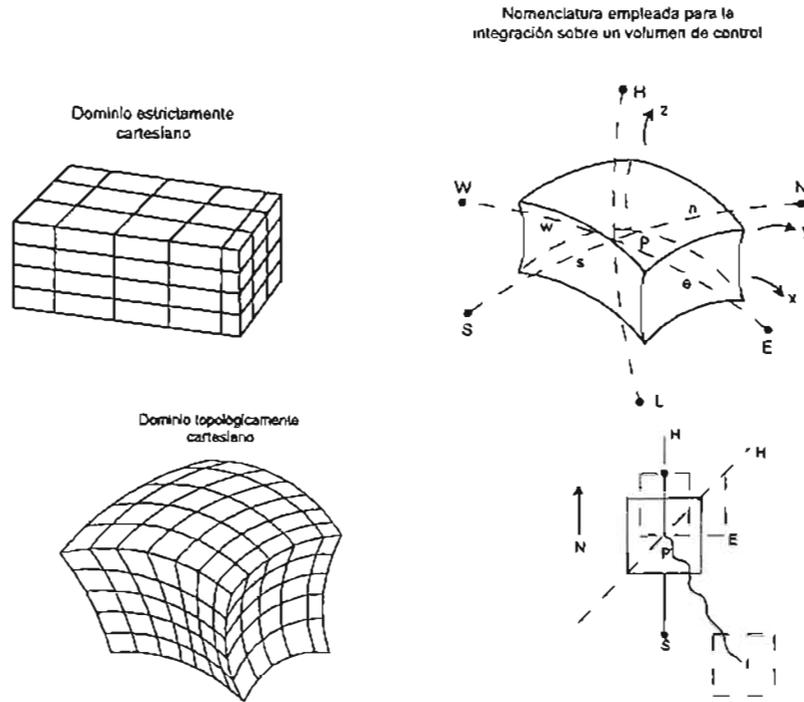
El primer paso, la integración del volumen de control, distingue este método de las otras técnicas CFD.

Las ecuaciones algebraicas obtenidas por este método son derivadas de la integración de las ecuaciones diferenciales sobre volúmenes de control de tamaño finito

llamados subdominios o "celdas", las cuales son topológicamente cartesianas, teniendo seis lados y ocho esquinas.

La figura 6.5 representa la división de un dominio en celdas, así como un volumen de control típico con la nomenclatura empleada para la discretización de las ecuaciones diferenciales.

Figura 6.5 Representación del sistema discretizado en volúmenes finitos



Fuente: Manual CFD PHOENICS

La idea básica del método del volumen finito parte de la forma integral de la ecuación general de conservación.

Si integramos la ecuación (6.1) en un volumen de control:

$$\int_{vc} \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} dV + \int_{vc} \text{div}[\rho\phi u] dV = \int_{vc} \text{div}[\Gamma \text{ gra } d(\phi)] dV + \int_{vc} S_\phi dV \quad (6.2)$$

El teorema de la divergencia de Gauss nos relaciona integrales de volumen con integrales de superficie, de modo que podemos escribir la ecuación anterior de la siguiente forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{vc} \rho\phi dV + \int_{sc} n \cdot [\rho\phi u] dV = \int_{sc} n \cdot [\Gamma \text{ gra } d(\phi)] dV + \int_{vc} S_\phi dV \quad (6.3)$$

Esta forma integral de la ecuación, en muchas deducciones, se obtiene antes que la ecuación diferencial de conservación. Cuando se estudian problemas en estado permanente, el primer término desaparece. En el caso de estudios dependientes del tiempo, se integra una vez más con respecto al tiempo en un pequeño intervalo Δt . La ecuación general de transporte en forma integrada queda:

$$\int_{\Delta t} \left(\frac{\partial}{\partial t} \int_{vc} \rho \phi dV \right) + \int_{\Delta t} \int_{sc} n \cdot [\rho \phi u] dV = \int_{\Delta t} \int_{sc} n \cdot [\Gamma \text{ gra } d(\phi)] dV + \int_{\Delta t} \int_{vc} S_{\phi} dV \quad (6.4)$$

Estas ecuaciones generales son las que se discretizan en el método de volumen finito para obtener ecuaciones algebraicas del tipo:

$$a_p T_p = a_N \phi_N + a_S \phi_S + a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_H \phi_H + a_L \phi_L + b \quad (6.5)$$

Donde:

a_p, a_N , etc., son coeficientes;

b , es una representación de la fuente apropiada para ϕ en cada celda .

Los subíndices, de acuerdo a la figura 6.5, tiene el siguiente significado:

$P \rightarrow$ Nodo típico sobre el cual se esta discretizando la ecuación;

$N \rightarrow$ Nodo vecino al norte, es decir, en dirección y-positiva;

$S \rightarrow$ Nodo vecino al sur, es decir, en dirección y-negativa;

$E \rightarrow$ Nodo vecino al este, es decir, en dirección x-positiva;

$W \rightarrow$ Nodo vecino al oeste, es decir, en dirección x-negativa;

$H \rightarrow$ Nodo vecino alto, es decir, en dirección z-positiva;

$L \rightarrow$ Nodo vecino bajo, es decir, en dirección z-negativa;

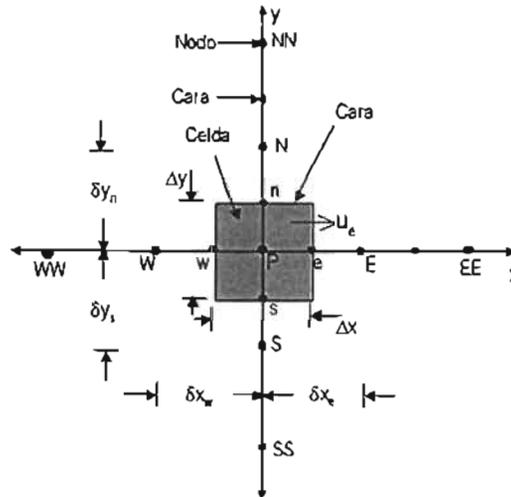
Se resuelve el conjunto de ecuaciones algebraicas de volumen finito para todas las celdas y ϕ 's en cuestión de una manera iterativa. La deducción detallada de la ecuación 6.5 y mayores detalles acerca de la discretización de la ecuación integrodiferencial (6.4) pueden consultarse en textos de fluidodinámica computacional, por ejemplo Patankar [1980]; Versteeg y Malalasekera [1995].o a Ferziger y Peric [1996]; en la siguiente sección se presenta un resumen que dará al lector un contexto de dicha discretización..

6.9 Discretización De Las Ecuaciones

Tras la presentación general de la ecuación de transporte y del método de volúmenes finitos en la sección anterior, en ésta, se presenta la discretización sobre una malla cartesiana, bidimensional y uniforme (celdas de iguales dimensiones espaciales en

las direcciones X y Y) como el mostrado en la figura 6.6 (el espesor de la celda en la dirección z puede considerarse la unidad).

Figura 6.6 Diagrama esquemático de un volumen de control bidimensional



Fuente: Manual CFD PHOENICS

En el curso de la discretización de las ecuaciones se consideran los valores discretos de las variables dependientes en un punto concreto de la celda computacional. Es frecuente suponer que las variables escalares (como la presión, la entalpía, o las fracciones másicas) se encuentran definidas (o “almacenadas”) en el centro de la celda, mientras que los componentes de la velocidad correspondientes se encuentran desplazados en cada dirección a las caras de la celda. Esta disposición desplazada se conoce como “malla decalada” o “desplazada” (“*staggered mesh*”). En este caso, se trata de una malla de este tipo.

En la figura 6.6 se muestra la notación de la celda y de sus vecinas. Dada Una celda P, sus vecinas se denotan de acuerdo a los puntos cardinales (en inglés) y como *Low* y *High* en la dirección z. Las caras de las celdas se nombran con la misma nomenclatura, pero con letras minúsculas. El tiempo también se discretiza, y las celdas en la dirección temporal se llaman intervalos temporales. La celda P en el paso temporal se nota como T.

A continuación se presentan los términos de la ecuación discretizada. Definiendo los símbolos F , D y Pe como:

$$F = \rho \bar{v}_i; \quad D = \frac{\Gamma}{\delta_i}; \quad Pe = \frac{F}{D} \quad (6.6)$$

Donde \vec{v}_i es la velocidad en la cara i , δ_i es la distancia entre los nodos que incluyen la cara i . Las expresiones F y D representan el efecto de los términos convectivo y difusivo, respectivamente, de la ecuación de transporte; y Pe es el número de *Peclet*, que es la relación entre la convección y difusión.

Los coeficientes de la ecuación 6.5 están definidos como:

$$a_i = D_i f(|Pe|_i) + \max(-F_i, 0) \quad (6.7)$$

Los valores de F y D en la cara de la celda de la ecuación 6.7 son:

$$F_i = (\rho \vec{v}_i) \Delta i; \quad D_i = \frac{\Gamma_i \Delta_i}{\delta_i}; \quad i = n, s, e, w \quad (6.8)$$

Donde Δi es la longitud de la cara i .

Para determinar F_i se necesita conocer ρ y \vec{v}_i en la cara de la celda. El término de la ecuación de transporte (6.1) requiere también el conocimiento de los escalares Φ en la cara de la celda. La velocidad \vec{v}_i está calculada en la cara si la malla es decajada; pero ρ y Φ están calculados en el nodo y necesitan ser interpolados a la cara para calcular los coeficientes a_i de la ecuación discretizada 6.5. La obtención de estas variables en la cara de la celda es importante en la precisión y convergencia de la solución. El cálculo de ρ y Φ da lugar a los llamados esquemas de discretización. La función $f(|Pe|)$ de la ecuación 6.7 depende del esquema empleado. Por ejemplo, en el esquema de diferencias desplazadas, $f(|Pe|) = 1$, y para el sistema híbrido [Patankar, 1980]:

$$f(|Pe|_i) = \max(0, 1 - 0.5|Pe|) \quad (6.9)$$

El coeficiente para el término transitorio es

$$a_\tau = \frac{\rho \Delta x \Delta y}{\Delta t} \quad (6.10)$$

Para el cálculo del término D_i (ec. 4.8) se necesita obtener el coeficiente de difusión Γ en la cara de la celda. El coeficiente Γ no es necesariamente una constante, sino probablemente función de valores variables que se conocen en los nodos (por ejemplo, la temperatura), y por lo tanto es necesario interpolarlo a la cara. Esta interpolación puede ser aritmética o armónica. Para la cara e , por ejemplo, estas interpolaciones son:

$$\Gamma_e = \frac{\Delta x (\Gamma_P + \Gamma_E)}{2\delta x_e}; \quad \text{ó} \quad \Gamma_e = \frac{2\delta x_e}{\Delta x \left(\frac{1}{\Gamma_P} + \frac{1}{\Gamma_E} \right)} \quad (6.11)$$

El término fuente de la ecuación general 6.5 se linealiza como:

$$\bar{S}_\Phi = \bar{S}_{\Phi,C} + \bar{S}_{\Phi,V} \Phi_p \quad (6.12)$$

Donde el término $\bar{S}_{\Phi,V}$ se elige de acuerdo con la relación existente entre \bar{S}_Φ y Φ , en caso de depender el primero del segundo. El objetivo de la linealización del término fuente mejorar la convergencia de la solución.

Con esta suposición. Los términos B y a_p de la ecuación 4.5 son:

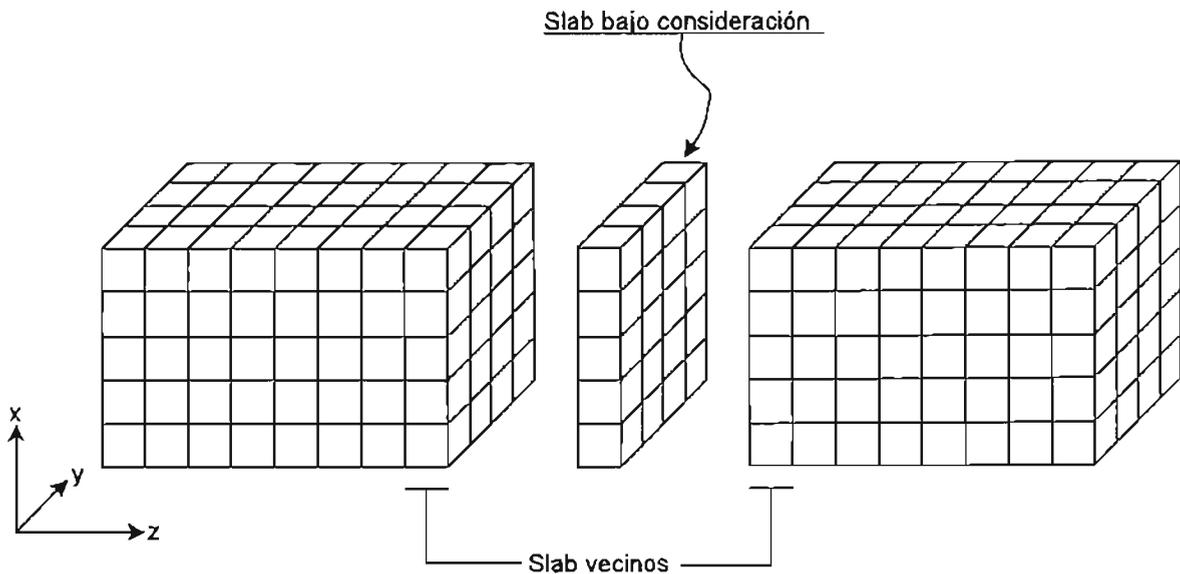
$$B = \bar{S}_{\Phi,C} \Delta x \Delta y + a_T \Phi_T \quad (6.13)$$

$$a_p = a_e + a_w + a_n + a_s + a_T - \bar{S}_{\Phi,V} \Delta x \Delta y \quad (6.14)$$

La ecuación 6.5 se aplica en cada celda del dominio, para cada Φ y para cada paso temporal Δt , por lo que se tiene un sistema de ecuaciones lineales en donde los coeficientes a pueden depender, directa o indirectamente de Φ , por lo que el sistema es realmente pseudo-lineal.

Para resolver este sistema de ecuaciones se puede utilizar cualquier método de resolución de ecuaciones lineales, por ejemplo el método de matrices tridiagonales "TDMA" adaptado para tres dimensiones. Esta adaptación consiste en aplicar el método a cada grupo de celdas que se encuentren a un mismo índice en dirección 'z'. A cada grupo se le llama "slab" y el procedimiento se llama "slab-by-slab" (ver figura 6.7). El proceso se da tantas veces sea necesario, hasta que la solución alcance la convergencia.

Figura 6.7 Secuencia del método TDMA adaptado para tres dimensiones



Fuente: Manual CFD PHOENICS

6.10 Acoplamiento Entre Velocidad Y Presión

En el sistema de ecuaciones con el que se trabaja, toda variable dependiente Φ está asociada a una ecuación de transporte (y por tanto, a una ecuación algebraica) con dos excepciones: la presión cuyo gradiente aparece como término fuente en las ecuaciones de cantidad de movimiento y no tiene una ecuación propia; y la ecuación de continuidad no tiene una variable propia. La densidad y la velocidad aparecen en ésta, pero la primera de estas variables es determinada por medio de una ecuación de estado y la segunda de las ecuaciones de cantidad de movimiento.

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*) [Patankar and Spalding, 1972] [Patankar, 1980]. El algoritmo empleado en esta tesis para resolver el problema de acoplamiento velocidad-presión es el IPSA (*Inter-Phase Slip Algorithm*) el cual es análogo a los de la familia SIMPLE, pero fue diseñado específicamente para el caso de flujos bifásicos [Spalding, 1981].

El ciclo de solución IPSA consta básicamente de los siguientes pasos:

- 1) Resolver las ecuaciones para las fracciones volumétricas r_i (inicialmente con velocidades supuestas).
- 2) Resolver las variables escalares Φ_i .
- 3) Resolver las velocidades de las ecuaciones de cantidad de movimiento (inicialmente con presiones supuestas).
- 4) Sumar las ecuaciones de las fracciones volumétricas r_i para formar una ecuación de continuidad global, por ejemplo calcular los errores de continuidad que producen los campos r_i y v_i actuales.
- 5) Transformar la ecuación de continuidad global en una ecuación de corrección para la presión, y derivar con respecto a ésta.
- 6) Resolver la ecuación anterior, y corregir campos de presión y velocidad.
- 7) Repetir desde 1) hasta alcanzar la convergencia del método.

6.11 Convergencia

Como se mencionó anteriormente, el proceso de solución del sistema de ecuaciones es iterativo y durante éste, las ecuaciones en general no se cumplen; la diferencia numérica entre la parte izquierda y derecha de la ecuación se denomina residuo. Se dice entonces que cuando la suma de los errores disminuye con el proceso iterativo, se está logrando la convergencia.

La relajación es la técnica más usada para procurar la convergencia. La idea de esta técnica es disminuir la velocidad a la que el procesador de ecuaciones lineales procede, con el fin de evitar que grandes cambios a los valores de las variables introducidas durante el proceso iterativo causen la divergencia del mismo. El método de

relajación es aplicable tanto para las variables dependientes como para las propiedades y fuentes. Se emplean dos tipos de relajación: la inercial y la lineal.

La relajación inercial (o de falso paso temporal) se emplea principalmente para velocidades y consiste en añadir a la ecuación algebraica un término fuente (ecuación 6.15) que es idéntico al que resulta de discretizar el término temporal de la ecuación de conservación.

$$\bar{S}_{\phi, V} = \frac{\rho_P V_P}{\Delta t_f} (\Phi^{n-1} - \Phi^n) \quad (6.15)$$

Donde V_P es el volumen de la celda P , Δt_f es el intervalo de tiempo falso y el superíndice n se refiere al número de iteración.

La relajación lineal consiste simplemente en aceptar un valor para cada variable en cada celda que es una combinación lineal del valor pre-existente (resultado de la iteración anterior) y del valor proporcionado por el procesador de ecuaciones algebraicas. Este es el tipo de relajación empleado generalmente para la presión y densidad y esta dada por la siguiente expresión:

$$\Phi_P^n = \alpha \Phi_P^{sol} + (1 - \alpha) \Phi_P^{n-1} \quad (6.16)$$

Donde α es el factor de relajación, el cual, normalmente toma valores entre 0 y 1; y el superíndice *sol* se refiere al valor de la propiedad proporcionado por el procesador (*solver*) en la iteración actual. Nótese que al alcanzar la convergencia, $\Phi_P^n = \Phi_P^{n-1}$, con lo cual se demuestra que la relajación no cambia la solución final, sino sólo la velocidad a la que se alcanza.

Resultados y conclusiones

El modelo numérico presentado en el capítulo 5 es resuelto por medio del código numérico CFD PHOENICS el cual nos permite conocer el comportamiento del sistema.

7.1 Descripción del sistema

El sistema para el cual fue aplicado el modelo matemático es un gasificador de tipo downdraft de lecho estratificado, las condiciones de alimentación se muestran en la tabla 7.1, así como la figura 7.1 muestra un diagrama simplificado de este gasificador donde se pueden observar sus dimensiones, se utiliza como combustible madera de pino, en el apéndice II se da el análisis último e inmediato o aproximado para este tipo de biomasa, el combustible es alimentado por la parte superior utilizando un sistema de una tolva acoplada a un tornillo sin fin, como agente oxidante se utiliza aire, alimentado de igual forma por la parte superior del gasificador, el gas producido sale por la parte inferior. El archivo de instrucción Q1 se anexa de igual manera en el apéndice I, en la implementación del modelo a código PHOENICS se buscó resolver algunas variables que nos ayuden a describir el comportamiento de dicho sistema tales como velocidades, composiciones, entalpías, presión entre otras los resultados obtenidos por el simulador se muestran en forma de contornos en las cuales se aprecia el comportamiento de las variables de acuerdo a una posición espacial dentro del sistema.

Combustible Madera de pino	Flujo de alimentación	0.004167 kg/s	
	Densidad	200 kg/m ³	
	Temperatura inicial	Temperatura ambiente	
	Composición	Análisis inmediato (%masa) Humedad: 9.104 Ceniza: 3.28 Carbón: 2.346 Volátiles: 85.27	Análisis último (% masa) Carbón: 59 Hidrógeno: 7.19 Oxígeno: 32.68 Nitrógeno: 1.13 Azufre:
	Diámetro de la partícula en la alimentación	500 µm-5cm	
	Poder calorífico	13 - 15 000 kJ/kg	
Aire	Flujo de alimentación	7.3447E-3 kg/s	
	Temperatura en la alimentación	300 K	
	Presión de Alimentación	1.01359e+5 Pa	

Tabla 7.1 Datos del sistema a simular.

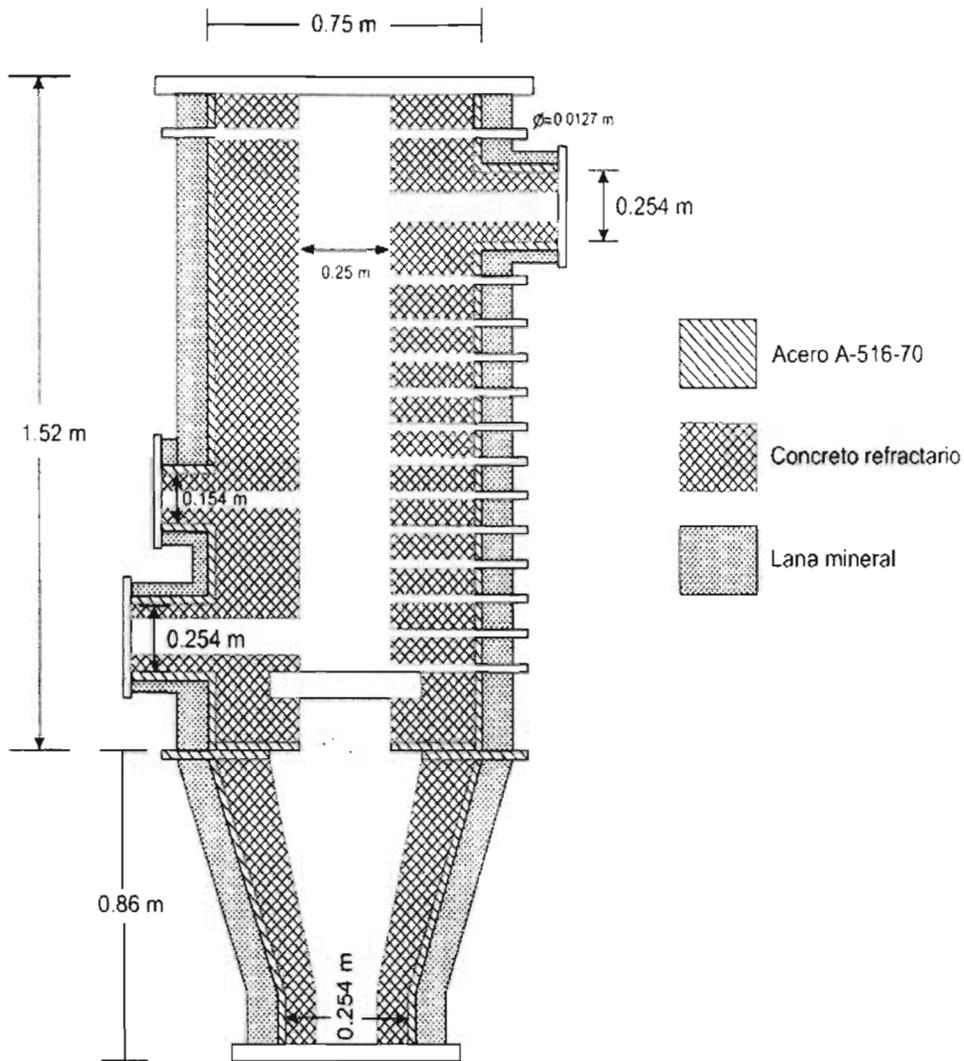


Figura 7.1 Gasificador estratificado diseño teórico

7.2 Discretización Del Dominio De Cálculo.

Se considera que el dominio de cálculo dentro del gasificador es un cilindro de longitud igual a 1.52 m con un diámetro de 0.25 m, el cual se discretiza formando una malla de 150 celdas (ver figura 7.4), dividiendo en proporción igual la longitud radial en 10 tramos (ver figura 7.3) y la altura en 15 tramos de igual magnitud (ver figura 7.2). Los cálculos hechos por el código CFD PHOENICS bajo estas condiciones tuvieron un tiempo de 10 minutos, con un número de iteraciones de 10,001 para un equipo de computo DELL OPTIPLEX GX-400. Los resultados obtenidos se muestran a continuación en forma de contornos para las variables más relevantes.

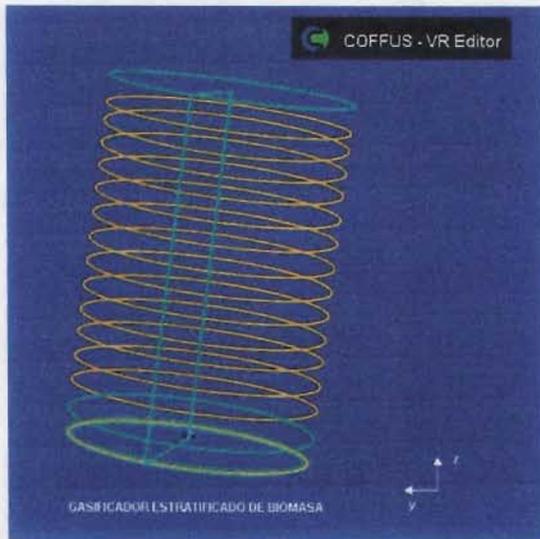


Figura 7.2 Discretización del dominio en dirección z

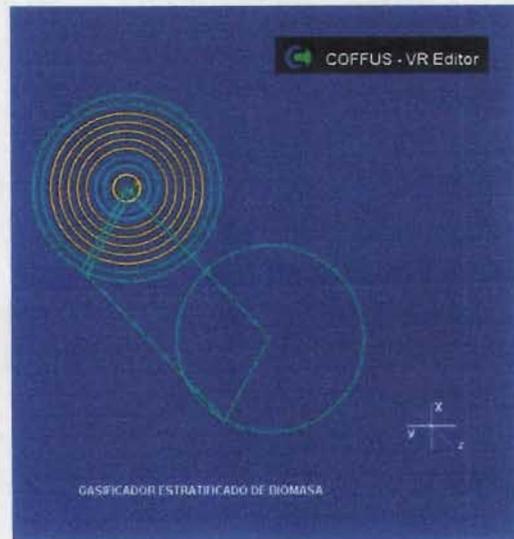


Figura 7.3 Discretización del dominio en dirección y

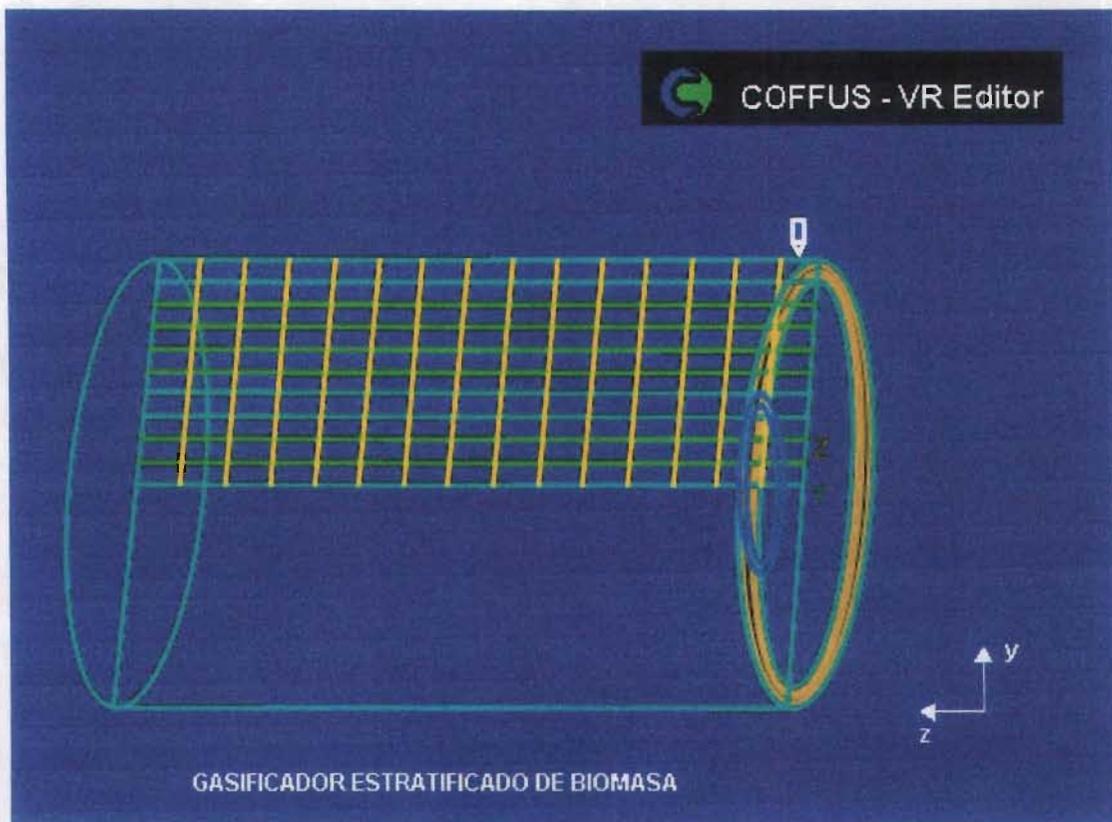


Figura 7.4 Malla de 10 x 15 en las direcciones y, z para el dominio de cálculo.

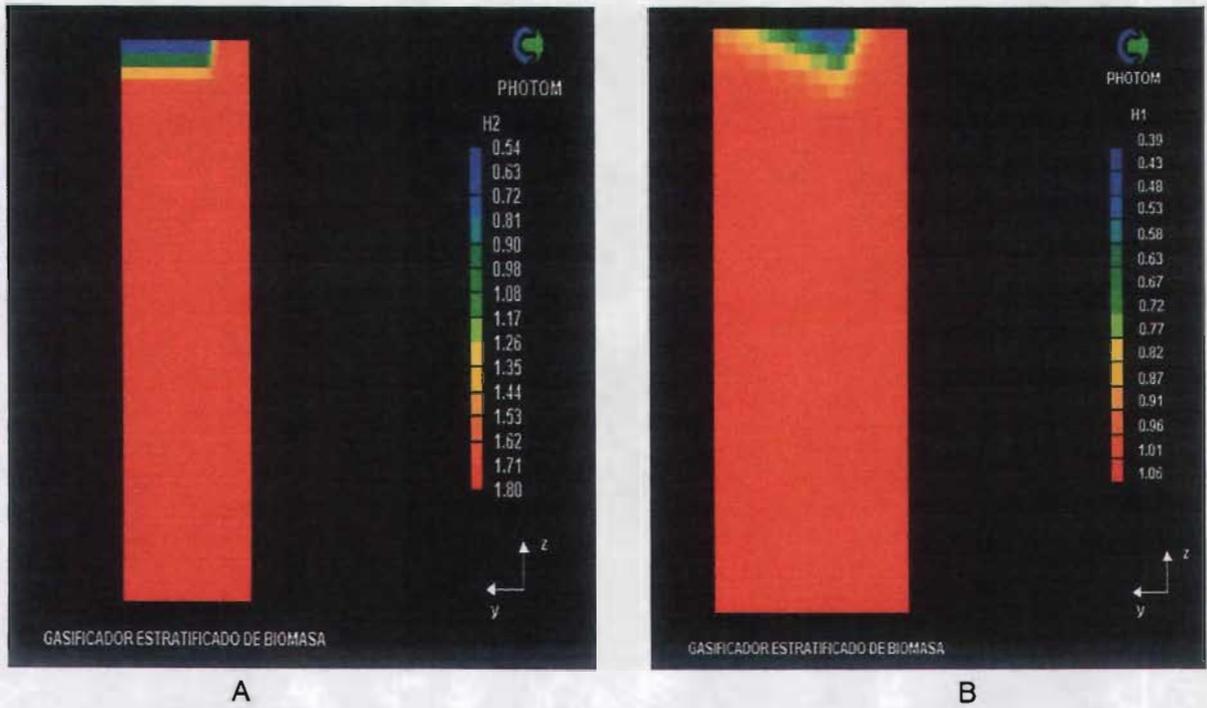


Figura 7.5 Contornos de entalpías para la fase sólido y gas A y B respectivamente.

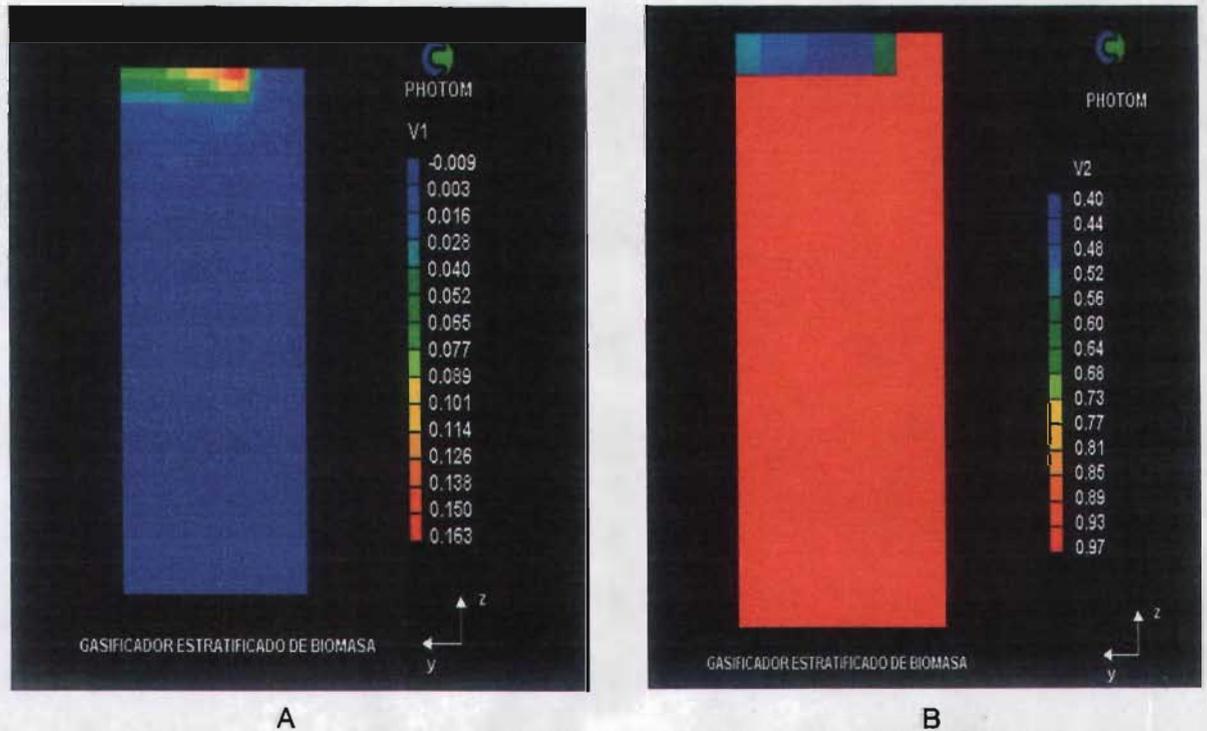
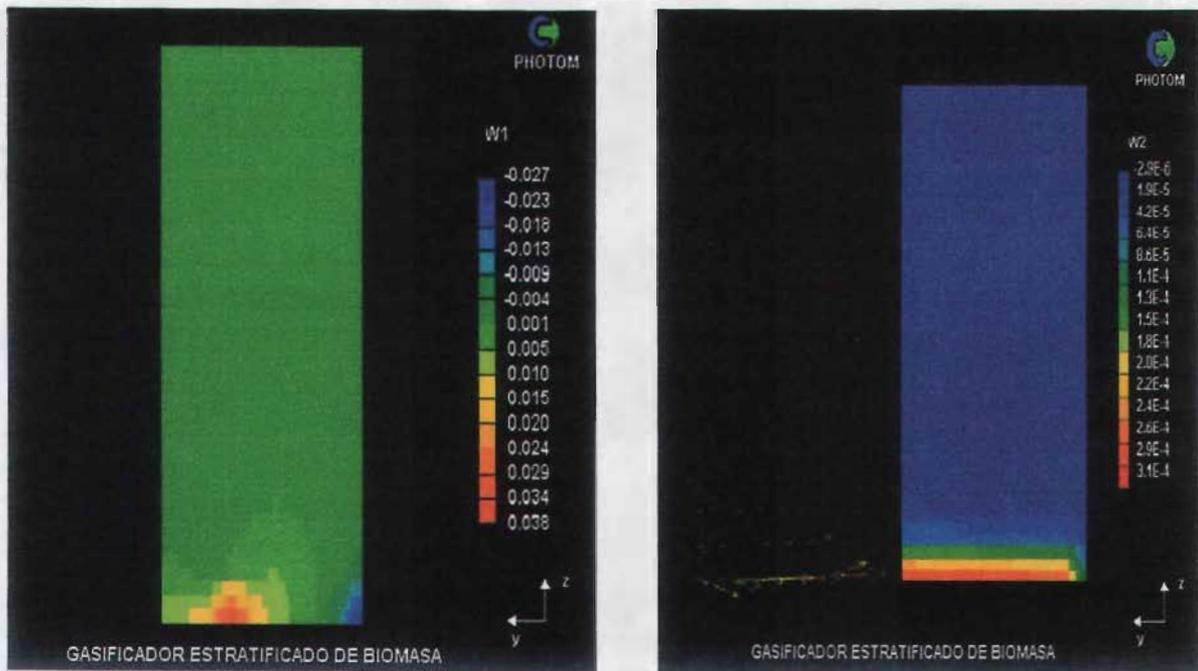


Figura 7.6 Contornos de velocidad para las fases en dirección y para las fases gas y sólida A y B respectivamente



A

B

Figura 7.7 Contornos de velocidad en la dirección z para las fases gas y sólida A y B respectivamente

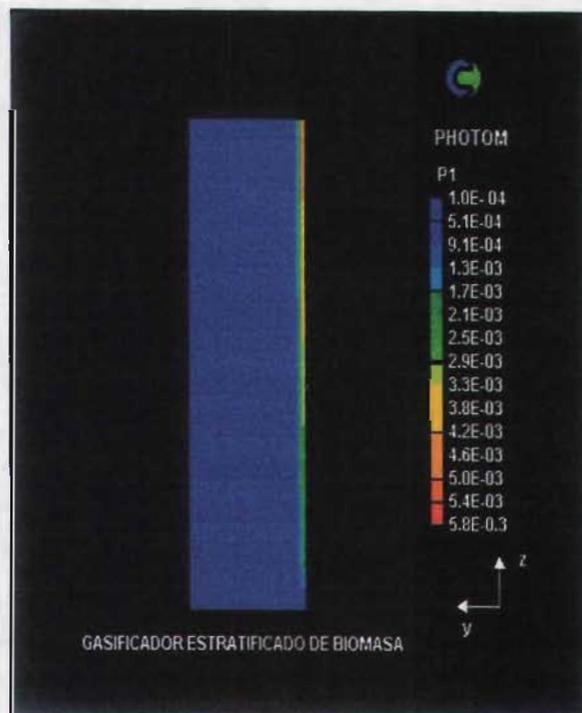


Figura 7.8 Contorno para la presión

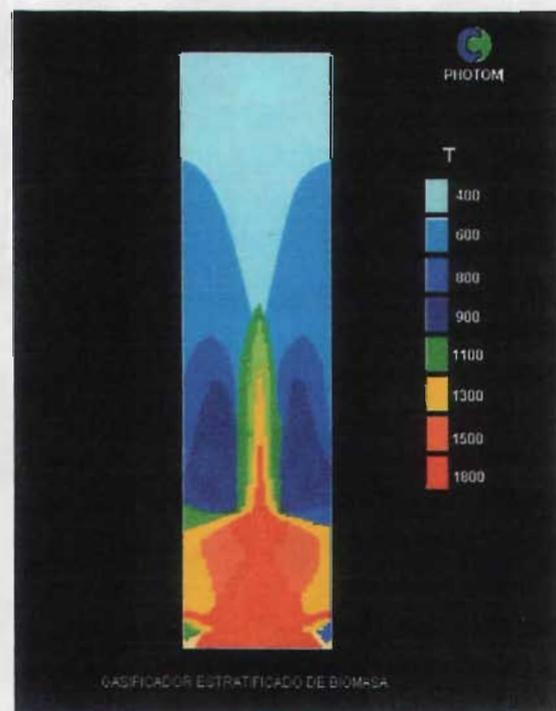


Figura 7.9 Contorno de temperatura

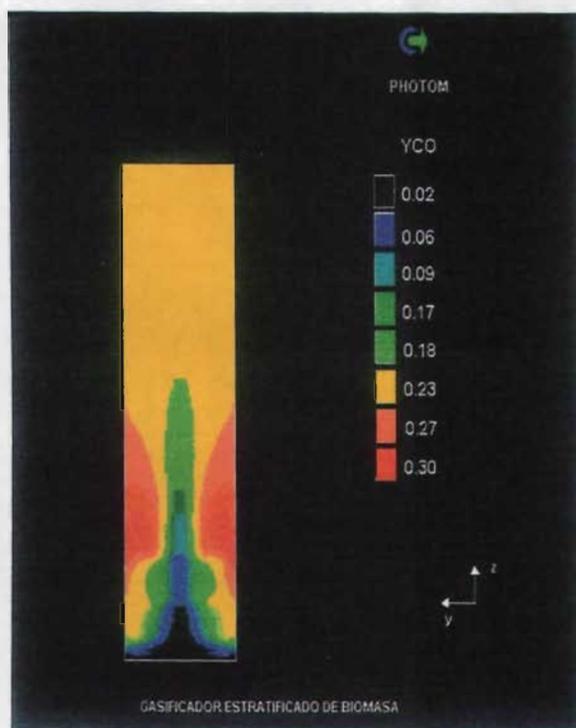


Figura 7.10 Contorno para el CO

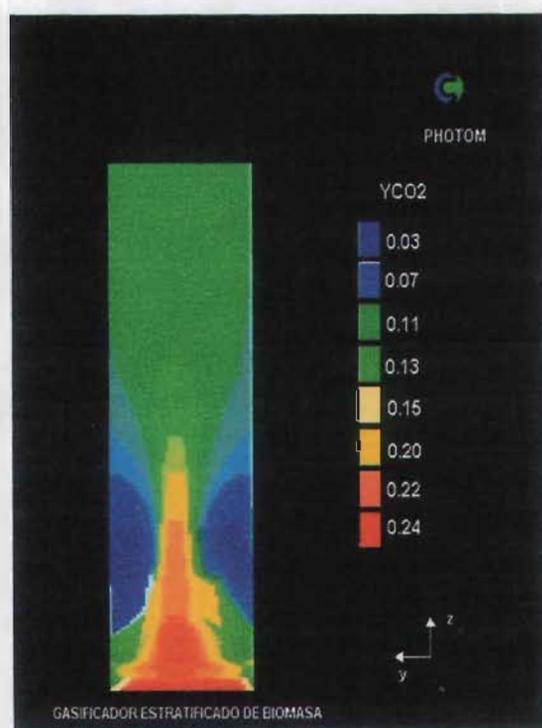


Figura 7.11 Contorno para el CO₂

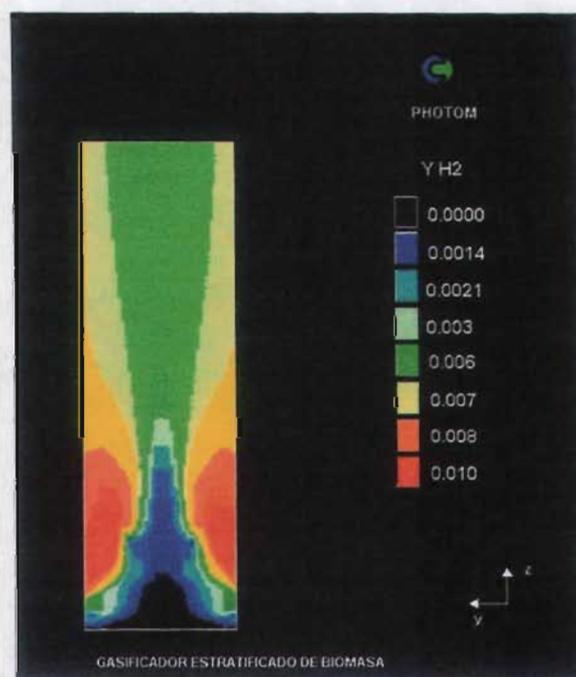


Figura 7.12 Contorno para el H₂

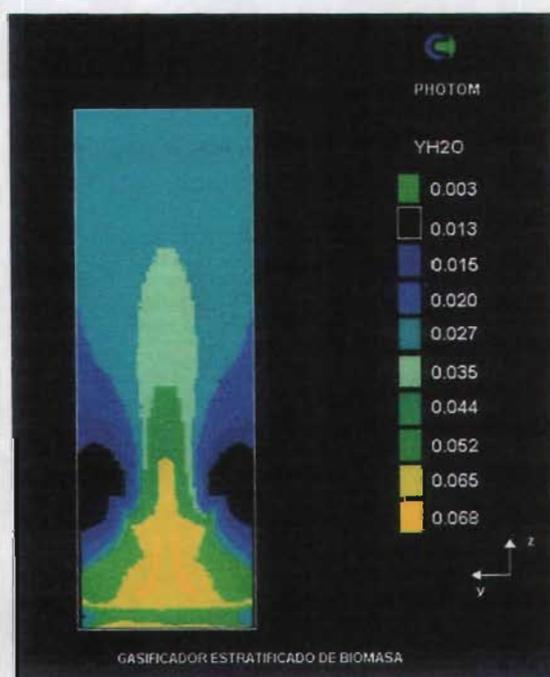


Figura 7.13 Contorno para el H₂O

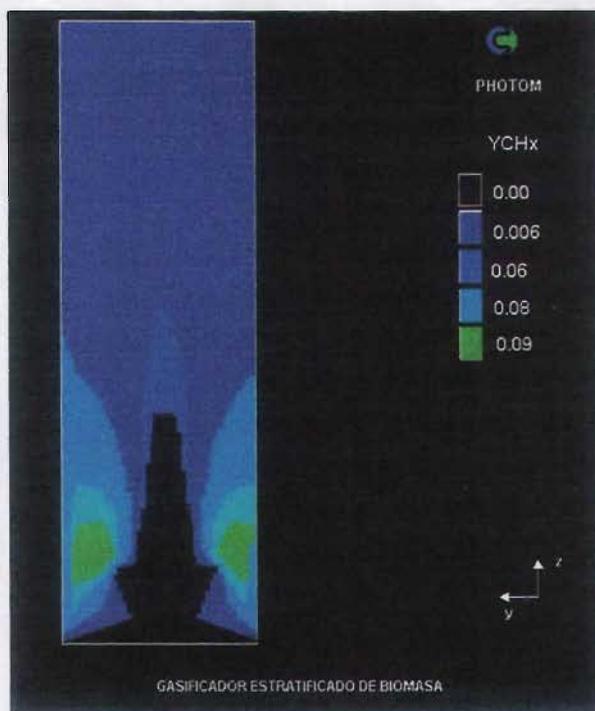


Figura 7.14 Contorno para el CH_x

7.3 RESULTADOS Y DISCUSIONES

Las gráficas anteriores muestran las variaciones en cuanto a composición, temperatura y campos de velocidad, siendo las variaciones mayormente en la dirección del eje z.

En la figura 7.5 se puede observar que en la parte inferior del sistema la entalpía tiene su mayor valor y esta disminuye en cantidades mínimas a lo largo del gasificador con excepción de la zona de alimentación situada en la parte superior donde existen valores de entalpía muy bajos en comparación al resto del gasificador, lo anterior es lógico pues suponemos que en la parte inferior del gasificador se llevan a cabo procesos exotérmicos (combustión) y la energía liberada por estos es consumida en parte en zonas superiores para que puedan efectuarse los procesos de gasificación, donde las reacciones son principalmente endotérmicas al igual que el secado de las partículas, esto se corrobora al observar el contorno para la temperatura (ver figura 7.9) en donde se observan temperaturas para la zona de combustión de hasta 1800 K, mientras que para la zona de gasificación y secado las temperaturas son de hasta 900 y 400 K respectivamente. Las velocidades para la fase gas tanto en dirección y como en z se mantienen en la mayor parte del gasificador constantes, en cambio las velocidades de la fase sólida muestran sus valores máximos en la parte inferior del gasificador. Siendo mayores las velocidades para la fase gas en ambas direcciones (ver figuras 7.6 y 7.7).

La evolución de las especies en el gasificador se muestra en las figuras 7.10 a 7.14, de ellas podemos apreciar la funcionalidad que existe con respecto a la temperatura y por

supuesto con los procesos involucrados, en primera instancia observamos un comportamiento para el CO el cual muestra un aumento en su concentración en la dirección positiva del eje z esto se explica considerando que en la parte inferior el proceso de oxidación es completo, de ahí que la concentración del CO₂ tenga su valor máximo en esta zona (ver figura 7.11), por el contrario en zonas posteriores en donde las temperaturas y la deficiencia de oxidante permiten las reacciones de gasificación Char-CO₂ y Char- H₂O siendo estas de carácter endotérmico, y por consecuencia se tendrán en esa zona temperaturas más bajas y concentraciones mayores de CO y H₂ (ver figura 7.10 y 7.12), para el H₂O se observa en la figura 7.13 que hay mayor concentración en la parte inferior debido a que esta se presenta como producto de la combustión que en contraste a la zona de gasificación en donde participa en la reacción Char-H₂O en la cual se produce H₂ y de ahí que su concentración en esta zona sea inferior.

La presencia de hidrocarburos como el CH₄ en la corriente gas provienen principalmente de los procesos de pirolisis, volatilización del carbón crudo y cracking de alquitrán, su concentración se muestra en la figura 7.14 para las diferentes zonas del gasificador.

La tabla 7.2 muestra la concentración final del gas obtenido

Componente	CO	CO ₂	H ₂	CH ₄	H ₂ O	N ₂
% vol.	21.6	6.6	8.5	1.0	3.9	58.3

Tabla 7.2

7.3.1 Valor Calorífico De La Mezcla

El valor calorífico del gas depende de las cantidades relativas de los diferentes componentes combustibles: monóxido de carbono, hidrógeno y metano.

El valor calorífico de estos tres gases se presenta en la tabla 7.3. Sin embargo, a fin de conseguir la combustión, el gas tiene que mezclarse con una cantidad apropiada de aire. La mezcla combustible tendrá un menor valor calorífico, por unidad de volumen, que el gas solo.

Las cantidades de oxígeno necesarias para una combustión completa (combustión estequiométrica) de cada uno de los componentes del combustible, se presentan también en la tabla 7.3.

Tabla 7.3 Valores caloríficos y demandas estequiométricas de oxígeno de los componentes combustibles del gas.

Gas	Valor calorífico efectivo kJ/mol	Valor kJ/m ³ *	Demanda estequiométrica de oxígeno (m ³ /m ³)
Monóxido de carbono	283 660	12655	0,5
Hidrógeno	241 300	10770	0,5
Metano	801 505	35825	2,0

*El volumen del gas se da en m³ en estado normal.

El valor calorífico de tal mezcla estequiométrica puede calcularse mediante la fórmula siguiente:

$$H_{ig} = \frac{12680 V_{CO} + 10800 V_{H2} + 35900 V_{CH4}}{1 + 2,38 V_{CO} + 2,38 V_{H2} + 9,52 V_{CH4}}$$

donde:

H_{ig} es el valor calorífico de una mezcla estequiométrica de gas y aire en kJ/m^3 .

V_{CO} fracción de volumen de monóxido de carbono en el gas (antes de mezclarlo con aire)

V_{H2} fracción de volumen de hidrógeno en el gas (antes de mezclarlo con aire)

V_{CH4} fracción de volumen de metano en el gas (antes de mezclarlo con aire).

Al realizar este cálculo a nuestra composición se obtiene un valor calorífico de 2519.48 kJ/m^3 .

7.4 Conclusiones

El modelo presentado en este trabajo cumple con los objetivos planteados pues predice la composición del gas así como el comportamiento de un sistema de gasificación tipo downdraft estratificado que utiliza como combustible madera y como agente oxidante aire, al evaluar cantidades físicas como campos de velocidades, presión y temperatura, considerando los diferentes procesos y fenómenos ocurridos. Los resultados obtenidos demuestran que es posible obtener un gas combustible de poder calorífico medio. Sin embargo, al comparar el valor calorífico de nuestra mezcla gaseosa y aire teniendo un valor de 2519.48 kJ/m^3 con el valor calorífico de una mezcla estequiométrica de gasolina y aire alrededor de $3\ 800 \text{ kJ/m}^3$, resulta evidente la diferencia de potencia de salida, por ejemplo, entre un motor determinado alimentado con gasolina y con la mezcla gaseosa obtenida.

Consideramos que este modelo puede servir como una herramienta para el diseño y optimización no sólo de este tipo de gasificadores sino que con apropiadas modificaciones podría emplearse para diferentes configuraciones, así como diferentes combustibles utilizados y de igual forma podría aplicarse a equipos de combustión.

Podemos concluir que el proceso de gasificación es una alternativa viable que puede considerarse para la generación de energía limpia a diferentes escalas, teniendo la posibilidad de que a grandes escalas pueda integrarse a ciclos combinados de generación de potencia que utilizan turbinas de gas. Sin menospreciar el efecto positivo que pudiera generar el uso de esta tecnología al medio ambiente y al uso sustentable de los combustibles fósiles.

Recomendaciones para trabajos futuros

Algunas recomendaciones que podrían complementar, extender o mejorar los resultados de la presente tesis, se dan a continuación:

- ❖ En primer lugar se recomienda la simulación del flujo reactivo en tres dimensiones, ya que en los patrones de flujo real, existe una componente angular (x) para la velocidad que podría afectar el sistema;
- ❖ Sin lugar a duda sería recomendable obtener la cinética de reacción, para la madera de pino u otros combustibles de interés por medio de experimentación, ya que en este trabajo la cinética utilizada fue extraída de la literatura, y obviamente las propiedades de un tipo de madera a otro son diferentes;
- ❖ De igual manera sería importante anexar al modelo los mecanismos de formación de NO_x para predecir las posibles emisiones y su impacto ambiental de estos componentes.

APÉNDICES

- Apéndice 1 Archivo De Instrucción A CFD PHOENICS Q1
- Apéndice 2 Caracterización De Maderas
- Apéndice 3 Normas Oficiales Mexicanas De Emisiones
Contaminantes A La Atmósfera
-

APENDICE 1

Archivo De Instrucción A CFD PHOENICS Q1

TALK=f;RUN(1, 1);VDU=X11-TERM

```
** definition of variables
REAL (PI,AINBOQ,print)
REAL (ROAIIN)
REAL (DIAM,DIAMBOQ)
REAL (FAIRIN, VELAIN)
REAL (FMBIIN, FBIAIN)
REAL (ROMEAN)
REAL (TAIRIN)
REAL (HBIOIN,HAIRIN)
REAL (TKEAIN,,EPAIIN, DIST)
** dimensiones (SI)
PI=3.14159
  diametro gasificador
DIAM=0.25
  diametros boquillas
DIAMBOQ=0.25
  Area boquillas
AINBOQ=(PI*DIAMBOQ*DIAMBOQ)/4
ainboq
** flujos masicos aire - kg/s
  parte superior del gasificador y por m**2
FAIRIN=(7.3447E-3)/AINBOQ
Fairin1
** length scale for inlet epsilon
DIST=(DIAMBOQ)/10.0
** flujos masicos de biomasa - kg/s
  -entrada del gasificador
FMBIIN=0.004167
FMBIIN=FAIRIN*0.56735
FBIAIN=FMBIIN
fbiain
** inlet temperatures - K
  biomass
  air
TAIRIN= 300.0
  evaluate inlet densities - currently only used for fiinit(rho1)
PRESS0=1.01359e+5
TEMP0=0.
ROAIIN=PRESS0/(287.41*TAIRIN)
  ROAIIN=FAIRIN/VELAIN
roaiin
  *Densidad de la Biomasa
REAL(ROBIOM); ROBIOM=200.
  * Velocidades
  VELAIN=0.127324
VELAIN=FAIRIN/ROAIIN
velain
REAL(FVAIIN)
REAL(FVBIIN,S1,S11)
REAL(UNOIN)
```

```

FVAIIN=FAIRIN*AINBOQ/(ROAIIN)
FVBIIN=FBIAIN*AINBOQ/(ROBIOM)
FVAIIN
FVBIIN
S1=FVAIIN/(FVAIIN+FVBIIN);S11=FVBIIN/(FVAIIN+FVBIIN)
S1
S11
UNOIN=S1+S11
UNOIN
TKEAIN=0.0025*VELAIN*VELAIN
EPAIIN=0.1643*TKEAIN**1.5/DIST
TKEAIN=0.3
EPAIIN=3.0
    ** Definiciones para el COFFUS
BOOLEAN(BURN,INERT,NOXCAL,RADCAL,SIZECH)
    ** Activa combustion
+ BURN=T
    SPEDAT(SET,COFFUS,BURN,L,BURN)
    ** Desactiva Radiacion
+ RADCAL=f
    SPEDAT(SET,COFFUS,RADCAL,L,RADCAL)
    ** Activa modelo de reduccion de particulas
+ SIZECH=T
BOOLEAN(ASFIREED)
INTEGER(ANA)
    ** ASFIREED selecciona tipo de analisis
ASFIREED=f
IF(ASFIREED) THEN
ANA=1

    ** Analisis aproximado (en fracciones masicas)
    YWATM = Humedad YASHM = ceniza
    YRAWC=Carbon fijo (char)
    YCHAM = volatiles
REAL(YWATM,YASHM,YCHAM,YRAWC)
YWATM =9.104/100 ;YASHM = 3.28/100
YCHAM = 85.27/100 ;YRAWC = 2.346/100
    SPEDAT(SET,COFFUS,YWATM,R,YWATM);SPEDAT(SET,COFFUS,YASHM,R,YASHM)
    SPEDAT(SET,COFFUS,YCHAM,R,YCHAM);SPEDAT(SET,COFFUS,YRAWC,R,YRAWC)
ENDIF
    ** Analisis ultimo (en fracciones masicas) ----
    YCDRY =carbon1 YODRY = oxygen
    YHDRY = hydrogen YNDRY = nitrogen
REAL(YHDRY,YCDRY,YODRY,YNDRY,YSDRY)
YCDRY = 59/100;YHDRY = 7.19/100
YODRY = 32.68/100;YNDRY = 1.13/100

    SPEDAT(SET,COFFUS,YCDRY,R,YCDRY);SPEDAT(SET,COFFUS,YODRY,R,YODRY)
    SPEDAT(SET,COFFUS,YHDRY,R,YHDRY)
    SPEDAT(SET,COFFUS,YNDRY,R,YNDRY)
    *****

Q1 created by VDI menu, Version 3.1, Date 24/12/97
    CPVNAM=VDI;SPPNAM=COFFUS
    *****

IRUNN = 1;LIBREF = 3
    *****

```

```

Group 1. Run Title
TEXT(GASIFICADOR ESTRATIFICADO DE BIOMASA)
*****

Group 2. Transience
STEADY = F
*****

CARTES=F
GROUP 3. X-direction grid specification
NREGx=1
IREGx=1; GRDPWR(x,1,6.28318,1.0)
GROUP 4. Y-direction grid specification
NREGy=1
IREGy=1; GRDPWR(y,10,0.25,1.0)
GROUP 5. Z-direction grid specification
GRDPWR(z,15,0.75,1.0)
Group 6. Body-Fitted coordinates

Group 7. Variables: STOREd,SOLVEd,NAMED
-----
+ STORE(TMP1)
ONEPHS=f
SOLVE(P1,V1,W1)
SOLUTN(P1,Y,Y,Y,P,P,P)
STORE(P2)
+ SOLUTN(V2,Y,Y,N,N,N,Y);SOLUTN(W2,Y,Y,N,N,N,Y)
+ SOLUTN(R1,Y,Y,N,N,N,Y);SOLUTN(R2,Y,Y,N,N,N,Y)
+ SOLUTN(H1,Y,Y,N,P,P,P);SOLUTN(H2,Y,Y,N,N,N,Y)
+ STORE(TMP2)
TURMOD(KEMODL)
KELIN=3
STORE(PRPS)
STORE(VPOR)
* Gas-phase mass-fractions
+ SOLVE(YCHX,YCO2,YCO,YH2O,YH2,YO2);STORE(YN2)
* Particle-phase mass-fractions
+ SOLVE(COL2,CHA2,WAT2);STORE(ASH2)
Particle Size Change
-----
REAL(SMDIAM);SMDIAM=39.8*1.E-1
SMDIAM
+ SOLVE(PHIS)
STORE(SIZE)
FIINIT(PHIS)=.5
+ TERMS(PHIS,P,P,P,P,N,P)
FIINIT(SIZE)=SMDIAM

Thermal Radiation
-----
INTEGER(IHRADL)
IF(RADCAL) THEN
REAL(RADW,ABSORB,SCAT,SIGMA,EMIW,ED2ME,TWALL)
SIGMA=5.6697E-8/1e6;EMIW=0.7
TWALL=600.
RADW=SIGMA*TWALL**4;ABSORB=0.3;SCAT=0.14
RADW

```

```
RADIAT(FLUX,ABSORB,SCAT,H1)
FIINIT(RADY)=RADW;FIINIT(RADX)=RADW
ED2ME=EMIW/(2.0-EMIW)
RELAX(RADY,FALSDT,1.0)
RELAX(RADX,FALSDT,1.0)
ENDIF
Group 8. Terms & Devices
```

```
TERMS(H1,N,P,P,P,P,P)
TERMS(H2,N,P,P,P,P,P)
* Gas-phase mass-fractions (assign variables to phases)
TERMS(YO2,P,P,P,P,Y,P);TERMS(YCHX,P,P,P,P,Y,N)
TERMS(YCO,P,P,P,P,Y,P);TERMS(YCO2,P,P,P,P,Y,P)
TERMS(YH2O,P,P,P,P,Y,P);TERMS(YH2,P,P,P,P,Y,P)
* Particle-phase mass-fractions (assign variables to phases)
TERMS(COL2,P,P,P,P,N,P);TERMS(CHA2,P,P,P,P,N,P)
TERMS(WAT2,P,P,P,P,N,P)
CSG3=CNGR
Group 9. Properties
```

```
STORE(RHO1)
TEMP0=0.0
REAL(RG56,RG57)
ENUL=1.8E-5
RHO2=ROBIOM
PRNDTL(H2)=1.E10
RHO1=GRND;TMP1=GRND;RG56=GRND;RG57=2.0
SPEDAT(SET,COFFUS,RG56,R,RG56);SPEDAT(SET,COFFUS,RG57,R,RG57)
CP1=1.005/1e3
CP2=1.8/1e3
TMP2B=1.0/CP2
TMP2=GRND
PRNDTL(10)=GRND
STORE(LMPW)
PRT(R2)=1.e20
* Enthalpies solved in MJ/kg
PRNDTL(WAT2)=1.E10;PRNDTL(COL2)=1.E10;PRNDTL(CHA2)=1.E10
Group 10. Inter-Phase Transfer Processes
```

```
STORE(CFIP)
SPEDAT(SET,COFFUS,SMDIAM,R,SMDIAM)
SPEDAT(SET,COFFUS,PCIM,R,2.70171E+01)
+ RLOLIM=1.E-5;CFIPS=GRND;;STORE(SLIP,REYN)
+ CINT(YCHX)=0.0;CINT(YO2)=0.0;CINT(YH2O)=0.0;CINT(YCO)=0.0
CINT(YH2)=0.0
+ CINT(YCO2)=0.0;CINT(WAT2)=0.0;CINT(CHA2)=0.0;CINT(COL2)=0.0
+ CINT(H1)=0.0;CINT(H2)=0.0
* storage for relaxation of heat source
+ STORE(QDOT);FIINIT(QDOT)=0.0
* special relaxation factors for heat source
+ RELAX(QDOT,LINRLX,1.0)
+ RESREF(QDOT)=0.3;ENDIT(QDOT)=0.3;PRT(QDOT)=1.0;PRNDTL(QDOT)=1.0
+ REAL(THCON);THCON=0.0458
SPEDAT(SET,COFFUS,GASCON,R,THCON)
PRNDTL(10)=grnd
PRT(R2)=1.e20
```

Group 11. Initialise Var/Porosity Fields

```

REAL(HINI,TREFE,TINI)
FIINIT(R2)=1.E-5;FIINIT(R1)=1.0-FIINIT(R2)
FIINIT(YCHX)=0.;FIINIT(YCO)=0.1
+ FIINIT(YO2) =.232 ;FIINIT(YH2O)=0.
FIINIT(YH2)=0.0
+ FIINIT(YN2) =.768;FIINIT(YCO2)=0.0
FIINIT(ASH2)=YASHM;FIINIT(CHA2)=YRAWC
FIINIT(WAT2)=YWATM;FIINIT(COL2)=0.0
TREFE=273.0
TINI=1000.
  * compute the enthalpy of the air stream
  solo para valor inicial
RG57=2.0
HINI=0.77*(0.97035+1.493E-4*TINI/RG57)*TINI
HINI=HINI+0.23*(1.0802+3.265E-5*TINI/RG57)*TINI
  ** Conversion de HCALC a J/kg
HINI=HINI/1000
hini
FIINIT(H1)=HINI;FIINIT(H2)=CP2*TINI
FIINIT(TEMP1)=TINI;FIINIT(TEMP2)=TINI
FIINIT(RHO1)=PRESS0/(FIINIT(TEMP1))/287.398
FIINIT(V1)=1
FIINIT(V2)=1
  * Calculo de las entalpias del aire de entrada
REAL(HCALC1,TCALC1)
TCALC1=TAIRIN
RG57=2.0
HCALC1=0.77*(0.97035+1.493E-4*TCALC1/RG57)*TCALC1
HCALC1=HCALC1+0.23*(1.0802+3.265E-5*TCALC1/RG57)*TCALC1
  ** Conversion de HCALC a J/kg
HCALC1=HCALC1/1000

```

Group 13. Boundary conditions and special sources

```

PATCH(KESOURCE,PHASEM,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
COVAL(KESOURCE,KE ,GRND4 ,GRND4 )
COVAL(KESOURCE,EP ,GRND4 ,GRND4 )
  PATCH (BUOYANCY,PHASEM,1,NX,1,NY,1,1,1,1)
  COVAL (BUOYANCY,v1 ,FIXFLU ,GRND1 )
  COVAL (BUOYANCY,v2 ,FIXFLU ,GRND1 )
  BUOYA = .000E+00 ; BUOYC =-9.810E+00 ; BUOYB = .000E+00
  * Modulación de la turbulencia debido a la presencia de partículas
  PATCH(TURMODUL,FREEVL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
  COVAL(TURMODUL,KE,GRND,0.0)
  COVAL(TURMODUL,EP,GRND,0.0)

  * Gas-particles heat transfer
  Checado en gxcoal
  + PATCH(LHEATRA,FREEVL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
  + COVAL(LHEATRA,H1,GRND3,GRND3)
  + COVAL(LHEATRA,H2,GRND3,GRND3)

```

BIOMASS DRYING

Si esta en gxcoal

PATCH(VAPORIS0,FREEVL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
COVAL(VAPORIS0,P1,FIXFLU,GRND5)
COVAL(VAPORIS0,P2,FIXFLU,GRND5)
COVAL(VAPORIS0,YH2O,ONLYMS,1.0);COVAL(VAPORIS0,H1,ONLYMS,GRND5)

PATCH(VAPORIS2,FREEVL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
COVAL(VAPORIS2,H2,FIXFLU,GRND5);COVAL(VAPORIS2,WAT2,FIXFLU,GRND5)

* Patch to counter the transfer of species due to mass transfer

Si esta en gxcoal

PATCH(VAPORIS5,FREEVL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
COVAL(VAPORIS5,COL2,GRND9,GRND9);COVAL(VAPORIS5,CHA2,GRND9,GRND9)
COVAL(VAPORIS5,WAT2,GRND9,GRND9)
COVAL(VAPORIS5,PHIS,GRND9,GRND9)
COVAL(VAPORIS5,PHIS,FIXFLU,GRND5)

STORE(VAPO);FIINIT(VAPO)=0.0;RELAX(VAPO,LINRLX,1.0)
RESREF(VAPO)=0.3;ENDIT(VAPO)=0.3;PRT(VAPO)=1.0;PRNDTL(VAPO)=1.0
REAL(ADEVOL,EDEVOL,RG55,C1EBU,C2EBU)
INTEGER(IG14,IG16,MODHET,IORDER,IKDMEA)

RAW COAL VOLATILISATION: Raw coal > Y Volatiles + (1-Y) Char

Si esta en gxcoal

+ PATCH(DEVOLAT0,FREEVL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
+ COVAL(DEVOLAT0,P1,FIXFLU,GRND1)
+ COVAL(DEVOLAT0,P2,FIXFLU,GRND1)
+ COVAL(DEVOLAT0,YCHX,ONLYMS,GRND1);COVAL(DEVOLAT0,YO2,ONLYMS,GRND1)
+ COVAL(DEVOLAT0,H1,ONLYMS,GRND1)

Si esta en gxcoal

* Patch for volatile phase-2 species

+ PATCH(DEVOLAT2,FREEVL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
+ COVAL(DEVOLAT2,CHA2,FIXFLU,GRND1)
+ COVAL(DEVOLAT2,COL2,GRND1,0.0)
* ADEVOL = constant A * EDEVOL = constant E/R in volat. model
+ ADEVOL=2000.0;EDEVOL=2.3E4/8.130
+ SPEDAT(SET,COFFUS,ADEVOL,R,ADEVOL)
+ SPEDAT(SET,COFFUS,EDEVOL,R,EDEVOL)

* store volatilization rate & special relaxation

+ STORE(VRAT);FIINIT(VRAT)=0.0;RELAX(VRAT,LINRLX,4.0)
+ RESREF(VRAT)=0.3;ENDIT(VRAT)=0.3;PRT(VRAT)=1.0;PRNDTL(VRAT)=1.0

* Use this line to de-activate: devolat=skip;rg(21)=0.0

Patch to counter the transfer of non-volatile species

Si esta en gxcoal

+ PATCH(DEVOLAT5,FREEVL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
+ COVAL(DEVOLAT5,COL2,GRND9,GRND9)
+ COVAL(DEVOLAT5,CHA2,GRND9,GRND9)
+ COVAL(DEVOLAT5,WAT2,GRND9,GRND9)
+ COVAL(DEVOLAT5,PHIS,GRND9,GRND9)

COVAL(DEVOLAT5,PHIS,FIXFLU,GRND1)

- * Ask litec what this is; suggest better name than IG16
- * IG16 = 1 indicates CO as product, =2 indicates CO2
- + IG16=1
- + SPEDAT(SET,COFFUS,IG16,1,IG16)

TWO-STEP HOMOGENEOUS COMBUSTION OF VOLATILES (YCHX)

* Ask litec what these are:

Store combustion rate for relaxation and products for printout

- * Liter=1 selects mixing rate (ep/k) as combustion rate
- =2 Kinetic; 3 minimum; 4 harmonic

```
+ STORE(COM1);FIINIT(COM1)=0.0;LITER(COM1)=1;RELAX(COM1,LINRLX,1.0)
+ RESREF(COM1)=0.3;ENDIT(COM1)=0.3;PRT(COM1)=1.0;PRNDTL(COM1)=1.0
+ STORE(COM2);FIINIT(COM2)=0.0;RELAX(COM2,LINRLX,1.0)
+ RESREF(COM2)=0.3;ENDIT(COM2)=0.3;PRT(COM2)=1.0;PRNDTL(COM2)=1.0
+ LITER(COM2)=1
+ STORE(COM3);FIINIT(COM3)=0.0
RELAX(COM3,LINRLX,0.5)
```

* C1EBU & C2EBU = EBU constants in combustion model

```
+ C1EBU=4.0;C2EBU=0.0
+ SPEDAT(SET,COFFUS,C1EBU,R,C1EBU)
+ SPEDAT(SET,COFFUS,C2EBU,R,C2EBU)
```

*Reaccion

CHx + O2 -> CO + H2O seguida por CO + O2 -> CO2

Checado en gxcoal

```
+ PATCH(COMBUSTA,PHASEM,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
+ COVAL(COMBUSTA,YCHX,FIXFLU,GRND2);COVAL(COMBUSTA,YO2,FIXFLU,GRND2)
+ COVAL(COMBUSTA,YH2O,FIXFLU,GRND2);COVAL(COMBUSTA,YCO,FIXFLU,GRND2)
+ COVAL(COMBUSTA,H1,FIXFLU,GRND2)
```

checado en gxcoal

```
+ PATCH(COMBUSTB,PHASEM,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
+ COVAL(COMBUSTB,YO2,FIXFLU,GRND2);COVAL(COMBUSTB,YCO2,FIXFLU,GRND2)
+ COVAL(COMBUSTB,YCO,FIXFLU,GRND2);COVAL(COMBUSTB,H1,FIXFLU,GRND2)
* Reaccion H2 + 0.5O2 -> H2O
+ PATCH(COMBUSTE,PHASEM,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
+ COVAL(COMBUSTE,YO2,FIXFLU,GRND2);COVAL(COMBUSTE,YH2O,FIXFLU,GRND2)
+ COVAL(COMBUSTE,YH2,FIXFLU,GRND2);COVAL(COMBUSTE,H1,FIXFLU,GRND2)
```

HETEROGENEOUS COMBUSTION OF CHAR C(S) + O2 > CO2

* Reaccion C(particula) + b/2 --> COb + hCICO o hCICO2 (por kg C)
Shet02 kg O2/kg C

```
+ PATCH(BURNOUT0,FREEVL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
+ COVAL(BURNOUT0,P1,FIXFLU,GRND5)
+ COVAL(BURNOUT0,P2,FIXFLU,GRND5)
+ COVAL(BURNOUT0,H1,ONLYMS,GRND1)
```

```
+ PATCH(BURNOUT2,FREEVL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
+ COVAL(BURNOUT2,H1,FIXFLU,GRND5)
+ COVAL(BURNOUT2,YO2,FIXFLU,GRND5)
+ COVAL(BURNOUT2,CHA2,FIXFLU,GRND5)
+ COVAL(BURNOUT2,YCO,GRND9,1.0)
```

* Ask litec what this is:

```

    coval(burnout2,yco2,gmd9,1.0);ig14=1
* Ask litec for clarification of these:
* IG14 = 1 indicates CO as product, =2 indicates CO2
* MODHET = selects kinetic law for heterog. reaction
* IORDER = selects order of heterog. reaction
* IKDMEA = selects kinetic/diffusion weighting
*****Voy a modificar MODHET, en gxcoal vienen algunos modelos
MODHET=1 Modelo de IW Smith, 19th. Symp on Comb.
IORDER=1 y IKDMEA=1 selecciona en gxcoal GKT=AMIN1(GKC,GKD)
+ IG14=1;MODHET=1;IORDER=1;IKDMEA=1
+ SPEDAT(SET,COFFUS,IG14 ,I,IG14 )
+ SPEDAT(SET,COFFUS,MODHET,I,MODHET)
+ SPEDAT(SET,COFFUS,IORDER,I,IORDER)
+ SPEDAT(SET,COFFUS,IKDMEA,I,IKDMEA)
* storage of rate triggers calculation
+ STORE(BOUT);FIINIT(BOUT)=0.0
+ STORE(BOUG);FIINIT(BOUG)=0.0
+ STORE(HIDR);FIINIT(HIDR)=0.0
+ RELAX(BOUT,LINRLX,0.6)
+ RELAX(BOUG,LINRLX,0.6)
+ RELAX(HIDR,LINRLX,0.6)
;RESREF(BOUT)=0.3
+ ENDIT(BOUT)=1.E-20;PRT(BOUT)=0.1;PRNDTL(BOUT)=1.E+20
+ RELAX(BOUG,LINRLX,4.0);RESREF(BOUG)=0.3
+ ENDIT(BOUG)=1.E-20;PRT(BOUG)=1.;PRNDTL(BOUG)=1.E+0
+ RELAX(HIDR,LINRLX,4.0);RESREF(HIDR)=0.3
+ ENDIT(HIDR)=1.E-20;PRT(HIDR)=1.;PRNDTL(HIDR)=1.E+0
* RG55 = ask litec what this is
+ RG55=0.0
+ SPEDAT(SET,COFFUS,RG55,R,RG55)
* Patch to counter the transfer of non-combusting species
Si esta en gxcoal
+ PATCH(BURNOUT5,FREEVL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
+ COVAL(BURNOUT5,COL2,GRND9,GRND9);COVAL(BURNOUT5,CHA2,GRND9,GRND9)
+ COVAL(BURNOUT5,WAT2,GRND9,GRND9)
* quito el siguiente renglon, porque la combustion heterogenea
si contribuye a la disminucion de la particula.
+ COVAL(BURNOUT5,PHIS,GRND9,GRND9)
** Reaccion heterogenea
C + CO2 -> 2CO
+ PATCH(BURNGAS0,FREEVL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
+ COVAL(BURNGAS0,P1,FIXFLU,GRND5)
+ COVAL(BURNGAS0,P2,FIXFLU,GRND5)

+ PATCH(BURNGAS2,FREEVL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
+ COVAL(BURNGAS2,H1 ,FIXFLU,GRND5)
+ COVAL(BURNGAS2,YCO2 ,FIXFLU,GRND5)
+ COVAL(BURNGAS2,CHA2,FIXFLU,GRND5)
+ COVAL(BURNGAS2,YCO,GRND9,1.0)

+ PATCH(BURNGAS5,FREEVL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
+ COVAL(BURNGAS5,COL2,GRND9,GRND9);COVAL(BURNGAS5,CHA2,GRND9,GRND9)
+ COVAL(BURNGAS5,WAT2,GRND9,GRND9)
+ COVAL(BURNGAS5,PHIS,GRND9,GRND9)
** Reaccion heterogenea
C + H2O -> H2 + CO

```

```
+ PATCH(BURNHID0,FREEVL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
+ COVAL(BURNHID0,P1,FIXFLU,GRND5)
+ COVAL(BURNHID0,P2,FIXFLU,GRND5)

+ PATCH(BURNHID2,FREEVL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
+ COVAL(BURNHID2,H1 ,FIXFLU,GRND5)
+ COVAL(BURNHID2,YH2O ,FIXFLU,GRND5)
+ COVAL(BURNHID2,CHA2,FIXFLU,GRND5)
+ COVAL(BURNHID2,YCO,GRND9,1.0)
+ COVAL(BURNHID2,YH2,GRND9,1.0)

+ PATCH(BURNHID5,FREEVL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
+ COVAL(BURNHID5,COL2,GRND9,GRND9);COVAL(BURNHID5,CHA2,GRND9,GRND9)
+ COVAL(BURNHID5,WAT2,GRND9,GRND9)
+ COVAL(BURNHID5,PHIS,GRND9,GRND9)
```

```
PATCH(SIZECHAN,VOLUME,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
COVAL(SIZECHAN,PHIS,FIXFLU,GRND7)
```

* CONDICIONES DE FRONTERA GASIFICADOR

** Boquillas en combustor

PRIMER NIVEL

```
PATCH(BOQIN,high,1,1,4,4,1,1,1,1)
```

Aire

```
COVAL(BOQIN,P1,FIXFLU,FAIRIN)
COVAL(BOQIN,V1,ONLYMS,velain)
COVAL(BOQIN,H1,ONLYMS,HCALC1); COVAL(BOQIN,KE,ONLYMS,TKEAIN)
COVAL(BOQIN,EP,ONLYMS,EPAIN)
```

Biomasa

```
COVAL(BOQIN,P2,FIXFLU,FBIOMA)
COVAL(BOQIN,V2,ONLYMS,VEL1)
COVAL(BOQIN,H2,ONLYMS,CP2*TCALC1)
COVAL(BOQIN,phis,ONLYMS,1.)
COVAL(BOQIN,WAT2,.000E+00, YWATM)
COVAL(BOQIN,CHA2,.000E+00, 0.000)
COVAL(BOQIN,COL2,.000E+00,1-YASHM-YWATM)
COVAL(BOQIN,YO2 ,.000E+00, 2.320E-01)
COVAL(BOQIN,YH2O, .000E+00, .000E+00)
COVAL(BOQIN,YH2, .000E+00, .000E+00)
COVAL(BOQIN,YCO , .000E+00, .000E+00)
COVAL(BOQIN,YCO2, .000E+00, .000E+00)
COVAL(BOQIN,YCHX, .000E+00, .000E+00)
COVAL(BOQIN,RADY, 0.000E+00, 0.000E+00)
COVAL(BOQIN,RADX, 0.000E+00, 0.000E+00)
```

```
PATCH(OUT ,low , 1, NX, ny, NY, 1, 1, 1, 1)
```

```
COVAL(OUT ,V1 , .000E+00, .000E+00)
COVAL(OUT ,V2 , .000E+00, .000E+00)
COVAL(OUT ,W1 , .000E+00, .000E+00)
COVAL(OUT ,W2 , .000E+00, .000E+00)
COVAL(OUT ,P1 , 1.000E+02, .000E+00)
COVAL(OUT ,P2 ,(RHO2/RHO1)*1.e+3,0.0)
COVAL(OUT ,KE , .000E+00, .000E+00)
COVAL(OUT ,EP , .000E+00, .000E+00)
COVAL(OUT ,H1 , .000E+00, SAME )
COVAL(OUT ,H2 , .000E+00, SAME )
COVAL(OUT ,PHIS, .000E+00, .000E+00)
```

```

COVAL(OUT ,WAT2, .000E+00, .000E+00)
COVAL(OUT ,CHA2, .000E+00, .000E+00)
COVAL(OUT ,COL2, .000E+00, .000E+00)
COVAL(OUT ,YO2, .000E+00, .000E+00)
COVAL(OUT ,YH2O, .000E+00, .000E+00)
COVAL(OUT ,YH2, .000E+00, .000E+00)
COVAL(OUT ,YCO, .000E+00, .000E+00)
COVAL(OUT ,YCO2, .000E+00, .000E+00)
COVAL(OUT ,YCO2, .000E+00, .000E+00)
COVAL(OUT ,RADY, 0.000E+00, SAME )
COVAL(OUT ,RADX, 0.000E+00, SAME )

```

*****RADIATION

```

PATCH(WALLR1,WEST,1,1,5,6,1,1,1,1)
COVAL(WALLR1,RADX,ED2ME,RADW)

```

```

PATCH(WALLR2,EAST,NX,NX,5,6,1,1,1,1)
COVAL(WALLR2,RADX,ED2ME,RADW)

```

```

PATCH(WALLR3,WEST,1,1,8,24,1,1,1,1)
COVAL(WALLR3,RADX,ED2ME,RADW)

```

```

PATCH(WALLR4,EAST,NX,NX,8,24,1,1,1,1)
COVAL(WALLR4,RADX,ED2ME,RADW)

```

```

PATCH(WALLR5,WEST,1,1,30,NY,1,1,1,1)
COVAL(WALLR5,RADX,ED2ME,RADW)

```

```

PATCH(WALLR6,EAST,NX,NX,30,NY,1,1,1,1)
COVAL(WALLR6,RADX,ED2ME,RADW)

```

Group 15. Terminate Sweeps

LSWEEP = 15000

RESFAC = 1.000000E-03

Group 16. Termination of iterations

* Limit iterations to save cpu time

DO II=12,NPHI

+ IF(LITER(II).GT.8) THEN

+ LITER(II)=8

+ ENDIF

ENDDO

Group 17. Under-relaxation devices

REAL(FACLIN,FACMIN)

+ FACLIN=0.01

RELAX(PHIS,LINRLX,FACLIN)

RELAX(CFIP,LINRLX,0.3);RELAX(RHO1,LINRLX,0.3)

RELAX(YCHX,LINRLX,FACLIN);RELAX(YO2, LINRLX,FACLIN)

RELAX(YH2O,LINRLX,FACLIN);RELAX(YCO, LINRLX,FACLIN)

RELAX(YH2,LINRLX,FACLIN)

RELAX(YCO2,LINRLX,FACLIN);RELAX(COL2,LINRLX,FACLIN)

RELAX(CHA2,LINRLX,FACLIN);RELAX(WAT2,LINRLX,FACLIN)

* Special relaxation practices for sources

```
* FACMIN = ask litec what this is
FACMIN = 0.9
SPEDAT(SET,COFFUS,FACMIN,R,FACMIN)
```

Group 18. Limits on variables or increments to them

```
VARMIN(H1)=.000010;VARMIN(H2)=.00001
VARMAX(H1)=100.0;VARMAX(H2)=100.0
VARMIN(R2) =1.E-9
VARMIN(PHIS)=1.E-6;VARMAX(PHIS)=1.0E+2
VARMAX(SIZE)=SMDIAM;VARMIN(SIZE)=1.E-11
VARMAX(YCHX)=1.0;VARMIN(YCHX)=1.E-6
VARMAX(YCO) =1.0;VARMIN(YCO) =1.E-6
VARMAX(YO2) =1.0;VARMIN(YO2) =1.E-6
VARMAX(YH2O)=1.0;VARMIN(YH2O)=1.E-6
VARMAX(YH2)=1.0;VARMIN(YH2)=1.E-6
VARMAX(YCO2)=1.0;VARMIN(YCO2)=1.E-6
VARMAX(YN2) =1.0;VARMIN(YN2) =1.E-6
VARMAX(CHA2)=1.0;VARMIN(CHA2)=1.E-6
VARMAX(COL2)=1.0-YASHM-YWATM;VARMIN(COL2)=1.E-6
VARMAX(WAT2)=1.0;VARMIN(WAT2)=1.E-8
VARMAX(ASH2)=1.0;VARMIN(ASH2)=1.E-6
VARMAX(TMP2) = 1.000000E+4 ;VARMIN(TMP2) =273.0
VARMAX(TMP1) = 1.000000E+4 ;VARMIN(TMP1) =273.0
VARMAX(V1 ) = 5.000000E+01 ;VARMIN(U1 ) =-5.000000E+01
VARMAX(V2 ) = 5.000000E+01 ;VARMIN(U2 ) =-5.000000E+01
VARMAX(W1 ) = 5.000000E+01 ;VARMIN(V1 ) =-5.000000E+01
VARMAX(W2 ) = 5.000000E+01 ;VARMIN(V2 ) =-5.000000E+01
varmax(p1)=1.000000E+03
vamin(p1)=1.0e-4
RELAX(P1 ,LINRLX, 8.000E-01)
RELAX(P2 ,LINRLX, 1.000E+00)
RELAX(V1 ,FALSDT, 1.000E-02)
RELAX(V2 ,FALSDT, 1.000E-02)
RELAX(W1 ,FALSDT, 1.000E-02)
RELAX(W2 ,FALSDT, 1.000E-02)
RELAX(R1 ,LINRLX, 4.000E-01)
RELAX(R2 ,LINRLX, 4.000E-01)
RELAX(KE ,FALSDT, 5.000E-03)
RELAX(EP ,FALSDT, 5.000E-03)
RELAX(PHIS,LINRLX, 1.000E-02)
RELAX(H1 ,LINRLX, 4.000E-01)
RELAX(H2 ,LINRLX, 4.000E-01)
RELAX(rho1,LINRLX, 2.000E-01)
```

Group 19. Data communicated by satellite to GROUND

```

NAMGRD =MICA
ASAP = T
BOOLEAN(SPEOUT)
  * SPEOUT = T activates special output data
  SPEDAT(SET,MICA,SPPNAM,C,COFFUS)
REAL(CBETA,YVOL,STCOEF,HEATC,HEATH,HEATC2,HITMUL,RG42,RG91)
REAL(RG100,RG101,RG102,RG103,RG104)
SPEOUT=t
  SPEDAT(SET,COFFUS,SPEOUT,L,SPEOUT)

  * CBETA * YVOL * STCOEF * HEATC * HEATH * HEATC2
  * HITMUL * RG91 ( ask litec what all these are )
CBETA=0.0;YVOL =0.0;STCOEF=0.0;HEATC=0.0
HEATH=0.0;HEATC2=0.0;HITMUL=0.0;RG42 =0.0;RG91=0.0
  SPEDAT(SET,COFFUS,CBETA ,R,CBETA )
  SPEDAT(SET,COFFUS,YVOL ,R,YVOL )
  SPEDAT(SET,COFFUS,STCOEF,R,STCOEF)
  SPEDAT(SET,COFFUS,HEATC ,R,HEATC )
  SPEDAT(SET,COFFUS,HEATH ,R,HEATH )
  SPEDAT(SET,COFFUS,HEATC2,R,HEATC2)
  SPEDAT(SET,COFFUS,HITMUL,R,HITMUL)
  SPEDAT(SET,COFFUS,RG42 ,R,RG42 )
  SPEDAT(SET,COFFUS,RG91 ,R,RG91 )
** Coal size-change calculation
  (en grupo 13)
  * PATCH(SIZECHAN,VOLUME,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
  * COVAL(SIZECHAN,PHIS,FIXFLU,GRND7)
  * RG100 = minimum size = 5.E-6
  * RG101 = factor for breakup during devolatilization =-100.
  * RG102 = factor for slip velocity
  * RG103 = factor for turbulent kinetic energy
  * RG104 = particle swelling =-0.2
  RG100=5.E-6;RG101=-100.0;RG102=-1.0E-3;RG103=-0.001;RG104=-0.2
  RG100=5.E-6;RG101=-100.0;RG102=0.0;RG103=0.00;RG104=-0.2
RG100=0.0;RG101=0.0;RG102=0.0;RG103=0.00;RG104=0.0
  SPEDAT(SET,COFFUS,RG100,R,RG100);SPEDAT(SET,COFFUS,RG101,R,RG101)
  SPEDAT(SET,COFFUS,RG102,R,RG102);SPEDAT(SET,COFFUS,RG103,R,RG103)
  SPEDAT(SET,COFFUS,RG104,R,RG104)
** Store Nox variables in combustion run

```

Group 20. Preliminary Printout

```
ECHO = T
```

Group 21. Print-out of Variables

```
OUTPUT(H1 ,N,N,Y,Y,N,N)
```

Group 22. Monitor Print-Out

```
IXMON = 6 ;IYMON = NY ;IZMON = 1
```

NPRMON = 100000
NPRMNT = 1
TSTSWP=50

Group 23.Field Print-Out & Plot Control
NPRINT = 100000
ISWPRF = 1 ;ISWPRL = 100000
No PATCHes used for this Group

Group 24. Dumps For Restarts
NOWIPE = T

STOP

CARACTERIZACIÓN DE MADERAS

Términos empleados en el análisis de combustibles sólidos.

- ❖ Análisis inmediato o aproximado.- El análisis inmediato en términos de % de humedad, materia volátil, cenizas, carbono fijo, más el poder calorífico.
- ❖ Análisis último (composición elemental).- El análisis en términos de los porcentajes en peso de los elementos presentes, es decir, del carbono, hidrogeno, oxígeno, nitrógeno, azufre.
- ❖ Contenido de humedad libre.- El porcentaje perdido cuando la madera, se expone a la atmósfera hasta alcanzar el equilibrio con ella a 15.6 °C.
- ❖ Contenido de humedad fija.- El % de humedad presente en la madera secada al aire. Denominada también humedad inherente o de equilibrio.
- ❖ Porcentaje de cenizas.- El porcentaje de residuo obtenido al quemar la madera en aire a 800 °C en un horno de mufla a condiciones normales.
- ❖ Carbón fijo.- Es igual a 100 menos la suma de los porcentajes de cenizas, materia volátil y humedad.
- ❖ Contenido de materia volátil.- El porcentaje de productos desprendidos cuando el combustible se calienta en ausencia de aire a 900 °C en condiciones normales.

LA MADERA Y SU COMPOSICIÓN

- ❖ Combustible sólido que se puede quemar directamente o transformándolo en carbón, o en gas.
- ❖ Los componentes químicos principales de la madera son la celulosa y la lignocelulosa. Otros componentes inflamables son resinas y ceras.
- ❖ El principal componente no inflamable es el agua, los árboles recién cortados contienen una cantidad considerable de agua. La proporción de cenizas es muy baja, generalmente menos de 6%. Los productos volátiles a 900 °C son del 60 a 75 %. Las variaciones en las proporciones de los componentes orgánicos determinan las diferencias observadas en los poderes caloríficos de las maderas. El poder calorífico de la celulosa pura es de 4150 cal/g, la resina y la cera se aproximan a 9450 cal/g.

Tipo de madera	Haya	castaño	Pino
Humedad %	12.6	12	12.9
Celulosa %	45.5	52.6	53.3
Resina y cera %	0.4	1.1	1.6
Soluble en agua %	2.4	5.4	4.6
Lignina %	39.1	28.9	28.2

Composición de algunos árboles secados al aire y sin cenizas.

Los análisis elementales de maderas secas y exentas de cenizas tienen en promedio la siguiente composición: carbono 49 a 51 %, hidrogeno 5.9 a 6.2 %, oxigeno 45 a 43 %, poder calorífico 4450 cal/g a 5000 cal/g.

Método Para El Análisis Inmediato De Maderas

Humedad Libre.

Extender una muestra de 1 Kg que pase a través de un tamiz de 6.5 mm y caiga sobre una bandeja de cobre de 30 cm por lado. Dejar secar durante 24 hr a temperatura ambiente del laboratorio y volver a pesar.

$$(\text{Perdida de peso} / \text{peso de muestra}) * 100 = \% \text{ humedad libre}$$

Humedad De Equilibrio

Moler la madera secada al aire procedente de la determinación de humedad libre hasta que pase a través de un tamiz de 55 mallas por cm. Pesar aproximadamente 5g en un vidrio de reloj tarado y tapado. Retirar tapa y secar durante una hora a 105 °C en una estufa con tiro de aire. Enfriar en un desecador y volver a pesar tapado.

$$\frac{\text{perdida de peso}}{\text{peso despues de secar al aire}} * 100 - \% \text{ de } H_2O \text{ libre} = \% \text{ humedad en equilibrio}$$

$$\% \text{ de cenizas} = \frac{\text{peso de cenizas}}{\text{peso de madera tomada}} * 100$$

$$\% \text{ de materias volátiles} = (\text{perdida de peso} * 100) - \% \text{ de humedad en la muestra}$$

$$a) \text{madera seca: carbón fijo} = 100 - (M.V. + \text{cenizas})$$

$$b) \text{madera humeda: carbón fijo} = 100 - (M.V. + H_2O + \text{cenizas})$$

Determinación De Cenizas

Pesar aproximadamente 1g de la muestra de análisis en una cápsula de cuarzo tarad, de 10-15 mm de profundidad y 5 cm de diámetro. Introducir la cápsula con la muestra en un horno de mufla frío y elevar la temperatura hasta 500 °C en 30 minutos elevar después la temperatura a 800 °C en una hora y mantener una hora más a 800 °C.

$$\% \text{ de cenizas} = \frac{\text{peso de cenizas}}{\text{peso de madera tomada}} * 100$$

Determinación De Materia Volátil

La determinación de las materias volátiles se realiza en un crisol de cuarzo de tipo normal, soportado durante el calentamiento de tal modo que su base no se apoye en el fondo del horno de mufla empleado. El borde del crisol y la cara inferior del borde de la tapa deben estar bien lisos. La mufla debe estar cerrada durante la determinación, manteniéndola a 925 °C.

$$\% \text{ de materias volátiles} = (\text{perdida de peso} * 100) - \% \text{ de humedad en la muestra}$$

El carbono fijo se calcula como sigue:

$$a) \text{ madera seca: } \text{carbón fijo} = 100 - (M.V. + \text{cenizas})$$

$$b) \text{ madera húmeda: } \text{carbón fijo} = 100 - (M.V. + H_2O + \text{cenizas})$$

Resultados experimentales obtenidos en la determinación del análisis inmediato para madera de pino.

Determinación	Fracción másica
Humedad en equilibrio	0.09104
Contenido de ceniza	0.0328
Material volátil	0.8527
Carbono fijo	0.02346

Composición madera de pino

	Tamaño de partícula	Densidad (g/cm ³)	Humedad % en peso	Volátiles % en peso	Cenizas % en peso	Carbón Fijo % peso
Aserrín	15 –500 µm	0.34-0.45	7.934	76.83	4.35	10.886
Viruta	10-30 mm	0.43	10.274	76.83	4.02	8.876

Análisis inmediato de madera de pino para residuos de la industria mueblera

Análisis último para diferentes maderas.

ANALISIS TIPICO DE MADERA SECA						
PORCENTAJE EN PESO						
ESPECIE	C2	H2	S2	O2	N2	ASH
CEDRO BLANCO	48.8	6.37		44.46		0.37
CIPRÉS	54.98	6.54		38.08		0.4
PINO, OREGÓN	52.3	6.3		40.5	0.1	0.8
HENLOCK, WESTERN	50.4	5.8	0.1	41.4	0.1	2.2
PINO, OCOTE	59	7.19		32.68		1.13
PINO, RESINA BLANCA	52.55	6.08		41.25		0.12
PINO, RESINA AMARILLA	52.6	7.02		40.07		1.31
SECOYA	53.5	5.9		40.3	0.1	0.2
FRESNO, BLANCO	49.73	6.93		43.04		0.3
HAYA	51.64	6.26		41.45		0.65
ABEDUL, BLANCO	49.77	6.49		43.45		0.29
OLMO	50.35	6.57		42.34		0.74
NOGAL AMERICANO	49.67	6.49		43.11		0.73
MAPLE	50.64	6.02		41.54	0.25	1.35
ROBLE, NEGRO	48.78	6.09		44.98		0.15
ROBLE, ROJO	49.49	6.62		43.74		0.15
ROBLE, BLANCO	50.44	6.59		42.73		0.24
ALAMO	51.64	6.26		41.75		0.65

Fuente :Energy from solid wastes (Cheremisinoff N. Paul and C. Morresi Angelo) 1999

Contenido Energético Del Combustible

La elección de un combustible para gasificación se decidirá, en parte, por su valor calorífico. El método de medición del contenido energético del combustible influirá en el cálculo de la eficiencia de un sistema determinado de gasificación. La información sobre los valores caloríficos de los combustibles suele ser confusa porque se emplean al menos tres bases diferentes:

- ❖ Los valores caloríficos superiores del combustible, obtenidos en un calorímetro adiabático de bomba. Estos valores incluyen el calor de condensación del agua que se produce en la combustión. Como es muy difícil recuperar el calor de condensación en operaciones reales de gasificación estos valores presentan una visión demasiado optimista sobre el contenido energético del combustible;
- ❖ los valores caloríficos superiores del combustible, con humedad cero, que ignoran el contenido real de humedad del combustible y dan por tanto estimaciones aún más optimistas del contenido energético;
- ❖ los valores caloríficos superiores del combustible, con cero de humedad y de cenizas, que ignoran los componentes incombustibles y dan por tanto estimaciones del contenido energético demasiado elevadas para un peso determinado de combustible, especialmente en el caso de algunos residuos agrícolas (cáscara de arroz).

Por lo tanto, la única forma realista de presentar los valores caloríficos de un combustible, para fines de gasificación, es dar los valores caloríficos inferiores (excluyendo el calor de condensación del agua producida) sobre la base de incluir las cenizas y con referencia específica al contenido real de humedad del combustible. En la siguiente tabla se dan los promedios de los valores caloríficos inferiores, de la madera, el carbón vegetal y la turba.

Promedios de los valores caloríficos inferiores

Combustible	Contenido de humedad (%)	Valor calorífico inferior (kJ/kg)
Madera	20 - 25	13 - 15 000
Carbón vegetal	2 - 7	29 - 30 000
Turba	35 - 50	12 - 14 000

Normas Oficiales Mexicanas de Emisiones Contaminantes a la Atmósfera.

Las especificaciones y requerimientos técnicos para el cumplimiento de la LGEEPA y sus reglamentos están contenidos en las Normas Oficiales Mexicanas (NOM) las cuales son resoluciones de control de carácter obligatorio ejercido específicamente en el ámbito administrativo. Las NOM que son aplicables a las actividades industriales objeto de los estudios de caso referido en este trabajo se enlistan a continuación.

NOM-034-ECOL-1993. Que establece los métodos de medición para determinar la concentración del monóxido de carbono en el aire ambiente y los procedimientos para la calibración de los equipos de medición.

NOM-035-ECOL-1993. Que establece los métodos de medición para determinar la concentración de partículas suspendidas totales en el aire ambiente y el procedimiento para la calibración de los equipos de medición.

NOM-037-ECOL-1993. Que establece los métodos de medición para determinar la concentración de nitrógeno en el aire y los procedimientos para la calibración de los equipos de medición.

NOM-038-ECOL-1993. Que establece los métodos de medición para determinar la concentración de bióxido de azufre en el aire y los procedimientos para la calibración de los equipos de medición.

NOM-043- ECOL-1993. Que establece los niveles máximos permisibles de emisión a la atmósfera de partículas sólidas provenientes de fuentes fijas.

NOM-085-ECOL-1994. Que establece los niveles máximos permisibles de emisión a la atmósfera de partículas, monóxido de carbono, óxido de nitrógeno, bióxido de azufre, neblina de ácido sulfúrico y partículas suspendidas, así como los requisitos y condiciones para la operación de los equipos de calentamiento indirecto por combustión y emisiones de bióxido de azufre en los equipos de calentamiento directo por combustión utilizados en fuentes fijas, que usan combustibles fósiles, líquidos o gaseosos o cualquiera de sus combinaciones.

NOM-086-ECOL-1994. Contaminación atmosférica especificaciones sobre protección ambiental que deben reunir los combustibles fósiles líquidos y gaseosos que se usan en fuentes fijas y móviles.

A continuación, se resumen las Normas Oficiales Mexicanas vigentes para evaluar la calidad del aire ambiente con respecto a ozono (O₃), bióxido de azufre (SO₂), bióxido de nitrógeno (NO₂), monóxido de carbono (CO), partículas suspendidas totales (PST), partículas menores a 10 micrómetros (PM10) y plomo (Pb).

Apéndice 3 Normas Oficiales Mexicanas de Emisiones Contaminantes a la Atmósfera

Valores normados para los contaminantes del aire en México

Contaminante	Valores Límite			Normas Oficiales Mexicanas
	Exposición agua		Exposición crónica (Para protección de la salud de la población susceptible)	
	Concentración y tiempo promedio	Frecuencia máxima aceptable		
Ozono (O ₃)	0.11 ppm (1 Hora)	1 vez cada 3 años	-	NOM-020-SSA1-1993
Monóxido de carbono (CO)	11 ppm (8 Horas)	1 vez al año	-	NOM-021-SSA1-1993
Bióxido de azufre (SO ₂)	0.13 ppm (24 Horas)	1 vez al año	0.03 ppm (media aritmética anual)	NOM-022-SSA1-1993
Bióxido de nitrógeno (NO ₂)	0.21 ppm (1 Hora)	1 vez al año	-	NOM-023-SSA1-1993
Partículas suspendidas totales (PST)	260 µg/m ³ (24 Horas)	1 vez al año	75 µg/m ³ (media aritmética anual)	NOM-024-SSA1-1993
Partícula menores a 10 µm (PM10)	150 µg/m ³ (24 Horas)	1 vez al año	50 µg/m ³ (media aritmética anual)	NOM-025-SSA1-1993
Plomo (Pb)	-	-	1.5 µg/m ³ (promedio aritmética en 3 meses)	NOM-026-SSA1-1993

Fuente: Diario Oficial de la Federación del 23 de diciembre de 1994.

Normas emitidas por la SEMARNAT para monitoreo ambiental para emisiones de fuentes fijas

Norma Oficial Mexicana	Niveles máximos permisibles de emisiones a la atmósfera
NOM-039-ECOL-1993	Bióxido y trióxido de azufre y neblinas de ácido sulfúrico en plantas productoras de ácido sulfúrico.
NOM-040-ECOL-1993	Partículas sólidas y control de emisiones fugitivas provenientes de industrias productoras de cemento.
NOM-043-ECOL-1993	Partículas sólidas.
NOM-046-ECOL-1993	Bióxido de azufre, neblinas de trióxido de azufre y ácido sulfúrico en plantas productoras de ácido dodecilsulfónico.
NOM-051-ECOL-1993	Gasóleo industrial que se consume por fuentes fijas en la ZMCM.
NOM-075-ECOL-1995	Compuestos orgánicos volátiles provenientes del proceso de separadores agua-aceite en las refinerías de petróleo.
NOM-085-ECOL-1994	Humos, partículas suspendidas totales, óxidos de azufre y óxidos de nitrógeno en fuentes fijas que utilizan combustibles fósiles.
NOM-092-ECOL-1995	Requisitos de los sistemas de recuperación de vapores de gasolina en estaciones de servicio y de autoconsumo ubicadas en el Valle de México.
NOM-093-ECOL-1995	Eficiencia de laboratorio de los sistemas de recuperación de vapores de gasolina en estaciones de servicio y de autoconsumo.
NOM-097-ECOL-1995	Material particulado y óxidos de nitrógeno en los procesos de fabricación de vidrio en el País.
NOM-105-ECOL-1996	Partículas sólidas totales y compuestos de azufre reducido total provenientes de la fabricación de celulosa.
NOM-121-ECOL-1997	Compuestos orgánicos volátiles (COV's) provenientes de las operaciones de recubrimiento de carrocerías de la industria automotriz así como el método para calcular sus emisiones.
NOM-123-ECOL-1997	Máximo permisible de compuestos orgánicos volátiles (COV's), en la fabricación de pinturas de secado al aire base solvente y para uso doméstico y los procedimientos para la determinación del contenido de los mismos en pinturas y recubrimientos.

Apéndice 3 Normas Oficiales Mexicanas de Emisiones Contaminantes a la Atmósfera

Normas de monitoreo ambiental

Norma Oficial Mexicana	Método de medición y calibración de equipo para la determinación de las concentraciones
NOM-034-ECOL-1993	Monóxido de carbono.
NOM-035-ECOL-1993	Partículas suspendidas totales.
NOM-036-ECOL-1993	Ozono.
NOM-037-ECOL-1993	Dióxido de nitrógeno.
NOM-038-ECOL-1993	Dióxido de azufre.

Efectos a la salud por contaminantes atmosféricos

Contaminante	Población expuesta y grupos en riesgo	Efectos a la salud
O ₃	Adultos y niños sanos	<ul style="list-style-type: none"> Disminución de la función pulmonar Incremento de la reactividad aérea Inflamación pulmonar
	Atletas, trabajadores al aire libre	<ul style="list-style-type: none"> Incremento de los síntomas respiratorios (efectos que se incrementan con el ejercicio)
	Asmáticos y gentes con otras enfermedades respiratorias	<ul style="list-style-type: none"> Disminución de la capacidad para realizar ejercicio (Efectos ocurridos en combinación con partículas y aerosoles ácidos) Incremento en el número de hospitalizaciones
CO	Adultos sanos	<ul style="list-style-type: none"> Disminución de la capacidad para realizar ejercicio
	Pacientes con enfermedad isquémica	<ul style="list-style-type: none"> Disminución de la capacidad para realizar ejercicio (Se incrementan los efectos con anemia o enfermedad pulmonar crónica) Angina de pecho
NO ₂	Adultos sanos	<ul style="list-style-type: none"> Incremento de la reactividad aérea
	Niños sanos	<ul style="list-style-type: none"> Disminución de la función pulmonar Incremento de síntomas respiratorios (incremento en el número de infecciones respiratorias) (Efectos encontrados dentro de las casas con uso de fuentes de combustión)
SO ₂	Adultos y pacientes con Enfermedad Pulmonar Obstructiva Crónica	<ul style="list-style-type: none"> Incremento en síntomas respiratorios (gas altamente soluble con poca penetración aérea a distancia) Incremento de mortalidad y hospitalización por enfermedades respiratorias Disminución de la función respiratoria (Observaciones hechas a poca exposición)
PM ₁₀	Niños	<ul style="list-style-type: none"> Incremento de síntomas respiratorios Incremento de enfermedades respiratorias Disminución de la función pulmonar (efectos vistos en combinación con SO₂)
	Efectos crónicos	<ul style="list-style-type: none"> Exceso de mortalidad
	Asmáticos	<ul style="list-style-type: none"> Incremento de la exacerbación del asma
Aerosoles ácidos	Adultos sanos	<ul style="list-style-type: none"> Alteración mucosilar
	Niños	<ul style="list-style-type: none"> Incremento de enfermedades respiratorias (efectos vistos en combinación con ozono y partículas)
	Asmáticos y otros	<ul style="list-style-type: none"> Disminución de la función pulmonar (incremento de hospitalizaciones)
Pb	Niños	<ul style="list-style-type: none"> Alteración de la función neuroconductual
	Adultos	<ul style="list-style-type: none"> Incremento de la presión sanguínea (asociado con los niveles de plomo en gasolina)

Fuente: Dirección General de Salud Ambiental, SSA, 1999.

Apéndice 3 Normas Oficiales Mexicanas de Emisiones Contaminantes a la Atmósfera

Efectos tóxicos de diferentes concentraciones de monóxido de carbono en el aire.

Porcentaje de CO en el aire	ppm	efectos
0,005	50	sin efectos importantes
0,02	200	posiblemente dolor de cabeza, en la frente y ligero durante 2 ó 3 horas
0,04	400	dolor en la frente y náuseas, después de 1 a 2 horas; en la parte posterior de la cabeza, después de 2,5 a 3,5 horas
0,08	800	dolor de cabeza, mareos y náuseas en 45 minutos; colapso y posiblemente inconsciencia, en 2 horas
0,16	1 600	dolor de cabeza, mareos y náuseas en 20 minutos; colapso e inconsciencia y posible fallecimiento, en 2 horas
0,32	3 200	dolor de cabeza y mareos en 5 a 10 minutos; inconsciencia y peligro de muerte, en 30 minutos
0,64	6 400	dolor de cabeza y mareos, en 1 a 2 minutos, inconsciencia y peligro de muerte, en 10 a 15 minutos
1,28	12 800	efecto inmediato; inconsciencia y peligro de muerte en 1 a 3 minutos

Bibliografía

Advanced Thermal Conversion Technologies for Energy from Solid Waste, IEA CADDET Centre for Renewable Energy, Oxfordshire, Reino Unido. Agosto 1998. Un informe conjunto del Programa de bioenergía de la IEA y del Programa de energías renovables de CADDET. <http://www.caddetre.org>

Anshu Bharadwaj, (2004). Effects of intraparticle Heat and Mass Transfer on Biomass Devolatilization: Experimental Results and Model Predictions. *Energy & Fuels* 18, 1021-1023.

A. Strehler, (2000). Technologies of wood combustion. *Ecological Engineering* 16, S25-S40. Elsevier.

A.V. Bridgwater, (2003). Renewable fuels and chemicals by thermal processing of biomass. *Chemical Engineering Journal* 91, 87-102.

Bonelli, P. R., Cassanello, M. C., & Cukierman, A. L. (2002). Caracterización Cinética de la pirólisis y Copirólisis de combustibles alternativos. *Avances en energías renovables y medio ambiente*. Vol. 6. No. 1, 0329-5184.

Chen, C., Horio, M., & Kojima, T. (2000). Numerical simulation of entrained flow coal gasifiers, Part I: Modeling of coal gasification in an entrained flow gasifier. *Chemical Engineering Science*, 55, 3861-3874.

Chen, C., Horio, M., & Kojima, T. (2000). Numerical simulation of entrained flow coal gasifiers, Part II: effects of operating conditions on gasifier performance. *Chemical Engineering Science*, 55, 3875-3883.

Colomba Di Blasi, (2000). Modelling the fast pyrolysis of cellulosic particles in fluid-bed reactors. *Chemical Engineering Science* 55, 5999-6013.

Colomba Di Blasi, (2002). Modeling Intra-and Extra-Particle Processes of Wood Fast Pyrolysis. *AIChE Journal* vol. 48, No. 10, 2386-2397.

Colomba Di Blasi, (1998). Multi-phase moisture transfer in the high-temperature drying of wood particles. *Chemical Engineering Science* Vol. 53, No. 2, pp 353-366.

Colomba Di Blasi, (1996). Heat, Momentum And Mass Transport Through A Shrinking Biomass Particle Exposed To Thermal Radiation. *Chemical Engineering Science*, vol. 51, No. 7, pp 1121-1132.

Compact Power, Avonmouth, Bristol, Reino Unido. <http://www.compactpower.co.uk>, 14 de enero de 2002.

Dai, X., Yin, X., Wu, C., Zhang, W., & Chen Y. (2001). Pyrolysis of waste tires in a circulating fluidized-bed reactor. *Energy*, 26, 385-399.

Eric Martinot, (2000). Renewable energy investment by the World Bank. *Energy Policy* 29, 689-699. Elsevier.

Bibliografía

Fu Yang Wang, Suresh K. Bhatia. (2001). A Generalized Dynamic Model For Char Particle Gasification With Structure Evolution And Peripheral Fragmentation. Chemical Engineering Science 56, 3683-3697.

Guadalupe De la Luz González., CALIDAD DEL AIRE EN LAS PRINCIPALES CIUDADES DE MÉXICO, Instituto Nacional de Ecología, México, Abril del 2000

Guo, B., Li, D., Cheng, C., Lü, Z., & Shen, Y. (2001). Simulation of biomass gasification with a hybrid neural network model. Bioresource Technology, 76, 77-83.

Jhon fredy Escobar, Juan Fernando Rincón Zapata y Jaime Aguirre Cardona, (2000). Gasificación de carbonizados. Simulación aplicando el modelo monofásico de Sundaresan-Amundson, Departamento de procesos, Universidad Nacional de Colombia.

J.M. Beér, (2000). Combustion technology developments in power generation in response to environmental challenges. Progress In Energy And Combustion Science 26, 301-327.

Kati Savolainen, (2003). Co-firing of biomass in coal-fired utility boilers. Applied Energy 74, 369-381. Elsevier.

Kenneth M. Bryden and Kenneth W. Ragland, (1996). Numerical Modeling of a Deep, Fixed Bed Combustor. Energy & Fuels 10, 269-275.

Lobachyov K. V., & Richter H. J. (1998). An advanced integrated biomass gasification and molten fuel cell power system. Energy Convers, 39, 1931-1943.

Lothar Reh, (1999). Challenges of circulating fluid-bed reactors in energy and raw materials industries. Chemical Engineering Science 54, 5359-5368.

Morten G Gronli, (2000). Mathematical Model for wood Pyrolysis-Comparison of Experimental Measurements with Model Predictions. Energy & Fuels 14, 791-800.

N. Fueyo, J. Ballester and C. Dopazo, (1997). The Computation Of Particle Size In Eulerian-Eulerian Models Of Coal Combustion. Int. J. Multiphase Flow vol. 23, No. 3, pp 607-612.

OLADE, (1997). Manual de gasificación, Organización Latinoamericana de Energía (UNESCO)

P.Y.H Fung, M.U.F. Kirschbaum, R.J. Riason, C. Stucley, (2002). The potential for bioenergy production from Australian forests, its contribution to national greenhouse targets and recent developments in conversion processes. Biomass & Bioenergy 22, 223-236.

R. Hilbert, F Tap, H. El-Rabii, (2004). Impact Of Detailed Chemistry And Transport Models On Turbulent Combustion Simulations. Progress In Energy And Combustion Science 30, 61-117.

Statewide Medical Services, Indianapolis, EE UU.
<http://www.med-dispose.com/pyrolysis.html>, 14 de enero de 2002

Bibliografía

W. Vicente et al., (2003). An Eulerian model for the simulation of an entrained flow coal gasifier. *Applied Thermal Engineering* 23, 1993-2008. Elsevier.

Weber, R., Sakurai, T., 2001. Formation characteristics of PCDD and PCDF during pyrolysis processes. *Chemosphere* 45: 1111-1117.

Zhou Lixing, (2000). Theory and numerical modeling of turbulent gas-particle flows and combustion. Science Press. Beijing, New York.