



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE INGENIERÍA

*“Simulación numérica de un gasificador de carbón con flujos
paralelos”*

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

INGENIERO MECÁNICO

P R E S E N T A:

JAVIER ALEJANDRO VILLEGAS LEGAL

DIRECTOR DE TESIS: DR. WILLIAM VICENTE Y RODRÍGUEZ

MÉXICO, CIUDAD UNIVERSITARIA

2010





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.

DEDICADO A:

A mis padres, a mis hermanos, a mis tías y mis primos que tanto me han ayudado a lo largo de mi vida, en todos los aspectos.

A todos mis amigos y compañeros.

AGRADECIMIENTOS:

A Dios, que tanto hace por mí.

A mi familia, que siempre esta conmigo, en la buenas y en las malas.

A mi tutor, Dr. William Vicente y Rodríguez, por todo su apoyo brindado.

A mis sinodales: Esteban Barrios, Eliseo Martínez, Martín Salinas y Javier Rosas

Y un agradecimiento especial a mi madre, que todo lo ha dado por mi y por mis hermanos.

1.	INTRODUCCIÓN	5
1.1	Antecedentes	6
1.2.	Clasificación de gasificadores	8
1.3.	Elementos principales de la gasificación	11
1.4.	Procesos fisicoquímicos que ocurren en la Gasificación	13
1.4.1.	Evaporación de la humedad	13
1.4.2.	Pirólisis o Volatización	14
1.4.3.	Oxidación y Reducción de los gases volátiles y del carbonizado	15
1.5.	Beneficios de la generación de energía por medio de gasificadores de biomasa vegetal	16
1.6.	Uso del gas de síntesis	17
1.7.	Problema a resolver	18
1.8.	Objetivo de la tesis	19
1.9.	Estructura de la tesis	19
2.	ECUACIONES DE TRANSPORTE	21
2.1.	Ecuaciones de conservación	21
2.2.	Conservación de la cantidad de movimiento	22
2.2.1.	Conservación de las especies químicas	23
2.3.	Conservación de energía (entalpía)	25
2.4.	Ecuación de estado	26
2.5.	Componentes de la partícula de carbón y fase gaseosa	27
2.6.	Ecuaciones del proceso de gasificación	27
2.6.1.	Secado de la partícula	27
2.6.2.	Pirólisis (Volatización)	28

2.6.3. Combustión y Gasificación	29
2.6.3.1. Reacciones Homogéneas	29
2.6.3.2. Reacciones Heterogéneas	31
2.7. Tamaño de partícula	32
2.8. Coeficiente de transferencia de calor entre la partícula y la fase gaseosa	33
2.9. Coeficiente de transferencia de masa entre la partícula y la fase gaseosa	33
2.10. Fuerza de arrastre entre la partícula y la fase gaseosa	34
2.11. Propiedades de transporte del sistema	34
2.12. Modelo de turbulencia	36
2.13. Dispersión turbulenta de la partícula	37
2.14. Promediado de ecuaciones	37
3. MÉTODO DE SOLUCIÓN	43
3.1. Método de volúmenes finitos	43
4. ANÁLISIS DE LOS RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN	49
4.1. Generalidades del proceso de gasificación de carbón	49
4.2. Formulación del problema	50
4.3. Descripción del sistema	51
4.4. Detalles Numéricos	54
4.5. Resultados	55
5. CONCLUSIONES	77
Apéndice A Modelos de turbulencia	79

Apéndice B Esquemas discretización	85
Bibliografía	88

Resumen

La biomasa vegetal (por ejemplo, carbón) es uno de los recursos energéticos con mayor potencial ya que permite la generación tanto de energía térmica como eléctrica, mediante tecnologías de bajo costo como la gasificación en lecho fijo. La transformación del carbón, un combustible sólido, en un combustible gaseoso, puede ser aprovechable en motores de combustión interna alternativos o en turbinas de gas como combustibles. Con el uso del carbón se obtiene una solución a dos problemas actuales, el alto costo del petróleo y la contaminación ambiental.

La gasificación es el proceso más flexible que existe para el aprovechamiento de residuos biomásicos, por medio de procesos termoquímicos. De los tipos de gasificación, el que utiliza aire como agente oxidante es el más utilizado, a pesar de que se obtiene un gas con un bajo poder calorífico, debido a su bajo costo.

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

Las ecuaciones para simular el reactor de flujos paralelos descendentes se basa en ecuaciones de conservación de la masa, de la energía y conservación de cantidad de movimiento de las fases. El efecto de turbulencia presentado por la fase gaseosa se determina usando el modelo $k - \varepsilon$.

El proceso a simular consiste en una alimentación de carbón y aire desde la parte superior del reactor. La combustión tiene lugar dentro del reactor, además de los procesos de gasificación, pirolisis, y secado.

El modelo proporciona información sobre la composición del gas de síntesis, velocidades, temperaturas de salida, y presión del proceso. Por último, los resultados obtenidos serán comparados con datos disponibles en la literatura.

CAPITULO 1

1. INTRODUCCIÓN

En las últimas décadas, el planeta ha presentado variaciones significativas en su clima, cuyo principal factor es el cambio climático debido principalmente al efecto invernadero. Este fenómeno evita que gran parte de la energía emitida por la Tierra se transmita directamente al espacio, provocando un continuo enfriamiento de la superficie terrestre. Este efecto invernadero se acentúa por la emisión de ciertos gases debidos a la quema de combustibles fósiles para generar energía. Estas actividades antropogénicas liberan grandes cantidades de dióxido de carbono (CO₂) y metano, principalmente, y que son enviados a la atmósfera.

Alrededor de las tres cuartas partes de las emisiones de CO₂ antropogénicas que se han producido en los últimos 20 años en el mundo se deben a la quema de combustibles fósiles, ya que el 80% de nuestra energía depende todavía de este tipo de combustibles, petróleo y gas natural. El resto se debe fundamentalmente a los cambios en el uso del suelo y, especialmente, a la deforestación. La única manera de evitarlo es gestionar la demanda de energía, aumentar la eficiencia energética y el uso de energías renovables.

El aprovechamiento de las fuentes de energía renovable, entre ellas la energía solar, eólica e hidráulica, y uso de combustibles de biomasa, es muy antiguo; desde hace muchos siglos ya se utilizaban, no obstante, después de la primera guerra mundial se produjo un retorno total a los combustibles fósiles, tan pronto como volvieron a estar disponibles, debido evidentemente a su comodidad, seguridad y ventajas económicas.

Recientemente se ha iniciado el interés por esta tecnología, especialmente como un medio de utilizar combustibles de biomasa, en vez de combustibles de petróleo importados de países en desarrollo. Este interés procede de la evidencia bien documentada de que durante la Segunda Guerra Mundial más de 1 millón de vehículos, autobuses, camiones, automóviles, barcos y trenes fueron propulsados por gasificadores alimentados a base de madera, carbón vegetal, turba o carbón mineral.

1.1. ANTECEDENTES

La gasificación es un proceso térmico que permite la conversión de un combustible sólido, tal como la biomasa, en un combustible gaseoso, mediante un proceso de oxidación parcial. El gas pobre resultante, conocido como gas de síntesis, tiene un valor calórico, que puede ser utilizado en turbinas de gas, en motores de combustión interna o en equipos de producción de calor y potencia. Ambos motores térmicos pueden ser acoplados a un generador para la producción de electricidad. Como agente oxidante en el proceso de gasificación se emplea, generalmente, vapor, oxígeno o aire. El gas de síntesis contiene monóxido de carbono (CO), dióxido de carbono (CO₂), hidrógeno (H₂), metano (CH₄), alquitrán (TAR), agua y pequeñas cantidades 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 O₂ se pueden alcanzar de 10 a 18 MJ/m³. Sin embargo, en la mayoría de los procesos se utiliza aire como agente oxidante, por razones económicas y tecnológicas. A diferencia de los procesos de combustión de carbón, la gasificación se realiza con defecto de oxígeno.

Además de sustituir a combustibles ligeros de origen fósil, la gasificación permite obtener altos rendimientos de generación de electricidad a partir de biomasa. Mediante la gasificación se pueden obtener rendimientos eléctricos de hasta un 30-32% mediante el uso de moto-generadores de gas de síntesis, mientras que con un ciclo Rankine convencional simple se tiene un rendimiento de hasta 22%.

Los sistemas de gasificación se vienen usando hace muchos años. Ellos han demostrado ser una buena alternativa para resolver los problemas energéticos en comunidades aisladas del sistema electro-energético.

Los principios básicos de la gasificación de la biomasa han sido conocidos desde finales del siglo XVIII, pero las primeras aplicaciones comerciales datan de 1830. Hacia comienzos de 1850 un gran número de lámparas de alumbrado público en Londres ya funcionaban con gas producido de la gasificación de biomasa, este experimento constituyó en el comienzo definitivo de las investigaciones en esta área.

Los orígenes del proceso de gasificación comienzan en Francia e Inglaterra en el siglo XIX donde se empleaba para la manufactura de un gas combustible cuyo uso era doméstico. Durante la Primera Guerra Mundial su uso se extendió en la fabricación de motores alimentados por biomasa o carbón para vehículos automotores, barcos, trenes y generadores de energía eléctrica de pequeña escala. Sin embargo, la llegada de combustibles fósiles relativamente baratos y de

“quemado” fácil como la gasolina desplazó a los gasificadores de la industria energética. En el inicio de la Segunda Guerra Mundial surgió un interés por formas alternativas de producir combustibles, retomando el uso de gasificadores en la industria automotriz. Un caso destacable de este hecho surgió en Suecia, donde en 1943 alrededor del 90% de los vehículos contaban con un motor basado en gasificador.

Cuando la producción de petróleo comenzó a estar disponible, el gas combustible producto de la gasificación de biomasa cayó. Actualmente debido al agotamiento de los combustibles y a la alza en los precios del petróleo, las tecnologías de gasificación han sido redescubiertas recientemente como una fuente de energía alternativa que ofrece varias ventajas sobre la combustión o quemado directo de combustibles fósiles como la gasolina y el carbón. De manera que el proceso de gasificación resulta atractivo debido a que es posible utilizar materiales de escaso valor comercial para generar energía eléctrica con alta eficiencia y baja producción de gases de efecto invernadero a un costo capital relativamente bajo.

Con ello se ha puesto en evidencia el efecto nocivo de los elevados precios del petróleo, en continuo aumento, para la economía y los esfuerzos de progresos de los países en desarrollo importadores de petróleo. Como resultado de ello, se ha producido un aumento del interés por las fuentes nacionales de energías renovables, de las cuales, la biomasa, en forma de madera o de residuos agrícolas, es el más fácilmente disponible en muchos países en desarrollo.

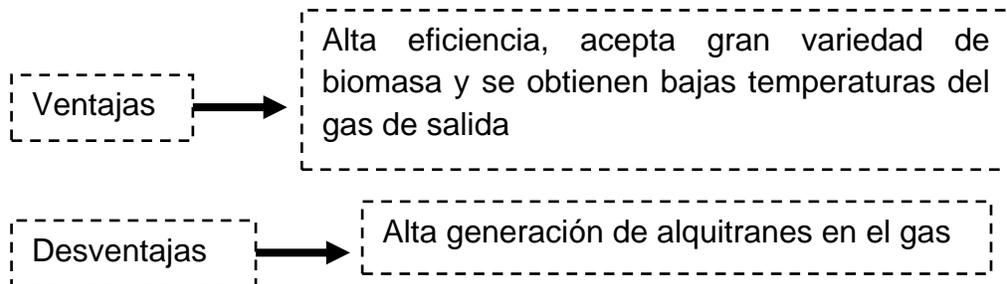
En el presente existe una creciente preocupación por el medio ambiente, que ha hecho generar una serie de cuestionamientos sobre continuar usando combustibles fósiles y por ello, la necesidad de producir energía sostenible ha incrementado la investigación en este campo y especialmente en el campo de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

1.2. CLASIFICACIÓN DE LOS GASIFICADORES

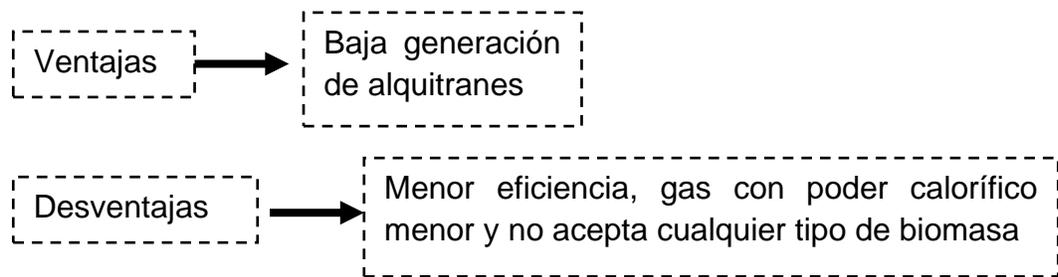
La gasificación se produce en el interior de equipos denominados gasificadores. Estos dispositivos son reactores de conversión termoquímica donde un combustible sólido/líquido reacciona con un agente oxidante/gasificante, produciendo un combustible gaseoso con una cierta composición, generalmente una mezcla de los gases H_2 , CO y CO_2 . Los criterios para caracterizar un gasificador son:

I. Fuente de energía:

- *Gasificador Directo*. La principal fuente de energía es el calor producido por la oxidación parcial de combustible sólido. La toma de aire se encuentra en el fondo y los gases salen por arriba del reactor. Los principales inconvenientes provienen de la posibilidad de que se produzcan chimeneas en el equipo, lo cual motiva la salida de oxígeno, así como la eliminación de la humedad contenida en los alquitranes.



- *Gasificador Indirecto*. La energía calórica es proporcionada por una fuente externa como puede ser una fase o un medio inerte calentado por la combustión del carbonizado producida en un gasificador de biomasa independiente. La principal ventaja de estos gasificadores radica en la posibilidad de producir un gas sin alquitrán.



II. La manera en que el combustible y el aire entran produciendo la reacción deseada:

- *Gasificador Updraft.* El aire es admitido por la parte baja de gasificador mientras que los sólidos se mueven de arriba hacia abajo en una circulación en contracorriente. Este tipo de gasificador tiene bien definidas las zonas de combustión parcial, reducción y pirolisis. El calor sensible del gas es utilizado para precalentar y secar el combustible; con ello, se logran altas eficiencias. Las desventajas que acusa este sistema de gasificación, son el alto contenido de alquitrán del gas producido y la capacidad marginal que tiene en su carga, y por ende la imposibilidad de generación de gas continuo que redundo en dificultades para la utilización en motores de combustión interna.
- *Gasificador Downdraft.* La partícula de combustible y los gases se mueven en la misma dirección. Las dificultades que se tiene que enfrentar en esta configuración es el contenido de cenizas y humedad en el gas producido; En general este tipo de configuración es más aceptable para aplicaciones en motores de combustión interna y turbinas de gas.
- *Gasificador Crossdraft.* Los gases generados se mueven de manera transversal con relación al combustible. Este gasificador tiene ventajas significativas sobre los gasificadores Updraft y Downdraft. El tiempo de arranque es de alrededor 5 minutos, tienen capacidad de operar con combustibles húmedos o secos y la temperatura del gas producido es relativamente alta. La composición del gas producido tiene un bajo contenido de hidrógeno y de metano. Como desventaja se debe considerar la necesidad de ser utilizados con combustibles

con bajo contenido de cenizas, como son la madera y el carbón mineral.

III. Según las condiciones de temperatura y presión bajo las cuales el líquido y un gas comparten la misma densidad.

- *Gasificador Subcrítico.* La temperatura y presión del gasificador se encuentran abajo del punto crítico agente gasificante dominante (presión de 220.9 bar y temperatura de 375.4°C).
- *Gasificador Supercrítico.* El punto de operación del gasificador se encuentra por encima del punto crítico.

IV. Según el movimiento del sólido fluidizado en conjunto con la fase gaseosa (formando un lecho).

- *Etapas cautiva.* No existe migración de partículas con el flujo del gas fuera del gasificador.
- *Etapas de Transporte.* Existe una gran migración de partículas fuera del gasificador debido a la fuerza de arrastre del flujo de gas saliente.

V. Según el movimiento del lecho sólido-gas.

Un lecho consiste en una columna formada por partículas sólidas, a través de las cuales pasa un fluido y sufre una caída de presión. Si el fluido se mueve a bajas velocidades a través del lecho no produce movimiento de partículas, pero al ir incrementando gradualmente la velocidad llega un punto donde las partículas no permanecen estáticas sino que se levantan y agitan, dicho proceso recibe el nombre de fluidización. A medida que se incrementa la velocidad del fluido, se incrementa el caudal (si el área se mantiene constante), y se puede distinguir diferentes etapas en el lecho:

- *Lecho fijo.* . Las partículas permiten el paso del fluido sin separarse unas de otras, lo cual hace que la altura del lecho se mantenga constante. Además las partículas se encuentran en estado estacionario sobre la rejilla para desechar las cenizas, por la cual fluye el aire de entrada ejerciendo una fuerza de arrastre sobre la

fase sólida de combustible que entra al reactor, produciendo una caída de presión cambiante a lo largo del lecho.

- *Lecho fluidizado.* El gasificador de lecho fluidizado permite más fácilmente el escalado del proceso y un mejor control de temperaturas del proceso. Además permite la adición de catalizadores. La principal desventaja es la alta concentración de partículas sólidas emitidas en el gas de salida, lo implica las subsecuentes etapas de depuración y acondicionamiento de los gases. La fluidización es el proceso que transforma partículas finas de sólido a un estado físico muy parecido al de un fluido por medio del contacto de un gas o un líquido. En un lecho fluidizado, la fuerza gravitacional sobre las partículas fluidizadas es vencida por la fuerza de arrastre del gas entrante, ejercida hacia arriba, manteniendo así una condición de semisuspendida. Existen dos tipos de fluidizaciones:

-Fluidización continua: Todas las partículas son removidas por el fluido, por el que el lecho deja de existir con tal, mientras que la porosidad tiende a uno.

-Fluidización discontinua: También se conoce como fase densa y es cuando el movimiento de las partículas se hace más turbulento, formándose torbellinos.

- *Lecho Turbulento.* Cuando la velocidad superficial del gas se incrementa a través del lecho fluidizado burbujeante, el lecho se expande debido al aumento de fracción de burbujas en la fase emulsionante. La fase burbujeante pierde su identidad a causa de la rápida coalescencia y consecuente ruptura masiva de burbujas y se presenta la fase turbulenta en la que el lecho muestra una superficie difusa.

Más características acerca de los distintos tipos de gasificadores se pueden observar en la tabla 1, al final del capítulo.

1.3. ELEMENTOS PRINCIPALES DE LA GASIFICACIÓN

- **Agentes gasificantes**

Según el agente gasificante que se emplee se producen efectos distintos en la gasificación, y el gas de síntesis varía en su composición y poder calorífico.

Si se gasifica con aire parte de la biomasa procesada se quema con el oxígeno presente, no obstante, el 50% del gas de síntesis es nitrógeno y en términos de poder calorífico el gas ronda los 5.5 MJ/m³.

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

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

• **Combustible de alimentación**

-Propiedades físicas. La biomasa vegetal tiene un tamaño homogéneo, estable en el tiempo y lo suficientemente pequeño para que las reacciones se produzcan a una velocidad adecuada, en un volumen razonable.

Un tamaño de partícula pequeño permite aumentar la calidad de gas de síntesis, reducir el tamaño del reactor o bien aumentar el tiempo de permanencia para el craqueo de las fracciones más pesadas y condensable (alquitranes). Un tamaño excesivamente pequeño puede hacer que la biomasa se atasque en los conductos o que sea arrastrada junto con las cenizas volantes al exterior de reactor antes de tiempo.

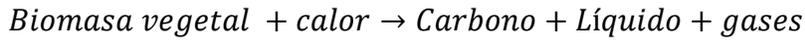
En conclusión en la mayoría de los casos, el tamaño de partícula no debe ser menor de 2-3 mm de diámetro.

-Composición química. Los valores de humedad de la materia a gasificar deben rondar del 10 al 15%.

Secar demás la biomasa vegetal presenta dos inconvenientes. El primero es que, a medida que se seca más, es más costos en términos energéticos y económicos. En segundo lugar, una biomasa secada más allá de su punto de equilibrio recupera la humedad al entrar en contacto con el aire del ambiente. En general la humedad facilita la formación de hidrógeno pero reduce la eficiencia térmica.

1.4.2 Pirólisis o Volatización (673 K – 1123 K).

La pirólisis consiste en la descomposición físico-química de la materia orgánica bajo la acción del calor y en ausencia de agentes oxidantes, produciendo una cantidad enorme de compuestos químicos. Los productos de la pirólisis son gases, líquidos, y carbonizado.

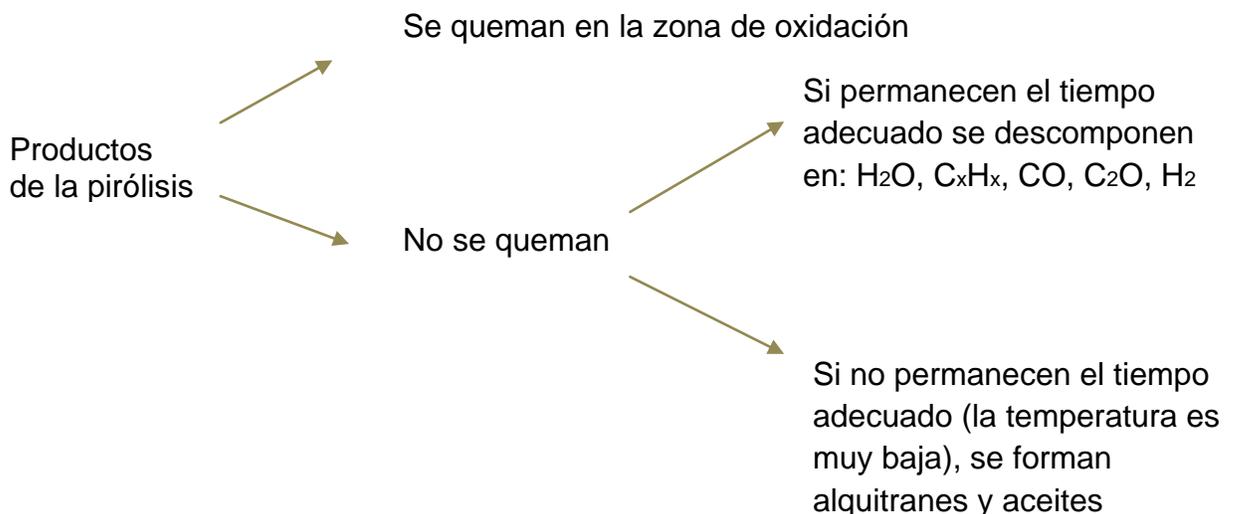


La proporción en que se obtiene cada uno de los productos básicos, depende de las propiedades de la biomasa vegetal a tratar y de los parámetros de operación del equipo:

- Temperatura del reactor.
- Tiempo de residencia de los productos en el reactor.
- Razón de calentamiento asociada con el tamaño de la partícula.
- Velocidad del gas de entrada.

Los productos de la pirólisis son agrupados en tres sustancias:

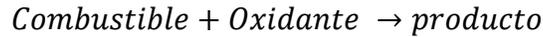
1. *Gases permanentes o volátiles*. Son gases simples como: CO_2 , CO , CH_4 , H_2 y otras cantidades pequeñas de hidrocarburos.
2. *Líquidos o gases pirolíticos (bio-aceite o alquitranes)*. Tiene un alto contenido de humedad proveniente del combustible y de las relaciones de descomposición.
3. *Carbonizado*. Es un hidrocarburo de fase sólida.



1.4.3. Oxidación y Reducción de los gases volátiles y del carbonizado

(923K – 1773K).

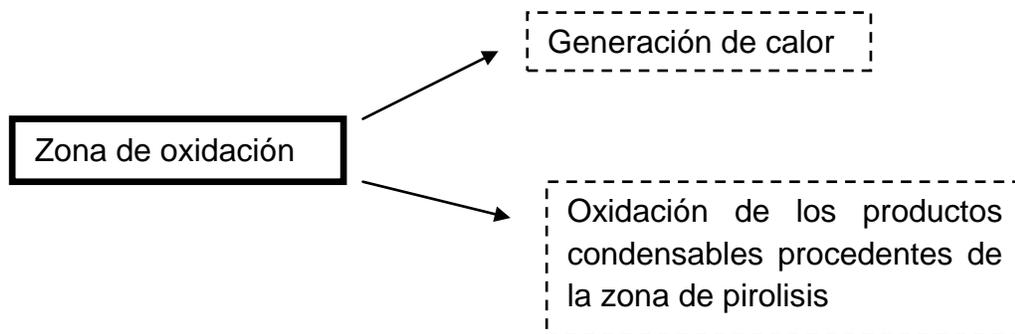
En este proceso se oxidan los productos volátiles procedentes de la pirólisis, y el carbonizado. En el proceso se combina un combustible y un oxidante, según proporciones másicas fijas, para producir un producto único:



Se suele dividir en dos zonas de reacción a este proceso:

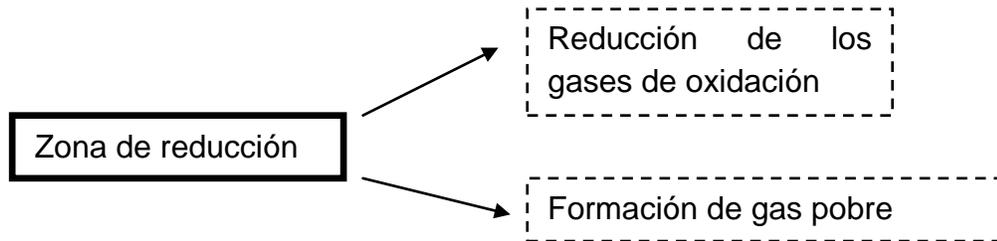
-Reacciones de Oxidación. En este proceso se obtiene la mayor energía calórica de la gasificación del carbonizado.

- *Reacciones heterogéneas de combustión del carbonizado.* Son reacciones de superficie que promueven la transferencia de masa entre el carbonizado y la fase gaseosa, provocando la reducción del tamaño de la partícula.
- *Combustión de los gases volátiles.* Son reacciones heterogéneas entre los productos del proceso de pirólisis. La rapidez de reacción de este proceso es mayor a la reacción de combustión del carbonizado.



-Reacciones de Reducción.

- *Reacciones heterogéneas de gasificación del carbonizado.* Son reacciones de superficie entre la fase sólida y la fase gaseosa cuyos productos son gases de bajo peso molecular.
- *Reacción de separación del CO₂.* Separación natural del CO₂ por medio de vapor de agua.



1.5. Beneficios de la generación de energía por medio de gasificadores de biomasa vegetal

El proceso de gasificación ofrece la posibilidad de utilizar una gran variedad de residuos sólidos biomásicos: desechos de la industria maderera, bosques naturales, subproductos agrícolas, agroindustriales y desechos sólidos municipales, así como residuos provenientes de la industria de refinación y destilación del petróleo y del carbón mineral conocidos en su conjunto como coque.

La consideración actual de la biomasa como una fuente de energía limpia se hace bajo nuevos criterios y enfoques.

-El balance de CO₂ emitido es neutro. La combustión de biomasa, si se realiza en condiciones adecuadas, produce agua y CO₂, pero la cantidad emitida de este último gas, principal responsable del efecto invernadero, es captada por las plantas durante su crecimiento. Es decir, el CO₂ de la biomasa viva forma parte de un flujo de circulación continuo entre la atmósfera y la vegetación, sin que suponga incremento de ese gas en la atmósfera.

-No emite contaminantes sulfurados o nitrogenados.

-Generación de energía a bajo costo. En un estudio comparativo de las tecnologías de generación de electricidad de alta eficiencia y de bajo impacto ambiental actuales (bajas emisiones de Dióxido de Carbono (CO₂), Óxidos de Azufre (SO_x) y Óxidos de Nitrógeno (NO_x) realizado por Beér (2007), se concluye que el incremento de la eficiencia de generación es el método de menor costo para disminuir las emisiones de CO₂, Óxidos de Azufre (SO_x) y Óxidos de Nitrógeno (NO_x).

-*Aprovechamiento completo del combustible.* Con un método de aprovechamiento o transformación (proceso físico, químico, termoquímico, biológico), cualquier tipo de biomasa (sólida o líquida) se puede aprovechar completamente.

-*Reduce el deterioro medioambiental.* La principal fuente de contaminación del aire es derivada de la quema de combustibles fósiles en reactores, motores u otros dispositivos. Esto debido a las emisiones de gases contaminantes:

- Óxidos de azufre.
- Óxidos de nitrógeno.
- Óxidos de carbono.
- Compuestos volátiles de orgánicos hidrocarburos.

Actualmente se ha favorecido el desarrollo de tecnologías de generación de energía que cumplan con las fuertes restricciones impuestas a las emisiones de gases de impacto ambiental por parte de organismos internacionales regulatorios. En este sentido, los gasificadores incorporan reacciones químicas o procedimientos físicos de secuestro y/o separación de Dióxido de Carbono (CO₂), Óxidos de Azufre (SO_x) y Óxidos de Nitrógeno (NO_x) que en su conjunto son denotados como procesos de limpieza del gas de síntesis.

1.6. Uso del gas de síntesis

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

-Interna: Para motores con chispa (gas pobre solamente) y motores diesel (gas pobre más un porcentaje de gasolina).

-Externa: Para turbinas de gas (gas pobre de alta calidad) y motores Stirling (gas pobre solamente).

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

1.7. Problema a resolver

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

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

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

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

Por todo lo anterior, esta tesis se basa en el modelo de simulación numérica computacional, en donde se simulará el proceso de gasificación de biomasa vegetal, en este caso carbón, en un gasificador de flujos paralelos descendentes.

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

1.8. Objetivo de la tesis

Se simulará los procesos internos de gasificación de carbón, en un gasificador de flujos paralelos descendentes (Downdraft) mediante un modelo de dinámica de fluidos computacional para reproducir, de manera cuantitativa, el comportamiento real de las variables de operación. Así mismo, los resultados serán comparados respecto a los valores obtenidos en la gasificación de biomasa vegetal, en un gasificador similar y a las mismas condiciones.

1.9. Estructura de la tesis

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

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

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

La simulación numérica realizada con el modelo dinámico deducido mediante el método de diferencias finitas espaciales, se presenta en el cuarto capítulo. El análisis y resultados obtenidos en la investigación, también se describen en el cuarto capítulo.

Finalmente, en el quinto capítulo, se muestran las conclusiones basadas en los resultados obtenidos de la presente investigación, así como posibles trabajos a futuro en base a la variación de la relación de aire-combustible.

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

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

“Simulación numérica de un gasificador de carbón con flujos paralelos”

CAPÍTULO 2

1. ECUACIONES DE TRANSPORTE

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

Los procesos de gasificación son modelados para ambas fases, así como la interacción entre la fase sólida y gaseosa.

2. ECUACIONES DE CONSERVACIÓN

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

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

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

Las fracciones volumétricas deben de cumplir la condición:

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

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

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

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

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

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

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

Para la fase gaseosa la ecuación (3) se resuelve para la entalpía, la velocidad de cada componente, la tasa de disipación, la energía cinética turbulenta, los flujos de radiación de cada componente, la energía cinética turbulenta y para las fracciones másicas de todas las especies químicas de la fase gaseosa (CH_4 , CO_2 , CO , H_2 , O_2).

2.2. CONSERVACIÓN DE LA CANTIDAD DE MOVIMIENTO

La conservación de cantidad de movimiento de flujo está dada por la ecuación:

$$\frac{\partial(\rho \vec{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla P + \nabla \cdot \vec{\tau} + \rho \vec{f}_m \quad (4)$$

Donde P es la presión, $\bar{\tau}$ es el tensor de esfuerzos viscosos, y \vec{f}_m son las fuerzas de cuerpo como la gravedad.

Los esfuerzos viscosos de la ecuación (4) están dados por la expresión:

$$\bar{\tau} = \mu(\nabla\vec{v} + \nabla\vec{v}^T) + \left(\mu_v - \frac{2}{3}\mu\right)(\nabla \cdot \vec{v})\bar{\delta} \quad (5)$$

Donde μ es la viscosidad de la mezcla, μ_v es el coeficiente de viscosidad volumétrica y $\bar{\delta}$ es el tensor delta de Kronecker. El coeficiente de viscosidad volumétrica se desprecia.

Sustituyendo la ecuación (5) en (4), obtenemos las ecuaciones de Navier-Stokes:

$$\frac{d(\rho\vec{v})}{dt} + \nabla \cdot (\rho\vec{v}\vec{v}) = -\nabla P + \nabla \cdot \left[\mu \left(\nabla\vec{v} + (\nabla\vec{v})^T + \frac{2}{3}(\nabla \cdot \vec{v})\bar{\delta} \right) \right] + \rho\vec{g} \quad (6)$$

2.3.1 CONSERVACIÓN DE LAS ESPECIES QUÍMICAS

La fracción másica de una especie α , de una mezcla de N especies se obtiene con la siguiente ecuación:

$$Y_\alpha = \frac{m_\alpha}{m_T} \quad (7)$$

La suma de todas las fracciones másicas debe de ser uno. La conservación de una especie α se expresa en términos de la fracción másica:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_\alpha) + \nabla \cdot (\rho\vec{v}Y_\alpha) = -\nabla \cdot J_\alpha + S_\alpha \quad \alpha = 1, 2, \dots, N \quad (8)$$

- **Fase sólida**

-Carbón:

$$\frac{\partial \rho_{carbón} Y_{carbón}}{\partial t} + \frac{\partial \rho_{carbón} Y_{carbón} v_s}{\partial z} = -r_{p1} \quad (9)$$

-Carbonizado (Char, C):

“Simulación numérica de un gasificador de carbón con flujos paralelos”

$$\frac{\partial \rho_C Y_{sC}}{\partial t} + \frac{\partial \rho_C Y_{sC} v_s}{\partial z} = v_{C,P1} r_{P1} - \alpha_s \sum_j W_C r_j \quad (10)$$

$$j = c5, g1 - g3$$

-Humedad (agua, w):

$$\frac{\partial \rho_w Y_w}{\partial t} + \frac{\partial v_s \rho_w Y_w}{\partial z} = -m_w \quad (11)$$

Continuidad del sólido:

$$\frac{\partial \rho_s}{\partial t} + \frac{\partial \rho_s v_s}{\partial z} = (1 - v_{C,P1}) r_{P1} - \sum_j W_C r_j = \dot{M}_{g \rightarrow s} \quad (12)$$

- **Fase gaseosa**

-Especies gaseosas (i):

$$\frac{\partial \rho_i Y_{gi}}{\partial t} + \frac{\partial \rho_i Y_{gi} v_g}{\partial z} - \frac{\partial \left(\varepsilon D_i \rho_g \frac{\partial Y_{gi}}{\partial z} \right)}{\partial z} = W_i \sum_j v_{i,j} r_j + v_{i,P1} r_{P1} \quad (13)$$

$$i = O_2, H_2, CO, CO_2, CH_4; \quad j = c1 - c5, g1 - g3, wg$$

-Vapor de agua (H₂O):

$$\frac{\partial \rho_{H_2O} Y_{gH_2O}}{\partial t} + \frac{\partial \rho_{H_2O} Y_{gH_2O} v_g}{\partial z} - \frac{\partial \left(\rho_{H_2O} \varepsilon D_{H_2O} \frac{\partial Y_{gH_2O}}{\partial z} \right)}{\partial z} = W_{H_2O} \sum_j v_{H_2O,j} r_j + v_{H_2O,P1} r_{P1} + m_w; \quad j = c1 - c5, g1 - g3, wg \quad (14)$$

-Nitrógeno (N₂):

$$\rho_{N_2} = \rho_g - \sum_{i \neq N_2} \rho_i \quad (15)$$

-Continuidad del gas:

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \frac{\partial \rho_g v_g}{\partial z} = \sum_i \sum_j M_i v_{i,j} r_j + (1 - v_{C,P1}) r_{P1} + m_w = \dot{M}_{s \rightarrow g} \quad (16)$$

$$i = O_2, H_2, CO, CO_2, CH_4, N_2, H_2O; \quad j = c1 - c5, g1 - g3, wg$$

2.3. CONSERVACIÓN DE ENERGÍA (ENTALPÍA)

La energía total de una mezcla es la suma de la energía cinética, potencial e interna, y se representa por la ecuación:

$$e = U + \frac{1}{2} |\vec{v}|^2 + u \quad (17)$$

La ecuación de la energía total es:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(U + \frac{1}{2} |\vec{v}|^2 + u \right) \right] + \nabla \cdot \left[\rho \vec{v} \left(U + \frac{1}{2} |\vec{v}|^2 + u \right) \right] \\ = \nabla \cdot (\vec{\tau} \cdot \vec{v}) - \nabla \cdot (\rho \vec{v}) - \nabla \cdot \vec{J}_\theta + \dot{Q}_r \end{aligned} \quad (18)$$

Donde \vec{J}_θ es el flujo difusivo de calor y \dot{Q}_r es el intercambio de calor por radiación y los primeros términos de la derecha representan el trabajo de las fuerzas viscosas y de presión.

La entalpía de la mezcla se define mediante la siguiente ecuación:

$$h = u + \frac{P}{\rho} \quad (19)$$

En términos de entalpía, la ecuación de la energía total de la mezcla está dada por:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(U + \frac{1}{2} |\vec{v}|^2 + h \right) \right] + \nabla \cdot \left[\rho \vec{v} \left(U + \frac{1}{2} |\vec{v}|^2 + h \right) \right] \\ = \left(\frac{dP}{dt} + \vec{v} \cdot \nabla \right) + \vec{\tau}' : \nabla \vec{v} - \nabla \cdot \vec{J}_\theta + \dot{Q}_r \end{aligned} \quad (20)$$

Donde $\vec{\tau}' : \nabla \vec{v}$ es la disipación viscosa Φ_v .

Para la fase sólida (Hs), la entalpía de la mezcla está representada por la ecuación:

$$\frac{\partial \sum_i \rho_i Y_{si} H_{si}}{\partial t} + \frac{\partial \sum_i \rho_i Y_{si} H_{si} v_s}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_s^* \frac{\partial T_s}{\partial z} \right) = - \sum_j r_{sj} \Delta H_{sr,j} - Q_{sg} + Q_{sc} - m_w \Lambda$$

$$i = w, \text{Cárbon}, C; \quad j = c5, g1 - g3, p1 \quad (21)$$

$$H_{si} = C_{si} (T_s - T_0)$$

Para la fase gaseosa (H_g), tenemos:

$$\frac{\partial \sum_i \rho_i Y_{gi} H_{gi}}{\partial t} + \frac{\partial \sum_i Y_{gi} H_{gi} \rho_i v_g}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_g^* \frac{\partial T_g}{\partial z} \right) = - \sum_j r_{gj} \Delta H_{gr,j} + Q_{sg} + Q_{gc}$$

$$i = O_2, H_2, CO, CO_2, CH_4, H_2O, N_2; \quad j = c1 - c4, p2, wg \quad (22)$$

$$H_{gi} = C_{gi} (T_g - T_0)$$

Donde para la fase sólida y la fase gaseosa, tenemos:

$$Q_{sg} = h_{sg} A_p v_p (T_s - T_g) \quad (23)$$

$$Q_{sc} = \frac{4h_{sc}}{D} (T_c - T_s) \quad (24)$$

$$Q_{gc} = \frac{4h_{gc}}{D} (T_c - T_g) \quad (25)$$

2.4. ECUACIÓN DE ESTADO

Las ecuaciones anteriores deben ser suplementadas con ecuaciones de estado que relacionen la presión, densidad y temperatura. La ley ideal del gas es una ecuación de estado simple las que relaciona las coordenadas termodinámicas de la fase gaseosa.

$$P = P_0 = \frac{\rho_g R T_g}{W_g} \quad (26)$$

$$W_g = \sum_i W_{gi} Y_{gi}; \quad i = N_2, O_2, CO_2, CO, H_2, CH_4, H_2O \quad (27)$$

2.5. COMPONENTES DE LA PARTÍCULA DE CARBÓN Y DE LA FASE GASEOSA

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

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

$$y_2^{ceniza} = 1 - y_2^{carb\acute{o}n\ seco} - y_2^{agua} - y_2^{char} \quad (28)$$

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

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

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

2.6. ECUACIONES DEL PROCESO DE GASIFICACIÓN

2.6.1. Secado de la partícula

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

$$\dot{m}_{secado} = \frac{\dot{q}_{1 \rightarrow 2}}{L} \text{ para } y_2^{agua} > 0; \quad (29)$$

$$\dot{m}_{secado} = 0 \text{ para } y_2^{agua} = 0 \quad (30)$$

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

La evaporación de la humedad de la biomasa vegetal (carbón) se controla por difusión, como se muestra en la siguiente ecuación:

$$m_w = v_p A_p k_m (\rho_v - \rho_{H_2O}) \quad (31)$$

$$\frac{RT^* \rho_v}{M_v} = \exp\left(a_1 - \frac{a_2}{T^*}\right) \quad (32)$$

Donde T^* es el valor promedio entre la temperatura del gas y del sólido.

2.6.2. Pirólisis (Volatización)

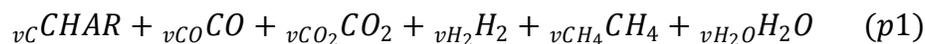
En el proceso de volatización de carbón, se considera que el carbón seco se consume para formar char y ceniza en la fase sólida, y materia volátil en la fase gaseosa.

$$1 \text{ kg de carbón seco} \rightarrow Y \text{ kg volátiles} + (1 - Y) \text{ kg char} \quad (33)$$

En la materia volátil se considerará un hidrocarburo general (CH_x). En CH_x , el subíndice “x”, representa la relación de carbono/hidrogeno, y se calcula por medio del análisis intermedio y final del carbón.

Una descripción del proceso químico de volatización es proporcionada por el submodelo de una reacción global con cinética de Arrhenius en el que los coeficientes estequiométricos de los volátiles, el carbonizado (CHAR) y los alquitranes (TAR) se deben especificar de acuerdo a resultados experimentales.

Carbón \rightarrow



La rapidez de volatización de la ecuación (p1), se modela por medio de la siguiente ecuación:

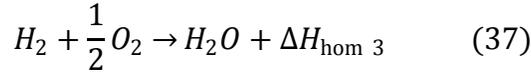
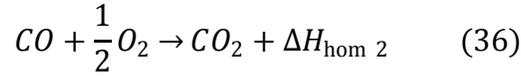
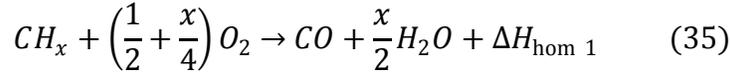
$$\dot{m}_{\text{volatización}} = -A_v Y r_1 \rho_2 \gamma_2^{\text{coal}} e^{-\frac{E_{p1}}{RT_2}} \quad (34)$$

Donde A_v es una constante, E_v es la energía de activación, R es la constante universal del gas, ρ_2 es la densidad del carbón, E_{p1} es la energía de activación, T_2 es la temperatura en la fase sólida. Las constantes A_v y E_v son constantes cinéticas, y dependen del tipo de carbón. Los valores de estas constantes se obtienen de la literatura de Smith, Ryback y Zembruski.

2.6.3. Combustión y gasificación

2.6.3.1. Reacciones homogéneas

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



Donde

$$\Delta H_{\text{hom } 2} = 23.59 \frac{MJ}{kg}, \Delta H_{\text{hom } 3} = 120.9 \frac{MJ}{kg} \quad y \quad (38)$$

$$\Delta H_{\text{hom } 1} = \frac{PCI}{\left[(1 - y_2^{agua}) - (y_c^{char}) (\Delta H_{hetero} + \Delta H_{\text{hom } 2}) \right] (y_c^{volatiles})} \quad (39)$$

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

Las tasas de reacciones químicas son calculadas por:

$$k = \min(k_{ar}, k_{EBU}) \quad (40)$$

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

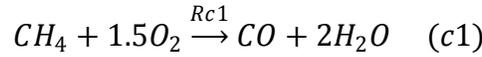
$$k_{EBU} = C_{EBU} \frac{\varepsilon}{k} \min\left(\frac{y_1^i}{S_i}, \frac{y_1^j}{S_j}\right) \quad (41)$$

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

$$k_{ar} = A\rho_1 e^{-\frac{E}{RT_i}} \quad (42)$$

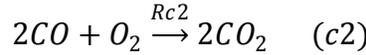
Por lo tanto, las reacciones de oxidación que se llevan a cabo son:

- Oxidación del metano.



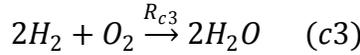
$$R_{c1} = k_{c1} T_m C_{CH_4} C_{O_2} = A_{c1} e^{-\left(\frac{E_{c1}}{RT_m}\right)} T_m C_{CH_4} C_{O_2} \quad (43)$$

- Oxidación del monóxido de carbono.



$$R_{c2} = k_{c2} C_{O_2} C_{CO} C_{H_2O}^{0.5} = A_{c2} e^{-\left(\frac{E_{c2}}{RT_m}\right)} C_{O_2} C_{CO} C_{H_2O}^{0.5} \quad (44)$$

- Oxidación del Hidrógeno.

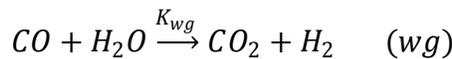


$$R_{c3} = k_{c3} C_{O_2} C_{H_2} = A_{c3} e^{-\left(\frac{E_{c3}}{RT_m}\right)} C_{O_2} C_{H_2} \quad (45)$$

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

$$T_m = \begin{cases} T_g + T_s; & \text{si } T_g \leq T_s \\ T_g; & \text{si } T_g > T_s \end{cases} \quad (46)$$

-Reacción de separación del CO₂ con vapor de agua.



$$R_{wg} = \alpha_g K_{wg} \left(C_{CO} C_{H_2O} - \frac{C_{CO_2} C_{H_2}}{K_E} \right) \quad (47)$$

$$K_{wg} = A_{wg} e^{-\left(\frac{E_{wg}}{RT_g}\right)} \quad (48)$$

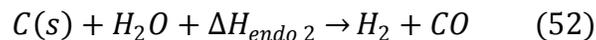
$$K_E = A_E e^{\left(\frac{E_E}{RT_g}\right)} \quad (49)$$

2.6.3.2. Reacciones heterogéneas

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

Las reacciones de combustión y gasificación del carbonizado son descritas por el modelo de núcleo no reactivo y partícula reducida, el cual se fundamenta en el modelo de contracción de núcleo inerte de la partícula de carbonizado. El modelo establece el concepto de velocidad de reacción debida a los efectos simultáneos de las diferentes resistencias internas a la transferencia de masa de una fase a otra (difusión a través de la película de gas en torno a la partícula y la cinética química intrínseca en la superficie). Las limitaciones de transferencia de masa durante una reacción heterogénea o disminución del tamaño de partícula por medio del modelo de núcleo no reactivo dependen del contenido de cenizas en el combustible.

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



CO y H₂ resultan de las reacciones (50)-(52) y son incorporadas para la fase gaseosa, y si las condiciones Stoichiométricas lo permiten, son oxidados por para producir CO₂ y H₂O, respectivamente.

La velocidad de reacción se calcula como sigue:

$$\dot{m}_{heterogeneo} = \frac{6r_2k_c}{2Dk_d} [-k_c + (k_c^2 + 4k_d^2P_i)^{1/2}] \quad (53)$$

Donde D es el diámetro de la partícula, P_i es la presión parcial de O₂ y H₂O, y k_c y k_d son las tasas cinéticas y de difusión, respectivamente. Los valores de k_c y k_d se calculan por medio de las siguientes ecuaciones:

$$k_c = A_h e^{-\frac{E_h}{RT_2}} \quad (54)$$

$$k_d = \frac{Sh D_k M_c}{RT_1 D} \quad (55)$$

Donde Sh es el número de Sherwood, M_c es el peso molecular del carbón, y D_k es el coeficiente de difusión para el O₂, H₂O y CO₂.

2.7. TAMAÑO DE PARTÍCULA

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

$$\frac{\partial(\rho_2 r_2 \Phi_s)}{\partial t} + \nabla(\rho_2 r_2 \Phi_s V_2) - \nabla(\Gamma_{r_2} \nabla r_2) = S_{\Phi_s} \quad (56)$$

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

$$D = D_i \Phi_s^{-1/3} \quad (57)$$

Como la reducción se produce como consecuencia de las reacciones heterogéneas, se tiene que considerar un modelo para el agente gasificante también:

$$r_j = \frac{C_i}{\frac{1}{k_m} + \frac{1}{k_j}} A_p v_p \quad (58)$$

$$K_j = A_j e^{-\left(\frac{E_j}{RT_s}\right)}; \quad j = c5, g1 - g3; \quad i = O_2, CO_2, H_2O, H_2 \quad (59)$$

Donde K_m es el coeficiente difusivo de transferencia de masa correspondiente a la especie reactante a través de la capa de la fase gaseosa que se forma alrededor de la partícula, K_j es la velocidad de de reacción de la superficie j .

2.8. COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA DE CALOR ENTRE LA PARTÍCULA Y LA FASE GASEOSA

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

$$q_{j \rightarrow i} = 6 \frac{r_2}{D^2} \rho_1 Nu k_1 (T_j - T_i) \quad (60)$$

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

$$Nu = 2.0 + 0.65 Re^{1/2} Pr^{1/3} \quad (61)$$

Donde Re es el número de Reynolds y Pr el número de Prandtl.

2.9. COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA DE MASA EN ENTRE LA PARTÍCULA Y LA FASE GASEOSA

El coeficiente es deducido a partir de modelos de masa difusiva que describen el intercambio de masa entre las fases sólida y gaseosa, por medio de una película estacionaria muy delgada e hipotética, conocidos como modelos de capa límite.

Las correlaciones para los sólidos y gases, en términos del número de Schmidt y el número de Reynolds, son tomadas de Gupta y Thodos (1963).

$$h_{sg} = \zeta \frac{2.06 C_g U_g \rho_g}{\epsilon} Re^{-0.575} Pr^{-\left(\frac{2}{3}\right)} \quad (62)$$

$$\widehat{K}_m = \eta_p A_p K_m \quad \eta_p = \frac{\alpha_s}{V_p} \quad (63)$$

$$V_p = \frac{4}{3} \pi r_c^3 = A_p \frac{r_c}{3} \quad (64)$$

$$k_m = \frac{2.06 v_g}{\alpha_g} Re^{-0.575} Sc^{-\left(\frac{2}{3}\right)}; \quad K_m \leq K'_m \quad (65)$$

$$k_m \leftrightarrow h_{s \rightarrow g}$$

Número de Schmidt \leftrightarrow Número de Prandtl

Donde K'_m es un límite correctivo máximo propuesto por Di Blasi (2000), que evita valores irrealistas de temperaturas, debidos a los cambios introducidos por las reacciones químicas.

2.10. FUERZA DE ARRASTRE ENTRE LA PARTÍCULA Y LA FASE GASEOSA

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

$$f_{i \rightarrow j} = f_{j \rightarrow i} = \frac{3r_2}{4D} \rho_1 C_d |V_r| \quad (66)$$

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

$$C_D = \frac{24(1 + 0.15Re^{0.687})}{Re} \quad (67)$$

2.11. PROPIEDADES DE TRANSPORTE DEL SISTEMA

-Conductividad térmica efectiva y Viscosidad del gas:

$$\lambda_g^{eff} = \lambda_g = 4.8 \times 10^{-4} T_g^{0.717} \quad (68)$$

$$\mu_g = 1.98 \times 10^{-5} \left(\frac{T_g}{300} \right)^{\frac{2}{3}} \quad (69)$$

Las difusividades efectivas son $D_{ig}^{eff} = D_{ig}$ debido a que se desprecia la turbulencia en forma de difusión de especies químicas gaseosas. Se calculan de acuerdo a la correlación de Fuller, Reid (1987).

$$D_{ig} = \frac{0.00143T^{1.75}}{PW_{ig}^{1/2} [(\Sigma_v)_i^{1/3} + (\Sigma_v)_g^{1/3}]^2} \quad (70)$$

$$W_{ig} = 2 \left[\frac{1}{W_i} + \frac{1}{W_g} \right]^{-1} \quad (71)$$

-Conductividad térmica efectiva de la fase sólida:

$$\lambda_s^{eff} = d_p \lambda_{rg} + \frac{\lambda_s}{\lambda_s / (d_p \lambda_{rs}) + 1.43(1 - 1.2\alpha_g)} \quad (72)$$

$$\lambda_{rg} = 4\sigma\epsilon_g T_g^3; \quad \epsilon_g = 0.05 \quad (73)$$

$$\lambda_{rs} = 4\sigma\epsilon_s T_s^3; \quad \epsilon_s = 0.85 \quad (74)$$

$$\lambda_s = 0.0013 + 0.05 \left(\frac{T_s}{1000} \right) + 0.63 \left(\frac{T_s}{1000} \right)^2 \quad (75)$$

-Velocidad del sólido. Se calcula a partir de la ecuación de continuidad y para ello es necesario conocer la densidad de sólido ρ_s , para lo cual existen dos opciones:

a) Considerarle constante a lo largo de todo el gasificador:

$$\rho_s = \rho_{Co} = v_C \rho_{Bo} \quad (76)$$

b) Aproximarla mediante la ley de los gases ideales justificado por el grado de fluidización de la fase sólida.

$$P = P_0 = \frac{\rho_s T_s R}{W_s} \quad (77)$$

$$W_s = \sum_i W_{si} Y_{si}; \quad i = B, A, C; \quad (78)$$

Di Blasi propone el cálculo de la velocidad del sólido para dos regiones del gasificador definidas por las reacciones heterogéneas que se llevan a cabo en él.

i. Región de volatización. Los efectos de las reacciones químicas se reflejan en la variación de la densidad parcial del carbonizado y por la ecuación que define el tamaño de la partícula.

$$\frac{\partial \rho_C \alpha_s}{\partial t} + V_s \frac{\partial \rho_C \alpha_s}{\partial z} = \alpha_s v_{C,p1} R_{p1} \quad (79)$$

$$V_s = V_{s0} = \text{velocidad del sólido}$$

$$\frac{V_p}{V_{p0}} = \left(\frac{d_p}{d_{p0}} \right)^3 = [(1 - \chi_{ash})X + \chi_{ash}]; \quad d_p \geq d_{pmin} \quad (80)$$

- ii. Región de oxidación y gasificación. Los efectos provocados por las reacciones químicas provocan la velocidad del sólido.

$$\rho_{C0} \frac{\partial \alpha_s V_s}{\partial z} = -\alpha_s \sum_j W_c \tau_j \quad j = c5, g1 - g3 \quad (81)$$

$$\rho_{C0} = v_c \rho_{B0} \quad (82)$$

$$\frac{V_p}{V_{p0}} = \frac{V_{s0}}{V_s} \quad (83)$$

2.12. MODELO TURBULENCIA

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

$$\nu_T = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (84)$$

Donde C_μ es una constante, k y ε , son la energía cinética turbulenta y la tasa de disipación, respectivamente. Los valores de k y ε son calculados con las ecuaciones de transporte. Las ecuaciones de momentum turbulento son:

$$\frac{\partial k}{\partial t} + u_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = (P_k - \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial j} \left(\frac{\nu_T}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) \quad (85)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + u_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} = \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial j} \left(\frac{\nu_T}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) \quad (86)$$

$$P_k = \nu_T \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \left(k + \nu_T \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \quad (87)$$

Las constantes se muestran en la tabla (2).

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

C_μ	0.09
σ_k	1.0
σ_ε	1.314
C_{g1}	1.44
C_{g2}	1.92

2.13. DISPERSIÓN TURBULENTA DE LA PARTÍCULA

Las partículas son dispersas por las fluctuaciones turbulentas en el campo del flujo. La dispersión es el resultado de la correlación $\overline{r'_2 V'_2}$. El modelo de gradiente de difusión es utilizado:

$$r'_2 V'_2 = -\frac{v_t}{\sigma_{r2}} \nabla r_2 \quad (88)$$

Donde σ_{r2} es calculado acorde Rizk y Elgobashi, como se muestra en la siguiente ecuación:

$$\sigma_{r2} = \left[1 + \frac{3}{2} 0.85 \frac{|V_r|^2}{k} \right]^{0.5} \quad (89)$$

2.14. PROMEDIADO DE ECUACIONES

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

Una de las alternativas para la simulación de flujos turbulentos reactivos, es el promedio de las ecuaciones instantáneas de conservación. Con este método, se promedian todas las fluctuaciones de las escalas temporales y se resuelven ecuaciones de transporte para los valores medios de las propiedades del fluido.

Estas ecuaciones no son cerradas, por lo cual se requieren modelos que reemplacen los términos no cerrados.

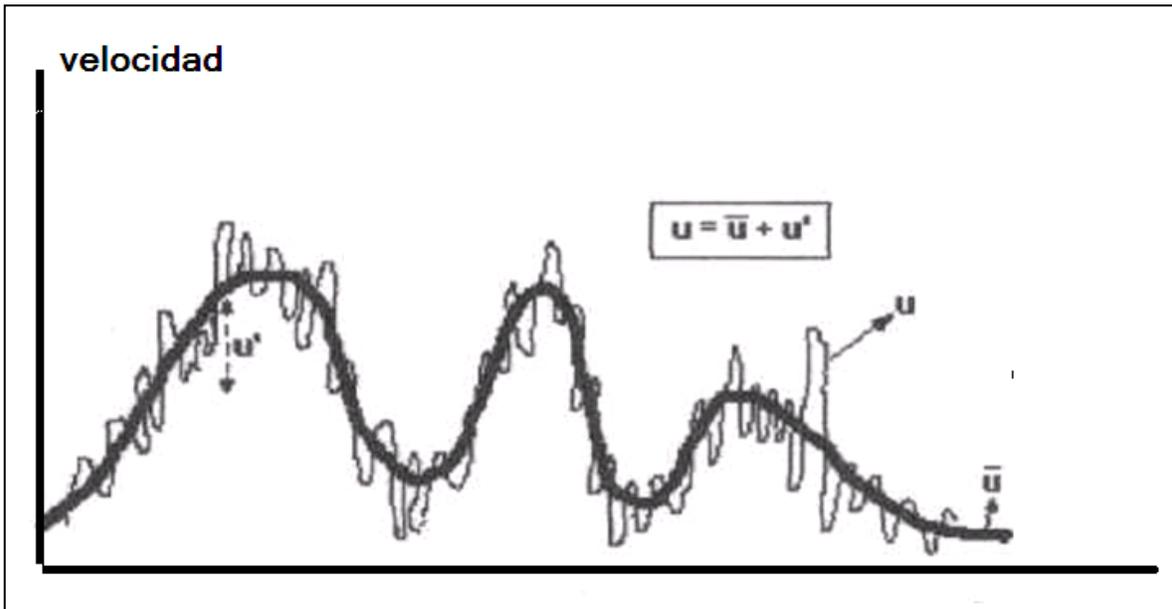


Figura 1. Representación de las fluctuaciones del flujo debido a la turbulencia.

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

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

$$\Phi = \bar{\Phi} + \Phi' \quad (90)$$

$$\Phi = \tilde{\Phi} + \Phi'' \quad (91)$$

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

$$\bar{\Phi} = \lim_{n_e \rightarrow \infty} \frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{n_e} \Phi^i \quad \text{Promediado de Reynolds} \quad (92)$$

$$\tilde{\Phi} = \lim_{n_e \rightarrow \infty} \frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{n_e} \rho^i \Phi^i \quad \text{Promediado de Favre} \quad (93)$$

En donde Φ^i es la muestra i del conjunto de realizaciones n_e de un experimento.

Por definición:

$$\overline{\rho\Phi''} = 0; \quad \overline{\Phi''} \neq 0 \quad (94)$$

Por lo tanto para los promedios se tiene:

$$\bar{\Phi} = \tilde{\Phi} + \overline{\Phi'} \quad (95)$$

$$\overline{\Phi''} = -\frac{\overline{\rho'\Phi''}}{\bar{\rho}} \quad (96)$$

$$\overline{\rho'\Phi''} = \overline{\rho'\Phi'} \quad (97)$$

$$\overline{u_i\Phi'} = u_i\Phi'' + \frac{\rho' u_i\Phi''}{\bar{\rho}} + \overline{u_i\Phi''} \quad (98)$$

Si se aplica el promedio de Favre a las ecuaciones instantáneas de continuidad, cantidad de movimiento, energía y especies químicas, se obtienen las siguientes ecuaciones:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\mathbf{v}}) = 0 \quad (99)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{\mathbf{v}}) + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\mathbf{v}}\tilde{\mathbf{v}}) \\ = \underbrace{-\nabla P + \nabla \cdot \left[\mu \left\{ \nabla\tilde{\mathbf{v}} + (\nabla\tilde{\mathbf{v}})^T - \frac{2}{3}(\nabla \cdot \tilde{\mathbf{v}})\vec{\delta} \right\} \right]}_I + \underbrace{\nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\mathbf{v}}''\tilde{\mathbf{v}}'')}_{II} + \rho g \end{aligned} \quad (100)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{Y}_\alpha) + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\tilde{Y}_\alpha) = \underbrace{\nabla \cdot \Gamma_\alpha \nabla \tilde{Y}_\alpha}_I + \underbrace{\nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}'' Y_\alpha'')}_{II} + \bar{S}_\alpha \quad (101)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{h}) + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\tilde{h}) = \underbrace{-\nabla \cdot \tilde{\mathbf{j}}_h}_I + \underbrace{\nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}'' h'')}_{II} \quad (102)$$

Si se aplica el promedio de Favre en la ecuación homogénea se obtiene:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{\phi}_z) + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\phi_z) = \underbrace{-\nabla \cdot (\Gamma \nabla \tilde{\phi}_z)}_I + \underbrace{\nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}'' \phi_z'')}_{II} \quad (103)$$

En flujos turbulentos, el término de difusión laminar (I), de las ecuaciones anteriores, es generalmente despreciable frente al término de difusión turbulenta (II), por lo tanto las ecuaciones anteriores se escriben como:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \vec{u}) = 0 \quad (104)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \vec{u}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \vec{u}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \vec{u} \vec{u}) = -\nabla \bar{P} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \vec{u}'' \vec{u}'') + \rho \vec{g} \quad (105)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{Y}_\alpha) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \vec{u} \tilde{Y}_\alpha) = \nabla \cdot (\bar{\rho} \vec{u}'' \tilde{Y}_\alpha'') + \dot{S}_\alpha \quad (106)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{h}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \vec{u} \tilde{h}) = \nabla \cdot (\bar{\rho} \vec{u}'' h'') \quad (107)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{\phi}_z) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \vec{u} \phi_z) = \nabla \cdot (\bar{\rho} \vec{u}'' \tilde{\phi}_z'') \quad (108)$$

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

Si el flujo es de baja velocidad ($Ma \ll 1$), generalmente se supone que las fluctuaciones de la presión son despreciables. Por lo tanto, los valores medios de la densidad y la tasa de reacción química se pueden expresar como función de una presión de referencia ρ_0 . Donde $\tilde{\phi}_\alpha$ representa la fracción másica de las especies químicas.

Los flujos turbulentos $\sigma'' \Phi''$ de las ecuaciones (105), (106), (107) requieren modelización.

La densidad $\bar{\rho}$ se puede escribir como:

$$\bar{\rho} = \rho(\tilde{T}, \tilde{\phi}_1, \dots \dots \tilde{\phi}_N) \quad (109)$$

Una de las principales dificultades que se presentan en la simulación de flujos turbulentos reactivos es la modelización de la tasa de reacción media. Esto se debe al efecto que tienen las fluctuaciones turbulentas en dicha tasa de reacción química, pues ésta es altamente no lineal, por lo que su media no puede ser calculada simplemente a partir de las variables medias, que son los resultados que se obtienen del modelo. En el modelado del término de reacción química es conveniente referirse a dos casos extremos que limitan el rango de situaciones posibles, y que son, la hipótesis de reacción infinitamente rápida o muy lenta.

Estas hipótesis se hacen a partir de comparaciones entre los tiempos característicos de la cinética química t_q , y de una escala de tiempos de turbulencia

t_l . El número de Damköhler es la relación entre estos tiempos: $Da_{Ko} = t_l/t_q$. La hipótesis de química rápida implica que $t_q \ll t_l$ o $Da \gg 1$ y la de química lenta $t_q \gg t_l$ o $Da \ll 1$.

Si se supone que la cinética química es infinitamente rápida, se puede considerar que la reacción ocurre en una capa delgada, que sufre convección, además de ser alabeada, y estirada o comprimida por la turbulencia, pero cuya estructura interna no es afectada por ella. Este tipo de modelos han dado lugar al desarrollo de modelos de tipo “mixed is burned” y de “laminar flamelet”. Los primeros ignoran totalmente la cinética química, mientras que los segundos consideran que dentro de la zona de reacción el flujo es laminar. Un modelo del tipo “mixed is burned”, utilizado frecuentemente en la simulación de flujos industriales de llamas de difusión, supone que la reacción química procede al paso dictado por la mezcla de reactantes a nivel molecular.

En el otro extremo del rango de números de Damköhler ($Da \ll 1$) se supone que la mezcla tiene lugar de forma mucho más rápida que la reacción química, y por lo tanto se puede considerar al fluido como perfectamente mezclado a nivel molecular al momento en que la reacción química tiene lugar. La tasa de reacción media se puede entonces aproximar con valores medios de los escalares termoquímicos:

$$\bar{S}_\alpha \approx S_\alpha(\bar{h}, \bar{\rho}, \bar{Y}_1, \bar{Y}_2, \dots, \bar{Y}_N) \quad (110)$$

Por esta razón, esta reacción química se denomina a menudo “pseudo laminar”. En combustión, las principales reacciones liberadoras de calor son demasiado rápidas para que esta aproximación se válida.

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

Constantes y Propiedades del proceso	Valor
Altura del reactor	$L = 0.5 \text{ m}$
Diámetro interno del reactor	$D = 0.1 \text{ m}$
Porosidad	$\varepsilon = 0.5$
Tamaño inicial de partícula	$d_{p0} = 0.00005 \text{ m}$
Contenido de cenizas	$\chi_{ash} = 0.105$
Densidad de la masa entrante	$\rho_{carbón} = \rho_{s0} = 1300 \text{ kg/m}^3$
Densidad del aire entrante	$\rho_{aire} = \rho_{g0} = 1.18 \text{ kg/m}^3$
Temperaturas de las paredes del reactor	$T_w = 600 \text{ K}$
Temperatura de los flujos entrantes	$T_w = T_{g0} = T_{s0} = 600 \text{ K}$
Presión de Operación	$P_0 = 1 \text{ atm}$
Factores de corrección de los coeficientes de transferencia	$\zeta = \frac{1}{2}$ y $k^*_m = 0.045 \text{ m/s}$
Humedad del carbón entrante	$Y_{L0} = 5\% \text{ (biomasa seca)}$
Composición del aire	$Y_{N_2O} = 0.764, Y_{O_2O} = 0.23, Y_{H_2O} = 0.006$
Composición del carbón (análisis aproximado)	$Y_{humedad} = 0.053, Y_{char} = 0.358$ $Y_{volatil} = 0.467, Y_{ash} = 0.121$
Composición del carbón sin humedad (análisis final)	$Y_{carbón} = 0.776, Y_H = 0.065$ $Y_{O_2} = 0.139, Y_N = 0.0113$
Composición del carbonizado	$\alpha = 0.2526, \beta = 0.0237, \gamma = 0.8013$

CAPÍTULO 3

3. ANÁLISIS DE RESULTADOS DE SIMULACIÓN

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

3.1. ANÁLISIS DE RESULTADOS DE SIMULACIÓN

Se pueden representar las ecuaciones medias de continuidad, cantidad de movimiento y del modelo de turbulencia, mediante una ecuación general, donde la variable dependiente está representada por $\tilde{\phi}$:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{\phi}) + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\phi}\tilde{u}_i) - \nabla \cdot (\Gamma_\phi \nabla \tilde{\phi}) = \bar{S}_\phi \quad (111)$$

Donde Γ_ϕ es el coeficiente de difusión, y \bar{S}_ϕ es el término fuente. Los términos del lado izquierdo de la ecuación (111) son el término transitorio, convectivo y de difusión respectivamente. Los términos Γ_ϕ y \bar{S}_ϕ están especificador para cada variable $\tilde{\phi}$. En el caso de la ecuación de continuidad $\tilde{\phi} = 1$.

La ecuación anterior se puede discretizar con el método de volúmenes finitos. Con dicho método, el dominio se divide en pequeños volúmenes de control, como se observa en la figura 2, asociando a cada uno de ellos un punto nodal. De forma similar se discretiza el tiempo en intervalos temporales. La ecuación diferencial resultante se integra en cada volumen de control y cada intervalo temporal, y el resultado es una ecuación discretizada que relaciona los valores de $\tilde{\phi}$ para un determinado grupo de puntos nodales. Esta ecuación algebraica expresa el principio de conservación de $\tilde{\phi}$ en el volumen finito, de la misma manera que la ecuación diferencial lo expresa para un volumen infinitesimal. La ecuación algebraica para un nodo P puede expresarse en forma general como:

$$a_P \tilde{\phi}_P = \sum_{i=B,W,N,S,H,L} a_i \tilde{\phi}_i + a_T \tilde{\phi}_T + B \quad (112)$$

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

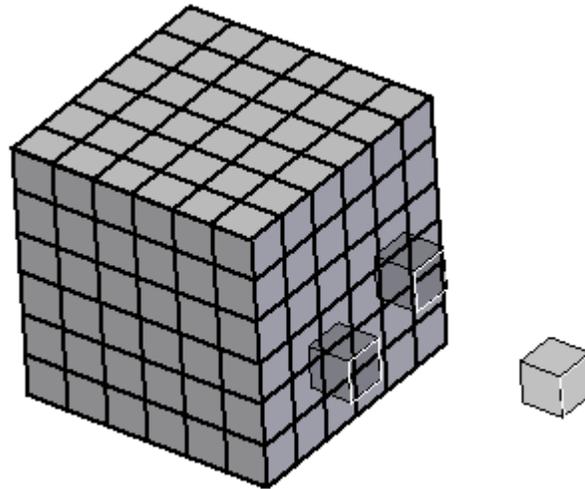


Figura 2. Representación del sistema discretizado en volúmenes finitos.

En el caso de una malla cartesiana, escalona (“staggered”) y uniforme (celdas de iguales dimensiones espaciales), se puede emplear por sencillez un volumen de control bidimensional, como el que se muestra en la figura 3 (el espesor de la celda en dirección z puede considerarse la unidad.) En una malla escalonada, las variaciones se encuentran definidas en el centro de la celda, mientras que las componentes de velocidad en cada dirección, correspondientes a la celda, se encuentran desplazadas a las caras de la celda.

En la figura 3, se muestra la notación de la celda y de sus vecinas. Dada una celda P , sus vecinas se nombrarán según las iniciales de los puntos cardinales (en inglés) en las direcciones “ x ” e “ y ” y como “Low” y “High” en la dirección z . Las caras de la celda se nombran con la misma nomenclatura, pero con letras minúsculas. A su vez, el tiempo también se discretiza. Las celdas en la dirección temporal se llaman intervalos temporales. La celda P en el paso temporal se nota como T .

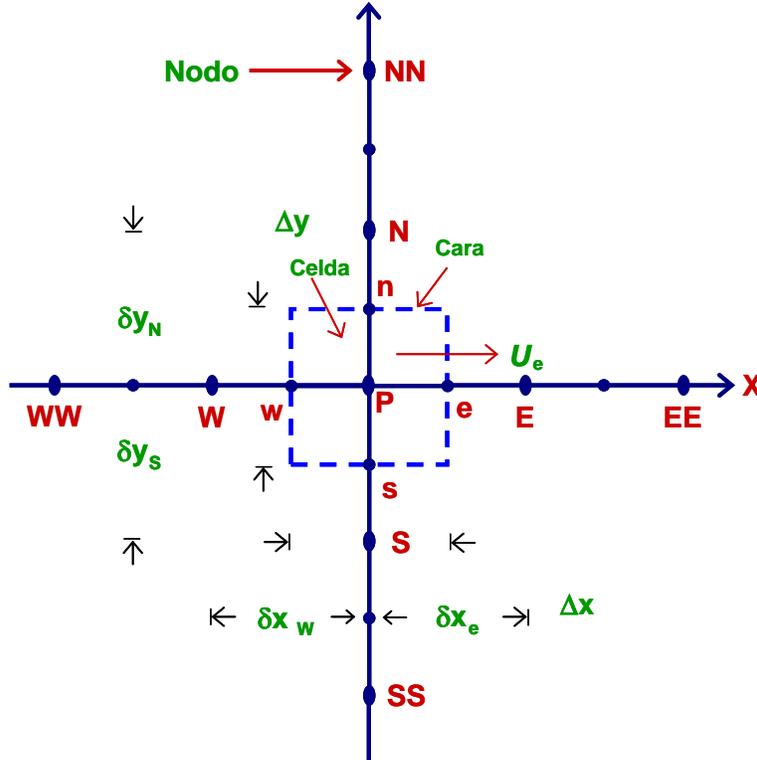


Figura 3. Diagrama esquemático de un volumen de control bidimensional

A continuación, se presentan los términos de la ecuación discretizada (112).

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

$$F = \overline{\rho \tilde{v}}_i \quad D = \frac{\Gamma}{\delta_i} \quad Pe = \frac{F}{D} \quad (113)$$

Donde \tilde{v}_i es la velocidad en la cara i , δ_i es la densidad entre los nodos que incluyen la cara i y Pe es el número de Peclet, que es la fracción entre la convección y la difusión, \tilde{v} es la velocidad de la cara i y x_i . Las expresiones F y D representan el efecto de los términos convectivo y difusivo de la ecuación de transporte (111) respectivamente.

Los coeficientes a_i de la ecuación de la ecuación (112) son:

$$a_i = D_i f(|Pe|_i) + \max(-F_i, 0) \quad (114)$$

Los valores F y D en la cara de la celda de la ecuación (113) son:

$$F_i = (\bar{p}\bar{v})_i \Delta_i, \quad D_i = \frac{\Gamma_i \Delta_i}{(\delta_i)}, \quad i = n, s, e, w \quad (115)$$

Donde Δ_i es la longitud de la cara i .

Para determinar F_i se necesita conocer \bar{p} y \bar{u}_i en la cara de la celda, El cálculo del término convectivo de la ecuación de transporte (111) requiere también el conocimiento de la variable escalar, $\bar{\phi}$, en la cara de la celda. La velocidad \bar{v}_i está calculada en la cara de la malla secuenciada; pero \bar{p} y $\bar{\phi}$ están calculados en el nodo y necesitan ser interpolados a la cara para calcular los coeficientes a_i de la ecuación discretizada (112).

La obtención de estas variables en la cara de la celda es importante para la precisión y convergencia de la solución. El cálculo de \bar{p} y $\bar{\phi}_i$ da lugar a los llamados esquemas de discretización. La función $f(|Pe|)$ de la ecuación (112) depende del esquema de interpolación. Por ejemplo, en el esquema de diferencias desplazadas $f(|Pe|) = 1$, y para el sistema híbrido:

$$f(|Pe|) = \max(0.1 - 0.5|Pe|) \quad (116)$$

El coeficiente para el término transitorio es:

$$a_T = \frac{\rho_T \Delta x \Delta y}{\Delta t} \quad (117)$$

Para obtener el coeficiente D_i (114) se necesita calcular el coeficiente de difusión, Γ , en la cara de la celda. El coeficiente Γ no es necesariamente una constante, sino probablemente una función de los valores variables que se conocen en los nodos, y por lo tanto es necesario interpolarlo a la cara. Esta interpolación puede ser aritmética o armónica. Por ejemplo, para la cara e , estas son las interpolaciones:

$$\Gamma_e = \frac{\Delta x (\Gamma_p + \Gamma_E)}{2\delta x_e} \quad (118)$$

$$\Gamma_e = \frac{2\delta x_e}{\Delta x \left(\frac{1}{\Gamma_p} + \frac{1}{\Gamma_P} \right)} \quad (119)$$

El término fuente de la ecuación general (111) δ_ϕ , se linealiza como:

$$\bar{S}_\phi = \bar{S}_{\phi,c} + \bar{S}_{\phi,v} \bar{\phi} P \quad (120)$$

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

Con esta suposición, los términos B y a_p de la ecuación (112) son:

$$B = \bar{S}_{\phi,c} \Delta x \Delta y + a_T \tilde{\phi}_T \quad (121)$$

$$a_p = a_e + a_w + a_n + a_s + a_T - \bar{S}_{\phi,y} \Delta x \Delta y \quad (122)$$

La ecuación (111) se aplica en cada celda del domino, para cada ϕ y para cada paso temporal Δt , por lo que se tiene un sistema de ecuaciones lineales (los coeficientes de a pueden depender, directa o indirectamente de $\tilde{\phi}$, por lo que el sistema es realmente pseudo-lineal). Para resolver el sistema de ecuaciones se puede utilizar cualquier método de resolución de ecuaciones diferencial.

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

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

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

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

$$\bar{S}_{\phi,T} = \frac{\rho V_p}{\Delta t_f} (\tilde{\phi}_P^{(n-1)} - \tilde{\phi}_P^{(n)}) \quad (123)$$

Donde V_p es el volumen de la cara P, Δt_f es el intervalo de tiempo falso y el superíndice n se refiere al número de iteración.

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

$$\tilde{\phi}_p^{(n)} = \alpha \tilde{\phi}_p^{sol} + (1 - \alpha) \tilde{\phi}_p^{(n-1)} \quad (124)$$

Donde α es el factor de relajación, el súper índice *sol* se refiere al valor de la propiedad proporcionado por el “solver” en la iteración actual. El factor de relajación α , normalmente toma valores entre 0 y 1.

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

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

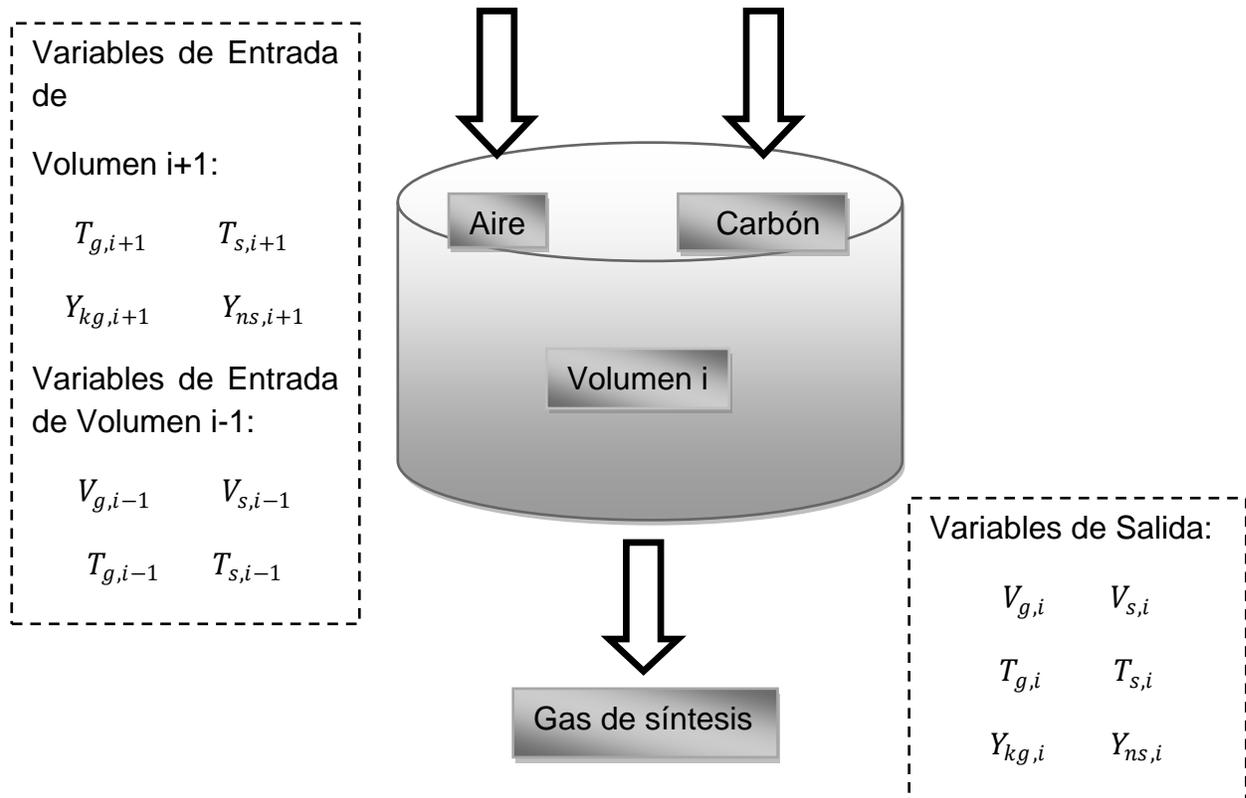


Figura 4. Volumen de control *i* con variables de entrada y salida

CAPÍTULO 4

4. ANÁLISIS DE RESULTADOS DE SIMULACIÓN

En este capítulo se presenta el sistema que se simuló, las consideraciones que se tomaron en cuenta para obtener los resultados deseados, así como los resultados obtenidos en los flujos de salida del gasificador de flujos paralelos.

4.1. GENERALIDADES DEL PROCESO DE GASIFICACIÓN DE CARBÓN

La simulación numérica presenta los procesos de secado del carbón, la volatilización, gasificación y combustión del carbón fijo (Char), así como la combustión de especies de la fase gaseosa.

Para modelar el gasificador de carbón se tienen las siguientes características:

- Se utiliza un modelo Euleriano para el análisis de la cinemática de las variables de transporte de ambas fases.
- Las especies químicas modeladas para la fase gaseosa son: CO₂, CO, O₂, CH_x, H₂, Vapor de agua.
- En la fase sólida se consideran cuatro especies principales: el carbón, el carbonizado producto de la pirólisis, ceniza y humedad.
- Se consideran tres reacciones de cinética química: La pirólisis, que abarca únicamente la degradación térmica del carbón debido a la acción del calor y produce volátiles (CO₂, CO, H₂O, H₂, CH₄) y carbonizado. La combustión, que considera solo la oxidación de los gases volátiles y del carbonizado. La gasificación entre la superficie de la fase sólida y la fase gaseosa y las reacciones de las fases gas-gas, tal como lo es, la separación natural de CO₂ por medio de H₂O.
- El reactor es cilíndrico con la misma área transversal en todo lo largo.
- Existe flujo de masa de las dos fases.
- Los principales procesos que son modelados son:

- La evaporización de la humedad.
- La gasificación heterogénea (Vapor H_2O , CO_2 y H_2).
- Combustión del carbonizado (char).
- Combustión de las especies volátiles.
- Transferencia de calor a través de las paredes.
- Transferencia de masa.
- Tasas finitas de cambio gas-vapor de agua y fase gas.
- Transferencia de calor entre las fases.

4.2 FORMULACIÓN DEL PROBLEMA

Durante los últimos años se han realizado estudios de manera numérica sobre gasificadores de todo tipo y características para poder así analizar el proceso de gasificación, obtener una mejor eficiencia en el sistema y una mayor cantidad de energía calorífica.

El caso que se va a simular consiste en un reactor continuamente llenado por un flujo de carbón, mientras se inyecta aire desde la parte superior, en sincronía con el carbón, véase la figura (5).

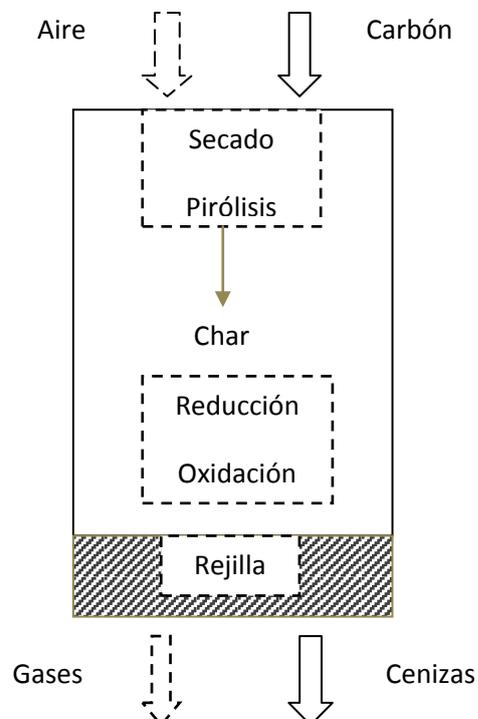


Figura 5. Gasificador de carbón con flujos concurrentes (Downdraft)

La pirólisis, secado, combustión, gasificación y el precalentamiento de la alimentación en frío tiene lugar dentro del gasificador. La combustión suministra calor para el proceso endotérmico de gasificación del carbonizado (char) y los volátiles,

El modelo de flujo de dos fases (sólidos-gas) de los mecanismos de transporte para reactores de gasificación se basa de acuerdo al enfoque del modelo Euleriano, el cual analiza el comportamiento de las variables de transporte en un volumen de control fijo con coordenadas espaciales fijas para ambas fases.

El modelo euleriano se utiliza para la mezcla heterogénea de dos fases en la que se emplean ecuaciones de conservación de masa, energía, especies químicas y momentum para describir el comportamiento de cada fase independiente, suponiendo que éstas son continuas. Las ecuaciones de conservación para la fase gaseosa y la fase sólida son resueltas por el programa de fluidos computacionales mediante un método de volúmenes finitos.

4.3 DESCRIPCIÓN DEL SISTEMA

Un esquema del reactor (volumen de control) se puede observar en la figura 6. El gasificador es del tipo down-draft. En la sección superior, aire y carbón pulverizado son introducidos. El carbón pulverizado se volatiliza y reacciona con oxígeno, elevando su temperatura para posteriormente llevarse a cabo las reacciones endotérmicas (Char-CO₂ y Char-H₂O). Las reacciones producen principalmente CO y CH_x, y en menor proporción, H₂ y CO₂.

Se consideraron partículas de carbón de 0.00005 m de diámetro. El aire de alimentación se considera compuesto de 77% de nitrógeno y 21% de oxígeno en mol y con una temperatura de 600 K. Los componentes (YCH_x, YCO, YCO₂, YH₂O y YH₂) tienen un valor inicial de 0%.

El reactor, donde se lleva a cabo la reacción de gasificación, utilizado en la simulación numérica realizada en esta tesis, es un eje cilíndrico hueco con diámetro interno de 0.45 m y una longitud de 0.5 m.

Los flujos de entrada de carbón y aire son por la parte superior del reactor, y la salida del gas de síntesis y ceniza se da por la parte inferior.



Figura 6. Volumen de control del gasificador de carbón con flujos concurrentes

-Condiciones de frontera

Las condiciones de frontera necesarias para solucionar las ecuaciones de conservación del proceso, se describen en esta sección.

-En la parte superior del reactor ($z=L$), las condiciones del carbón introducido son:

$$\rho_{carb\acute{o}n} = \rho_{s0} = 1300 \text{ kg/m}^3$$

$$V_{s0} = 0.00242 \text{ m/s}$$

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial z} = 0; \quad i = CO_2, CO, H_2, CH_4, O_2, H_2O, T$$

$$T_s = T_{s0} = 600$$

Donde V_{s0} , es la velocidad inicial del sólido (carbón), T_{s0} la temperatura a la que entra el carbón y ρ_{s0} su densidad inicial.

-Las condiciones de alimentación del agente oxidante, aire, son:

$$\rho_i = 0; \quad i = CO_2, CO, H_2, CH_4, T$$

$$\rho_{aire} = \rho_{g0} Y_{i0}; \quad i = N_2, O_2, H_2O$$

$$V_{g0} = 0.04715 \text{ m/s}$$

$$T_g = T_{g0} = 600$$

Donde V_{g0} es la velocidad inicial del gas, aire, T_{g0} la temperatura a la que entra el aire, y ρ_{g0} su densidad inicial.

Las constantes de referencia a las condiciones de frontera se encuentran en la Tabla 3.

Para un equilibrio de operación en el que los frentes de reacción de combustión, pirólisis y gasificación se encuentran en la parte inferior del reactor es necesario imponer un flujo másico de combustible sólido en la entrada del gasificador \dot{m}_s ($z=L$) y un flujo másico de aire \dot{m}_g ($z=L$). Para tener una relación de aire/combustible de 1.5, que es la misma relación utilizada en la simulación de gasificación de biomasa, con la cual se compararán resultados, se tiene que tener los siguientes gastos de aire y carbón a la entrada:

$$\dot{m}_{carbón,s} = 18 \text{ kg/h} \quad \dot{m}_{aire,g} = 27 \text{ kg/h}$$

A partir de estos flujos y de las densidades de carbón y aire, se puede calcular la velocidad del gas y del sólido a la entrada:

$$V_{s0} = \frac{\dot{m}_s}{\rho_s A} f_{vol s} \quad (125)$$

$$V_{g0} = \frac{\dot{m}_g}{\rho_g A} f_{vol g} \quad (126)$$

$$A = \frac{\pi D^2}{4} \quad (127)$$

$$f_{vol s} = \frac{\dot{Q}_s}{V_T} \quad (144) \quad f_{vol g} = \frac{\dot{Q}_g}{V_T} \quad (128)$$

$$\frac{\dot{m}_s}{\rho_s} + \frac{\dot{m}_g}{\rho_g} = \dot{Q}_s + \dot{Q}_g = V_T \quad (129)$$

Donde A es el área de la sección transversal de diámetro interno del reactor. Por lo tanto la velocidad del flujo de aire a la entrada del gasificador es $v_{aire} = 0.04715 \frac{m}{s}$, y la velocidad del flujo de carbón a la entrada es $v_{carbón} = 0.00242 \frac{m}{s}$. El flujo de aire y el flujo de carbón entran a una presión de 1 bar.

4.4 DETALLES NUMÉRICOS

El gasificador simulado es de dos dimensiones. El método de volúmenes finitos es usado para la solución de la ecuaciones de transporte mostradas en el capítulo tres.

El análisis de la reacciones de los flujos dentro del gasificador se hace desde una perspectiva unidimensional, en la dirección del eje “y”, esto por simplicidad.

La simulación de los procesos de gasificación se lleva a cabo por medio de la discretización del sistema planteado, mediante una malla cartesiana bidimensional.

Como la zona de análisis del gasificador tiene una forma simple (forma cilíndrica), el dominio del sistema fue discretizado por una malla de 30 x 40 en las direcciones “x” y “y” respectivamente, esto debido a que pruebas realizadas al sistema, con un mallado más fino, mostraron que los resultados eran independientes del tipo de mallado y número de barridas. La discretización del gasificador se puede apreciar en la figura 7. Las pruebas mostraron que un mallado más fino solo recalca las zonas de disturbio en las diferentes regiones de reacción de las fases.

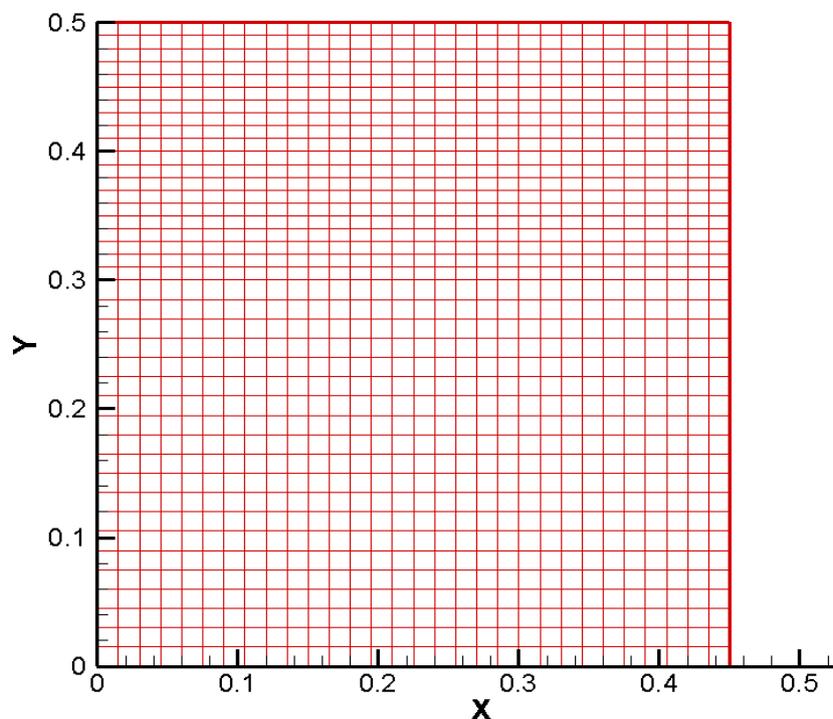


Figura 7. Discretización del sistema

4.5. RESULTADOS

En esta sección se muestran los resultados de la simulación, los cuales son comparados con valores experimentales obtenidos en el modelo, de una dimensión, formulado por Colomba Di Blasi para analizar el comportamiento estratificado de los gasificadores de biomasa con flujos concurrentes. Dicha comparación se llevará a cabo considerando un gasto másico de combustible igual a 18 kg/h para ambos procesos de gasificación, al igual que el mismo gasto de agente gasificante, que para ambos estudios es aire, de 27 kg/h.

Los parámetros importantes, en lo que se enfoca este trabajo, son la velocidad del flujo para ambas fases, la temperatura del gas y del sólido, las concentraciones de cada especie química que compone el gas de síntesis (bióxido de carbono, monóxido de carbono, hidrogeno, vapor de agua, hidrocarburo), las concentraciones de las fases sólidas existentes (char, carbón crudo, ceniza y humedad) y la presión del proceso.

La simulación de un gasificador de flujos paralelos con carbón en un estado permanente (tiempo igual a cero referido a las condiciones iniciales), considerando un modelo euleriano para ambas fases existentes, con la zona de reacción localizada cerca de la parte alta del reactor, y considerando la turbulencia del proceso, proporcionó los siguientes resultados:

Temperaturas

La figura 8 y 9 muestran que la temperatura de ambas fases, a la salida gasificador, es la misma. Esto se debe a que el carbón incinerado en forma de ceniza sale junto con los gases, ganando energía calórica. Además las temperaturas de ambas fases presentan cambios acorde al proceso que se llevo a cabo, tal como secado, pirólisis, combustión y gasificación. Para los fines de esta tesis la temperatura de la fase sólida no se considera para el análisis de comparación, simplemente nos sirve de marco para ilustrar los fenómenos de transferencia de calor entre las fases.

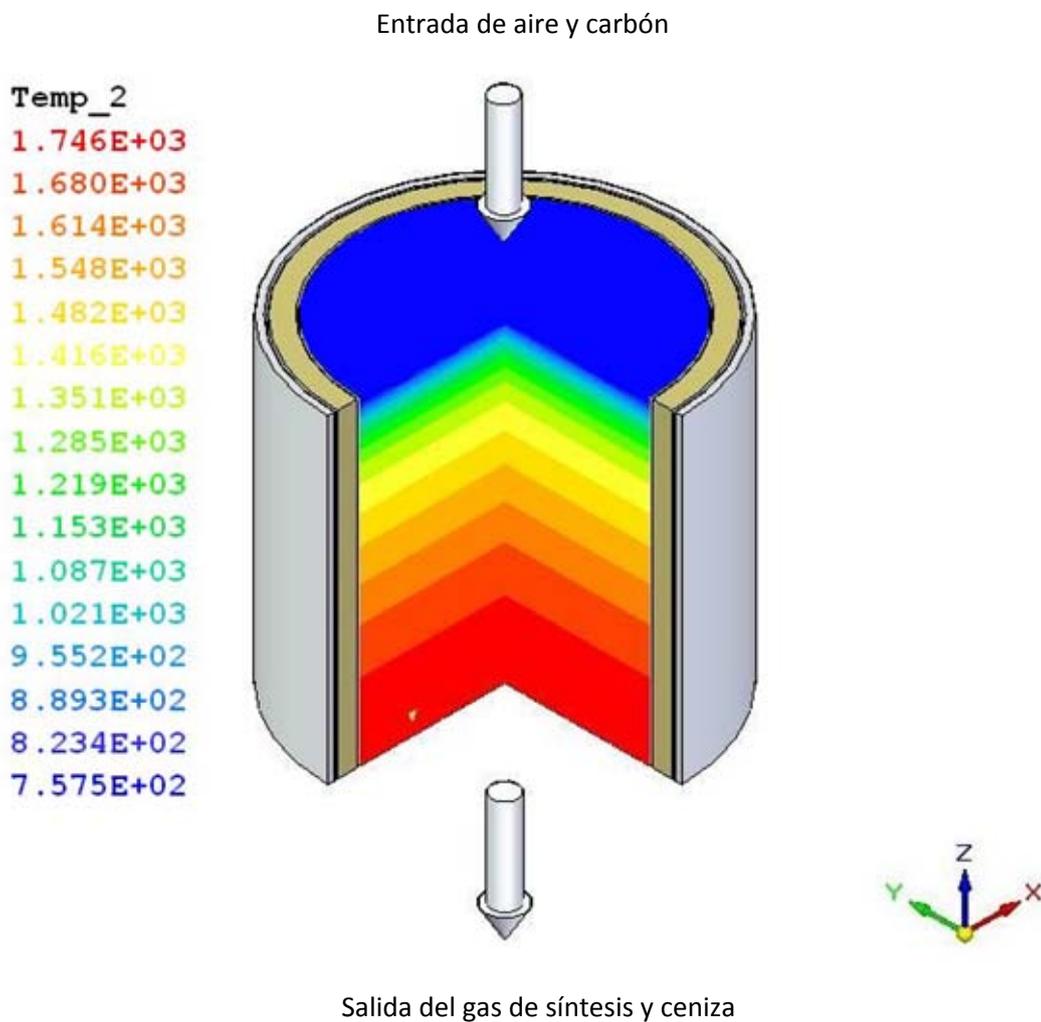


Figura 8. Perfiles de temperatura del gas

La figura 9 muestra que la temperatura del gas se va incrementando de manera gradual hasta alcanzar una temperatura máxima a la salida de 1700 K aproximadamente. La temperatura alcanza su máximo valor en la zona de combustión dentro del volumen de control que representa el reactor del gasificador, esto debido a la oxidación de los gases, ya que la combustión es una reacción exotérmica que libera energía aunada a la temperatura correspondiente a los volátiles y al carbonizado, productos de la pirolisis, antes de la oxidación.

También se puede observar en el mismo esquema 9, en la parte superior del reactor, una de 700 a 800 K aproximadamente, la cual es mayor a la temperatura inicial de la fase gaseosa ($T_0=600$ K); Este aumento de temperatura se debe al secado instantáneo del carbón.

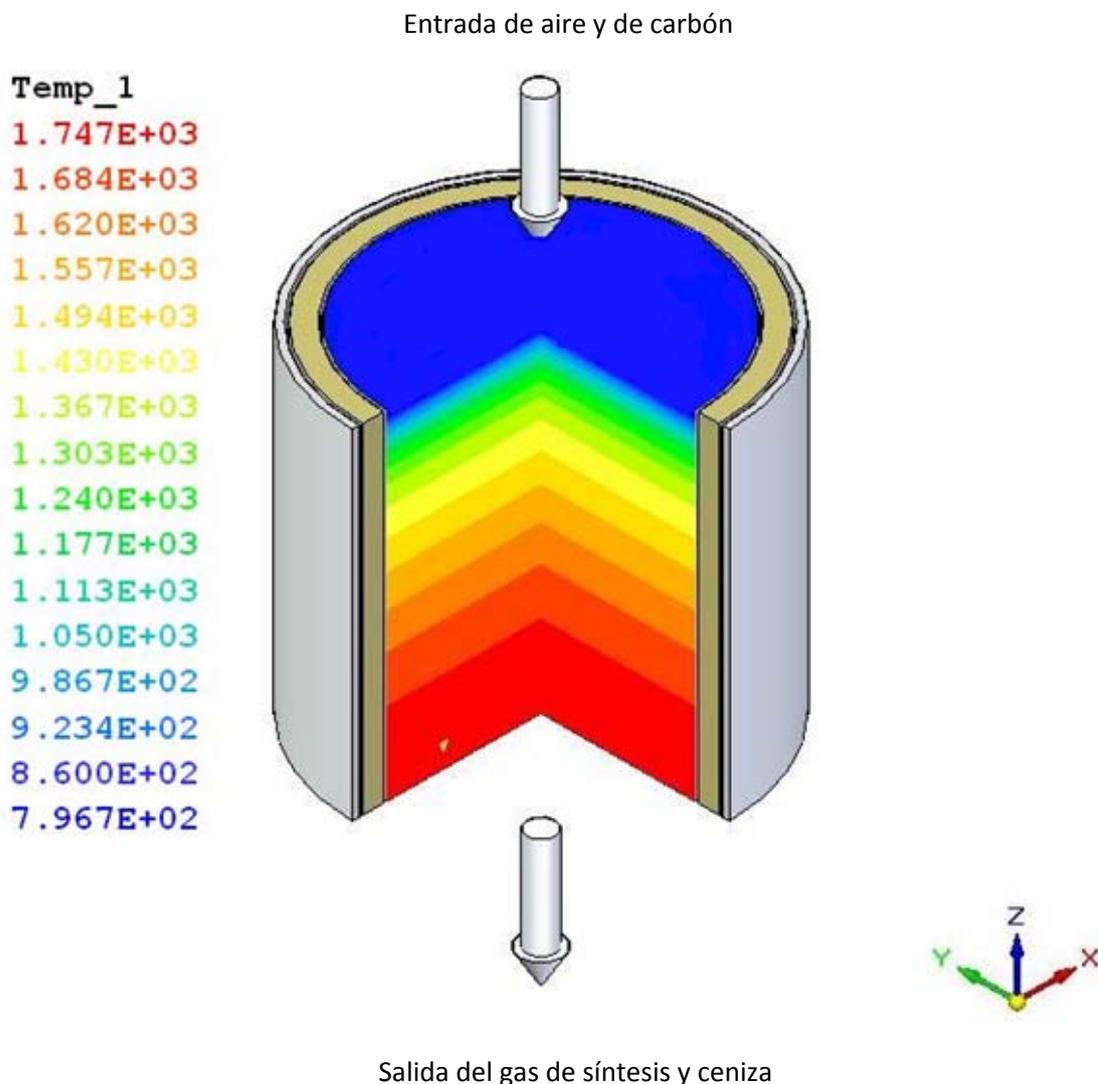


Figura 9. Perfiles de temperatura de la fase sólida

Velocidades

El perfil de velocidades en la fase gaseosa según la figura 10, obtenida de la simulación numérica, muestra que la velocidad va creciendo conforme la fase pasa a través del reactor (volumen de control), llegando a una velocidad máxima de 0.2577 m/s, la cual es mayor a la velocidad de entrada. El aumento de velocidad es necesario para mantener la conservación de la masa, debido a que se debe de establecer un equilibrio entre los gastos másicos de cada fase por el cambio de densidades de cada fase existente en él reactor, la cual se reduce, y tal equilibrio es el aumento de velocidad en la fase.

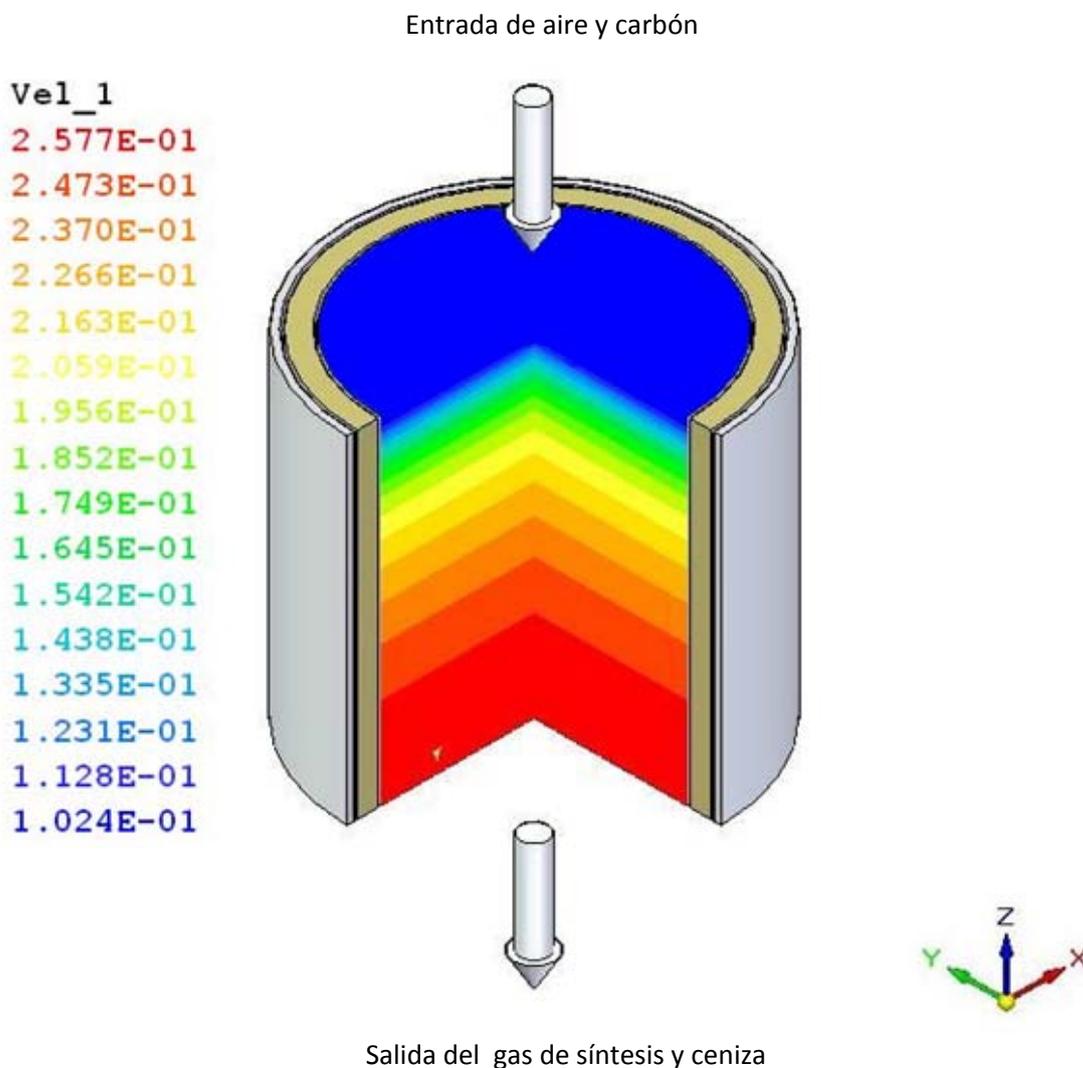


Figura 10. Perfiles de velocidad de la fase gaseosa

Las velocidades en la parte inferior del reactor para las dos fases son mayores que las velocidades de entrada correspondientes a cada fase; la razón de esto es porque conforme se lleva a cabo las reacciones de gasificación (pirólisis, gasificación, combustión) del proceso, la densidad de la fase va disminuyendo.

La velocidad presenta mayores valores en la zona de oxidación (combustión y gasificación), debido a las reacciones de gasificación y reacciones exotérmicas de combustión de los volátiles y carbón fijo, donde existen los cambios de densidad más grandes.

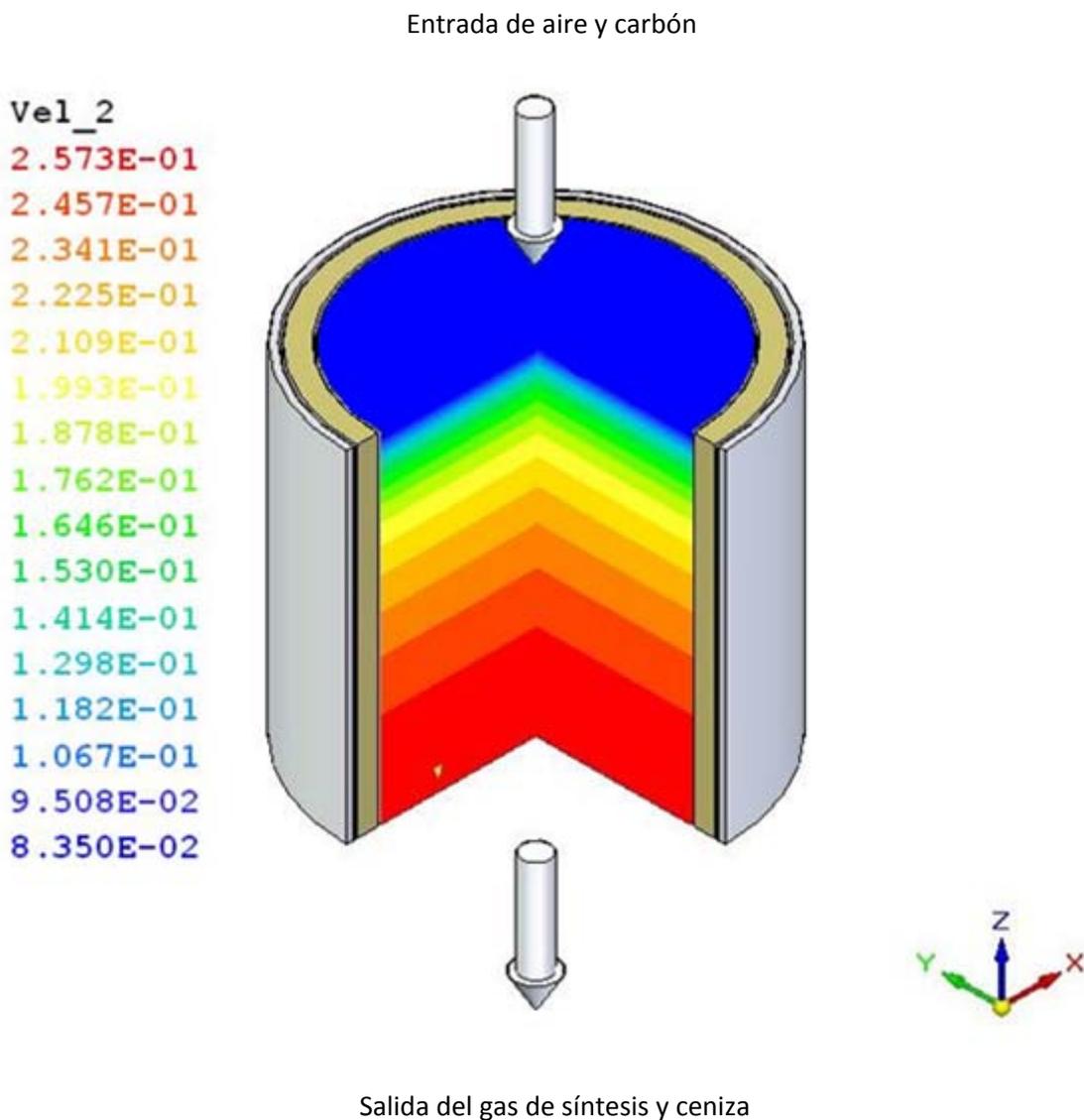


Figura 11. Perfiles de velocidad de la fase sólida

Presión

En la figura 12 se puede observar la caída de presión en el reactor, la cual se debe a la disminución de la densidad de cada fase y a la extracción del gas en la parte inferior del reactor. La diferencia de presiones a la entrada y a la salida indica el sentido de la mezcla, el cual es correcto. La presión dentro del reactor es pequeña y los cambios de presión también son pequeños.

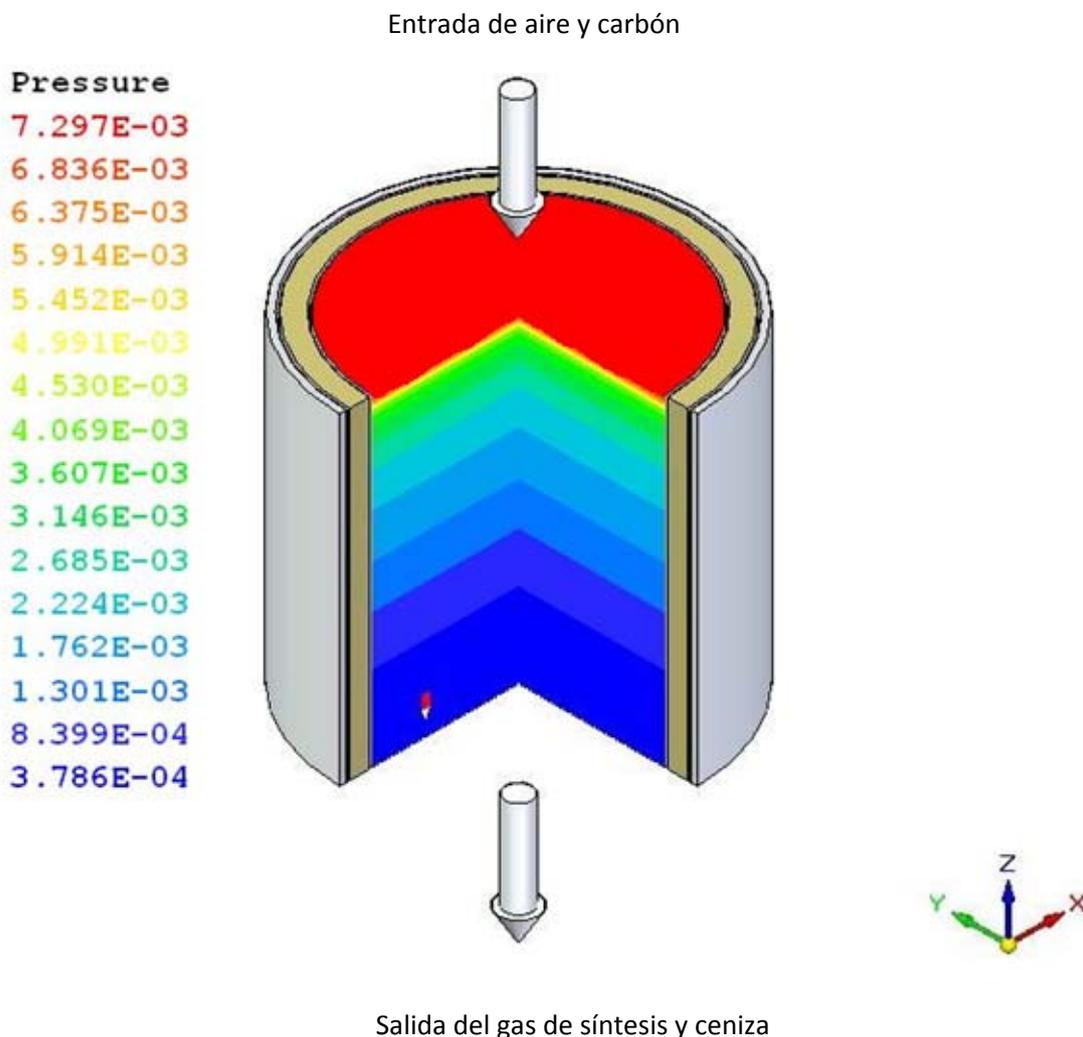


Figura 12. Contornos de presión del proceso

Concentraciones del gas de síntesis

El material volátil es oxidado en la zona de combustión-gasificación. El perfil de composición del CO, mostrado en la figura 13, tiene un porcentaje másico similar a los resultados reportados por William Vicente, Salvador Ochoa, Esteban Barrios, y Javier Aguillón en el 2003, en la literatura base de esta tesis [12] "An Eulerian model for the simulation of an entrained flow coal gasifier", para un gasificador de carbón para un gasificador integrado con ciclo combinado (IGCC) que opera por arrastre de aire. Según el artículo antes mencionado, el porcentaje másico de CO es de 0.20%, y en la simulación realizada en este trabajo es de 21%. Se observa en la figura 13, que en la zona gasificación donde reacciona el carbonizado con el CO_2 , H_2O , y H_2 , se genera la mayor producción de CO. La reacción gasificación del carbonizado con el CO_2 y el H_2O , produce más CO, adicional al que ya se había generado en el proceso de pirolisis. En la zona de combustión, donde se lleva a cabo la oxidación del CO, H_2 , CH_4 , y del carbonizado se genera CO en menor proporción. Esto se debe, a la oxidación del CH_x y del carbonizado.

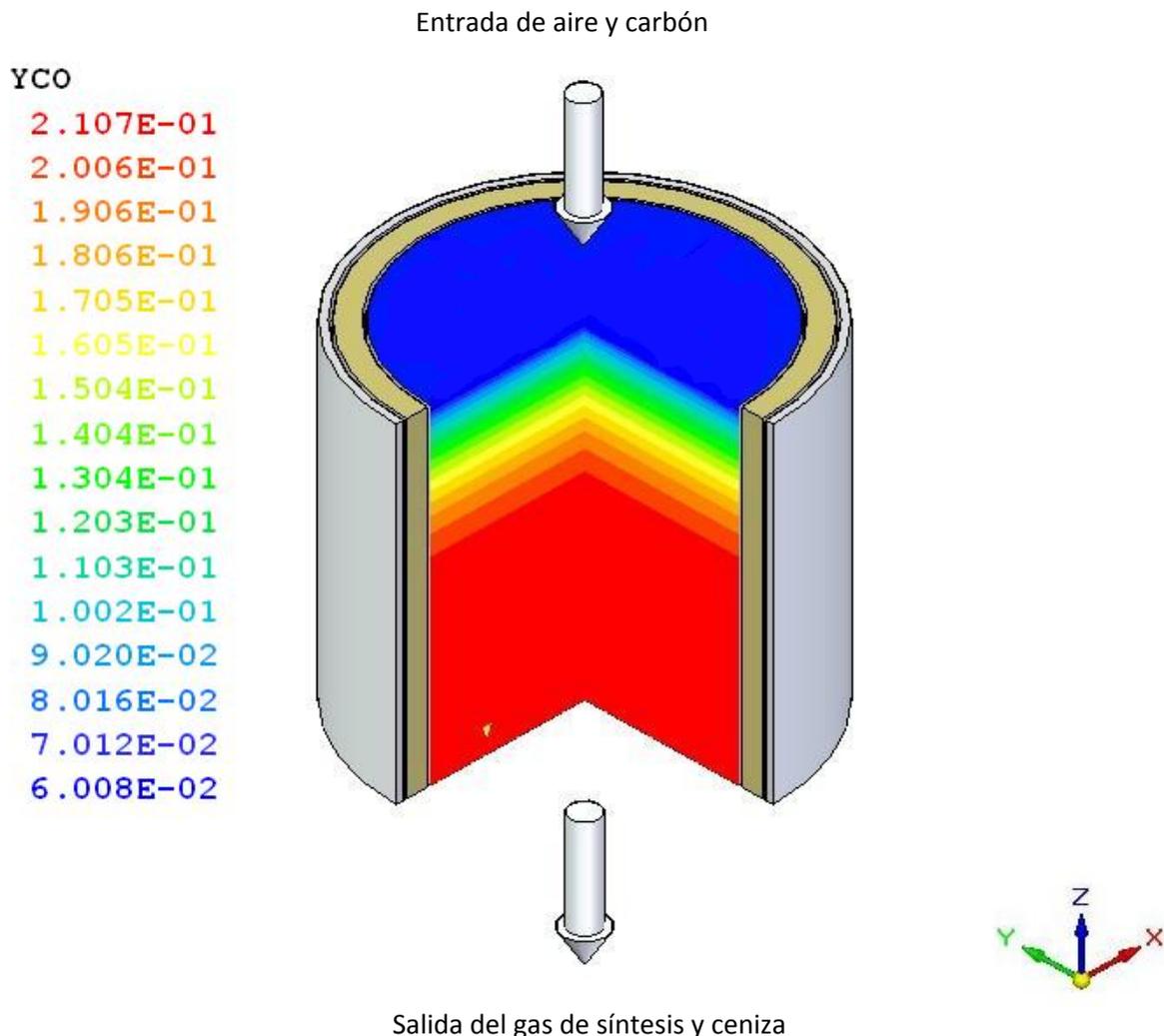


Figura 13. Contornos de concentraciones de CO (fracciones másicas)

La concentración de CH_x va disminuyendo conforme el gas pasa a través del reactor. A la salida, la concentración es baja, según la figura 14, y esto se debe a que esta especie química se oxida en la zona de combustión y disminuye su porcentaje másico para generar CO y H_2O . Por lo tanto los valores más bajos en la concentración de CH_x se presentan durante la combustión del gas.

La mayor concentración de CH_x se produce durante el proceso de pirólisis. Posteriormente su proporción va disminuyendo conforme se van llevando a cabo las reacciones de combustión y gasificación.

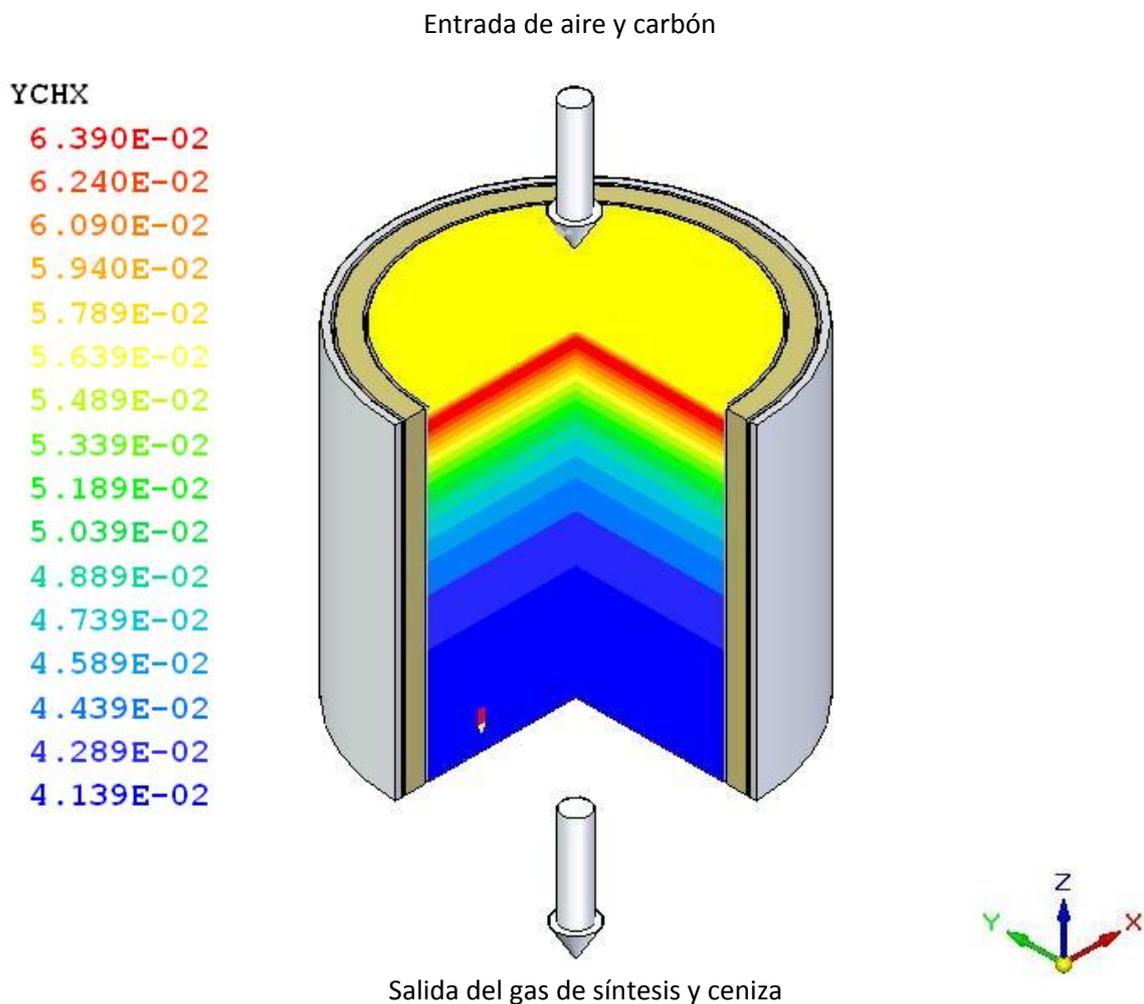


Figura 14. Contornos de concentraciones de YCH_x (fracciones másicas)

El porcentaje másico de la especie química CO_2 es de 0.0614%, el cual es menor comparado con el valor que presenta la literatura base de este trabajo [12], correspondiente a la gasificación de carbón en un gasificador de ciclo combinado, como antes se menciona, cuyo valor de concentración es de 0.11%. La gasificación de biomasa en un gasificador de flujos paralelos con arrastre por aire [13] presenta una variación de 0.01% respecto al valor obtenido en este trabajo. En la figura 15 se observa que la mayor producción de CO_2 se genera en el proceso de pirólisis y una menor cantidad adicional se debe a la combustión de los gases: CO , CH_x (productos de la pirólisis) y a la reacción homogénea de gasificación que se da entre el CO y H_2O para producir el CO_2 y H_2 .

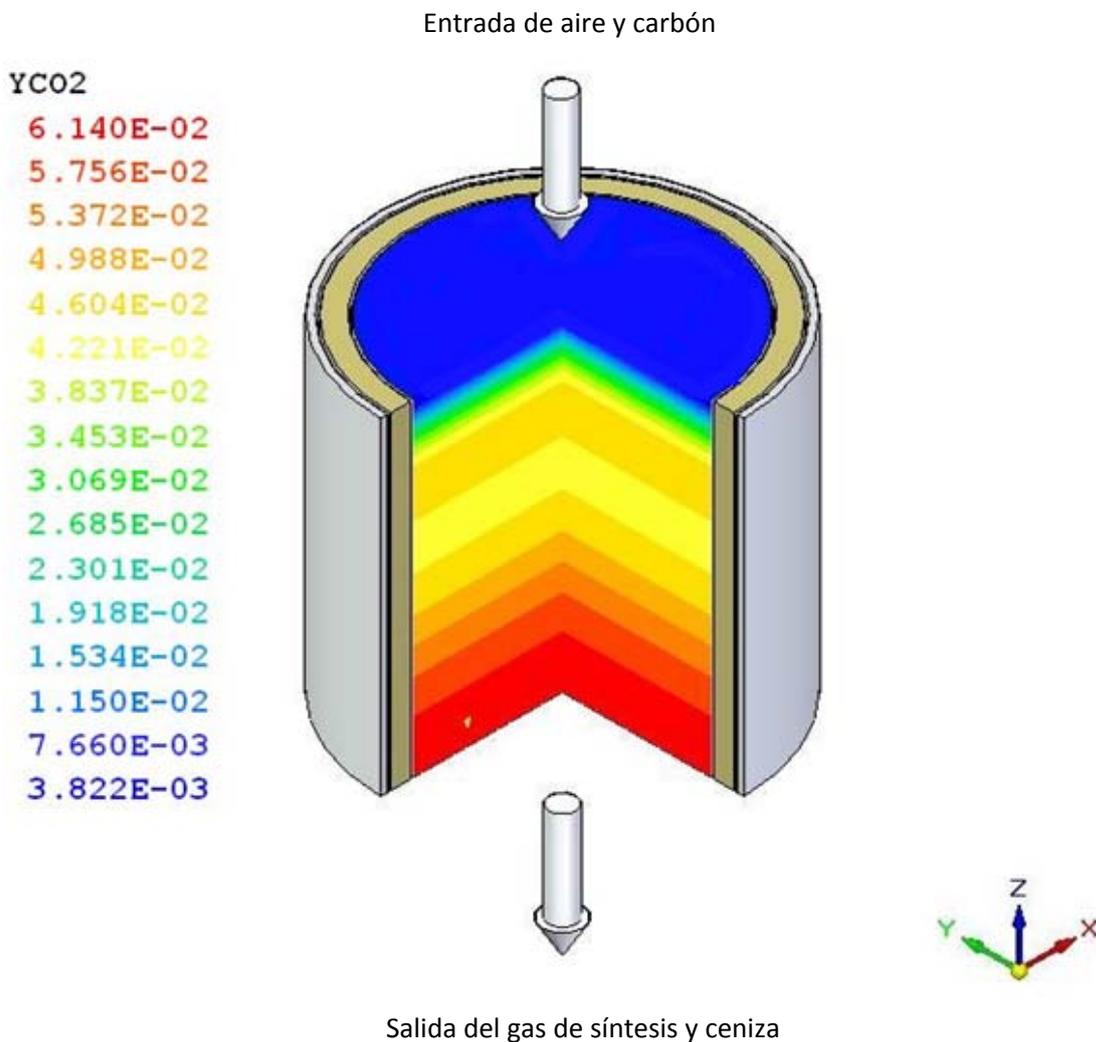


Figura 15. Contornos de concentraciones de YCO_2 (fracciones másicas)

El hidrógeno se producido principalmente durante el proceso de pirólisis del carbón y en menor proporción por la reacción de gasificación del char y por la reacción de formación de CO₂ con vapor de agua. La alta concentración de H₂ en la zona de pirólisis, según la figura 16, es reducida por las reacciones de reducción (gasificación), y oxidación (combustión) del H₂ generado por el char. La concentración de hidrogeno generado en la simulación de este trabajo indica un valor de 0.00327% en fracción másica, el cual, según datos de la literatura disponible, es aproximado al valor registrado en el ciclo de gasificación combinado [12], el cual es de 0.0033%, y menor al obtenido en un gasificador con las mismas característica y mismo gasto másico, que trabaja con biomasa, cuyo valor registrado es 0.033% [13].

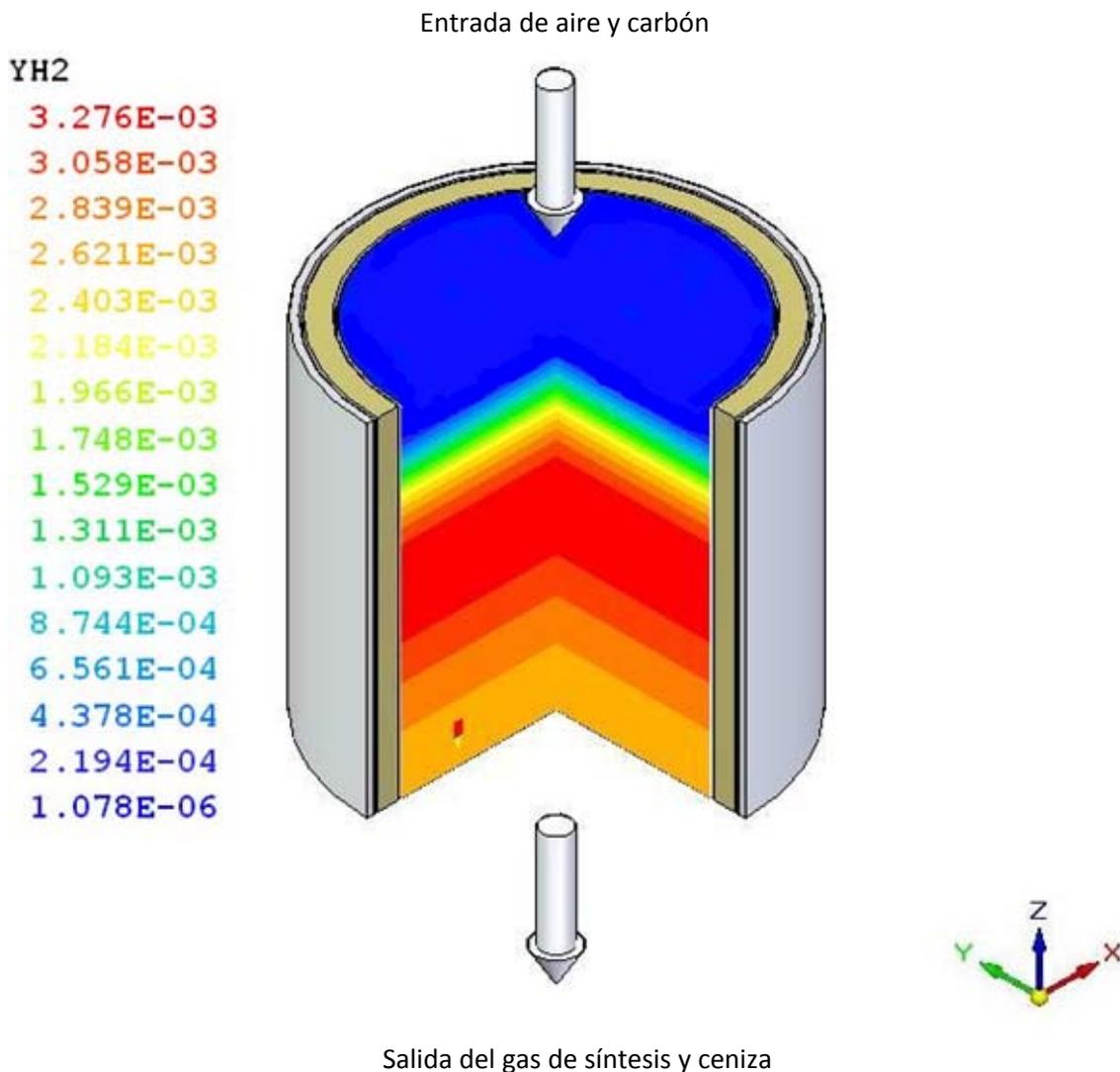


Figura 16. Contornos de concentraciones de YH₂ (fracciones másicas)

En la figura 17, se observa que el oxígeno se consume paulatinamente, según el proceso que se lleve a cabo. El oxígeno reacciona con los gases de volátiles y con el carbonizado (char), los cuales son productos de la pirólisis. El oxígeno oxida estos productos, generando energía calorífica, la cual es necesaria para que se lleve a cabo la gasificación del carbonizado. La gasificación necesita energía para poder llevarse a cabo, y esta energía la proporciona la oxidación de los gases volátiles productos de la pirólisis.

Como la pirólisis se lleva a cabo casi en ausencia de oxígeno, la concentración de oxígeno es mucho mayor en la parte superior del reactor que en cualquier otra zona. Después, dicho oxígeno reacciona con los gases que se produjeron en la pirólisis, consumiéndose todo el oxígeno contenido en el aire. La reacción de los productos volátiles con los otros componentes del aire, tales como el nitrógeno, no se consideran influyentes en la generación del gas de síntesis, por lo que el nitrógeno contenido en el aire no sufre cambio alguno y sale tal cual. La fracción másica de oxígeno a la salida es nula, a pesar de ser en teoría una combustión incompleta. Esto se debe al porcentaje mínimo de oxígeno contenido en el aire.

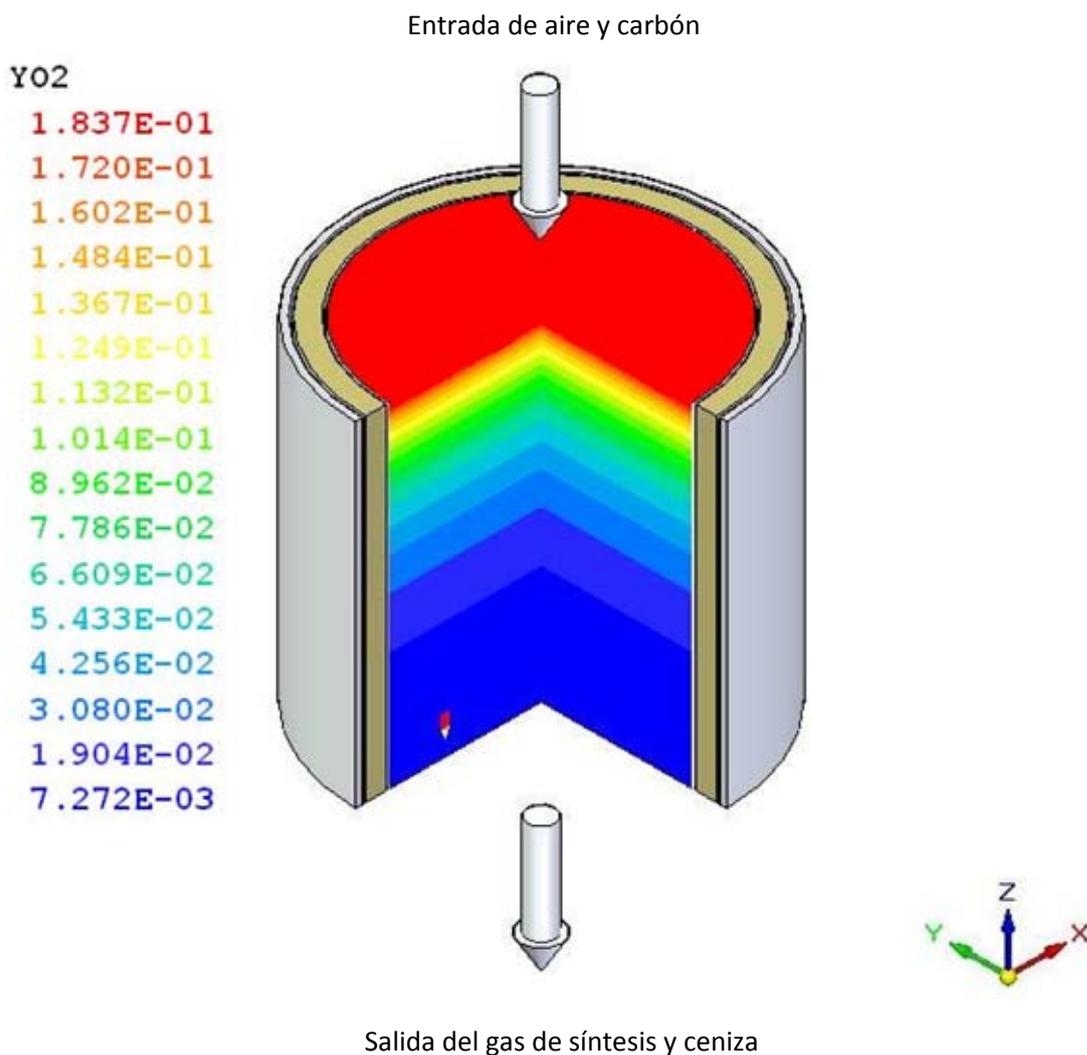


Figura 17. Contornos de concentraciones de YO₂ (fracciones másicas)

Concentraciones de la fase sólida

En la figura 18 se observa que el char es consumido en su totalidad, lo cual indica que el proceso de gasificación fue completo. Durante la pirólisis se produce el carbonizado (char), por lo que en esta zona del proceso de gasificación se tiene el porcentaje total de char generado por el carbón, y ya durante la gasificación se consume en su totalidad.

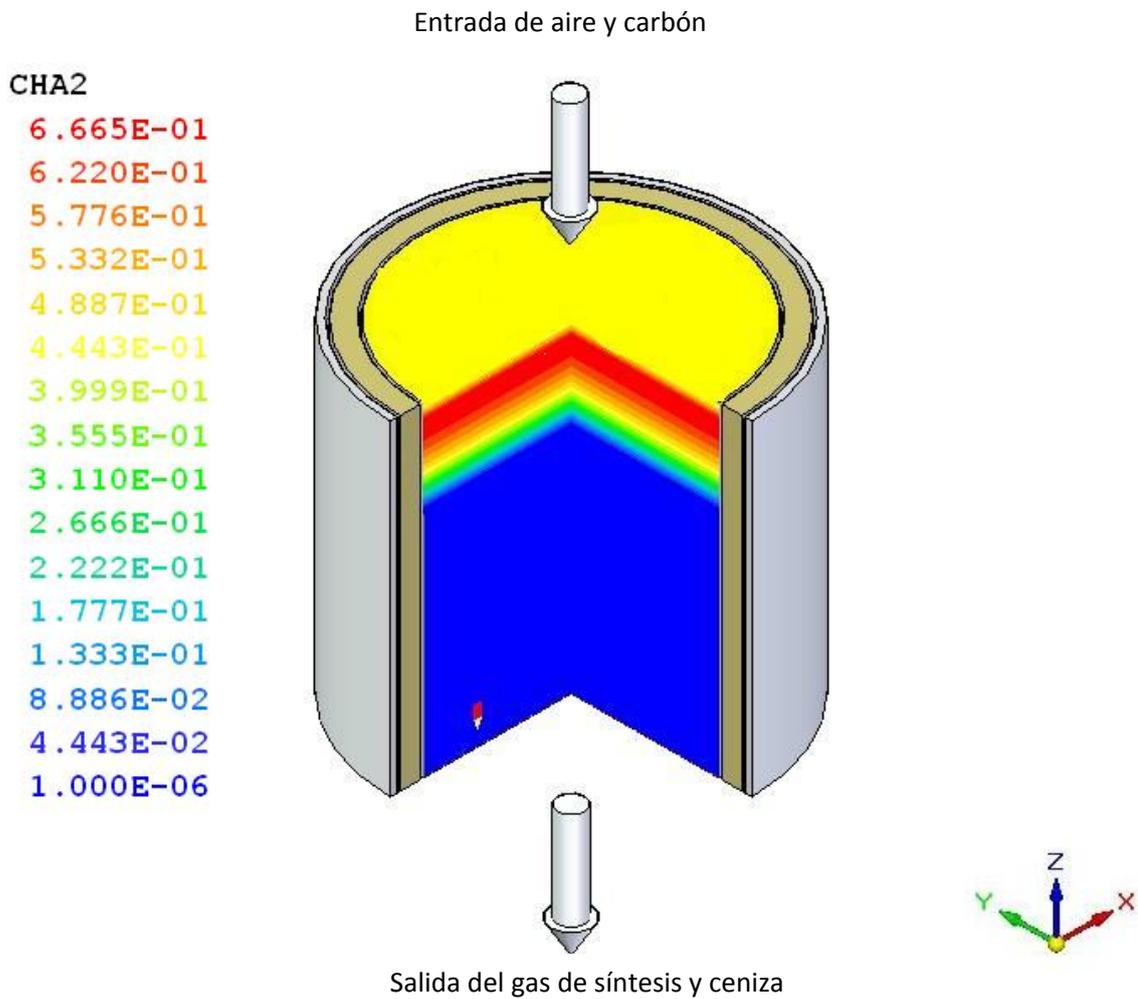


Figura 18. Contornos de concentraciones de CHAR (fracciones másicas)

Según el esquema de la figura 19, a la salida del reactor tenemos un 100% de ceniza, lo cual significa que todo el carbón se consumió en su totalidad por las reacciones de gasificación, y el carbonizado se gasificó por completo. Por todo lo anterior se puede decir que la gasificación del carbón fue completa.

El esquema 19 está estrechamente relacionado con la figura 18, que muestra concentración de char a lo largo del reactor, ya que la concentración de ceniza se produce a partir de la cantidad de char consumido. Por lo tanto, en la región donde el char es consumido en su totalidad, la concentración de ceniza debe llegar al cien por ciento, lo cual se puede verificar con el esquema de la figura 18 y figura 19.

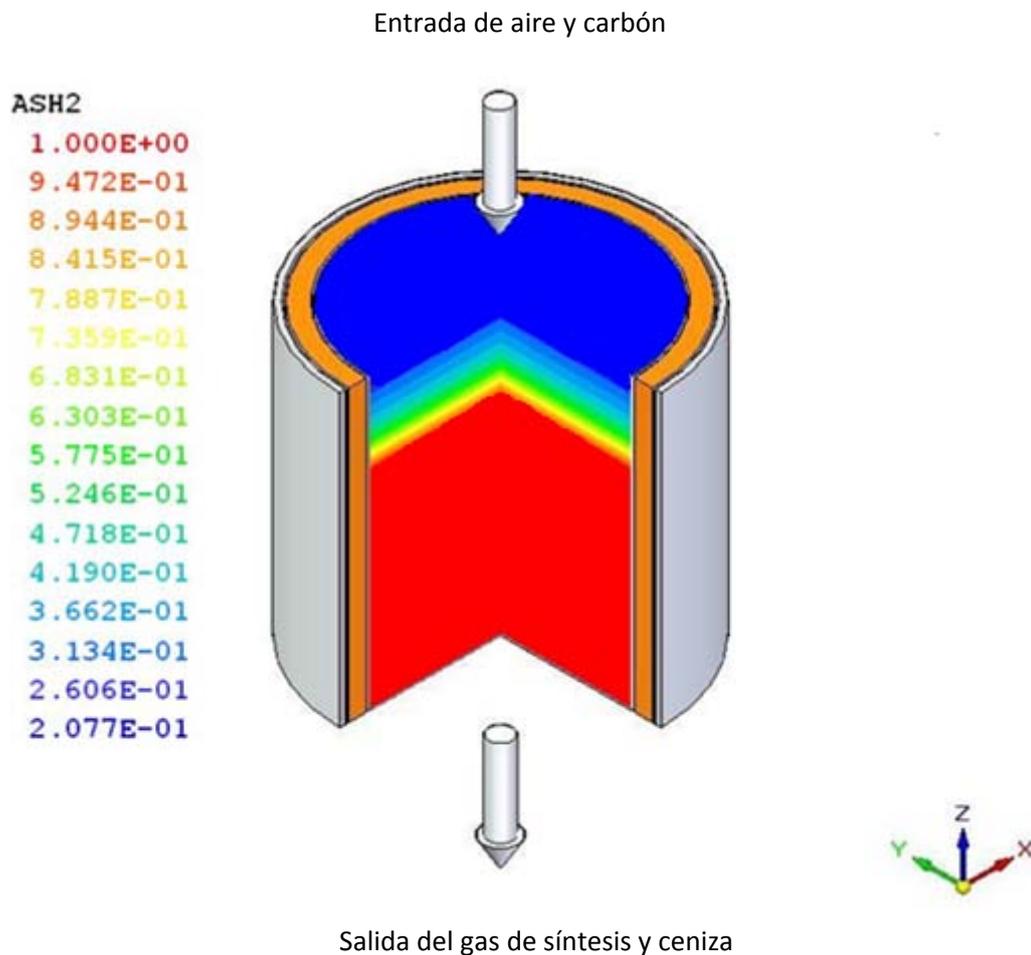


Figura 19. Contornos de concentraciones de Ceniza "ash" (fracciones másicas)

El esquema de la figura 20, describe como el carbón, después del secado donde se elimina la humedad contenida en el carbón, reacciona en su totalidad para formar char y materia volátil, los cuales reaccionarán en las zonas de oxidación y reducción. Por lo cual, el carbón fijo se consume totalmente en la zona de pirólisis.

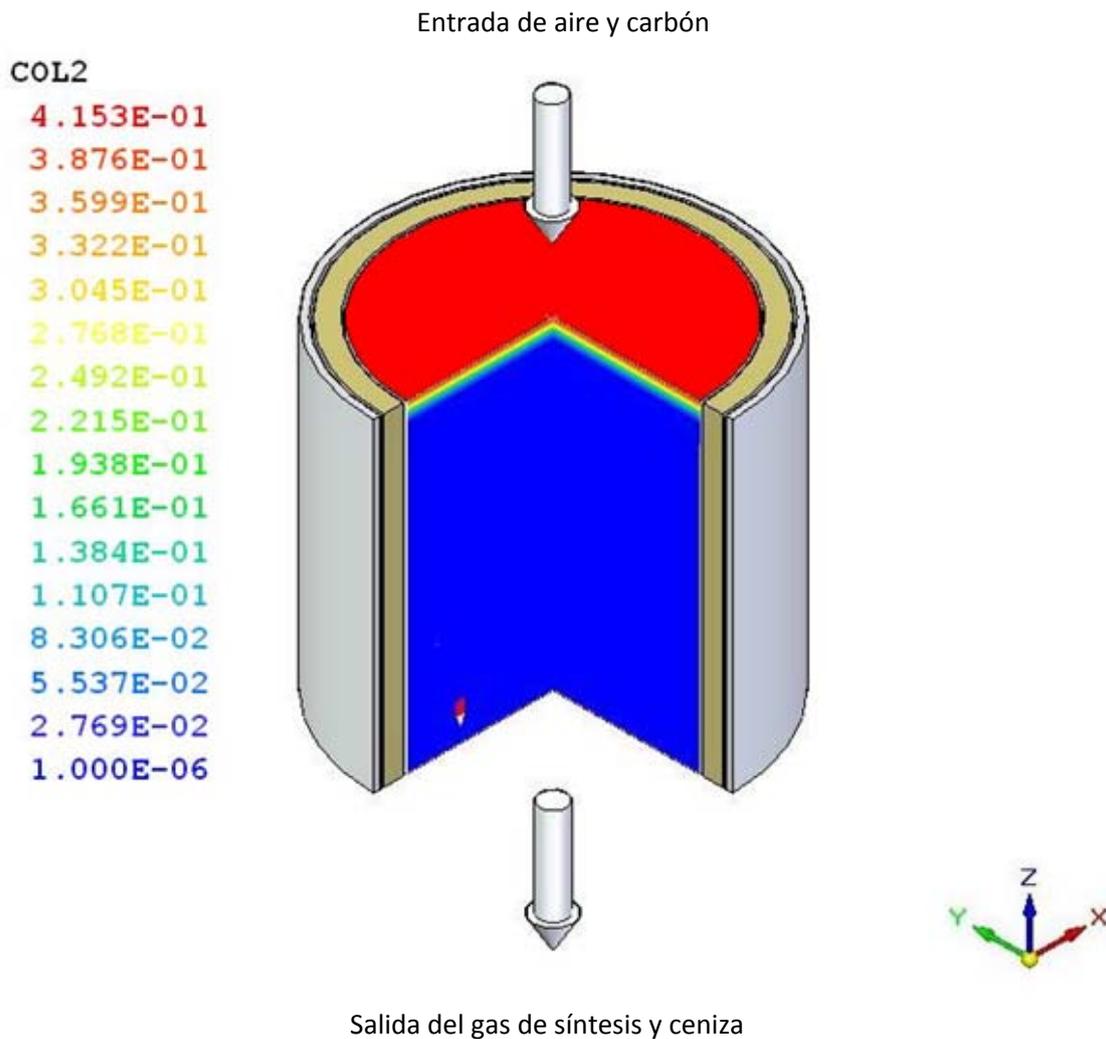


Figura 20. Contornos de concentraciones de carbón crudo "col" (fracciones másicas)

Tamaño de partícula

La figura 21 ilustra los cambios que va experimentando la partícula de carbón durante los procesos de gasificación. Se puede observar la evolución de la partícula desde su entrada al reactor hasta la salida.

El esquema muestra cómo va decreciendo el tamaño de la partícula, desde un valor inicial de 0.00005m hasta un valor de 0.00001077m , debido a las reacciones heterogéneas de gasificación principalmente, en donde se da el fenómeno transferencia de masa entre la fase sólida y la fase gaseosa.

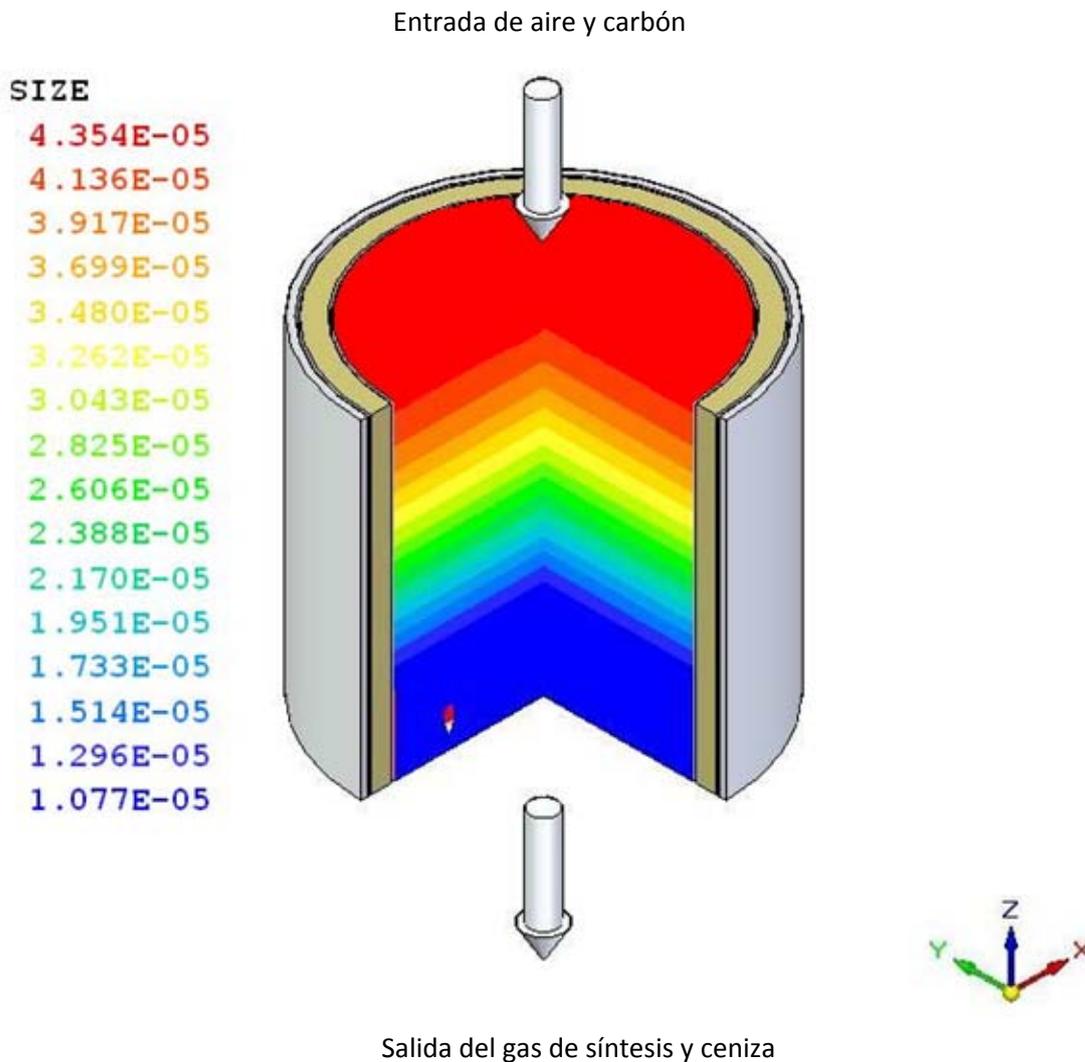


Figura 21. Perfil del tamaño de partícula de carbón "size" a través del reactor

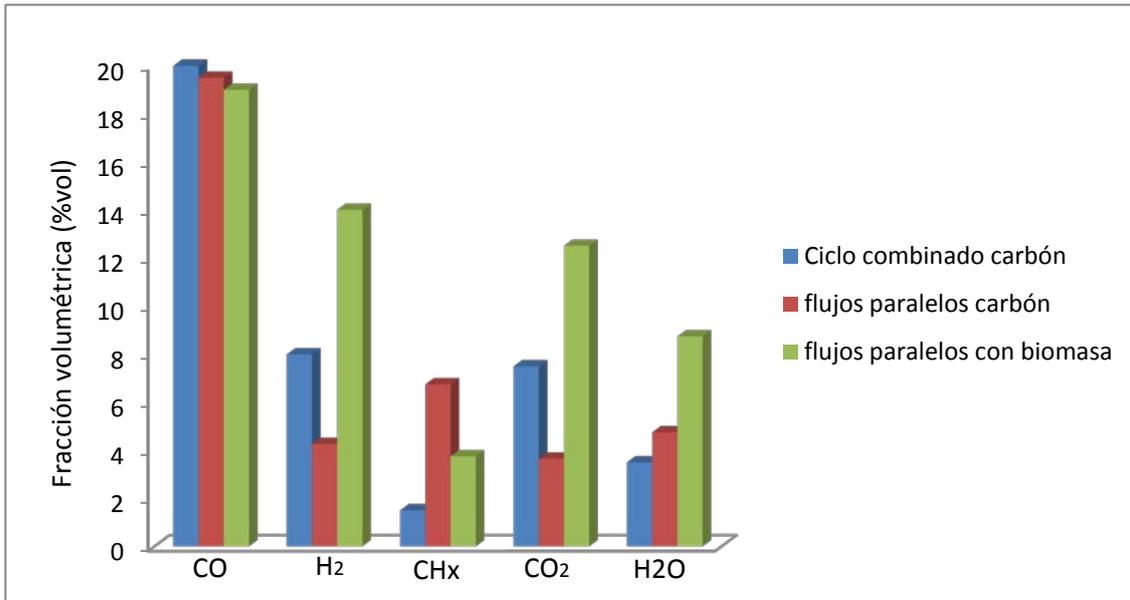


Figura 22. Comparación de datos entre los resultados de la simulación y los resultados disponibles en la literatura.

En la figura 22, se comparan los diferentes valores que se tiene de la composición del gas de síntesis en la literatura disponible [12 y 13] respecto a los resultados obtenidos en la simulación numérica realizada en esta tesis.

Respecto a la figura 22, se pueden concluir los siguientes aspectos:

-El proceso de gasificación utilizando un gasificador de flujos paralelos, usando como combustible biomasa vegetal produce más CO₂ que usando carbón como combustible, según los datos obtenidos en la literatura disponible [13] y la simulación realizada en esta tesis. El CO₂ es la especie química más contaminante, y por lo tanto, siempre se busca disminuir sus índices de producción por lo cual se tiene un mejor comportamiento en la gasificación de carbón en un gasificador de flujos paralelos.

-Comparando los resultados registrados en la simulación numérica del artículo de Di Blasi [13] respecto a los datos obtenido en este trabajo, se establece que la gasificación de biomasa produce un porcentaje másico mayor de hidrogeno en comparación con el porcentaje producido por el carbón cuando se usa combustible. Esto se debe a la composición natural de la biomasa principalmente. El H₂ es un gas que puede ser utilizado como recurso energético, sin generar emisiones contaminantes a la atmósfera, de ahí la importancia de mejorar su producción.

-La gasificación de carbón por medio de un gasificador con flujos paralelos descendentes es el proceso que menos CO₂ genera, el cual es el gas más contaminante para la atmósfera; Pero por medio de este proceso se genera una menor cantidad de hidrógeno. Por otra parte, mantiene buenos índices de

producción de CH_x y CO , que son combustibles gaseosos utilizados como recursos energéticos, en comparación con los gasificadores de biomasa de flujos paralelos [13] y los gasificadores de carbón de ciclo combinado IGCC [12].

-La gasificación de carbón por medio de un gasificador de ciclo combinado (IGCC) mantiene índices de producción de CO y H_2 superiores a los obtenidos por medio de la gasificación de carbón por arrastre de aire de flujos paralelos, pero se produce una menor cantidad de hidrocarburo y vapor de agua, según la literatura [12]. Esto se debe a las condiciones de operación del gasificador, como lo pueden ser la velocidad, el gasto de los flujos, el tamaño de partícula, y los procesos posteriores a los que se someta el gas de síntesis.

-En general, la gasificación de biomasa por medio de un gasificador de flujos paralelos, produce mayores porcentajes de vapor de agua, monóxido de carbono, hidrógeno, y dióxido de carbono, en comparación con la gasificación de carbón en un gasificador con la misma configuración, según las comparaciones correspondientes con la literatura [13] y los resultados registrados en esta tesis. La razón de esto se debe a la naturaleza del combustible, en gran parte, por su gran contenido de humedad y carbono, y al tamaño de partícula del combustible.

-En comparación con la gasificación de carbón en un gasificador de ciclo combinado (IGCC), según la literatura [12], también se tiene porcentajes mayores de producción de monóxido de carbono, hidrógeno, y dióxido de carbono.

Por todo lo antes mencionado, se puede concluir que los parámetros de operación son de gran importancia para producir un gas de síntesis más rico en composición y en poder calorífico. Además es importante considerar el tipo de gasificador, el tipo agente gasificante y el tipo de combustible que se utilizara en el proceso de gasificación.

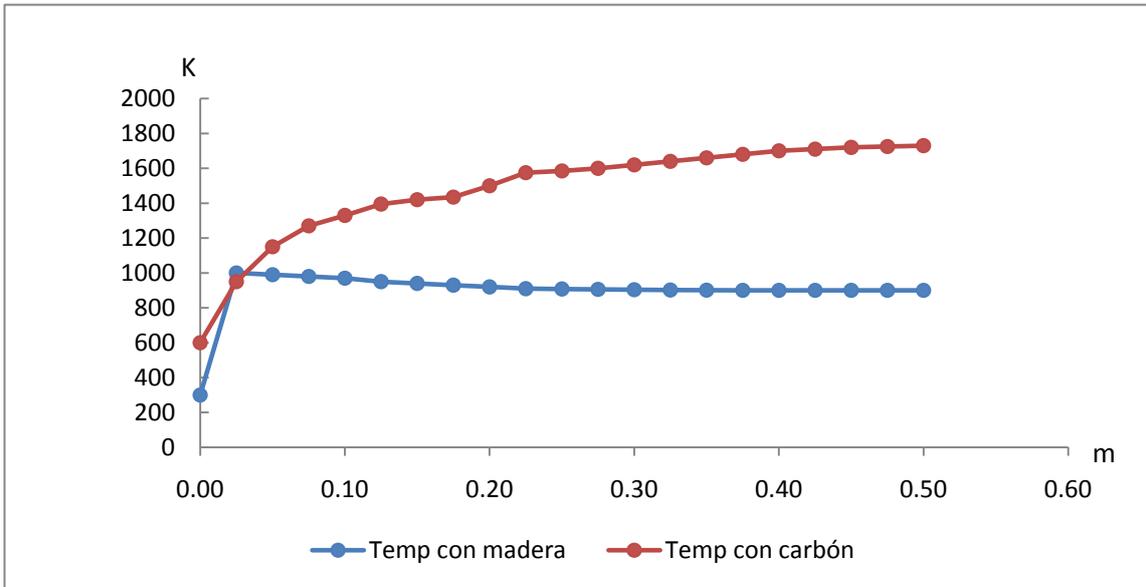


Figura 23. Gráfica comparativa. Temperaturas generadas con diferentes combustibles en la fase sólida.

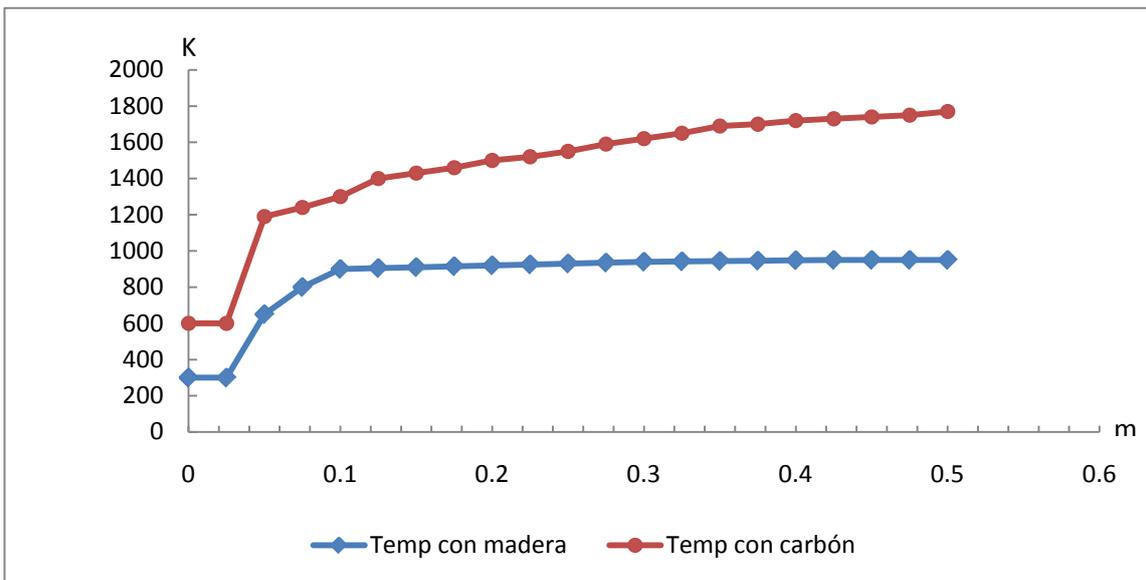


Figura 24. Gráfica comparativa. Temperaturas generadas con diferentes combustibles en la fase gaseosa.

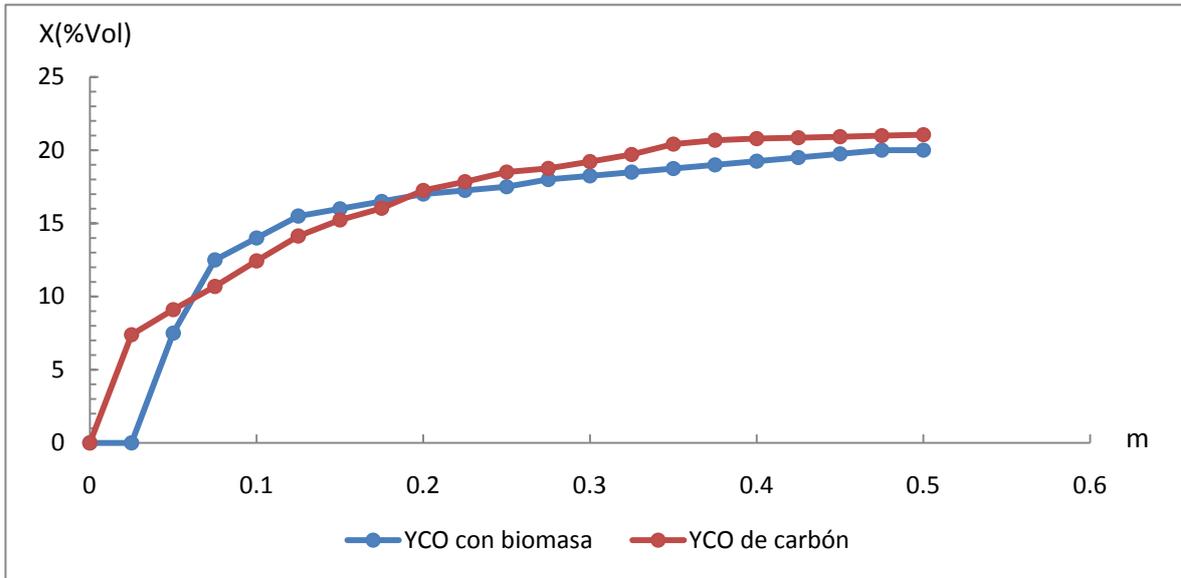


Figura 25. Gráfica comparativa. Producción de CO generado con diferentes combustibles.

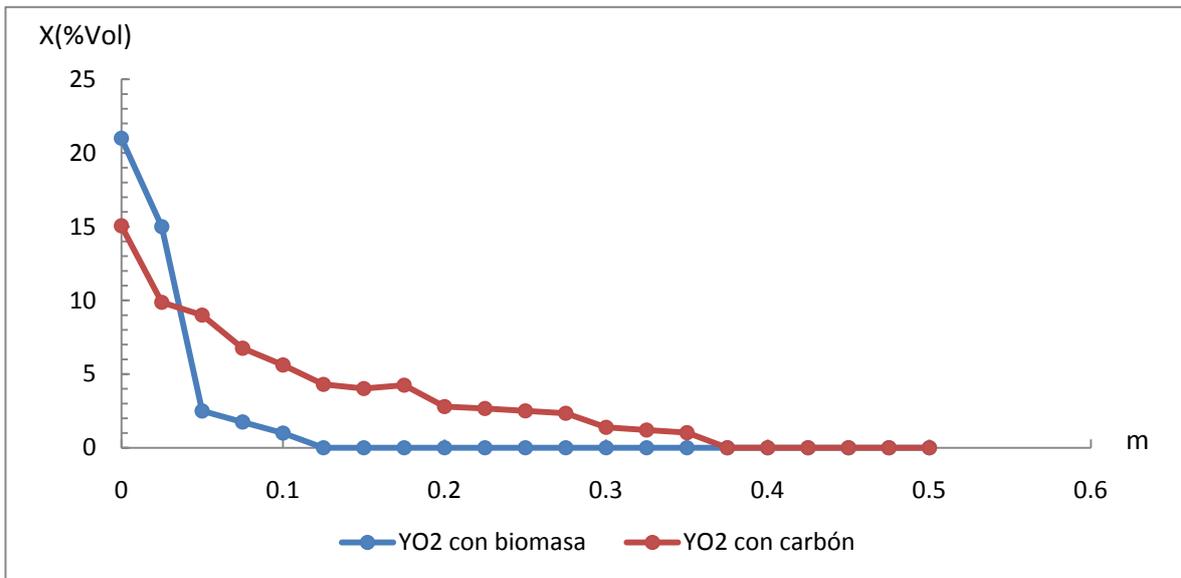


Figura 26. Gráfica comparativa. Producción de O₂ generado con diferentes combustibles.

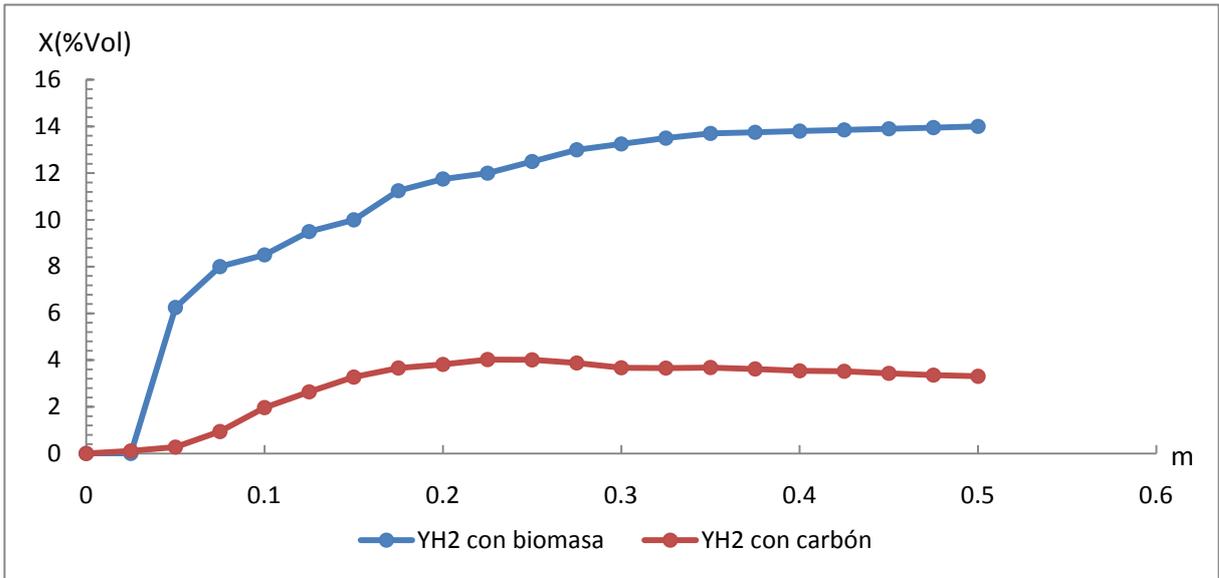


Figura 27. Gráfica comparativa. Producción de H₂ generado con diferentes combustibles.

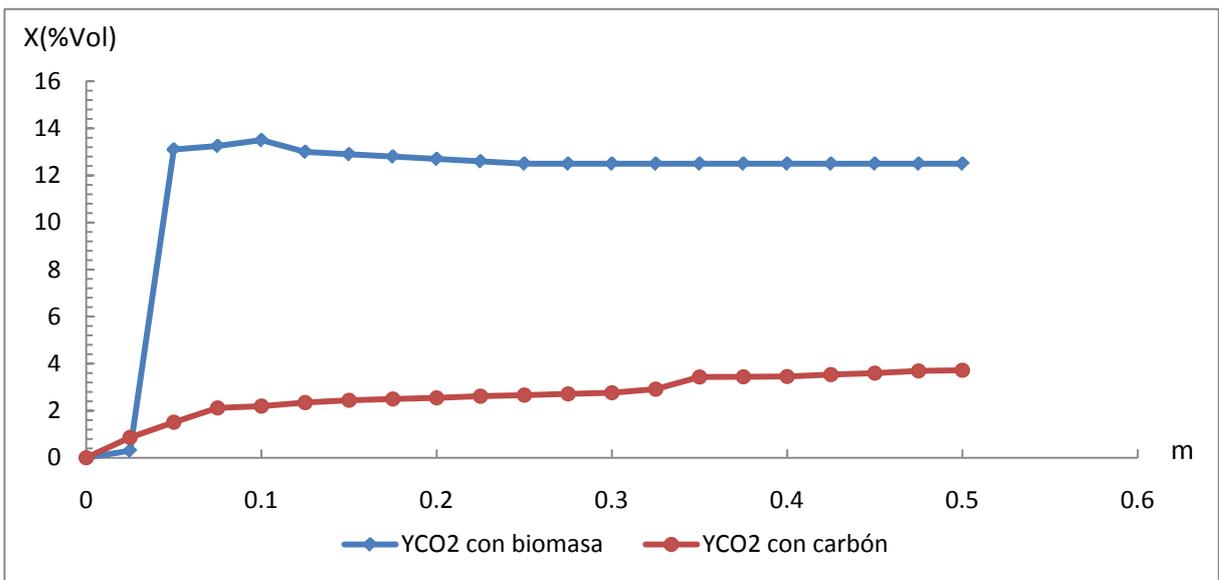


Figura 28. Gráfica comparativa. Producción de CO₂ generado con diferentes combustibles.

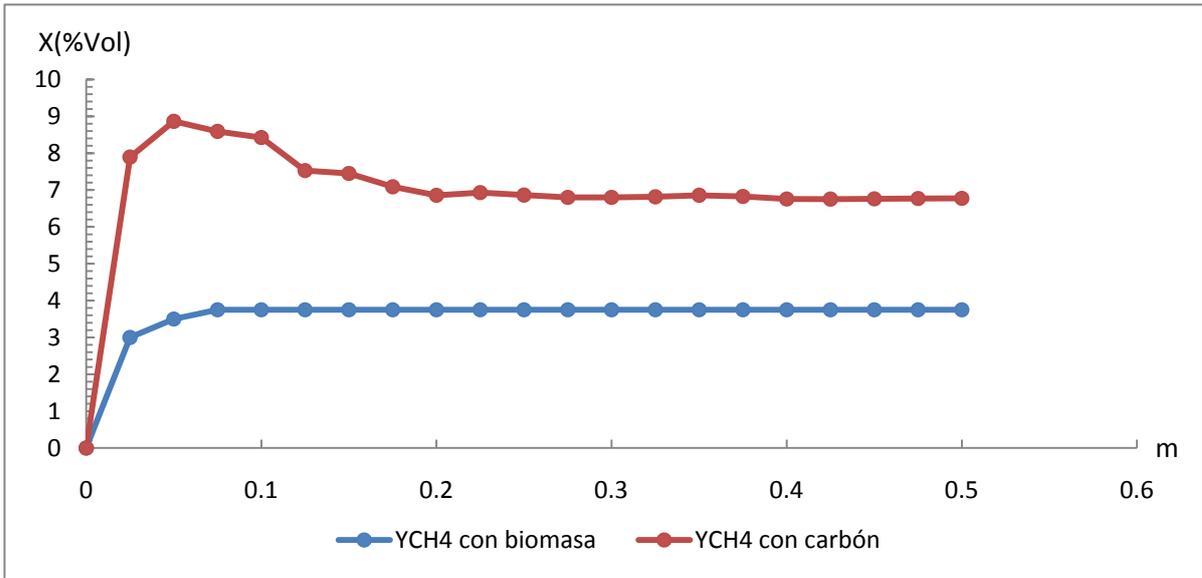


Figura 29. Gráfica comparativa. Producción de CH_4 generado con diferentes combustibles.

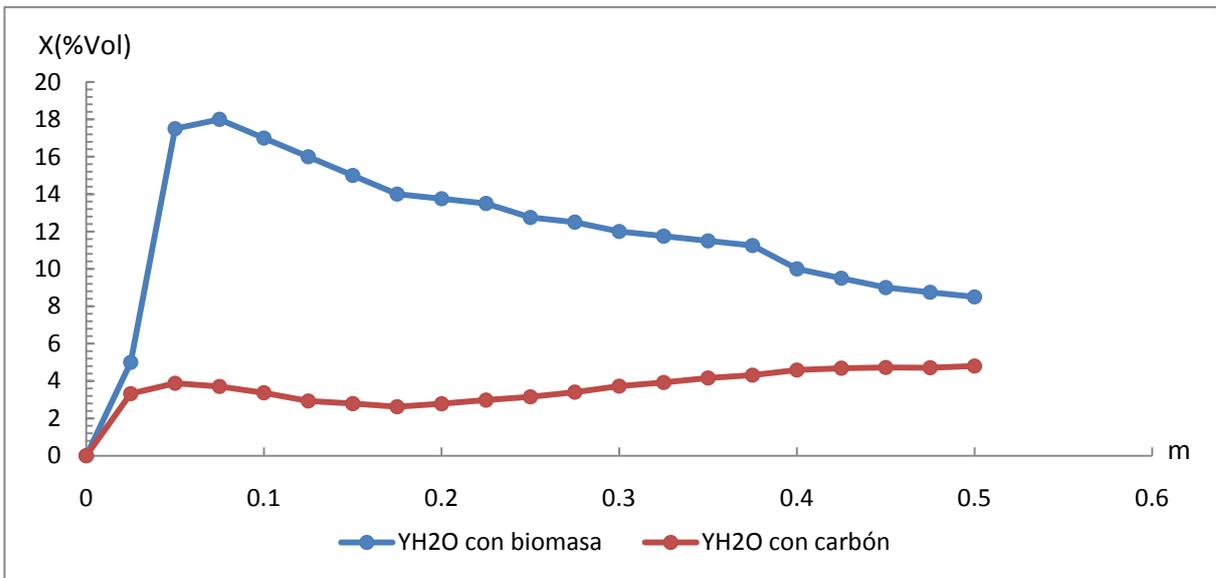


Figura 30. Gráfica comparativa. Producción de H_2O generado con diferentes combustibles.

La gráfica 24 describe el comportamiento evolutivo de la temperatura en la fase gaseosa a lo largo del reactor en un gasificador de flujos paralelos utilizando carbón como combustible. Comparando los valores registrados en el trabajo de gasificación de biomasa de Di Blasi [13] respecto a los datos proporcionados en este trabajo, se concluye que el gas de síntesis alcanza una mayor temperatura utilizando carbón como combustible que con el uso de biomasa. Esto se debe a la capacidad de reacción de los compuestos del combustible para generar energía calorífica. Un gas de síntesis a mayor temperatura representa una fuente de energía calórica que puede ser aprovechada en turbinas de gas o en intercambiadores de calor, por lo tanto, el gas de síntesis obtenido del gasificador de carbón de flujos paralelos tiene una exergía mayor que la del gas de síntesis derivado de la biomasa.

En las gráficas comparativas de las figuras 25 y 27, se describe la generación porcentual de hidrógeno y monóxido de carbono tanto para el carbón como para la biomasa en un gasificador de flujos paralelos. Los valores registrados de H₂ y CO para la gasificación de biomasa fueron tomados de la literatura disponible [13]. Se establece que al utilizar carbón como combustible se genera una mayor producción de monóxido de carbono y una menor producción de hidrogeno, al comparar los valores de producción de H₂ y CO en cada caso. Esto se debe principalmente a la composición de la biomasa, ya que tiene altos porcentajes de humedad, carbono y alquitrán.

Las reacciones adicionales de combustión y gasificación que tiene el TAR generado por la biomasa, generan vapor de agua, hidrocarburo CH₄, CO₂ y CO. Posteriormente el CO genera más H₂ en su reacción de heterogénea con el vapor de agua, en la separación de CO₂, sumado al hidrógeno generado por la pirolisis de la biomasa, como se mencionó en el capítulo 2. El carbón produce un porcentaje mayor de CO en comparación con la biomasa, según el esquema 25. Esto se debe a la composición másica de cada combustible, ya que el carbón contiene un porcentaje másico mayor de carbono que la biomasa. Dicho carbono reaccionará con el oxígeno para producir CO en la reacción de combustión.

La figura 26 describe como el oxígeno del aire se consume en su totalidad en el interior del gasificador, tanto para el carbón, como con la biomasa, en un gasificador de flujos paralelos. Esto indica que la oxidación de los gases, productos de la pirolisis, se llevo a cabo con insuficiencia de oxígeno (con un 23% de fracción másica de O₂ contenido en el aire, tabla 3).

Con el carbón como combustible en el proceso de gasificación se obtiene un menor porcentaje de CO₂ en la composición del gas de síntesis, en comparación con el uso de biomasa, según el esquema de la figura 28. Esto se debe a las reacciones de oxidación y gasificación (véase capítulo 2).

5. CONCLUSIONES

Un proceso de gasificación de flujo por arrastre de carbón o bien de flujos paralelos es simulado numéricamente mediante un modelo de dinámica de fluido computacional para reproducir, de manera cuantitativa, el comportamiento real de las variables de operación. Así mismo, los resultados son comparados respecto a los valores registrados en la gasificación biomasa vegetal, en un gasificador similar y a las mismas condiciones.

Se modelaron los procesos internos de un gasificador de carbón con el objetivo de mejorar el desempeño del proceso de gasificación, y así dar una alternativa de generación de energía calorífica a menores costos y con bajos índices de contaminación, en comparación con el método de generación de energía utilizando combustibles derivados del petróleo.

Se puede concluir de la simulación numérica, que en general, la temperatura del gas aumenta a lo largo del reactor y está vinculado con la composición del gas; Dicha temperatura aumenta debido a las reacciones que se llevan a cabo dentro del gasificador: pirolisis, combustión y gasificación, ya que dichas reacciones van liberando energía calorífica en diferentes proporciones (la gasificación libera una mínima energía), por lo tanto, conforme las reacciones cinéticas se llevan a cabo, la temperatura se va incrementando. El mayor incremento de temperatura tiene lugar en la zona de combustión (reacción exotérmica),

Las concentraciones de H₂O y CO₂, son bajas respecto (véase la grafica de la figura 22) a los valores reportados en el artículo Dynamic behavior stratified downdraft gasifier, Di Blasi 1999 [13], el cual trabaja con un gasificador con la misma configuración pero utilizando biomasa en vez de carbón. Esto se debe a la composición másica del combustible y al diámetro de la partícula. Las altas concentraciones de CO y CH₄, comparadas con la biomasa [13], se deben al porcentaje volumétrico de carbono contenido en el combustible, el cual es de 77.6%, y es mucho mayor al porcentaje contenido en la biomasa, 33% [13].

Como el aire seco se asume como agente oxidante, el H₂O es producido a partir de la humedad de la partícula sólida y como producto de la combustión de materia volátil. Este vapor de agua se forma principalmente en la zona de secado y pirolisis, y en pocas cantidades en la zona de combustión. En la zona de combustión, el hidrogeno generado en la pirólisis se oxida para generar vapor de agua, al igual que la oxidación del hidrocarburo (CH₄), pero en menor proporción. En la zona de un porcentaje del vapor de agua reacciona con el carbonizado, en la reacción heterogénea de gasificación.

A la salida del gasificador la temperatura promedio de los gases es de 1700 K, aproximadamente, con lo cual se comprueba, que se obtiene un gas de síntesis con un poder calorífico mayor utilizando como combustible carbón, en vez de biomasa vegetal (madera), en un gasificador de flujos paralelos.

En un gasificador de carbón de flujos paralelos descendentes, se obtiene un gas de síntesis con mayor energía calorífica aprovechable que en un gasificador de ciclo combinado (IGCC) [12], si el combustible a utilizar es carbón pulverizado, ya que su temperatura de salida es de aproximadamente 1700 K a diferencia del ciclo combinado con 1400 K.

En la figura (8) se puede observar que la temperatura se incrementa en la zona de combustión, debido a que se necesita liberar energía para poder llevar a cabo la gasificación, por lo cual, en el comportamiento general de los gasificadores, la temperatura tiende a disminuir a la salida del reactor, debido a que la gasificación es una reacción endotérmica.

El oxígeno es consumido en su totalidad, por lo cual se puede decir que el proceso de combustión dentro del gasificador fue incompleto, ya que no se utilizó el porcentaje correspondiente al aire teórico necesario para que se lleve a cabo la combustión completa de un combustible, lo cual comprueba la teoría de los gasificadores, los cuales funcionan con aire pobre de oxígeno.

En general, según los resultados, se puede concluir que en un gasificador de con flujos paralelos descendentes se genera una menor cantidad de CO₂, 3.53%, que en un gasificador con la misma configuración pero que utiliza biomasa en vez de carbón, 12.5% (véase la figura 22, [13]), el cual es un gas contaminante y por lo cual siempre se busca obtener menores proporciones volumétricas de este gas; Además produce una mayor cantidad de CO (19.5%) y CH_x (6.75%), respecto a la gasificación de biomasa en un gasificador con la misma configuración, CO (19%) y CH_x (3.75%), según la literatura [13] (véase la figura 22). Estos gases pueden ser utilizados como combustibles en algún otro proceso de combustión interna y así aprovechar toda la exergía interna de los gases volátiles.

El modelo depende de las características de la materia prima y de las condiciones de operación: gastos máxicos del combustible y del agente gasificante, tamaño de partícula del combustible, temperaturas de entrada de los flujos y de las paredes.

MODELOS DE TURBULENCIA

Algunos modelos que se pueden utilizar para representar el fenómeno de turbulencia en el flujo reactivo del gasificador simulado en este trabajo son:

- Cierres de segundo orden, en la forma de modelos de transporte de los esfuerzos de Reynolds.
- Modelos de tipo “difusividad turbulenta”, por medio del método k-ε.

I. Cierres de segundo orden

La ecuación de transporte exacta para los esfuerzos de Reynolds u''_i, u''_j es:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}u''_i u''_j) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\bar{\rho}u_k u''_i u''_j) = - \underbrace{\bar{u}_i'' \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_j} \bar{u}_j'' \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i}}_{(a)} \quad (130)$$

$$- \underbrace{\left[u''_i \frac{\partial P'}{\partial x_j} + u''_j \frac{\partial P'}{\partial x_i} \right]}_{(b)} - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_k}(\bar{\rho}u''_i u''_j u''_k)}_{(c)} \quad (131)$$

$$\underbrace{-\bar{\rho} \left[u''_i u''_k \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_k} + u''_j u''_k \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k} \right]}_{(d)} \quad (132)$$

$$- \underbrace{\left[\tau_{ik} \frac{\partial u''_j}{\partial x_k} + \tau_{ik}'' \frac{\partial u''_i}{\partial x_k} \right]}_{(e)} \quad (133)$$

Donde (a) es el efecto del gradiente de presión media, (b) la correlación entre gradientes de presión fluctuante y fluctuaciones de velocidad, (c) el transporte turbulento de los esfuerzos de Reynolds, (d) la producción de los esfuerzos de Reynolds por velocidad de deformación media, y (e) y la disipación viscosa. Los términos anteriores deben de ser modelarse.

Haciendo uso de la ecuación (95) del capítulo dos, el término (133) se puede expresar como:

$$-\left[\bar{u}_i'' \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_j} \bar{u}_j'' \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i}\right] = \frac{\overline{\rho' u_j''}}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\overline{\rho' u_i''}}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_j} \quad (134)$$

La correlación $\overline{\rho' u_j''}$ se puede modelar de una ecuación de conservación truncada como:

$$\overline{\rho' u_j''} = -\frac{1}{4.3} \frac{\tilde{k}}{\tilde{\varepsilon}} u_i'' u_j'' \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_j} \quad (135)$$

Donde $k = \frac{1}{2} u_i'' u_i''$ es la energía cinética turbulenta, y ε es su tasa de disipación que frecuentemente se desprecia.

Con el fin de modelar, la correlación entre gradientes de presión fluctuante y fluctuaciones de velocidad, (134), frecuentemente se divide en una parte redistributiva y una parte isotrópica:

$$\left(u_i'' \frac{\partial p'}{\partial x_j} + u_j'' \frac{\partial p'}{\partial x_i}\right) + \left(u_i'' \frac{\partial p'}{\partial x_j} + u_j'' \frac{\partial p'}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} u_k'' \frac{\partial p'}{\partial x_k}\right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} u_k'' \frac{\partial p'}{\partial x_k} \quad (136)$$

La parte isotrópica se divide en dos términos, uno de transporte por presión y otro de dilatación por presión:

$$-\frac{2}{3} \delta_{ij} u_k'' \frac{\partial p'}{\partial x_k} = \underbrace{-\frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial p' u_k''}{\partial x_k}}_{(I)} - \underbrace{\frac{2}{3} \delta_{ij} p' \frac{\partial u_k''}{\partial x_k}}_{(II)} \quad (137)$$

En flujos de baja velocidad $Ma \ll 1$, el término (II) de la ecuación anterior generalmente se desprecia.

El término (I) se suma al término de transporte turbulento de los esfuerzos de Reynolds (C) para formar el término:

$$\frac{\partial}{\partial x_k} (C_{ijk}) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\bar{\rho} u_i'' u_j'' u_k'' + \frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{p' u_k''} \right] \quad (138)$$

El término C_{ijk} se modela mediante un cierre de tipo gradiente:

$$C_{ijk} = -C_s \frac{\tilde{k}}{\tilde{\varepsilon}} u_k'' u_l'' \frac{\partial u_i'' u_j''}{\partial x_l} \quad (139)$$

El término (e) es la correlación de la disipación viscosa:

$$\overline{\tau_{ik} \frac{\partial u_j''}{\partial x_k}} + \tau_{ik}'' \overline{\frac{\partial u_i''}{\partial x_k}} = \bar{\rho} \varepsilon_{ij} \quad (140)$$

Si se supone isotropía local, el término ε_{ij} se puede escribir en función de la disipación de energía cinética turbulenta ε , como:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{2}{3} \tilde{\varepsilon} \delta_{ij} \quad (141)$$

La tasa de disipación de la energía cinética turbulenta, $\tilde{\varepsilon}$, se calcula de la siguiente ecuación de transporte, deducida por procedimientos similares a los utilizados en el caso de densidad constante

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{\varepsilon}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{\varepsilon} u_j) = \\ & \underbrace{-C_{\varepsilon 1} \bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\bar{k}} u_k \varepsilon'' u_j'' \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_j}}_{(a')} - \underbrace{C_{\varepsilon 2} \bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}^2}{\bar{k}}}_{(b')} + \underbrace{C_{\varepsilon 3} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\bar{k}} \frac{\overline{\rho u_j''}}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_j}}_{(c')} + \underbrace{\frac{\partial y}{\partial x_j} \left[C_{\varepsilon} \bar{\rho} \frac{\bar{k}}{\tilde{\varepsilon}} u_j'' u_k'' \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial x_j} \right]}_{(d')} \end{aligned} \quad (142)$$

El término (c') se desprecia.

La parte re-distributiva de la correlación entre gradientes de presión fluctuante y fluctuaciones de velocidad, de la expresión (136), usualmente se divide en dos partes: una que incluye cantidades turbulentas y otra que incluye la tasa de deformación media. Modelos para este término han sido propuestos, por ejemplo por Launder et al, (modelo ML), Gibson y Younis (modelo MG) y Musonge (modelo MJ).

Denotando al término redistributivo como Π_{ij} , los modelos se escriben como:

$$\Pi_{ij} = -C_1 \bar{\rho} \tilde{\varepsilon} \left(\frac{u_i'' u_j''}{\bar{k}} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \right) + C_2 \delta_{ij} \bar{\rho} u_i'' u_m'' \frac{\partial \tilde{u}_1}{\partial x_m} - C_3 \bar{\rho} P_{ij} + C_4 \bar{\rho} \bar{k} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (143)$$

$$- \frac{2}{3} C_4 \bar{\rho} \bar{k} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} - \left(\frac{2}{3} C_2 + C_3 \right) \left(\bar{\rho} u_i'' u_j'' \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} + \bar{\rho} u_i'' u_j'' \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right) \quad (144)$$

Donde P_{ij} es:
$$P_{ij} = - \left(u_i'' u_k'' \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_k} + u_j'' u_k'' \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k} \right) \quad (145)$$

Las constantes de las ecuaciones (143), (144), y (145) se presentan en la tabla 2.

Sustituyendo las ecuaciones (138), (139) y (141) en la ecuación de los esfuerzos de Reynolds (95) se tiene:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}u_i''u_j'') + \frac{\partial}{\partial x_k}(\bar{\rho}\tilde{u}_k u_i''u_j'') = \frac{\partial y}{\partial x_k}(C_{ijk}) - \bar{\rho} \left(u_i''u_k'' \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_k} + u_j''u_k'' \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k} \right) \quad (146)$$

Tabla 4. Constantes de las ecuaciones (113), (114) y (115).

()

Modelo	MG	ML	MJ
C _{ε1}	1.4	1.44	1.40
C _{ε2}	1.8	1.90	1.90
C _{ε3}	0.15	0.15	0.18
C _{ε4}	0.22	0.21	0.22
C ₁	3	1.50	3.00
C ₂	0.3	-0.582	-0.44
C ₃	-	0.764	0.46
C ₄	-	-0.182	-0.23

II. Modelos de viscosidad turbulenta

Estos modelos representan un método alternativo para determinar los esfuerzos de Reynolds $u_i''u_j''$. Están basados en el concepto de viscosidad turbulenta y suponen que, de la misma manera que en un flujo laminar los esfuerzos viscosos son proporcionales al gradiente de la velocidad, en un flujo turbulento, los esfuerzos causados por las fluctuaciones turbulentas son proporcionales al gradiente de la velocidad media. Esta relación entre los esfuerzos de Reynolds y las variables medias es:

$$\bar{\rho}u_i''u_j'' = -\bar{\rho}v_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \left(\bar{\rho}\tilde{k} + \bar{\rho}v_t \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \quad (147)$$

Donde $v_t = (\mu_t/\bar{\rho})$ es la viscosidad turbulenta y es una característica del estado del flujo.

Para el flujo turbulento de escalar, el concepto de viscosidad turbulenta o, propiamente, de difusividad turbulenta, se expresa como:

$$\rho u_i'' u_\alpha'' = -\bar{\rho} \frac{v_T}{S_{C_T}} \frac{\partial \tilde{\phi}_\alpha}{\partial x_i} \quad (148)$$

La viscosidad turbulenta v_T puede calcularse de diferentes formas, dando lugar a una variedad de modelos con un número variable de ecuaciones diferenciales. Los más populares de estos modelos son, probablemente, los de la familia del modelo $k - \varepsilon$.

III. Modelo $k - \varepsilon$

Este modelo es el empleado en ésta tesis. En él, se define como:

$$v_T = C_\mu \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\varepsilon}} \quad (149)$$

Donde C_μ es una constante determinada experimentalmente. Los valores de $\tilde{\varepsilon}$ y \tilde{k} se calculan a través de la ecuaciones de transporte.

La ecuación para la energía cinética turbulenta, \tilde{k} se obtiene de la ecuación de continuidad (1), haciendo $i=j$, aplicando la hipótesis de isotropía local, y dividiendo entre dos:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{k}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{k}) + \bar{\rho} u_i'' u_j'' \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_j} = - \frac{\partial}{\partial x_j} \underbrace{\left(\frac{1}{2} \overline{\rho u_j'' u_i'' u_i''} \right)}_{(a)} - \bar{\rho} \tilde{\varepsilon} \quad (150)$$

El término (a) se aproxima como:

$$- \left(\frac{1}{2} \overline{\rho u_j'' u_i'' u_i''} \right) \approx \frac{\mu_T}{\sigma_k} \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_j} \quad (151)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{k}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{k}) = \bar{\rho} (P_k - \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} \frac{v_T}{\sigma_k} \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_j} \right) \quad (152)$$

$$P_k = v_T \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{2}{3} \left(\tilde{k} + v_T \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i} \quad (153)$$

Aplicando hipótesis similares a las utilizadas para la ecuación de \tilde{k} , la ecuación para la disipación de la energía cinética turbulenta $\tilde{\varepsilon}$, se obtiene a partir para la ecuación (142):

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{\varepsilon}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{\varepsilon}) = \bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} (C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} \tilde{\varepsilon}) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} \frac{v_T}{\sigma_k} \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial x_j} \right) \quad (154)$$

Las constantes de las ecuaciones se encuentran en la tabla (6).

Tabla 5. Constantes del modelo $k - \varepsilon$ estándar.

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

El modelo $k - \varepsilon$, tal y como ha sido presentado, se comporta satisfactoriamente en flujos sencillos, normalmente flujos parabólicos para los cuales el modelo fue desarrollado en la década de 1970. En flujos más complejos, incluidos aquellos con rotación o con curvatura apreciable en las líneas de corriente, como los investigados en esta tesis, las hipótesis de isotropía en las que se basa el modelo no son aplicables, y las predicciones proporcionadas por el modelo son, en general, menos satisfactorias. La popularidad de este tipo de modelos, en la que su sencillez y economía juega un papel importante, ha dado lugar a una serie de modificaciones o variantes, que intentan compensar estas deficiencias, sin tener que abandonar la hipótesis de viscosidad turbulenta a favor de cierres de segundo orden.

ESQUEMAS DE DISCRETIZACIÓN

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

En la formulación de la ecuación discretizada (111), se requiere conocer la densidad ρ y la variable escalar ϕ en la cara de la celda. Estas variables se calculan en el nodo de la celda, por lo que es necesario interpolar entre celdas para conocer su valor en la cara. De tal modo que el cálculo de ρ y ϕ en la cara de la celda da lugar a los llamados esquemas de discretización. La determinación de los valores de estas variables en la cara es importante para la precisión y convergencia de la solución numérica.

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

Estos esquemas se describirán en base al sistema de celdas que se ilustra en la figura 6. Como ejemplo, se obtendrá el valor de ϕ en la cara e de la celda P. La velocidad en la cara e se considerará, positiva ($u_e > 0$).

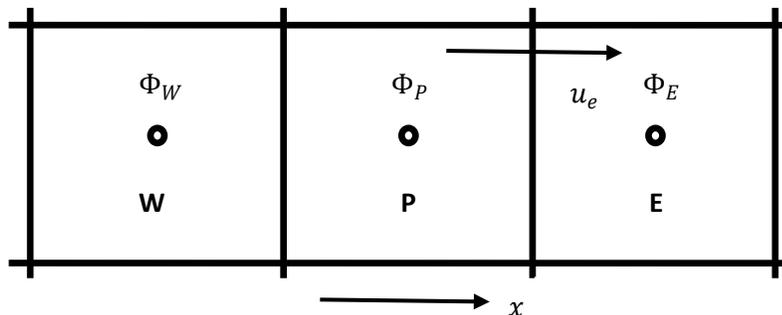


Figura 6. Diagrama esquemático de celdas.

B.1 Esquemas lineales

B.1.1 Diferencias desplazadas de primer orden

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

$$\phi_e = \phi_P$$

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

B.1.2. Diferencias centradas

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

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

Este esquema tiene una precisión de segundo orden, pero tiene el inconveniente de no estar acotado, por lo que puede presentar inestabilidades numéricas. El límite de estabilidad de este esquema viene dado en función del número de Peclet, ecuación (113) en el capítulo 3, que es un parámetro comparativo entre los procesos convectivo y difusivo.

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

B.1.3. Híbrido

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

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

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

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

$$\phi_e = \phi_P$$

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

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

“Simulación numérica de un gasificador de carbón con flujos paralelos”

```
TALK=f;RUN( 1, 1);VDU=X11-TERM
** definition of variables
REAL (PI,AINBOQ,print)
REAL (ROGIN1,ROGIN2,ROGIN3)
REAL (DIAM,DIAMBOQ, DIN2)
REAL (FGIN1,FGIN2 , FGIN3, VEL1, VEL2, VEL3)
REAL (FMC1, FCA1, FMC2, FCA2, FMC3, FCA3)
REAL (ROMEAN)
REAL (TGIN1,TGIN2,TGIN3)
REAL (HSIN,HGIN1,HGIN2,HGIN3)
REAL (TKEIN1,TKEIN2,TKEIN3,EPIN1,EPIN2,EPIN3,DIST)
** dimensiones (SI)
PI=3.14159
    diametro gasificador
DIAM=1.2
PI=DIAM
    diametros boquillas
DIAMBOQ=0.20
    Area boquillas
AINBOQ=(PI*DIAMBOQ*DIAMBOQ)/4
ainboq
** flujos masicos aire - kg/s
    Primer nivel, flujo por boquilla y por m**2
FGIN1=(4.708/4)/AINBOQ
fgin1
    Segundo nivel, flujo por boquilla y por m**2
FGIN2=(4.708/4)/AINBOQ
fgin2
    Tercer nivel, flujo por boquilla y por m**2
FGIN3=(1.832/4)/AINBOQ
fgin3
** length scale for inlet epsilon
DIST=(DIAMBOQ)/10.0
** flujos masicos carbon - kg/s
    -Primer nivel, flujo por boquilla
FMC1=1.472/4
FMC1=FGIN1*0.100254885
FCA1=FMC1
fca1
    -Segundo nivel, flujo por boquilla
FMC2=1.112/4
FMC2=FGIN2*0.236193712
FCA2=FMC2
fca2
    tercer nivel, flujo por boquilla
FMC3=4.832/3.
FMC3=FGIN3
FCA3=FMC3*1.2
```

```
fca3
** inlet temperatures - K
  coal
  air
TGIN1= 600.0
TGIN2= 600.0
TGIN3= 600.0
  evaluate inlet densities - currently only used for fiinit(rho1)
PRESS0=1.0e+5
TEMPO=0.
ROGIN1=PRESS0/(287.41*TGIN1)
  ROGIN1=FGIN1/VEL1
rogin1
ROGIN2=PRESS0/(287.41*TGIN2)
  ROGIN2=FGIN2/VEL2
rogin2
ROGIN3=PRESS0/(287.41*TGIN3)
  ROGIN3=FGIN3/VEL3
rogin3
  *Densidad del Carbon
REAL(ROCOAL); ROCOAL=1300.
  * Velocidades
  VEL1=2.5
VEL1=FGIN1/ROGIN1
vel1
  VEL2=2.5
VEL2=FGIN2/ROGIN2
vel2
  VEL3=2.5
VEL3=FGIN3/ROGIN3
vel3
REAL(FVA1,FVA2,FVA3)
REAL(FVC1,FVC2,FVC3,S1,S2,S3,S11,S12,S13)
REAL(UNO1,UNO2,UNO3)
FVA1=FGIN1*AINBOQ/(ROGIN1)
FVA2=FGIN2*AINBOQ/(ROGIN2)
FVA3=FGIN3*AINBOQ/(ROGIN3)
FVC1=FCA1*AINBOQ/(ROCOAL)
FVC2=FCA2*AINBOQ/(ROCOAL)
FVC3=FCA3*AINBOQ/(ROCOAL)
FVA1
FVC1
FVA2
FVC2
FVA3
FVC3
S1=FVA1/(FVA1+FVC1);S11=FVC1/(FVA1+FVC1)
S2=FVA2/(FVA2+FVC2);S12=FVC2/(FVA2+FVC2)
```

“Simulación numérica de un gasificador de carbón con flujos paralelos”

```
S3=FVA3/(FVA3+FVC3);S13=FVC3/(FVA3+FVC3)
S1
S2
S3
S11
S12
S13
UNO1=S1+S11
UNO2=S2+S12
UNO3=S3+S13
UNO1
UNO2
UNO3
TKEIN1=0.0025*VEL1*VEL1;TKEIN2=0.0025*VEL2*VEL2
TKEIN3=0.0025*VEL3*VEL3
EPIN1=0.1643*TKEIN1**1.5/DIST; EPIN2=0.1643*TKEIN2**1.5/DIST
EPIN3=0.1643*TKEIN3**1.5/DIST
TKEIN1=TKEIN2=TKEIN3=0.3
  EPIN1=3.0
  EPIN2=3.0
  EPIN3=3.0
  ** Definiciones para el COFFUS
BOOLEAN(BURN,INERT,NOXCAL,RADCAL,SIZECH)
  ** Activa combustion
+ BURN=T

  ** Desactiva Radiacion
+ RADCAL=f

  ** Activa modelo de reduccion de particulas
+ SIZECH=T
BOOLEAN(ASFIRE)
INTEGER(ANA)
  ** ASFIRE selecciona tipo de analisis
ASFIRE=f
IF(ASFIRE) THEN
ANA=1
  ** Coal proximate analysis (mass fractions, as fired)
  YWATM = water YASHM = ash n.b. YRAWC=1.0-YWATM-YASHM
  YCHAM = char if YCHAM > 0 , volatiles if YCHAM < 0
REAL(YWATM,YASHM,YCHAM,YRAWC)
YWATM =0.0147 ;YASHM = 0.3261
YCHAM = -0.0873;YRAWC = 1-YWATM-YASHM

ELSE
ANA=2
  ** Analisis aproximado (en fracciones masicas)
  YWATM = Humedad YASHM = ceniza
```

“Simulación numérica de un gasificador de carbón con flujos paralelos”

```
YRAWC=Carbon fijo (char)
YCHAM = volatiles
REAL(YWATM,YASHM,YCHAM,YRAWC)
YWATM =5.3/100 ;YASHM = 12.1/100
YCHAM = 46.7/100 ;YRAWC = 35.8/100

ENDIF
** Dry coal ultimate analysis (mass fractions) ----
YCDRY =carbon1 YODRY = oxygen YSDRY = sulphur
YHDRY = hydrogen YNDRY = nitrogen
REAL(YHDRY,YCDRY,YODRY,YNDRY,YSDRY)
YCDRY = 77.6/100;YHDRY = 6.5/100
YODRY = 13.9/100;YNDRY = 1.13/100
YSDRY = 1.-YASHM-YHDRY-YCDRY-YODRY-YNDRY
YSDRY=0.22/100

*****
Q1 created by VDI menu, Version 3.1, Date 24/12/97

*****
IRUNN = 1 ;LIBREF = 3
*****
Group 1. Run Title
TEXT(3d wall-fired 350MW lignite boiler )
*****
Group 2. Transience
STEADY = T
*****
CARTES=T
NREGX=1
NX=30
IREGX=1; GRDPWR(X,30,0.45,1.0)
NREGY=3
NY=40
IREGY=1; GRDPWR(Y,10,0.15,1.0)
IREGY=2; GRDPWR(Y,10,0.15,1.0)
IREGY=3; GRDPWR(Y,20,0.20,1.0)

NREGZ=1
NZ=1
IREGZ=1; GRDPWR (Z,1,0.01,1.0)
Group 6. Body-Fitted coordinates

Group 7. Variables: STOREd,SOLVEd,NAMED
-----
+ STORE(TMP1)
ONEPHS=f
SOLVE(P1,U1,V1)
```

```
SOLUTN(P1,Y,Y,Y,P,P,P)
  STORE(P2)
+ SOLUTN(U2,Y,Y,N,N,N,Y);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=0.00005
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,N,P);TERMS(CHA2,P,P,P,N,P)

TERMS(WAT2,P,P,P,N,P)

CSG3=CNCR

Group 9. Properties

STORE(RHO1)

TEMPO=0.0

REAL(RG56,RG57)

ENUL=1.8E-5

RHO2=ROCOAL

PRNDTL(H2)=1.E10

RHO1=GRND;TMP1=GRND;RG56=GRND;RG57=2.0

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)

+ 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

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

“Simulación numérica de un gasificador de carbón con flujos paralelos”

```
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
fiinit(vpor)=1.0
* friccion
WALL(WALL1,WEST,1,1,5,6,1,1,1,1)
WALL(WALL2,EAST,NX,NX,5,6,1,1,1,1)
WALL(WALL3,WEST,1,1,8,24,1,1,1,1)
WALL(WALL4,EAST,NX,NX,8,24,1,1,1,1)
WALL(WALL5,WEST,1,1,26,NY,1,1,1,1)
WALL(WALL6,EAST,NX,NX,26,NY,1,1,1,1)
* Calculo de las entalpias del aire de entrada
REAL(HCALC1,HCALC2,HCALC3,TCALC1,TCALC2,TCALC3)
TCALC1=TGIN1
TCALC2=TGIN2
TCALC3=TGIN3
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
HCALC2=0.77*(0.97035+1.493E-4*TCALC2/RG57)*TCALC2
HCALC2=HCALC2+0.23*(1.0802+3.265E-5*TCALC2/RG57)*TCALC2
HCALC3=0.77*(0.97035+1.493E-4*TCALC3/RG57)*TCALC3
HCALC3=HCALC3+0.23*(1.0802+3.265E-5*TCALC3/RG57)*TCALC3
** Conversion de HCALC a J/kg
HCALC1=HCALC1/1000
HCALC2=HCALC2/1000
HCALC3=HCALC3/1000
```

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 = .000E+00;

BUOYB = 0.

* 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)

COAL 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
  * 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
```

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 minimun; 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
  *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
```

“Simulación numérica de un gasificador de carbón con flujos paralelos”

```
+ 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 + hCtCO o hCtCO2 (por kg C)
ShetO2 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,grnd9,1.0);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
  * 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
  * 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)
```

“Simulación numérica de un gasificador de carbón con flujos paralelos”

```
+ 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

  CONDICIONES DE ENTRADA
PATCH(ENTRADA,NORTH,1,30,40,40,1,1,1,1)
*Aire*
COVAL(ENTRADA,P1,FIXFLU,1.1614*(0.04715*0.795))
COVAL(ENTRADA,R1,FIXFLU,0.04715*0.795)
COVAL(ENTRADA,U1,ONLYMS,0.0)
COVAL(ENTRADA,V1,ONLYMS,-0.04715)
COVAL(ENTRADA,H1,ONLYMS,HCALC3);
  COVAL(ENTRADA,KE,ONLYMS,TKEIN3)
```

```
COVAL(ENTRADA,EP,ONLYMS,EPIN3)
COVAL (ENTRADA,KE,ONLYMS,6.95905E-6)
COVAL (ENTRADA,EP,ONLYMS,2.513535E-8)
  *Carbon*
COVAL(ENTRADA,P2,FIXFLU,1300*(0.04715*(1-0.795)))
COVAL(ENTRADA,R2,FIXFLU,0.04715*(1.0-0.795))
COVAL(ENTRADA,U2,ONLYMS,0.0)
COVAL(ENTRADA,V2,ONLYMS,-0.04715)
COVAL(ENTRADA,H2,ONLYMS,CP2*TCALC3)
COVAL(ENTRADA,phis,ONLYMS, 1.)
COVAL(ENTRADA,WAT2, .000E+00, YWATM)
COVAL(ENTRADA,CHA2, .000E+00, 0.0)
COVAL(ENTRADA,COL2, .000E+00, 1-YASHM-YWATM)
COVAL(ENTRADA,YO2 , .000E+00, 2.320E-01)
COVAL(ENTRADA,YH2O, .000E+00, .000E+00)
COVAL(ENTRADA,YH2, .000E+00, .000E+00)
COVAL(ENTRADA,YCO , .000E+00, .000E+00)
COVAL(ENTRADA,YCO2, .000E+00, .000E+00)
COVAL(ENTRADA,YCHX, .000E+00, .000E+00)
  COVAL(ENTRADA,RADY, 0.000E+00, 0.000E+00)
  COVAL(ENTRADA,RADX, 0.000E+00, 0.000E+00)
```

CONDICIONES DE SALIDA

```
PATCH(SALIDA,SOUTH,1,30,1,1,1,1,1)
COVAL(SALIDA ,U1 , .000E+00, .000E+00)
COVAL(SALIDA ,U2 , .000E+00, .000E+00)
COVAL(SALIDA ,V1 , .000E+00, .000E+00)
COVAL(SALIDA ,V2 , .000E+00, .000E+00)
COVAL(SALIDA ,W1 , .000E+00, .000E+00)
COVAL(SALIDA ,W2 , .000E+00, .000E+00)
COVAL(SALIDA ,P1 , 1.000E+02, .000E+00)
COVAL(SALIDA ,P2 ,(RHO2/RHO1)*1.e+3,0.0)
COVAL(SALIDA ,KE , .000E+00, .000E+00)
COVAL(SALIDA ,EP , .000E+00, .000E+00)
COVAL(SALIDA ,H1 , .000E+00, SAME )
COVAL(SALIDA ,H2 , .000E+00, SAME )
COVAL(SALIDA ,PHIS, .000E+00, .000E+00)
COVAL(SALIDA ,WAT2, .000E+00, .000E+00)
COVAL(SALIDA ,CHA2, .000E+00, .000E+00)
COVAL(SALIDA ,COL2, .000E+00, .000E+00)
COVAL(SALIDA ,YO2 , .000E+00, .000E+00)
COVAL(SALIDA ,YH2O, .000E+00, .000E+00)
COVAL(SALIDA ,YH2, .000E+00, .000E+00)
COVAL(SALIDA ,YCO , .000E+00, .000E+00)
COVAL(SALIDA ,YCO2, .000E+00, .000E+00)
COVAL(SALIDA ,YCO2, .000E+00, .000E+00)
  COVAL(SALIDA ,RADY, 0.000E+00, SAME )
  COVAL(SALIDA ,RADX, 0.000E+00, SAME )
```

*****RADIATION

PATCH(WALLR1,WEST,1,1,1,40,1,1,1,1)
COVAL(WALLR1,RADX,ED2ME,RADW)

PATCH(WALLR2,EAST,NX,NX,1,40,1,1,1,1)
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 = 4000

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,0.5);RELAX(COL2,LINRLX,0.5)

RELAX(CHA2,LINRLX,0.5);RELAX(WAT2,LINRLX,0.5)

* Special relaxation practices for sources

* FACMIN = ask litec what this is

FACMIN = 0.9

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(U1 ) = 5.000000E+01 ;VARMIN(U1 ) =-5.000000E+01  
VARMAX(U2 ) = 5.000000E+01 ;VARMIN(U2 ) =-5.000000E+01  
VARMAX(V1 ) = 5.000000E+01 ;VARMIN(V1 ) =-5.000000E+01  
VARMAX(V2 ) = 5.000000E+01 ;VARMIN(V2 ) =-5.000000E+01  
  
varmax(p1)=1.000000E+03  
varmin(p1)=1.0e-4  
RELAX(P1 ,LINRLX, 1.000E-01)  
  RELAX(P2 ,LINRLX, 1.000E+00)  
RELAX(U1 ,FALSDT, 1.000E-03)  
RELAX(U2 ,FALSDT, 1.000E-03)  
RELAX(V1 ,FALSDT, 1.000E-03)  
RELAX(V2 ,FALSDT, 1.000E-03)  
  
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

```
-----  
BOOLEAN(SPEOUT)
```

* SPEOUT = T activates special OUTput data

REAL(CBETA,YVOL,STCOEF,HEATC,HEATH,HEATC2,HITMUL,RG42,RG91)
REAL(RG100,RG101,RG102,RG103,RG104)
SPEOUT=t

* 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

** 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

** 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 = 2 ;IZMON = 1
NPRMON = 100000
NPRMNT = 1
TSTSWP=-1

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

BIBLIOGRAFIA

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