



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO**  
PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA  
ENERGÍA - SOLAR FOTOTÉRMICA

**MODELACIÓN DE LA TRANSFERENCIA DE CALOR  
RADIATIVA EN REACTORES TERMOQUÍMICOS SOLARES**

**T E S I S**

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:  
MAESTRO EN INGENIERÍA

PRESENTA:

I.Q. ALDO JAVIER GUADARRAMA MENDOZA

TUTOR PRINCIPAL:

DRA. HEIDI ISABEL VILLAFÁN VIDALES  
INSTITUTO DE ENERGÍAS RENOVABLES, UNAM

CIUDAD UNIVERSITARIA, CD. MX., JUNIO DE 2017



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.

## **JURADO ASIGNADO:**

Presidente: Dr. Camilo Alberto Arancibia Bulnes

Secretario: Dr. Patricio Javier Valades Pelayo

1<sup>er.</sup> Vocal: Dra. Heidi Isabel Villafán Vidales

2<sup>do.</sup> Vocal: Dr. Hernando Romero Paredes Rubio

3<sup>er.</sup> Vocal: Dr. David Riveros Rosas

Lugar donde se realizó la tesis:

Instituto de Energías Renovables, UNAM  
Temixco Morelos

## **TUTOR DE TESIS**

DRA. HEIDI ISABEL VILLAFÁN VIDALES  
INSTITUTO DE ENERGÍAS RENOVABLES, UNAM

---

**FIRMA**

# Agradecimientos

---

A la Universidad Nacional Autónoma de México por que me volvió a abrir sus puertas, ahora en el Instituto de Energías Renovables, para crecer una vez más como profesionista y como persona.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) por haberme otorgado la beca de manutención durante la duración de los estudios de posgrado y por haberme otorgado una beca mixta para realizar una estancia de investigación en el extranjero.

Al proyecto PAPIIT-DGAPA-UNAM IG100217 "Propiedades de Electrodo de Carbón producidos a partir de Biomasa mediante concentración solar" por la beca otorgada para la obtención del grado de maestría.

Al proyecto PAPIIT-DGAPA-UNAM IA101115 "Modelado de reactores solares termoquímicos basados en receptores volumétricos porosos" por el apoyo otorgado para realizar una estancia de investigación en el extranjero.

Al Centro Mexicano de Innovación en Energía Solar (CEMIE-Sol), en el marco de la Convocatoria 2013-02, del FONDO SECTORIAL CONACYT-SENER-SUSTENTABILIDAD ENERGÉTICA, dentro del Proyecto Estratégico No. 10 con título: combustibles solares y procesos industriales (CoSolPi) por el apoyo otorgado para asistir al XXXVIII encuentro del AMIDIQ.

A la Dra. Heidi Isabel Villafán Vidales por haber dirigido este proyecto de tesis. Además le agradezco todo el apoyo, tanto académico como económico, para el desarrollo de todas las actividades que realice durante el posgrado.

Al Dr. Patricio Javier Valadez Pelayo por su apoyo, recomendaciones, consejos y correcciones durante todo el proceso de la elaboración de esta tesis.

Al Dr. Camilio A. Arancibia Bulnes por su apoyo y recomendaciones durante todo el proceso de la elaboración de este trabajo.

Al Dr. David Riveros Rosas y al Dr. Hernando Romero Paredes Rubio por sus observaciones y sugerencias que aportaron a este trabajo.

Al Dr. Maximiliano Valdés González por el apoyo técnico.

Al M.I. Isaías Moreno Cruz por todo el apoyo que amablemente me brindó con todas mis dudas de programación,  $\LaTeX$  y gnuplot.

A todos aquellos que impartieron las clases a las que atendí durante mis estudios de maestría y aportaron a mi crecimiento profesional y personal.

A Karla Emilse Noriega Rendón por todo su amor, cariño y paciencia con los que me acompañó durante todo este trayecto, desde el proceso de ingreso a la maestría hasta la

obtención del grado.

A mis padres María de Jesús Mendoza Candia y Francisco Javier Guadarrama Trejo que me han formado y me ha seguido apoyando en cada una de las decisiones que he tomado.

A mi hermano Andoni Andoni Adolfo Guadarrama Mendoza, por su buen humor, y que a pesar de la distancia siempre me ha apoyado.

A los buenos amigos que encontré en el IER con los que pase buenos y agradables momentos: Alejandro, Camilo, Charly, Eduardo, Ernesto, Fabiola, Fernando, Héctor, Hilda, Iris, Isaías, J. Alejandro, Juan Carlos, Julio, Lupita, Mariano y Tomás.

---

# Contenido

---

<b>Lista de Figuras</b>	<b>vii</b>
<b>Lista de Tablas</b>	<b>xi</b>
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Energía solar en la actualidad . . . . .	1
1.2. Combustibles Solares . . . . .	3
1.2.1. Hidrógeno . . . . .	3
1.2.2. Gas de Síntesis . . . . .	4
1.3. Producción solar de $H_2$ /Syngas . . . . .	5
1.3.1. Procesos termoquímicos . . . . .	5
1.3.2. Ciclos termoquímicos . . . . .	7
1.3.2.1. Ferrita de zinc . . . . .	7
1.4. Reactores termoquímicos solares . . . . .	9
1.5. Reactores solares volumétricos . . . . .	10
1.6. Diseño y escalamiento de reactores solares . . . . .	13
1.7. Estado del arte . . . . .	15
1.8. Descripción del problema . . . . .	17
1.9. Objetivos . . . . .	18
1.9.1. Objetivo general . . . . .	18
1.9.2. Objetivos particulares . . . . .	19
<b>2. Metodología</b>	<b>21</b>
2.1. Formulación matemática . . . . .	21
2.1.1. Ecuación de conservación de energía . . . . .	21
2.1.1.1. Equilibrio radiativo . . . . .	22
2.1.2. Ecuación de Transferencia Radiativa . . . . .	22
2.1.2.1. Flux de calor radiativo . . . . .	24
2.1.3. Métodos de solución para la Ecuación de Transferencia Radiativa . . . . .	24
2.1.4. Método Monte Carlo . . . . .	25
2.1.4.1. Relaciones de transferencia de calor para intercambio radiativo entre superficies . . . . .	25

2.2. Modelo matemático . . . . .	27
2.2.1. Trazado de rayos del concentrador solar . . . . .	27
2.2.2. Trazado de rayos Monte Carlo en el medio poroso . . . . .	29
2.2.2.1. Lectura de la posición y dirección del rayo . . . . .	29
2.2.2.2. Intersección con la superficie más cercana . . . . .	30
2.2.2.3. Determinación de la absorción o reflexión del rayo . . . . .	35
2.2.2.4. Determinación del tipo de reflexión . . . . .	35
2.2.2.5. Reflexión especular . . . . .	35
2.2.2.6. Reflexión difusa . . . . .	36
2.2.2.7. Determinar el elemento de superficie donde se absorbe el rayo . . . . .	37
2.2.2.8. Distribución del flux de radiativo en la superficie del poro . . . . .	38
2.2.3. Equilibrio radiativo . . . . .	38
2.3. Propiedades Ópticas . . . . .	39
2.3.1. Método de matriz de característica . . . . .	39
<b>3. Resultados</b>	<b>41</b>
3.1. Propiedades ópticas . . . . .	41
3.1.1. Propiedades ópticas del soporte de zirconia . . . . .	41
3.1.2. Propiedades ópticas de las películas de $ZnFe_2O_4$ . . . . .	42
3.2. Análisis del trazado de rayos en el medio poroso sin película reactiva . . . . .	45
3.2.1. Medio poroso con canales de 3mm de diámetro . . . . .	47
3.2.1.1. En el foco . . . . .	48
3.2.1.2. 5 cm fuera de foco . . . . .	50
3.2.1.3. 10 cm fuera de foco . . . . .	52
3.2.2. Medio poroso con canal de 4mm de diámetro . . . . .	54
3.2.2.1. En el foco . . . . .	55
3.2.2.2. 5cm fuera de foco . . . . .	56
3.2.2.3. 10 cm fuera de foco . . . . .	57
3.2.2.4. Conclusión de las simulaciones . . . . .	58
3.3. Análisis de trazado de rayos en el medio poroso con película reactiva . . . . .	59
3.3.0.1. 5 cm fuera de foco . . . . .	60
3.3.0.2. 10 cm fuera de foco . . . . .	62
3.3.0.3. Conclusiones de la simulaciones con película . . . . .	66
3.3.1. Comparación entre distintos espesores de película reactiva . . . . .	66
3.3.2. Comparación con distinta apertura del atenuador . . . . .	68
3.3.2.1. 5cm fuera de foco . . . . .	68
3.3.2.2. 10 cm fuer de foco . . . . .	69
3.3.3. Geometría recomendada para la reducción de ferrita de zinc . . . . .	71
<b>4. Conclusiones</b>	<b>79</b>

---

<b>A. Propiedades Ópticas</b>	<b>81</b>
A.1. Calculo de índice de refracción . . . . .	81
<b>B. Pruebas de independencia</b>	<b>85</b>
B.1. Prueba de independencia de rayos . . . . .	85
B.2. Prueba de independencia de malla . . . . .	86
<b>Referencias</b>	<b>89</b>

---





# Lista de Figuras

---

1.1. Radiación Global en el mundo, en escala de suma anual y suma diaria promedio en unidades de $\frac{kWh}{m^2}$ (Solargis 2016) . . . . .	2
1.2. Esquema de la conversión de energía solar a combustible solar (Steinfeld & Palumbo 2001) . . . . .	6
1.3. Esquema de un ciclo termoquímico de 2 pasos para la separación de $H_2O/CO_2$ en base a una reacción redox de un metal Smestad & Steinfeld (2012). . . . .	8
1.4. Esquema del Reactor Catalítico de Absorción Directa (Hogan et al. 1990) . . . . .	10
1.5. (a) Esquema del Reactor con receptor mejorado (b) Vista frontal del reactor con receptor mejorado (Muir et al. 1994) . . . . .	11
1.6. (a) Medio poroso de Carburo de Silicio. (b) Corte del esquema del reactor solar (Villafán-Vidales et al. 2011). . . . .	12
1.7. (a) Esquema del reactor de cavidad de eje vertical y (b) modelo axisimétrico de la geometría de la cavidad (Villafán-Vidales et al. 2012). . . . .	12
1.8. Esquema de la configuración del reactor solar de Furler et al. (2012). . . . .	13
1.9. Esquemas del reactor solar de cavidad irradiado indirectamente y del receptor volumétrico poroso . . . . .	17
1.10. Esquema del Horno Solar del Alto Flujo Radiativo (HOSIER). . . . .	18
2.1. Esquema de los caminos posibles de un fotón en un sistema cerrado arbitrario (Modest 2013). . . . .	26
2.2. Ejemplo de puntos de reflexión en la superficie del espejo hexagonal . . . . .	28
2.3. Vista del horno solar con rayos centrales reflejados sobre una ventana enfrente del punto focal y a una distancia de 5 cm fuera del punto focal . . . . .	29
2.4. Puntos incidentes en la ventana obtenidos con los rayos centrales reflejados del cono solar de cada partición en los espejos . . . . .	30
2.5. (a) Distribución de flux en el receptor. (b) Puntos incidentes en el receptor . . . . .	31
2.6. Diagrama de flujo para la implementación del trazado de Rayos por el método de Monte Carlo (Mahan 2002). . . . .	32
2.7. Esquema representativo en el plano $xy$ de un canal $i$ con centro fuera del origen . . . . .	33

2.8. Esquema de intersección de un rayo con las superficies del sistema. (a) Para un rayo proveniente de la entrada del canal. (b) Para un rayo que se refleja y continua su trayectoria. . . . .	34
2.9. Esquema de la reflexión especular . . . . .	36
2.10. Relación entre el sistema de referencia local y global (Mahan 2002). . . . .	36
2.11. Esquema del mallado de la superficie interior del poro . . . . .	37
3.1. Resultados de la medición de una muestra de zirconia en el espectrofotómetro en función de la longitud de onda. . . . .	42
3.2. Transmitancia con respecto a la longitud de onda calculada con el método de matriz característica comparada con la medida por Sultan & Singh (2009). . . . .	43
3.3. Propiedades ópticas de una película delgada de $ZnFe_2O_4$ en función del ángulo de incidencia calculadas para el rango del espectro solar y el rango de la emisión (2000K). . . . .	44
3.4. Propiedades ópticas en función del ángulo de incidencia para el sistema $ZrO_2/ZnFe_2O_4$ calculadas para el rango del espectro solar y el rango de la emisión (2000K). . . . .	45
3.5. Esquema del medio poroso monolítico indicando los canales que son objeto de análisis . . . . .	46
3.6. Flux radiativo incidente a lo largo de la coordenada angular para distintas posiciones radiales . . . . .	48
3.7. Distribución de los ángulos cenital y azimutal de los rayos incidentes para distintas posiciones angulares con la posición radial fija ( $R=12\text{mm}$ ) . . . . .	49
3.8. Resultados obtenidos para el poro central cuando el medio poroso esta en el foco del HOSIER . . . . .	50
3.9. Temperatura perimetral promedio con respecto a la longitud del canal de 3 mm de diámetro en el foco del concentrador . . . . .	51
3.10. Desviación estándar con respecto a la posición radial del canal de 3mm de diámetro para distintas longitudes de canal en el foco . . . . .	51
3.11. Temperatura perimetral promedio con respecto a la longitud del canal de 3 mm de diámetro a 5cm del foco del concentrador . . . . .	52
3.12. Desviación estándar con respecto a la posición radial del canal de 3mm de diámetro para distintas longitudes $H$ de canal a 5 cm del foco . . . . .	53
3.13. Temperatura perimetral promedio con respecto a la longitud del canal de 3 mm de diámetro a 10cm del foco del concentrador . . . . .	53
3.14. Desviación estándar con respecto a la posición radial del canal de 3mm de diámetro para distintas longitudes de canal a 10cm del foco . . . . .	54
3.15. Temperatura perimetral promedio con respecto a la longitud del canal de 4 mm de diámetro en el foco del concentrador . . . . .	55
3.16. Desviación estándar con respecto a la posición radial del canal de 4mm de diámetro para distintas longitudes de canal en el foco . . . . .	56

---

3.17. Temperatura perimetral promedio con respecto a la longitud del canal de 4 mm de diámetro a 5cm del foco del concentrador . . . . .	57
3.18. Desviación estándar con respecto a la posición radial del canal de 4mm de diámetro para distintas longitudes de canal a 5cm del foco . . . . .	58
3.19. Temperatura perimetral promedio con respecto a la longitud del canal de 4 mm de diámetro a 10cm del foco del concentrador . . . . .	58
3.20. Desviación estándar con respecto a la posición radial del canal de 4mm de diámetro para distintas longitudes de canal a 10 cm del foco . . . . .	59
3.21. Temperatura perimetral promedio con respecto a la longitud del canal de 3mm de diámetro y longitud de 15mm con película reactiva de 100 nm de espesor . . . . .	60
3.22. Temperatura perimetral promedio con respecto a la longitud del canal de 3mm de diámetro y longitud de 6mm con película reactiva de 100 nm de espesor . . . . .	61
3.23. Temperatura perimetral promedio con respecto a la longitud del canal de 3mm de diámetro y longitud de 8mm con película reactiva de 100 nm de espesor . . . . .	62
3.24. Temperatura perimetral promedio con respecto a la longitud del canal de 3mm de diámetro y longitud de 15mm con película reactiva de 100 nm de espesor a 10cm del foco del concentrador . . . . .	63
3.25. Temperatura perimetral promedio con respecto a la longitud del canal de 3mm de diámetro y longitud de 6mm con película reactiva de 100 nm de espesor a 10cm del foco del concentrador . . . . .	65
3.26. Temperatura perimetral promedio con respecto a la longitud del canal de 3mm de diámetro y longitud de 8mm con película reactiva de 100 nm de espesor a 10cm del foco del concentrador . . . . .	65
3.27. Temperatura perimetral promedio a lo largo del canal central de 6mm de largo para 100nm, 300nm y 500nm de espesor de película reactiva . . . . .	67
3.28. Temperatura perimetral promedio a lo largo del canal central de 8mm de largo para 100nm, 300nm y 500nm de espesor de película reactiva . . . . .	67
3.29. Temperatura perimetral promedio a lo largo del canal central de 15mm de largo para 100nm, 300nm y 500nm de espesor de película reactiva . . . . .	68
3.30. Temperatura perimetral promedio a lo largo del canal central de 6mm de largo para diferentes aperturas del atenuador del Horno Solar, a 5cm de su foco . . . . .	69
3.31. Temperatura perimetral promedio a lo largo del canal central de 8mm de largo para diferentes aperturas del atenuador del Horno Solar, a 5cm de su foco . . . . .	70
3.32. Temperatura perimetral promedio a lo largo del canal central de 15mm de largo para diferentes aperturas del atenuador del Horno Solar, a 5cm de su foco . . . . .	71

---

3.33. Temperatura perimetral promedio a lo largo del canal central de 6mm de largo para diferentes aperturas del atenuador del Horno Solar, a 10cm de su foco . . . . .	72
3.34. Temperatura perimetral promedio a lo largo del canal central de 8mm de largo para diferentes aperturas del atenuador del Horno Solar, a 10cm de su foco . . . . .	73
3.35. Temperatura perimetral promedio a lo largo del canal central de 15mm de largo para diferentes aperturas del atenuador del Horno Solar, a 10cm de su foco . . . . .	74
3.36. Perfiles de temperatura de distintos canales para una geometría de canal de 3mm de diámetro y 6mm de longitud, colocando el monolito a 5cm de foco y una apertura del atenuador del 40% . . . . .	75
3.37. Temperatura perimetral promedio con respecto a la longitud del canal de 3mm de diámetro y longitud de 6mm con película reactiva de 100 nm de espesor a 5cm del foco del concentrador y 40% de apertura del concentrador	76
3.38. Perfiles de temperatura de distintos canales para una geometría de canal de 3mm de diámetro y 6mm de longitud, colocando el monolito a 10cm de foco y una apertura del atenuador del 60% . . . . .	77
3.39. Temperatura perimetral promedio con respecto a la longitud del canal de 3mm de diámetro y longitud de 6mm con película reactiva de 100 nm de espesor a 10cm del foco del concentrador y 60% de apertura del concentrador	78
A.1. Índices de refracción para $ZrO_2$ y $ZnFe_2O_4$ utilizados para calcular las propiedades ópticas con el método de la matriz característica . . . . .	83
A.2. Coeficientes de extinción para $ZrO_2$ y $ZnFe_2O_4$ utilizados para calcular las propiedades ópticas con el método de la matriz característica . . . . .	83
B.1. Temperatura promedio del canal en función del número de rayos. . . . .	85
B.2. Potencia absorbida en función del número de rayos . . . . .	86
B.3. Potencia absorbida en función del número de elementos de la malla . . . . .	87
B.4. Temperatura promedio en función del número de elementos de la malla . . . . .	87

# Lista de Tablas

---

1.1. Comparativa de densidad energética entre el Hidrógeno y otros combustibles(Hurtado & Soria 2007) . . . . .	3
1.2. Óxidos metálicos con potencial para llevar a cabo producción solar de hidrógeno por ciclos termoquímicos de dos pasos (Abanades et al. 2006) . . .	8
3.1. Propiedades ópticas de la muestra de zirconia promediada de manera simple en el espectro entre 250-2500 nm . . . . .	41
3.2. Localización de los centros de los canales con respecto al eje $x$ y al eje $y$ , y la posición radial. . . . .	47
3.3. Temperatura promedio, desviación estándar, temperatura máxima y temperatura mínima del perfil de temperaturas en la superficie interna del poro de 3 mm de diámetro para la simulación en el foco del concentrador . .	49
3.4. Temperatura promedio, desviación estándar, temperatura máxima y temperatura mínima del perfil de temperaturas en la superficie interna del poro de 3 mm de diámetro para la simulación de 5 cm fuera del foco del concentrador . . . . .	52
3.5. Temperatura promedio, desviación estándar, temperatura máxima y temperatura mínima del perfil de temperaturas en la superficie interna del poro de 3 mm de diámetro para la simulación 10 cm fuera del foco del concentrador . . . . .	54
3.6. Temperatura promedio, desviación estándar, temperatura máxima y temperatura mínima del perfil de temperaturas en la superficie interna del poro de 4 mm de diámetro para la simulación en el foco del concentrador . .	55
3.7. Temperatura promedio, desviación estándar, temperatura máxima y temperatura mínima del perfil de temperaturas en la superficie interna del poro de 4 mm de diámetro para la simulación 5cm fuera del foco del concentrador . . . . .	57
3.8. Temperatura promedio, desviación estándar, temperatura máxima y temperatura mínima del perfil de temperaturas en la superficie interna del poro de 4 mm de diámetro para la simulación a 10cm del foco del concentrador	59

3.9. Temperatura promedio, desviación estándar, temperatura máxima y temperatura mínima del perfil de temperaturas en la superficie interna del poro de 3 mm de diámetro y 15mm de longitud para la simulación a 5cm del foco del concentrador con película reactiva de 100nm de espesor . . . . .	61
3.10. Temperatura promedio, desviación estándar, temperatura máxima y temperatura mínima del perfil de temperaturas en la superficie interna del poro de 3 mm de diámetro y 6mm de longitud para la simulación a 5cm del foco del concentrador con película reactiva de 100nm de espesor . . . . .	62
3.11. Temperatura promedio, desviación estándar, temperatura máxima y temperatura mínima del perfil de temperaturas en la superficie interna del poro de 3 mm de diámetro y 8mm de longitud para la simulación a 5cm del foco del concentrador con película reactiva de 100nm de espesor . . . . .	63
3.12. Temperatura promedio, desviación estándar, temperatura máxima y temperatura mínima del perfil de temperaturas en la superficie interna del poro de 3 mm de diámetro y 15mm de longitud para la simulación a 10cm del foco del concentrador con película reactiva de 100nm de espesor . . . . .	64
3.13. Temperatura promedio, desviación estándar, temperatura máxima y temperatura mínima del perfil de temperaturas en la superficie interna del poro de 3 mm de diámetro y 6mm de longitud para la simulación a 10cm del foco del concentrador con película reactiva de 100nm de espesor . . . . .	64
3.14. Temperatura promedio, desviación estándar, temperatura máxima y temperatura mínima del perfil de temperaturas en la superficie interna del poro de 3 mm de diámetro y 8mm de longitud para la simulación a 10cm del foco del concentrador con película reactiva de 100nm de espesor . . . . .	66
3.15. Temperatura promedio, desviación estándar, temperatura máxima y temperatura mínima del perfil de temperaturas en la superficie interna del poro de 3 mm de diámetro y 6mm de longitud para la simulación a 5cm del foco del concentrador y apertura de 40% con película reactiva de 100nm de espesor . . . . .	72
3.16. Temperatura promedio, desviación estándar, temperatura máxima y temperatura mínima del perfil de temperaturas en la superficie interna del poro de 3 mm de diámetro y 6mm de longitud para la simulación a 10cm del foco del concentrador y apertura de 60% con película reactiva de 100nm de espesor . . . . .	74
A.1. Permitividad a altas frecuencias, frecuencias y factores de amortiguamiento para la $ZnFe_2O_4$ (Shimada et al. 2004) y $ZrO_2$ (Pecharroman et al. 1996) .	82
A.2. Constantes utilizadas en la ecuación de tres términos de Sellmeier para el calculo del índice de refracción de la zirconia (Wood & Nassau 1982) . . . .	82

## **1.1. Energía solar en la actualidad**

Hoy en día existe una gran incertidumbre acerca del futuro energético del mundo. El 81.5%(Beltrán Rodríguez et al. 2015) de la producción mundial de energía primaria se logra a través de la quema de combustibles fósiles. Este último recurso energético no es renovable, además su combustión contribuye al aumento de la concentración de los gases de efecto invernadero en la atmósfera. Por ello, se está fomentando el uso de fuentes de energía renovable, que derivan principalmente de la radiación incidente del sol en la Tierra, ya que son una alternativa sustentable para una paulatina transición energética.

La luz del sol es uno de los recursos más abundantes en la superficie de la tierra, es un recurso ilimitado en una escala de tiempo humana y es un recurso que no le pertenece ni a gobiernos ni a particulares.

Para el año 2001, Steinfeld (Steinfeld & Palumbo 2001) estimaba que utilizando el 0.1% de la superficie terrestre con colectores solares que operarán con una eficiencia del 20%, se podría abastecer la necesidades energéticas anuales de los habitantes del planeta para aquel año. Para el año 2014 el consumo de energía mundial aumento un 35.28%, pero bajo las mismas condiciones de operación de los colectores solares se requeriría el 0.14% del total de la superficie terrestre para satisfacer el requerimiento actual.

A pesar de todas las ventajas antes mencionadas del aprovechamiento de la energía solar, se tienen inconvenientes para hacer uso de esta fuente:

1. La radiación solar incidente en la superficie terrestre esta muy diluida, cerca de 1  $kW/m^2$ .
2. Es un recurso intermitente.
3. La distribución del recurso solar no es equitativa sobre la superficie terrestre, ya que la mayor parte se encuentra entre las latitudes 30° Norte y 30° Sur. En la figura 1.1 se muestra la radiación promedio, tanto anual como diaria, en todo el mundo para ilustrar este punto.

Para contrarrestar estas desventajas, se han propuesto distintos métodos de almacenamiento de energía solar, que se clasifican en dos grupos dependiendo de la tecnología de



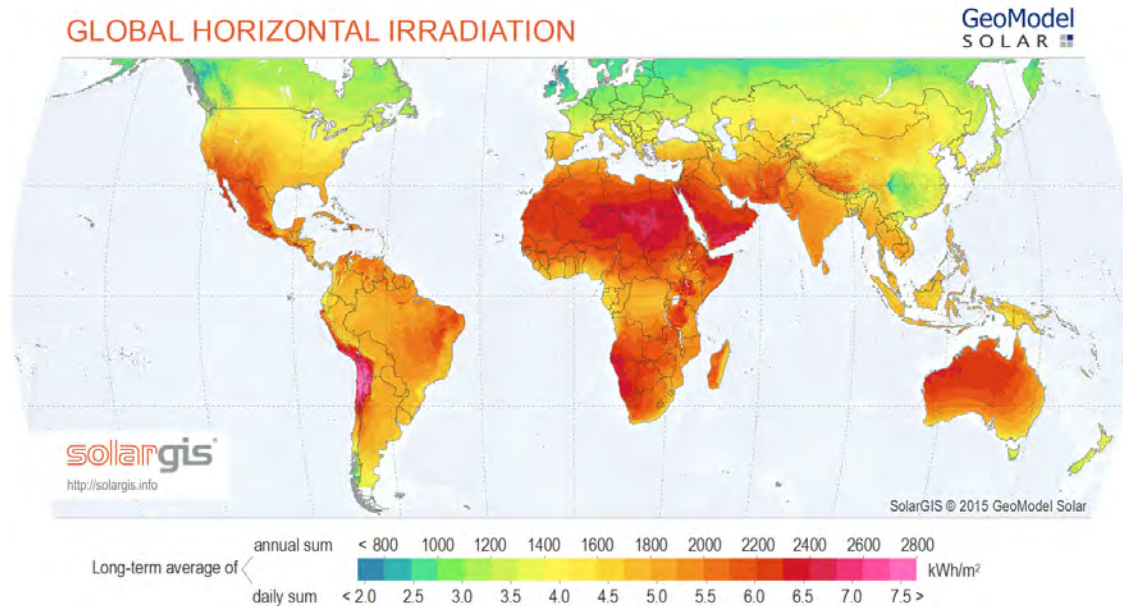


Figura 1.1: Radiación Global en el mundo, en escala de suma anual y suma diaria promedio en unidades de  $\frac{kWh}{m^2}$  (Solargis 2016)

aprovechamiento de la energía solar; para los paneles fotovoltaicas se considera el almacenamiento de electricidad, y el almacenamiento de energía térmica se aplica en tecnologías de concentración solar. Este trabajo en particular se va a enfocar al almacenamiento para tecnologías de concentración solar. A su vez, el almacenamiento de energía térmica, puede clasificarse en (Hou et al. 2011):

- **Almacenamiento por energía térmica:** la energía térmica puede ser almacenada directamente. En almacenamiento de calor sensible, la energía es almacenada en diferencia de temperatura al aumentar la temperatura de algún material durante las horas pico. En almacenamiento de calor latente, como en los materiales de cambio de fase, al utilizar la energía de las horas pico para realizar el cambio de fase del material en cuestión, y utilizar posteriormente esta energía.
- **Almacenamiento por sorción** (ya sea adsorción o absorción): dos sustancias químicas que forman “enlaces” a condiciones estándar, son separados utilizando la energía durante la hora pico. La energía es liberada cuando las dos sustancias están mezcladas y son expuestas a condiciones estándar.
- **Almacenamiento por energía química:** el calor generado por concentración de energía solar es utilizado para llevar a cabo una reacción endotérmica para la producción de un combustible almacenable y transportable.

El almacenamiento por energía química se perfila como una de las opciones más viables de almacenamiento, ya que además de que se tiene la capacidad de almacenar la

Combustibles	Densidad Energética		
	Densidad [ $\frac{kg}{m^3}$ ]	Volumen [ $\frac{kWh}{m^3}$ ]	Masa [ $\frac{kWh}{kg}$ ]
$H_2$ líquido (1 bar, $-252.8^\circ C$ )	70.71	2375	33.59
$H_2$ gas (300 bar, $25^\circ C$ )	20.55	690	
$H_2$ gas (700 bar, $25^\circ C$ )	47.96	1611	
Gas natural (1 bar, $25^\circ C$ )	0.65	9.1	13.93
Butano líquido ( $25^\circ C$ )	550	7000	12.73
Gasolina	750	9270	12.36

Tabla 1.1: Comparativa de densidad energética entre el Hidrógeno y otros combustibles (Hurtado & Soria 2007)

energía solar por periodos de tiempos mas largos que los otros métodos, también permite que la energía solar pueda ser transportada de manera indirecta. Los combustibles solares por los que la comunidad científica a apostado son principalmente el Hidrógeno y el Gas de Síntesis, ya que ambos son las materias primas básicas para producir combustibles sintéticos líquidos a través de procesos disponibles industrialmente (Agrafiotis et al. 2015).

## 1.2. Combustibles Solares

### 1.2.1. Hidrógeno

El hidrógeno es el elemento más simple que pueda existir, además de ser el más abundante en el Universo. Gracias a este elemento y su reacción de fusión nuclear en el centro del Sol, existe vida en la Tierra (entre otros factores).

En la actualidad, el hidrógeno es utilizado principalmente como reactivo en procesos industriales para la producción de fertilizantes, amoniaco ( $NH_3$ ), metanol ( $CH_3 - OH$ ), así como también es utilizado en el proceso de refinación del crudo. No obstante, se le ha considerado como un potencial vector energético para la sustitución de los combustibles fósiles, ya sea usándolo en celdas de combustible o en su combustión directa. En la tabla 1.1 se muestran las densidades energéticas (tanto másicas como volumétricas) de combustibles cotidianos, presentando su comparación con el hidrógeno. Notablemente, el hidrógeno tiene una mayor capacidad energética al comparar por unidad de masa, sin embargo, al ser menos denso es menor su capacidad energética por unidad de volumen. Este hecho implica mayores dificultades en el transporte, almacenamiento y distribución del hidrógeno, comparado con los demás combustibles (Hurtado & Soria 2007).

A pesar de ser uno de los elementos más abundantes en el Universo, la realidad es que en la Tierra prácticamente no se encuentra al hidrógeno diatómico ( $H_2$ ) de manera natural, este está presente asociado a otras moléculas en una gran cantidad de compuestos existentes en la Tierra, y se puede obtener través de procesos químicos. Las fuentes de las

cuales se obtiene el hidrógeno actualmente son el gas natural (48%), el petróleo (30%), el carbón (18%) y agua (4%)(Hurtado & Soria 2007). En la actualidad, uno de los procesos más utilizados para la obtención del hidrógeno es el reformado de gas natural con vapor. En este proceso, se hace reaccionar vapor de agua con metano en condiciones de alta temperatura y presión (por encima de los 800°C a una presión de 25 bar), obteniendo como productos monóxido de carbono e hidrógeno, como se muestra en la reacción en la ecuación (1.1). El monóxido de carbono resultante de la primera reacción reacciona con el vapor de agua que se ha puesto en exceso para obtener como productos dióxido de carbono y una molécula adicional de hidrógeno, que es la reacción de desplazamiento de vapor de agua o 'water gas shift'(WGS), que muestra en la ecuación (1.2). El inconveniente de este proceso es que, además de hidrógeno, se produce dióxido de carbono que es considerado como un gas de efecto invernadero. Otro inconveniente, es la fuente de calor necesaria para llevar a cabo esta reacción, ya que como se dijo anteriormente, se requiere llevar la temperatura a más de 800°C; lo más común es que este calor de proceso sea obtenido de la quema de combustibles fósiles dentro de calderas.



### 1.2.2. Gas de Síntesis

El gas de síntesis o "syngas" es una mezcla gaseosa que contiene cantidades variables de monóxido de carbono (CO) e hidrógeno (H<sub>2</sub>) y su conversión exotérmica a combustibles ha sido practicada comercialmente desde hace mucho tiempo, por ejemplo por medio de la síntesis Fischer-Tropsch (Agrafiotis et al. 2015). Además es utilizado como intermediario en diferentes procesos químicos, para la producción de ácido acético, metanol, etanol, etilenglicol, amoníaco, ácido nítrico, entre otros(McKetta 1996).

La síntesis Fischer-Tropsch (FT) es un proceso industrial para producir alcanos por medio del gas de síntesis utilizando catalizadores basados en cobre, hierro o rutenio(Huber et al. 2006). Desarrollado por los alemanes Franz Fischer y Hans Tropsch durante las primeras décadas de los 1900s y utilizado por Alemania Nazi durante la década de 1930s y 1940s para la producción de combustibles líquidos a partir de gas de síntesis proveniente del carbón. La reacción general que ocurre en el proceso de síntesis Fischer-Tropsch se muestran en la ecuación 1.3.



Los productos de la síntesis FT están dentro de una gamma de alcanos en su mayoría de cadena lineal, que van desde cadenas de uno a 50 carbonos gobernadas por el modelo de polimerización de Anderson-Schulz-Flory (ASF).

El gas de síntesis es producido por los distintos tipos de proceso de producción de hidrógeno que contienen una fuente de carbono. Por consecuencia también es mayormente

producido a través del reformado de metano con un exceso de vapor de agua (Hickman & Schmidt 1993).

### 1.3. Producción solar de $H_2$ /Syngas

Es importante enfatizar que los procesos actuales de producción de hidrógeno y gas de síntesis, utilizan como precursor al metano, que comúnmente es obtenido a través de la explotación de yacimientos de combustibles fósiles. Además, como ya se ha mencionado anteriormente, para llegar a condiciones de operación quemamos combustible de origen fósil para la producción de vapor de servicio.

Una alternativa para evitar o disminuir la emisión de gases de efecto invernadero durante la producción de estos combustibles es utilizar la energía solar.

Para producir hidrógeno con energía solar existen básicamente 3 maneras (y sus combinaciones) que son (Steinfeld 2005):

- Electroquímica: por medio de la electrólisis, se divide la molécula de agua en sus componentes elementales (hidrógeno y oxígeno) por medio de energía eléctrica que proviene de paneles fotovoltaicos.
- Fotoquímica: se utilizan materiales semiconductores (fotocatalizadores) que son excitados mediante luz solar, generando electrones y cargas positivas. Estas cargas son separadas y, posteriormente, utilizadas para llevar a cabo las reacciones de reducción y oxidación de la molécula del agua.
- Termoquímica: se utiliza la radiación del sol concentrada, redirigiéndola a un reactor químico donde es absorbida por los reactivos para llevar a cabo una reacción.

Por otro lado, para la producción solar de gas de síntesis, sólo se tiene la opción de la producción solar termoquímica.

Se prefiere estudiar los procesos termoquímicos ya que presentan una mejor eficiencia con respecto a los procesos electroquímicos y fotoquímicos. Para los procesos termoquímicos se reporta una eficiencia de producción general del 45 %, mientras que la eficiencia reportada de la electrólisis es del 30 %, y la eficiencia para los procesos fotoquímicos es del 10 % (Wang et al. 2012).

#### 1.3.1. Procesos termoquímicos

Los procesos termoquímicos son aquellos que utilizan la energía concentrada del sol como fuente de energía para llevar a cabo reacciones endotérmicas de interés. En la figura 1.2 se muestra un esquema general de cómo opera un proceso termoquímico.

Se tienen cinco rutas termoquímicas para la producción de hidrógeno que involucran dos procesos principales:

---

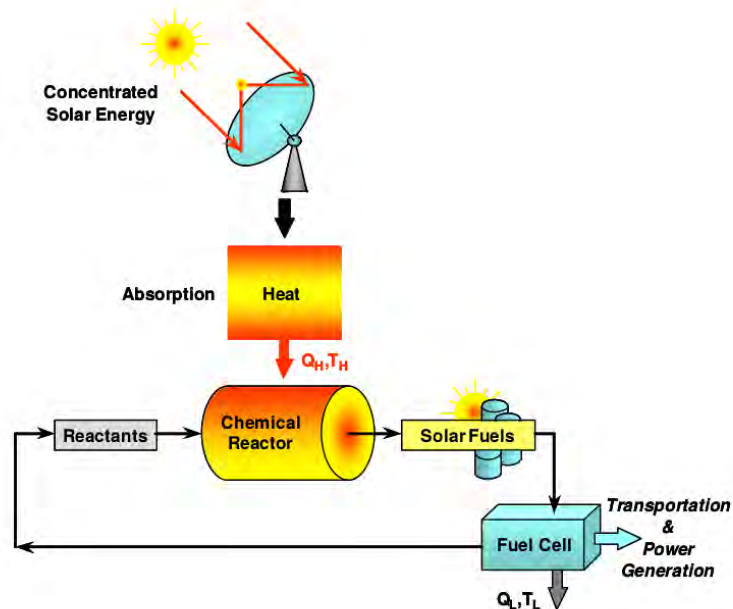


Figura 1.2: Esquema de la conversión de energía solar a combustible solar (Steinfeld & Palumbo 2001)

- Disociación de Agua
  - Termólisis
  - Ciclos Termoquímicos
- Descarbonización
  - Reformado
  - Cracking
  - Gasificación

En el caso de la producción de gas de síntesis solar, se han estado desarrollado dos vías de producción(Steinfeld 2012):

1. Producción vía ciclos termoquímicos tomando como materia prima agua ( $H_2O$ ) y dióxido de carbono ( $CO_2$ ).
2. Producción vía gasificación solar tomando como materia prima alguna fuente de carbono, como carbón, biomasa, desperdicio con alto contenido de carbono, etc.

La estrategia de investigación de las vías de producción del gas de síntesis, sitúan a la producción a través de ciclos termoquímicos como una alternativa a desarrollar a largo plazo, ya que es necesario desarrollar tecnologías novedosas y tomara tiempo antes de que

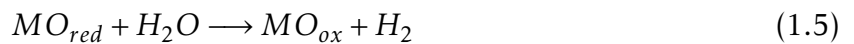
este método esté listo técnica y económicamente para su aplicación comercial. Mientras que la gasificación solar junto con otros procesos híbridos solar/fósil se proponen, desde un punto de vista estratégico, como procesos a desarrollar al mediano/corto plazo.

### 1.3.2. Ciclos termoquímicos

Dentro de los procesos termoquímicos para la producción de hidrógeno o syngas, es de nuestro mayor interés el estudio de los ciclos termoquímicos de dos pasos, ya que, aunque requieren temperaturas más altas que ciclos con más pasos, pueden alcanzar eficiencias por arriba del 30 % (Steinfeld & Palumbo 2001).

El mecanismo es el siguiente: en el primer paso se realiza una reacción endotérmica, que es la reducción de un óxido metálico (ver la ecuación (1.4)), la cuál obtiene la energía necesaria para efectuar la reacción de la radiación solar concentrada.

El segundo paso, es una reacción exotérmica, que se trata de la oxidación del metal u óxido metálico reducido producido en el paso anterior. Para la producción de hidrógeno puro, se debe realizar esta oxidación con vapor de agua, como se muestra en la ecuación (1.5). Para el caso de la producción del gas de síntesis, se debe realizar la reacción agregando una combinación de agua y dióxido de carbono, como se muestra en la ecuación (1.6). Al terminar este paso, el óxido metálico vuelve a su estado inicial y se repite el ciclo.



Cabe destacar que, cómo la producción de gases se esta llevando a cabo en dos etapas diferentes, se resuelve el problema de la separación del hidrógeno o gas de síntesis con el oxígeno producido en la primera etapa. En la figura 1.3 se presenta el esquema de la producción de estos dos combustibles solares en un ciclo de dos pasos.

Se han realizado estudios previos (Abanades et al. 2006) donde se han elegido los mejores pares metal-óxidos metálicos para realizar un ciclo termoquímico para la producción de hidrógeno. En este estudio, los autores seleccionaron los óxidos metálicos de una base de datos. Esta selección, que se muestra en la tabla 1.2, se consideraron los ciclos que tuvieran menos etapas, la menor cantidad de elementos involucrados en la reacción, que no tuviera inconvenientes de seguridad y ambientales, y además, que fueran accesibles <sup>1</sup>.

---

<sup>1</sup>Se omitieron los resultados para ciclos de 3 pasos y aquellos que tienen como producto intermedio el dióxido de azufre

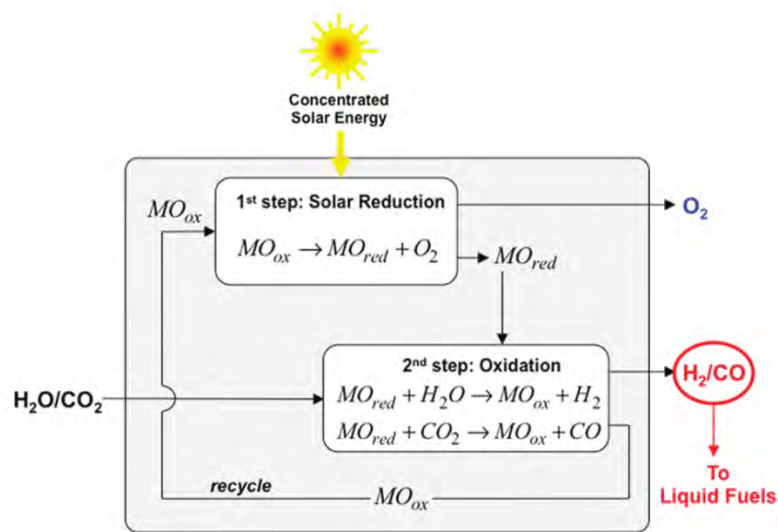


Figura 1.3: Esquema de un ciclo termoquímico de 2 pasos para la separación de  $H_2O/CO_2$  en base a una reacción redox de un metal Smestad & Steinfeld (2012).

### 1.3.2.1. Ferrita de zinc

Dentro de los diferentes tipos de óxidos metálicos se encuentran los óxidos metálicos mixtos. Las ventajas de utilizar un óxido metálico mixto es que se reduce la temperatura de la reacción de reducción mientras se preserva la actividad de la reacción de oxidación, comparada con utilizar el óxido metálico puro, y aumenta el punto de fusión de los óxidos metálicos (Miller et al. 2008). También con estos óxidos metálicos se evita que la temperatura de reducción coincida con el punto de fusión, como es el caso de el  $Fe_2O_3$ , donde para reducirlo se necesitan temperaturas superiores a los 1808K causando la aglomeración de reactivos y desactivación del material, debido a la disminución del área superficial específica (Agrafiotis et al. 2015).

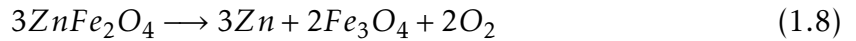
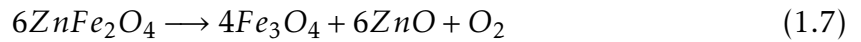
En este trabajo en particular, se propone el uso de ferrita de zinc ( $ZnFe_2O_4$ ), ya que con este óxido metálico mixto se requiere una menor temperatura de reducción en comparación a los óxidos metálicos presentados en la tabla 1.2. En la reacción de reducción se puede obtener un rendimiento cercano al 100% a una temperatura de 1800K (Aoki et al. 2004), aunque se buscan temperaturas por alrededor de los 1500K (Kaneko et al. 2004).

Para la producción de hidrógeno, las reacciones que rigen al ciclo termoquímico son las siguientes:

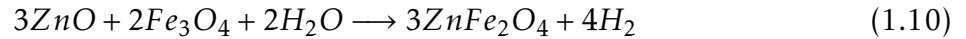
- Reacción de reducción:** de acuerdo con Kaneko et al. (2004), la reducción de la ferrita de zinc puede ocurrir de dos formas distintas, que se muestran en las ecuaciones (1.7) y (1.8). En reacción de reducción de la ecuación (1.8) el zinc metálico se vaporiza, y reacciona con el oxígeno liberado como se muestra en la ecuación (1.9).

Ciclo	Temperatura máxima (°C)	Reacciones
$ZnO/Zn$	2000	$ZnO \longrightarrow Zn + \frac{1}{2}O_2$ $Zn + H_2O \longrightarrow ZnO + H_2$
$Fe_3O_4/FeO$	2200	$Fe_3O_4 \longrightarrow 3FeO + \frac{1}{2}O_2$ $3FeO + H_2O \longrightarrow Fe_3O_4 + H_2$
$In_2O_3/In_2O$	2200	$In_2O_3 \longrightarrow In_2O + O_2$ $In_2O + 2H_2O \longrightarrow In_2O_3 + 2H_2$
$SnO_2/Sn$	2650	$SnO_2 \longrightarrow Sn + O_2$ $Sn + H_2O \longrightarrow SnO_2 + 2H_2$

Tabla 1.2: Óxidos metálicos con potencial para llevar a cabo producción solar de hidrógeno por ciclos termoquímicos de dos pasos (Abanades et al. 2006)



- **Reacción de producción de hidrógeno:** la reacción de producción de hidrógeno o de oxidación del ciclo se muestra en la ecuación (1.10).



## 1.4. Reactores termoquímicos solares

Para poder producir hidrogeno o gas de síntesis solar, es necesario diseñar y desarrollar los reactores en los cuáles se llevarán acabo las reacciones de oxidación y reducción de los ciclos termoquímicos, que se muestran en las ecuaciones (1.4), (1.5) y (1.6), respectivamente.

Una característica única en los reactores químicos solares es que la fuente de calor de proceso es energía solar concentrada(Steinfeld & Palumbo 2001). Por lo tanto las características en el diseño de los reactores en la parte de transferencia de calor puede variar del de los reactores convencionales. Debido a esto, los reactores solares es útil clasificarlos en dos grupos:



- Reactores irradiados indirectamente: En estos reactores el calentamiento de los reactivos se realiza de manera indirecta. Este calentamiento implica el uso de un material o compuesto que absorba la radiación solar concentrada, y posteriormente, la transporte por el mecanismo de conducción y/o radiación al interior del reactor.
- Reactores irradiados directamente: En este tipo de reactores, las partículas reactivas están directamente expuestas a la radiación solar concentrada, lo cual provee eficientemente la energía al sitio de reacción.

## 1.5. Reactores solares volumétricos

Dentro de la clasificación de reactores irradiados directamente, estos se pueden clasificar en dos sub grupos: aquellos que utilizan un receptor volumétrico donde se depositan los reactivos y en los que se irradian directamente las partículas reactantes(Alonso & Romero 2015). Este trabajo esta enfocado en reactores de receptor volumétrico. Los receptores volumétricos consisten en materiales con estructuras con alta porosidad, tal como mallas de alambre, espumas cerámicas o estructuras de panal(Agrafiotis et al. 2007).

El interés de estudiar este tipo de reactores radica en que las temperaturas máximas del receptor deberían alcanzarse dentro del material, fenómeno al que se le nombra efecto volumétrico, de manera que la temperatura en la superficie irradiada del receptor volumétrico es menor que la que tendría en los absorbedores tubulares, lo que conduce a menores pérdidas de radiación(Gomez-Garcia et al. 2016).

Distintos grupos han desarrollado sus propios diseños y/o prototipos de este tipo de reactores. Algunos de ellos se describen a continuación:

En el Laboratorio Nacional de Sandia (SLN por sus siglas en inglés), en Albuquerque, Arizona(Hogan et al. 1990), se desarrollo un primer prototipo de reactor solar irradiado directamente para el estudio de la reacción de reformado de metano con dióxido de carbono para la producción de gas de síntesis. La idea del diseño de este reactor es que el catalizador soportado en un medio de alúmina, en este caso particular rodio, sea irradiado directamente para que alcance la temperatura de reacción. El reactor consiste en un cilindro de aluminio con un diámetro de 38.1 cm y 38.1 cm de largo. La energía solar concentrada se transmite a través de una ventana de sílice fundida y de la apertura de 12.7 cm de diámetro, para llegar al absorbedor poroso de alúmina con un recubrimiento de rodio, con 22.9 cm de diámetro y 2.54 cm de espesor. En la figura 1.4 se puede observar un esquema del reactor descrito anteriormente.

En un siguiente trabajo del SNL (Muir et al. 1994), desarrollaron un receptor de radiación solar para el reactor directamente irradiado. El reactor consta de dos absorbedores, dos discos de espuma de cerámica porosa reticulada de 64 cm de diámetro por 5 cm de espesor, hechos de alúmina. Ambos soportando un recubrimiento de rodio que funciona como catalizador para la reacción de reformado de metano con dióxido de carbono. El reactor cuenta con una ventana de vidrio de cuarzo de 10 mm de espesor que esta montada en un marco enfriado por agua y sellada con silicon que resiste altas temperaturas.

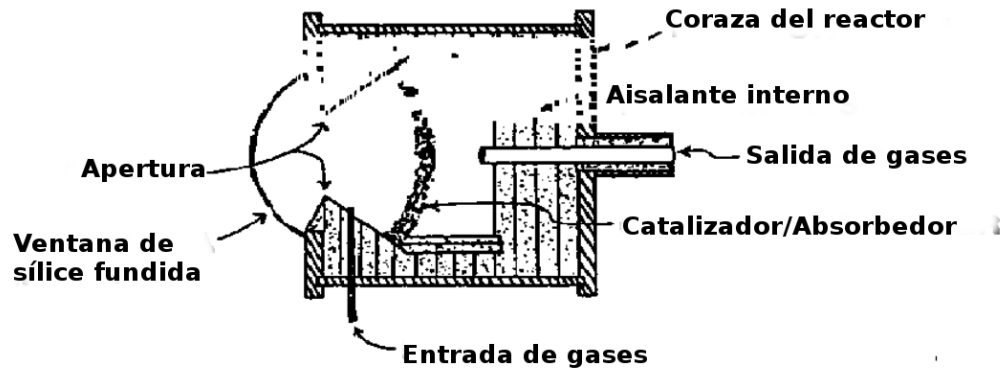


Figura 1.4: Esquema del Reactor Catalítico de Absorción Directa (Hogan et al. 1990)

El absorbedor se monta atrás de la ventana dentro de una cavidad cilíndrica de acero, aislada por un recubrimiento cerámico. En la figura 1.5a se puede observar un esquema del reactor, y en la figura 1.5b se encuentra una fotografía frontal de este.

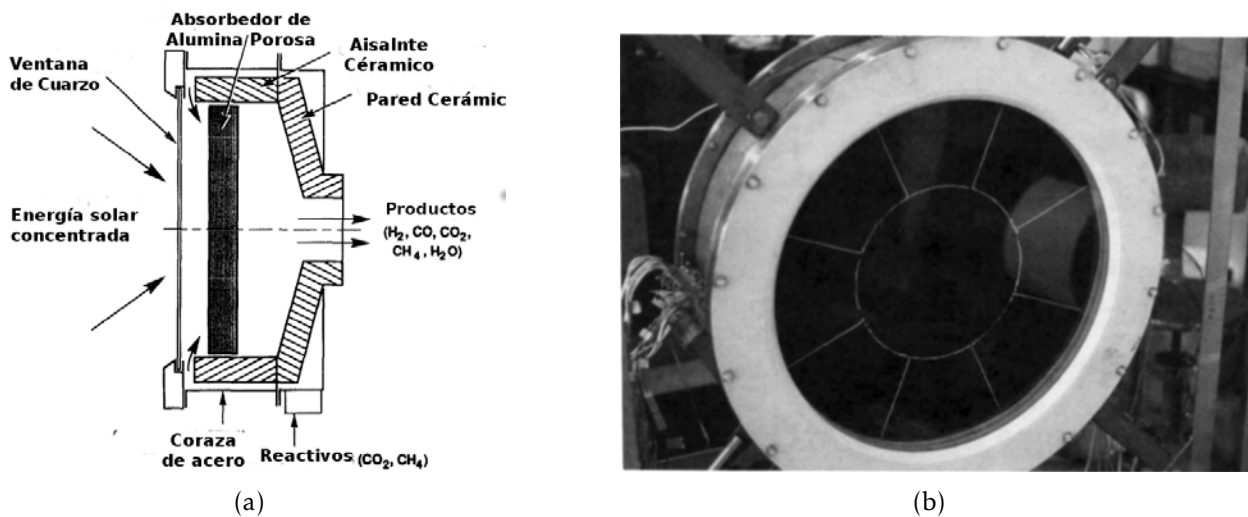


Figura 1.5: (a) Esquema del Reactor con receptor mejorado (b) Vista frontal del reactor con receptor mejorado (Muir et al. 1994)

En el laboratorio PROMES-CNRS, en Francia (Villafán-Vidales et al. 2011), se diseñó un prototipo un reactor solar de horizontal de cavidad cilíndrica con dimensiones de 35 cm de diámetro interno y 44 cm de largo, que contiene un medio poroso cerámico (véase la figura 1.6(a)). El frente del dispositivo es irradiado por un concentrador solar de disco parabólico de 2 m de diámetro. Las paredes laterales están envueltas por un aislante y una ventana de vidrio hemiesférica separa el sistema del ambiente. El esquema del reactor se puede ver en la figura 1.6(b).

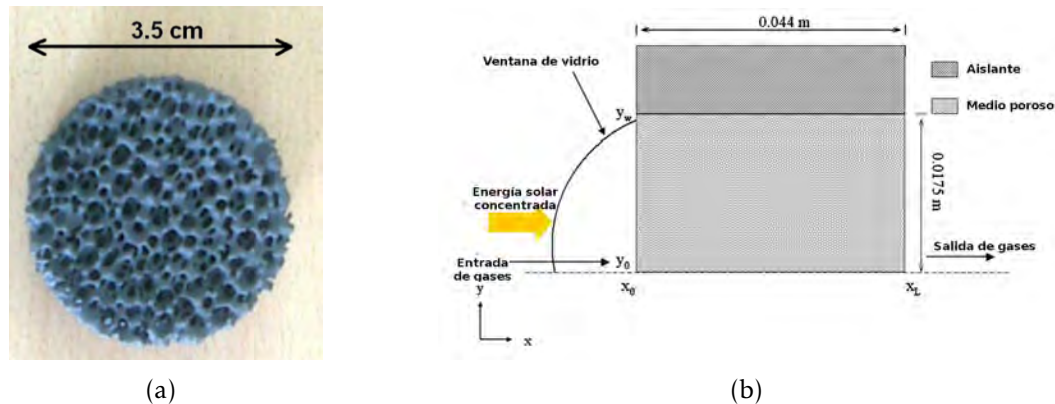


Figura 1.6: (a) Medio poroso de Carburo de Silicio. (b) Corte del esquema del reactor solar (Villafán-Vidales et al. 2011).

En el trabajo de Villafán-Vidales et al. (2012), se simuló un reactor de cavidad con eje vertical. El reactor está diseñado para la reducción continua de óxidos metálicos en una atmósfera controlada. El reactor consiste en un cilindro de pared aislante de 30 mm de diámetro interno y 30 mm de profundidad, y está envuelto en un aislante de fibra de alúmina-silicato. La cavidad tiene una apertura de 12 mm de diámetro en su cara superior para dejar entrar la radiación solar concentrada a través de una ventana hemisférica de vidrio Pyrex. Dentro del reactor, el óxido metálico a reaccionar se encuentra en el fondo de la cavidad, la forma de alimentación consiste en una varilla ascendente hecha de una pila de gránulos de óxido de 8 mm de diámetro y 5 mm de espesor. En la figura 1.7(a) se muestra un esquema del reactor y su concentrador solar, y en la figura 1.7(b) un esquema axisimétrico de los componentes de la cavidad.

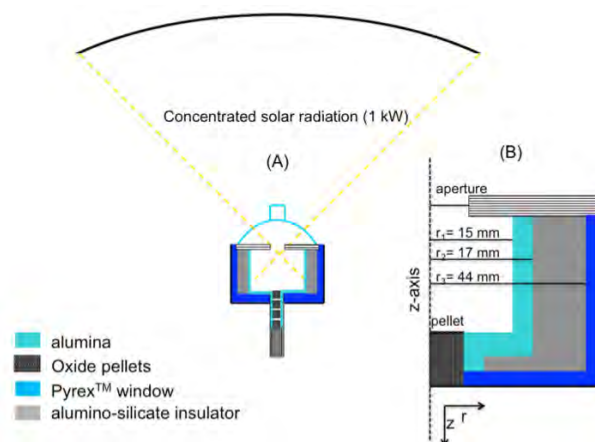


Figura 1.7: (a) Esquema del reactor de cavidad de eje vertical y (b) modelo axisimétrico de la geometría de la cavidad (Villafán-Vidales et al. 2012).

En el trabajo de Furler et al. (2012), desarrollaron un reactor solar que consiste en

una cavidad con una apertura de 4 cm de diámetro para la entrada de la energía solar concentrada. Sobre la apertura se encuentra una ventana de cuarzo de 24 cm de diámetro y 3 mm de espesor. Un concentrador solar parabólico compuesto (CPC) es incorporado en la apertura para aumentar más la relación de la concentración solar. Dentro de la cavidad se contiene un receptor hecho de varias capas de ceria porosa en forma cilíndrica con un diámetro interno de 62 mm, un diámetro externo de 85 mm y 100 mm de altura. El reactor tiene también un asilamiento de alumina envuelto por la cobertura exterior de Inconel 600. En la figura 1.8 se muestra un esquema del reactor descrito anteriormente.

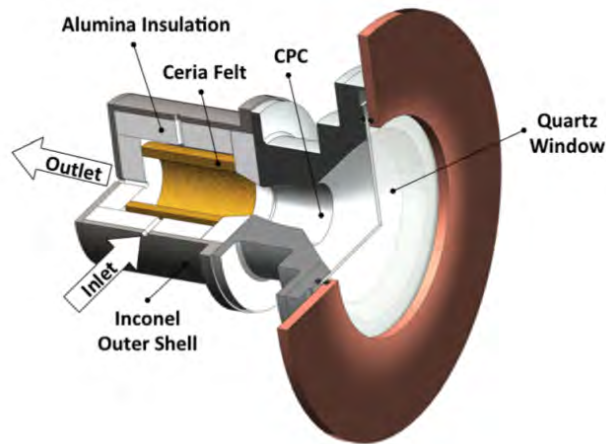


Figura 1.8: Esquema de la configuración del reactor solar de Furler et al. (2012).

## 1.6. Diseño y escalamiento de reactores solares

Independientemente del tipo de reactor solar, debido al uso de energía solar concentrada, además de la metodología de diseño utilizada en la ingeniería de reactores tradicional, es necesario considerar efectos fenómenos y modelos adicionales a esta metodología, presentando dificultades para el diseño de reactores solares. Algunas de estas dificultades son (Lédé & Ferrer 1999):

- **Datos de cinética química.** Existen datos básicos importantes para estimar la velocidad de reacción y seleccionar el tipo de reactor. Desafortunadamente estos datos no los encontramos disponibles en la literatura, especialmente si se encuentran involucradas varias fases en la reacción. A menudo se encuentra datos erróneos, esto depende de los modelos empíricos, cuyos parámetros carecen de significado cuando se intentan aplicar en otro tipo de reactor. Este es el caso de muchas mediciones hechas con análisis termogravimétricos donde las temperaturas y las velocidades de calentamiento son muy bajas en comparación a las que se encuentran en un reactor solar.

- **El modelado de los reactores.** La ecuación de transporte de radiación, que acompaña, y usualmente se impone a las ecuaciones de transporte de masa, energía y momentum que comunmente se utilizan para modelar reactores. Por eso, ahora que el balance radiativo es prioritario, se requieren muchos datos y parámetros no se encuentran en la literatura. En adición a los datos de cinética química, también hay incertidumbre por datos de propiedades ópticas (emisividad, absorptividad, reflectividad) y otras constantes fisicoquímicas. Estas dificultades se incrementan considerablemente cuando estas propiedades cambian rápidamente según avanza la reacción, y en muchos casos, su dependencia con respecto a la temperatura no puede ser ignorada.
  - **Problemas con los materiales.** Es bien sabido que los materiales utilizados para la construcción de un reactor solar debe ser capaz de soportar altas temperaturas, choques térmicos severos y condiciones transitorias. Pero también los materiales que se involucran con la reacción como el medio inerte de transición, catalizadores y los reactivos, se someten a los choques térmicos. Estos también pueden cambiar de forma, tamaño, estructura y propiedades, con variaciones en la distribución de tamaño de partícula. Estas modificaciones pueden complicar la simulación de estos reactores.
  - **La instalación solar impone el tipo de reactor.** Es claro que el diseño de un reactor solar con una instalación de concentradores solares específica tiene pocas opciones para ser optimizado para otro tipo de instalación solar. En consecuencia, los cambios de escala conllevan cambios drásticos en el diseño del reactor, de manera que los resultados de las pruebas a pequeña escala no pueden ser inmediatamente escalados; deben ser tratados adecuadamente, utilizando modelos libres de parámetros efectivos, que permitan describir con certidumbre, el comportamiento de los nuevos diseños.
  - **Ciclos Termoquímicos-Reacciones Reversibles.** Muchos procesos solares involucran reacciones que deben llevarse a cabo un gran número de veces, incluyendo a los ciclos termoquímicos y a las reacciones reversibles. Aunque las pérdidas y/o las irreversibilidades son muy pequeñas por cada ciclo, estas se pueden volver significativas cuando el ciclo se repite muchas veces, por lo que es necesario también, diseñar estrategias adecuadas de regeneración del óxido metálico. Como en la industria petroquímica, es recomendable que esta regeneración se lleve a cabo dentro del mismo reactor solar.
  - **Metrología en condiciones extremas.** Dentro de los reactores termoquímicos se encuentran a menudo condiciones extremas, temperaturas mayores a los 3000 K, grandes flujos de calor que deben ser transferidos de forma eficiente (alrededor de los 10 000 soles), altas velocidades de calentamiento y enfriamiento, tamaño pequeño de partículas (hasta nanopartículas), reacciones muy rápidas y tiempos de residencia muy cortos.
-

- **Regímenes transitorios.** Esta es una de las mayores dificultades que se encuentran en el uso de sistemas solares, con dos principales causas:
  - La intermitencia de la radiación solar en escalas de tiempo cortas (por la nubosidad) y la diaria (día y noche). Entre el gran número de consecuencias se encuentran las siguientes: el comportamiento de los materiales, la estabilidad y el control del proceso completo, el modelo, la búsqueda y optimización de sistemas híbridos.
  - En reactores sólido-gas, las partículas atraviesan varias veces la zona focal, proceso en donde se someten a una sucesión de regímenes transitorios de calefacción y refrigeración. La selectividad de la reacción puede ser muy diferente en comparación con la misma reacción realizada en condiciones de estado estacionario.

## 1.7. Estado del arte

Como ya se había mencionado anteriormente, los reactores solares son un componente clave para llevar a cabo, con energía solar concentrada, los ciclos termoquímicos. Por esta razón el diseño y optimización de estos es un paso muy importante que se puede lograr con herramientas como la modelación. A continuación se describirá el estado de arte de la modelación de receptores solares volumétricos

Algunos de los trabajos realizados están basados en el método de trazado de rayos Monte Carlo, en donde se han evaluado las propiedades ópticas de materiales porosos tales como el coeficiente de extinción y dispersión.

En el trabajo de Argento & Bouvard (1996) se propuso utilizar el método de trazado de rayos Monte Carlo para determinar las propiedades ópticas de un medio poroso, considerando que este está compuesto de un empaquetamiento de partículas esféricas de radio igual. Para la generación del empaquetamiento de partículas esféricas aleatorios también se utilizó el método de Monte Carlo. Calcularon el coeficiente de absorción y de dispersión para diferentes configuraciones con distinta densidad relativa del medio poroso.

En el trabajo de Petrasch et al. (2007) se realizó una representación en 3D de la retícula de una muestra de cerámica porosa generada por tomografía computarizada, que se empleó para determinar la porosidad del medio, la relación entre superficie-volumen, y el tamaño mínimo de volumen elemental representativo para dominio continuo. Posteriormente, se aplicó la técnica de trazado de rayos Monte Carlo (MCRT) para calcular el coeficiente de extinción y la función fase de dispersión basadas en funciones de distribución de probabilidad y la dirección de la radiación incidente. Se asumió un problema isotrópico, justificándose por que el coeficiente de extinción es independiente de la dirección.

En el trabajo de Akolkar & Petrasch (2011) se realizó un trazado de rayos Monte Carlo (MCRT) para optimizar la transferencia radiativa en un medio poroso. Utilizando algoritmos de manipulación de imagen en 3D para modificar la geometría a nivel poro. Después

se realizó un análisis de transferencia radiativa a nivel de poro para cada modificación de la geometría del poro, con el fin de encontrar el arreglo donde se obtenga la máxima absorción. Se obtuvieron resultados para fases sólidas opacas, tanto reflexión especular o difusa sin involucrar un medio participativo. Se estudiaron dos modelos de medio poroso: cerámicos porosos reticulados y partículas de  $CaCO_3$  empaquetadas. El coeficiente de extinción y el coeficiente de dispersión se determinaron por medio de un modelo de transferencia radiativa.

En el trabajo de Zhao & Tang (2016) se presentó un esquema de trazado de rayos Monte Carlo para simular la transferencia de calor radiativa dentro de estructuras complejas en 3D. Se estudio la transferencia radiativa en un medio poroso de carburo de silicio y los resultados mostraron que el coeficiente de extinción asociado al medio poroso incrementa con el decrecimiento del tamaño de poro y la porosidad.

En otros trabajos se evaluó la propagación de radiación incidente concentrada en receptores solares volumétricos, ya sean aplicados para la generación de potencia o en aplicaciones de química solar. Algunos trabajos de estos se mencionan enseguida:

En el trabajo de Chen et al. (2015) se presento un modelo integrado de la propagación de la radiación solar en un sistema que integra concentrador solar, ventana y absorbedor. Los parámetros de absorción volumétrica y desempeño óptico del receptor de medio poroso se investigó de manera numérica por el metodo de trazado de rayos Monte Carlo.

Lee et al. (2012) realizó un trabajo en donde realizó una evaluación numérica del rendimiento de un absorbedor solar, basado en el acoplamiento entre un modelo de flux solar y un modelo transferencia de calor. Desarrollaron un método de trazado de rayos para el modelo de distribución de flux solar en el absorbedor multicanal de  $SiC$  bajo un concentrador solar, y se resolvió las ecuaciones gobernantes de transferencia de calor para una dimensión que toman en cuenta la distribución de flux solar previamente obtenido.

En el trabajo Villafán-Vidales et al. (2011) estudió numericamente un reactor solar termoquímico de 1kW equipado con un estructura de espuma cerámica porosa para predecir la transferencia de calor dentro del receptor volumétrico. En este reactor esta planeado producir hidrógeno a partir de ciclos termoquímicos de dos pasos basado en óxidos metálicos mixtos, en donde se recubrirá el medio poroso con ferrita reactiva, el cuál será irradiado directamente con energía solar concentrada. El modelo numérico desarrollado acopla los fenómenos de transferencia de momentum, energía y masa con las reacciones químicas. Se utilizó el software FLUENT para resolver las ecuaciones de transporte de la fase fluida. Los términos fuente para la fase sólida, la transferencia de calor radiativa y las reacciones químicas fueron introducidos al software a través de funciones definidas por el usuario (UDF's). El modelo completo se utilizó para predecir el comportamiento térmico del receptor bajo diferentes condiciones de operación, tales como el flujo de gas inerte, el flux de radiación solar incidente, la porosidad, el tamaño de celda de la espuma, el largo del receptor volumétrico, y la influencia de las reacciones químicas.

Wang et al. (2014) se desarrolla el método de acoplamiento de Rayos de Monte Carlo y Método de Volumen Finito para investigar el rendimiento de la producción de hidrógeno a través del reformado con vapor de metano en reactores termoquímicos de medios poro-

sos que incluyen la masa, el impulso, la energía y la transferencia de energía radiativa, así como la cinética de la reacción química. El modelo local de no equilibrio térmico se utiliza para proporcionar más información sobre la temperatura. La aproximación P1 modificada se adopta para resolver la ecuación de transferencia de radiación. El método MCRT se utiliza para calcular la concentración de la luz solar y los problemas de transmisión. La ecuación de la energía de la fase fluida y las ecuaciones del transporte se resuelven con el software FLUENT. La ecuación de energía en fase sólida, la ecuación de transferencia de energía radiativa y la cinética de reacción química se programan mediante funciones definidas por el usuario (UDF). Los resultados numéricos indican que la irradiación solar concentrada en la superficie de entrada de fluido del reactor de energía solar es altamente desigual y la distribución de la temperatura tiene una influencia significativa en la producción de hidrógeno.

## 1.8. Descripción del problema

Como anteriormente se ha mencionado, en este tipo de reactores la transferencia de calor por radiación se impone sobre los otros dos mecanismos de transferencia de calor, convección y conducción (Lédé & Ferrer 1999). Por ello se requiere realizar un modelo de transferencia radiativa dentro del reactor solar para predecir su compartamiento y estimar una distribución de temperaturas dentro del reactor, ya que la temperatura es un parámetro muy importante para las reacciones del ciclo termoquímico.

Para este trabajo, se simuló un reactor solar de cavidad irradiado directamente que contiene un medio poroso cerámico como receptor de la radiación, el cuál estara recubierto por una película delgada de ferrita de zinc. El reactor de cavidad cónica, cuenta con una apertura de 40 cm de diámetro, colocada 22 cm alejada del foco del concentrador solar, donde se encuentra una ventana de vidrio borosilicato. En la figura 1.9(a) se muestra un esquema del reactor simulado.

En la figura 1.9(b) se muestra un esquema del medio poroso de zirconia. Tiene un diámetro total de 64 mm, una profundidad de 15 mm; cada poro tiene un diámetro de 3 mm con una separación aproximada de 1 mm entre cada borde de poro. En total cuenta con un total de 199 poros. En el modelo se considera que este medio poroso está impregnado con una película delgada de ferrita de zinc  $ZnFe_2O_4$ .

Por simplificación del problema, el modelo desarrollado en este trabajo de tesis sólo se enfoca a la simulación del medio poroso, el cual se simuló utilizando el método Monte Carlo de trazado de rayos para conocer la distribución de temperaturas de cada canal en diferentes posiciones, tanto del canal sin recubrimiento, como con recubrimiento. El modelo considera equilibrio radiativo, reflexión difusa y especular, y absorción.

En este caso particular, el modelo partirá de los datos de los rayos en el punto focal provenientes del Horno Solar de Alto Flujo Radiativo (HOSIER) del Laboratorio Nacional de Sistemas Concentración Solar y Química Solar (LACYQS) ubicado en el Instituto de Energías Renovables, UNAM en Témixco, Morelos. Los elementos que componen el HOSIER, como se puede ver en la figura 1.10, son los siguientes:



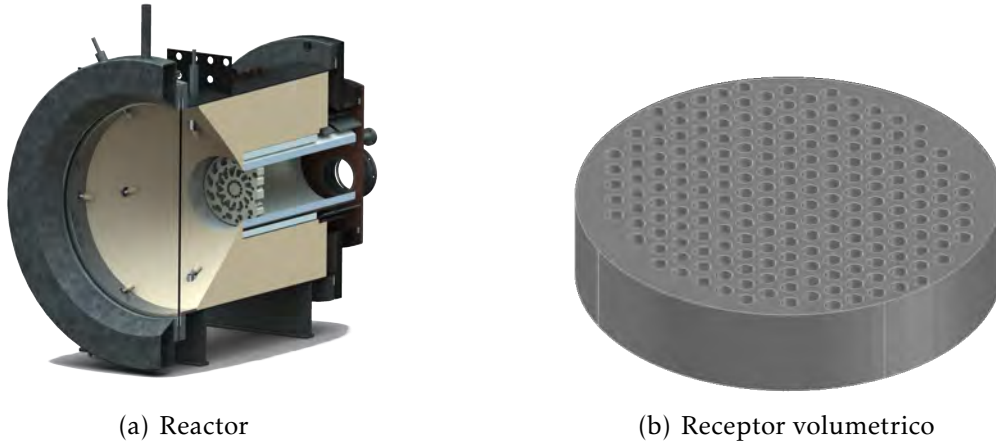


Figura 1.9: Esquemas del reactor solar de cavidad irradiado indirectamente y del receptor volumétrico poroso

- **Concentrador:** Consta de un arreglo de 409 espejos con un área total de  $36 m^2$ , que gracias a su diseño óptico permite generar una potencia térmica de hasta 25 kW, con flujos radiativos picos de 18,000 soles, en una imagen solar de hasta 10 cm de diámetro.
- **Heliostato:** A una distancia de 14 m del vértice del concentrador. Esta conformado por 2 grupos de espejos de distintas dimensiones (20 espejos de  $1.8 \times 1.3$  m y 10 de  $1.8 \times 1.9$  m) con un total de  $81 m^2$ .
- **Atenuador:** se utiliza para controlar la potencia concentrada por el HOSIER en la zona focal del concentrador, bloqueando parte de la radiación solar proveniente del heliostato.

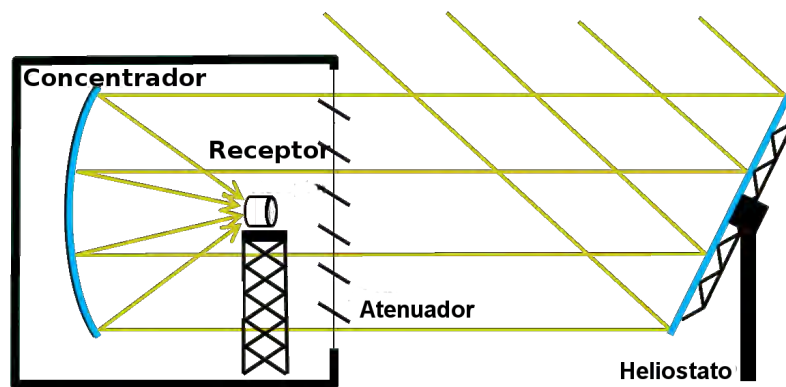


Figura 1.10: Esquema del Horno Solar del Alto Flujo Radiativo (HOSIER).

## 1.9. Objetivos

### 1.9.1. Objetivo general

El objetivo general de este trabajo es analizar la transferencia de calor radiativa en un reactor solar de absorción volumétrica basado en un medio poroso de zirconia ( $ZrO_2$ ) recubierto de una película delgada de ferrita de zinc ( $ZnFe_2O_4$ ).

### 1.9.2. Objetivos particulares

Los objetivos particulares de este trabajo de investigación son los siguientes:

- Elaborar un código de trazado de rayos Monte Carlo en C para efectuar el análisis.
  - Analizar el efecto de la zona focal en la distribución de temperaturas.
  - Estudiar el impacto de los parámetros geométricos de medio poroso en la distribución de flujo absorbido y temperatura.
  - Analizar el efecto del espesor de la capa de óxido en el medio poroso en la distribución de temperaturas y flux solar absorbido.
  - Encontrar el porcentaje de apertura óptima para alcanzar temperaturas de reacción de reducción de ferrita de zinc.
-



## 2.1. Formulación matemática

### 2.1.1. Ecuación de conservación de energía

La ecuación 2.1 es la forma general de la ecuación de conservación de energía para un fluido en movimiento, en donde  $u$  es la energía interna,  $\vec{v}$  es el vector de velocidades,  $q$  es el flux de calor total,  $\Phi$  es la función de disipación viscosa y  $Q'''$  es el calor generado en el medio (por ejemplo, la energía liberada por una reacción química).

$$\rho \left( \frac{\partial u}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla u \right) = -\nabla \cdot q - p \nabla \cdot \vec{v} + \mu \Phi + Q''' \quad (2.1)$$

Si el medio participa radiativamente por emisión, absorción y dispersión, entonces las ecuaciones de conservación de momentum y energía se ven alteradas por los siguientes tres efectos:

1. El término de flux de calor en la ecuación 2.1, el cual en los casos donde no se considera el mecanismo de radiación esta sólo asociado al mecanismo de conducción, ahora se le agrega un segundo componente, el flujo de calor radiativo, debido a la interacción con el medio dentro de un volumen de control.
2. La energía interna ahora contiene la contribución de la radiación.
3. El tensor de presión de radiación debe de ser agregado al tradicional tensor de presión en flujo de fluidos.

Bajo estas condiciones la ecuación de conservación de energía se puede simplificar. Aplicando las ecuaciones 2.2 y 2.3 en la ecuación 2.1 se obtiene la ecuación 2.4.

$$du = c_v dT \quad (2.2)$$

$$q = q_c + q_R = -k \nabla T + q_r \quad (2.3)$$

$$\rho c_v \left( \frac{\partial T}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla T \right) = \nabla \cdot (k \nabla T) - p \nabla \cdot \vec{v} + \mu \Phi + Q''' - \nabla \cdot q_R \quad (2.4)$$

en donde  $c_v$  es el calor específico de la fase fluida,  $T$  es la temperatura,  $k$  es la conductividad de la fase fluida y,  $q_c$  y  $q_R$  es el flujo de calor por conducción y radiación respectivamente.

### 2.1.1.1. Equilibrio radiativo

Cuando en un problema se dice que la transferencia de calor por radiación domina, es decir menospreciando los mecanismos de conducción y convección, a dicha situación se le refiere como equilibrio radiativo. El equilibrio termodinámico dentro del medio se logra solo en virtud de la radiación. Bajo estas condiciones, la ecuación 2.4 pasa a ser la ecuación 2.5.

$$\rho c_v \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot q_R = Q''' \quad (2.5)$$

En algunas ocasiones la transferencia de calor sucede de manera tan rápida que el equilibrio radiativo es alcanzado antes de notar algún cambio en la temperatura. Entonces la ecuación 2.5 se reduce a su forma de estado estacionario, que ese muestra en la ecuación 2.6.

$$\nabla \cdot q_R = Q''' \quad (2.6)$$

La aproximación de equilibrio radiativo, es aplicada a menudo en casos con temperatura extremadamente alta, como en plasmas, explosiones nucleares, etc. (Modest 2013).

### 2.1.2. Ecuación de Transferencia Radiativa

Para plantear la ecuación de transferencia radiativa, se realiza un balance de energía radiativa que viaja en dirección  $\hat{s}$ . El cambio de la intensidad se encuentra sumando las contribuciones de la emisión, absorción, dispersión de fuera de la dirección  $\hat{s}$ , y dispersión en la dirección  $\hat{s}$ . La ecuación (2.7) es conocida como la ecuación de transferencia radiativa (Modest 2013). En esta ecuación todas las cantidades pueden variar con la localización en el espacio, tiempo, y número de onda, mientras que la intensidad y la función fase también dependen de la dirección  $\hat{s}$ . Los términos que se encuentran a la izquierda de la ecuación (2.7) se refieren al cambio de la energía radiativa, el primer término a la derecha de la ecuación se refiere a la ganancia debido a la emisión, el segundo término se refiere a las pérdidas debido a la absorción, el tercer término son las pérdidas debido a la dispersión y el último término se refiere a las ganancias debido a la dispersión que proviene de otros lados.

$$\frac{1}{c} \frac{\partial I_\eta}{\partial t} + \frac{\partial I_\eta}{\partial \hat{s}} = j_\eta - \kappa_\eta I_\eta - \sigma_{s\eta} I_\eta + \frac{\sigma_{s\eta}}{4\pi} \int_{4\pi} I_\eta(\hat{s}') \Phi_\eta(\hat{s}, \hat{s}') d\Omega_i \quad (2.7)$$

Las variables de la ecuación (2.7) significan lo siguiente:

- $I_\eta$  es la intensidad radiativa espectral.
- $c$  es la velocidad de la luz.
- $t$  es la variable tiempo.
- $\hat{s}$  es la dirección en que viajan los rayos.
- $j_n$  es el coeficiente de emisión.
- $\kappa_\eta$  es el coeficiente de absorción.
- $\sigma_\eta$  es el coeficiente de dispersión.
- $\Phi_\eta$  es la función fase.
- $\Omega_i$  es el ángulo sólido.

El coeficiente de extinción se define como se muestra en la ecuación (2.8). A su vez, el coeficiente de emisión se define como se muestra en la ecuación (2.9). En donde  $I_{b\eta}$  es la intensidad radiativa espectral del cuerpo negro.

$$\beta_\eta = \kappa_\eta + \sigma_{s\eta} \quad (2.8)$$

$$I_\eta = \kappa_\eta I_{b\eta} \quad (2.9)$$

Para simplificar la ecuación (2.7), podemos eliminar el primer término de esta ecuación, ya que la dinámica impuesta por la velocidad de propagación de la luz es ordenes de magnitud superior a la dinámica de los otros fenómenos presentes en un reactor solar. Así que con lo anteriormente dicho y sustituyendo las ecuaciones (2.8) y (2.9) en la ecuación (2.7) se obtiene la ecuación (2.10).

$$\frac{\partial I_\eta}{\partial s} = \kappa_\eta I_{b\eta} - \beta_\eta I_\eta + \frac{\sigma_{s\eta}}{4\pi} \int_{4\pi} I_\eta(\hat{s}) \Phi_\eta(\hat{s}_i, \hat{s}) d\Omega_i \quad (2.10)$$

La ecuación (2.10) considera un medio participativo. Cómo el gas en el interior del reactor se considera no participativo, los coeficientes  $\kappa_\eta = \sigma_\eta = 0$ , lo que reduce esta ecuación a la ecuación (2.11).

$$\frac{dI_\eta}{ds} = 0 \quad (2.11)$$

### 2.1.2.1. Flux de calor radiativo

El flux de calor radiativo espectral en un elemento de superficie se puede expresar en términos de la intensidad entrante y saliente, como se muestra en la ecuación (2.12). En donde  $\hat{n}$  es el vector normal a la superficie y  $\hat{s}$  es el vector unitario de dirección de flux.

$$q_\eta \cdot \hat{n} = \int_{4\pi} I_\eta \hat{n} \cdot \hat{s} d\Omega \quad (2.12)$$

Esta relación está es para un elemento de superficie hipotética colocada arbitrariamente dentro de un sistema cerrado. Para obtener el flux total de radiación absorbida, se requiere integrar la ecuación (2.12) sobre todo el espectro, como se muestra en la ecuación (2.13)

$$q = \int_0^\infty q_\eta d\eta = \int_0^\infty \int_{4\pi} I_\eta(\hat{s}) \hat{s} d\Omega d\eta \quad (2.13)$$

Dependiendo del sistema de coordenadas utilizado, o la superficie descrita, el vector de flux de calor radiativo puede ser separado en componentes cartesianas, o en componentes normal y tangencial a la superficie.

### 2.1.3. Métodos de solución para la Ecuación de Transferencia Radiativa

Las soluciones analíticas a la ecuación de transferencia radiativa (ecuación (2.10)) son posibles sólo bajo simplificaciones bastantes restrictivas.

También se pueden obtener soluciones analíticas aproximadas después de simplificar la ecuación en distintas formas. Una de esas soluciones aproximadas, por dar un ejemplo, es la aproximación de dispersión simple. Esta solución se desarrolla asumiendo un medio homogéneo, sin fuentes internas y se considera solo la dispersión simple de fotones. En ocasiones, las suposiciones posibilitan la obtención de modelos aplicables a casos mas complejos, que solo permiten describir el fenómeno de manera cualitativa.

Para obtener soluciones en casos libres de dichas simplificaciones, se deben utilizar, se deben utilizar métodos numéricos para resolver la ecuación de transferencia radiativa. La gran mayoría de análisis de transferencia de calor radiativa que se hacen hoy en día utilizan uno de estos cuatro métodos:

1. Método de los armónicos esféricos.
2. Método de las ordenadas discretas.
3. Método zonal.
4. Método Monte Carlo.

Debido a su simplicidad y generalidad, el método Monte Carlo es ampliamente utilizado para resolver la ecuación de transferencia radiativa en campos tan diversos como la oceanografía, las ciencias atmosféricas, la astronomía, la física médica, la ingeniería nuclear y aplicaciones de concentración solar.

### 2.1.4. Método Monte Carlo

El Método Monte Carlo es un método de simulación numérica que involucra el uso de números aleatorios en el cálculo de estructuras de procesos estocásticos. Por proceso estocástico nos referimos a una secuencia de estados, cuya evolución se determina por eventos aleatorios (Kalos & Whitlock 1986).

El nombre y el desarrollo del método Monte Carlo data del año 1944, aunque el uso de procesos aleatorios para resolver problemas matemáticos han sido usados desde siglos antes. El primer uso de esta técnica en investigación científica fue en el intento de modelar la difusión de neutrones en material de fisión nuclear, para el desarrollo de la bomba atómica durante la Segunda Guerra Mundial (Modest 2013).

Los problemas de radiación térmica, en dominios a escala macroscópica, son particularmente adecuados para ser solucionadas mediante la técnica de Monte Carlo, ya que, bajo la suposición de óptica geométrica, la energía radiativa se puede considerar como paquetes discretos (fotones) que viajan en línea recta, cambiando su dirección de propagación, solo al interactuar con materia. El resolver este tipo de problemas con esta técnica implica rastrear la historia de una muestra aleatoria, pero estadísticamente significativa, de fotones desde sus puntos de emisión a sus puntos de absorción.

#### 2.1.4.1. Relaciones de transferencia de calor para intercambio radiativo entre superficies

En ausencia de medio participativo y asumiendo un índice de refracción igual a la unidad, el flux de radiación entrante o saliente de cierta superficie, utilizando el método Monte Carlo, se puede expresar como se muestra en la ecuación 2.14 (Modest 2013), en donde  $q(r)$  es el flujo de calor superficial local en la posición  $r$ ,  $T(r)$  es la temperatura superficial en la posición  $r$ ,  $\epsilon(r)$  es la emitancia hemisférica de la superficie en la posición  $r$ ,  $A$  área superficial de una superficie específica y  $d\mathcal{F}_{dA' \rightarrow dA}$  es el factor generalizado de intercambio radiativo entre los elementos de superficie  $dA'$  y  $dA$ .

$$q(r) = \epsilon(r)\sigma T^4(r) - \int_A \epsilon(r')\sigma T^4(r') \frac{d\mathcal{F}_{dA' \rightarrow dA}}{dA} dA' \quad (2.14)$$

En la ecuación 2.14 el primer término a la derecha de la ecuación describe la emisión desde la superficie y el segundo término es la fracción de energía, que originalmente fue emitida de la superficie  $r'$ , y eventualmente fue absorbida por la superficie  $r$ . Por lo tanto la definición del factor generalizado de intercambio radiativo  $d\mathcal{F}_{dA' \rightarrow dA}$ <sup>1</sup> es la siguiente: la fracción del total de la energía emitida por la superficie  $dA'$  y que es absorbida por  $dA$ , sea de forma directa o después de una o varias reflexiones.

Esta definición parece ser la más compatible para la solución mediante técnicas de trazado de rayos y, por lo tanto, suele emplearse para los cálculos mediante el método de Monte Carlo, por ejemplo, como se realizó en los trabajos de Toor & Viskanta (1968)

<sup>1</sup>El factor generalizado de intercambio radiativo también se le llama factor de Gebhart (Gebhart 1961)



y Coelho et al. (1998). En la figura 2.1 se muestra un esquema de un sistema cerrado arbitrario con paquetes de energía emitidos en la superficie  $dA'$  y absorbidos en  $dA$ .

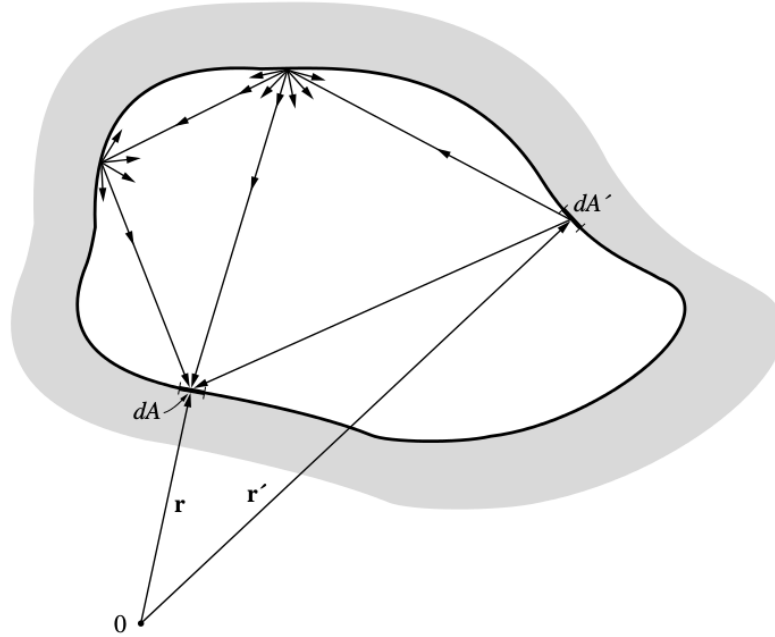


Figura 2.1: Esquema de los caminos posibles de un fotón en un sistema cerrado arbitrario (Modest 2013).

Si ahora el sistema tiene una apertura, se deben introducir de manera artificial superficies que cierren el sistema. Ahora el sistema está dividido en  $J$  sub-superficies, y la ecuación (2.14) se reduce a la ecuación (2.15), donde  $1 \leq i \leq J$ ,  $q_{ext}$  es la energía externa entrando a través de cualquier apertura en el sistema,  $A_s$  es el área de la apertura,  $\epsilon_j$  y  $T_j$  son la emisividad y temperatura promedio para cada sub-superficie.

$$Q_i = \int_{A_i} q_i dA_i = \epsilon_i \sigma T_i^4 A_i - \sum_{j=1}^J \epsilon_j \sigma T_j^4 A_j \mathcal{F}_{j \rightarrow i} - q_{ext} A_s \mathcal{F}_{s \rightarrow i} \quad (2.15)$$

Aunque los flujos de calor  $Q_i$  pueden ser calculados directamente por el método Monte Carlo, existe una ventaja para determinar mejor los factores de intercambio: en el caso de superficies grises, los factores de forma no dependen de la temperatura en el sistema, siempre y cuando las reflectancias y absorptancias sean independientes de la temperatura. Dado que toda la energía emitida tiene que ir a algún lado y, por la segunda ley de la termodinámica, el intercambio neto entre dos superficies a la misma temperatura debe ser cero. La regla de la suma y la reciprocidad se mantienen para los factores de intercambio,

como se muestra en la ecuaciones (2.16) y (2.17) respectivamente.

$$\sum_{j=1}^J \mathcal{F}_{j \rightarrow i} = 1 \quad (2.16)$$

$$\epsilon_i A_i \mathcal{F}_{i \rightarrow j} = \epsilon_j A_j \mathcal{F}_{j \rightarrow i} \quad (2.17)$$

Se emite un número estadísticamente significativo de paquetes de energía  $N_i$  desde una superficie  $A_i$ , cada uno de estos paquetes llevan una cantidad de energía radiativa.

$$E_i = \frac{\epsilon_i \sigma T_i^4 A_i}{N_i} \quad (2.18)$$

Si un número  $N_{ij}$  de estos paquetes de energía se absorbe en la superficie  $A_j$  ya sea por que impacte directamente o después de cualquier número de reflexiones, el factor de intercambio se calcula como se muestra en la ecuación (2.19).

$$\mathcal{F}_{i \rightarrow j} = \left( \frac{N_{ij}}{N_i} \right)_{N_i \gg 1} \quad (2.19)$$

En la sub-sección 2.2.2 se describirá de manera más detallada todo el seguimiento que se le hace a los paquetes de energía, aplicado al sistema que se esta estudiando en este trabajo.

## 2.2. Modelo matemático

Las simulaciones fueron realizadas en dos etapas. La primera consiste en un trazado de rayos del Horno solar. En esta simulación el receptor está colocado 5 cm fuera de la zona focal del concentrador para lograr obtener una distribución de flujo radiativo más homogénea. Esta parte provee la información de los puntos incidentes y la dirección de propagación en la cara frontal del receptor. La segunda etapa consiste en una simulación en el medio poroso utilizando el método Monte Carlo y el método de volumen finito. Con el método Monte Carlo se obtiene una función de densidad de probabilidad de la absorción de rayos, tanto para los rayos emitidos como para los rayos provenientes del Horno Solar. Con esta información, la distribución de temperaturas es obtenida utilizando el método de volumen finito, considerando la función de probabilidad obtenida por el método Monte Carlo y todos los fluxes radiativos de cada elemento de superficie.

### 2.2.1. Trazado de rayos del concentrador solar

La información de los rayos solares es obtenida a través del código del software Tona-lli (Riveros-Rosas et al. 2010). Tonalli utiliza el método de trazado de rayos para calcular

la distribución de radiación solar en receptores planos alrededor del punto focal en concentradores solares. Los errores ópticos son considerados con la operación matemática de la convolución, en la ecuación 2.20 se muestra la definición de la convolución. Este programa calcula el perfil de distribución solar reflejada de la convolución de un error global en la distribución de las superficies de los espejos  $g(\rho)$  y la distribución solar obtenida desde el sol  $f(\rho)$ .

$$(fg)(\rho) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\tau)g(\rho - \tau)d\tau \quad (2.20)$$

La variable  $\rho$  es un ángulo radial para las distribuciones cónicas. La función error esta definida como una distribución Gaussiana en dos dimensiones  $g(\rho)$ , ver la ecuación 2.21. La desviación estándar  $\sigma$  de esta distribución incluye todos los errores ópticos del sistema.

$$g(\rho) = \frac{1}{2\pi\sigma^2} \exp\left(-\frac{\rho^2}{2\sigma^2}\right) \quad (2.21)$$

Después de una reflexión de rayo, la ecuación 2.22 es utilizada para calcular la dirección del rayo reflejado.

$$\hat{r} = \hat{i} + 2(\hat{n} \cdot \hat{i})\hat{n} \quad (2.22)$$

Donde  $\hat{i}$  y  $\hat{r}$  son los vectores normales para los rayos incidentes y reflejados, respectivamente. El vector  $\hat{n}$  es el vector normal del punto de reflexión en la superficie del espejo. Para un espejo hexagonal, el código de trazado de rayos de Tonalli utiliza una distribución de puntos de reflexión con la propiedad de cada punto representa la misma área en el espejo, como se muestra en la figura 2.2.

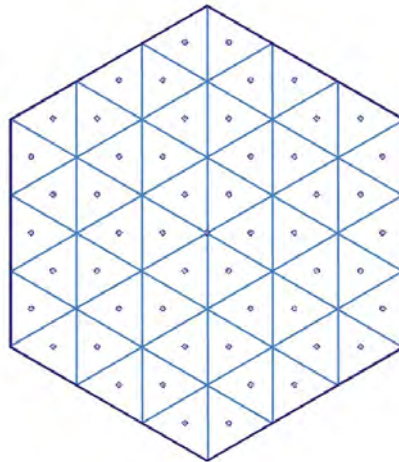


Figura 2.2: Ejemplo de puntos de reflexión en la superficie del espejo hexagonal

El sistema óptico completo para el horno solar se muestra en la figura 2.3. Los rayos reflejados en cada cono solar son filtrados por una ventana circular frente al punto focal.

Sin embargo, todos los rayos centrales de cada partición alcanza la zona clara en la ventana, como se muestra en la figura 2.4. Los puntos incidentes finales, para cada rayo, en el receptor son calculados con su vector normal de dirección y su energía equivalente de acuerdo con la partición de área y la intensidad relativa en el cono solar.

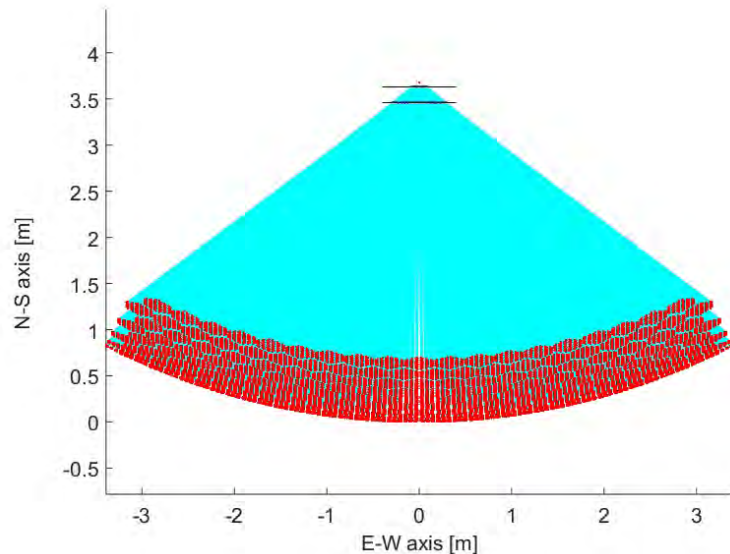


Figura 2.3: Vista del horno solar con rayos centrales reflejados sobre una ventana enfrente del punto focal y a una distancia de 5 cm fuera del punto focal

El valor irradiación directa fue de  $1000 \text{ W/m}^2$ , el coeficiente de reflectividad se fijó en un valor 1.0 y el error óptico fue considerado de 2 mrad. La distribución de flux en el receptor se muestra en la figura 2.5a. En la figura 2.5b se muestran los puntos incidentes de los rayos centrales reflejados para cada punto de reflexión en los espejos.

### 2.2.2. Trazado de rayos Monte Carlo en el medio poroso

El siguiente paso consiste en simular la propagación de la radiación solar dentro de los canales o poros del medio poroso utilizando el método de trazado de rayos Monte Carlo, partiendo de la información obtenida previamente de una simulación del Horno Solar. El algoritmo de cálculo utilizado está apegado al algoritmo que propone Mahan (2002), y se ilustra en la figura 2.6. En los siguientes párrafos se explica con más detalle cada uno de los pasos mostrados en el diagrama de flujo.

#### 2.2.2.1. Lectura de la posición y dirección del rayo

El primer paso del algoritmo de trazado de rayos por el Método de Monte Carlo, es determinar la localización y dirección inicial de donde partirá cada rayo. Usualmente se utilizan números aleatorios para determinar el punto de salida y la dirección. Sin embargo

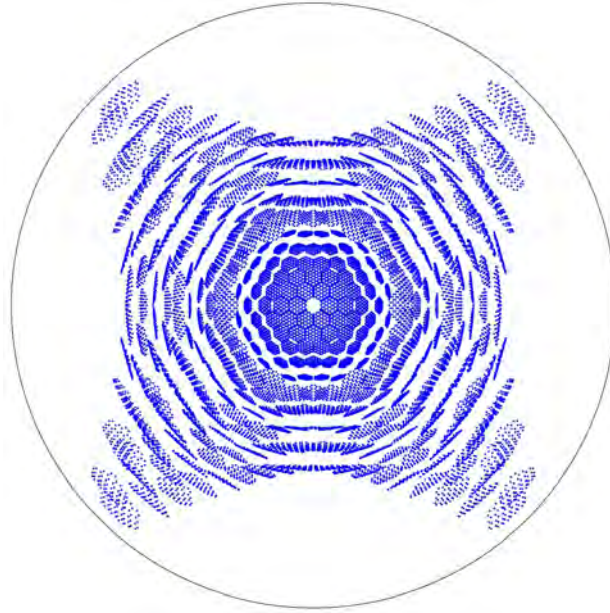


Figura 2.4: Puntos incidentes en la ventana obtenidos con los rayos centrales reflejados del cono solar de cada partición en los espejos

en este problema en particular, en vez de utilizar información generada al azar, utilizaremos la información proporcionada por la simulación del Horno Solar, donde se genera para cada rayo la siguiente información:

- El vector de posición donde el rayo llega al punto focal del HOSIER.
- El vector dirección con el cual continuará su trayectoria hacia el medio poroso.
- La energía contenida por el haz de luz.

#### 2.2.2.2. Intersección con la superficie más cercana

El paso a seguir, es calcular la trayectoria del rayo y determinar los puntos en donde interseca con las superficies implicadas en el modelo. Considerando que la propagación de rayos se calcula de manera independiente para los distintos canales del medio poroso, en el código se consideran tres superficies, dos superficies planas que representan la entrada y salida del canal, que se muestran en las ecuaciones (2.24) y (2.25) respectivamente, y la superficie interior de un canal cilíndrico  $i$ , que se muestra en la ecuación (2.23)). Las constantes  $a_i$  y  $b_i$  corresponden al centro del poro  $i$  con respecto al sistema de referencia. En la figura 2.7 se muestra de manera gráfica el radio y las constantes  $a_i$  y  $b_i$  como la localización del centro del poro cuando este se encuentra fuera del origen.

$$(x - a_i)^2 + (y - b_i)^2 = r^2 \quad (2.23)$$

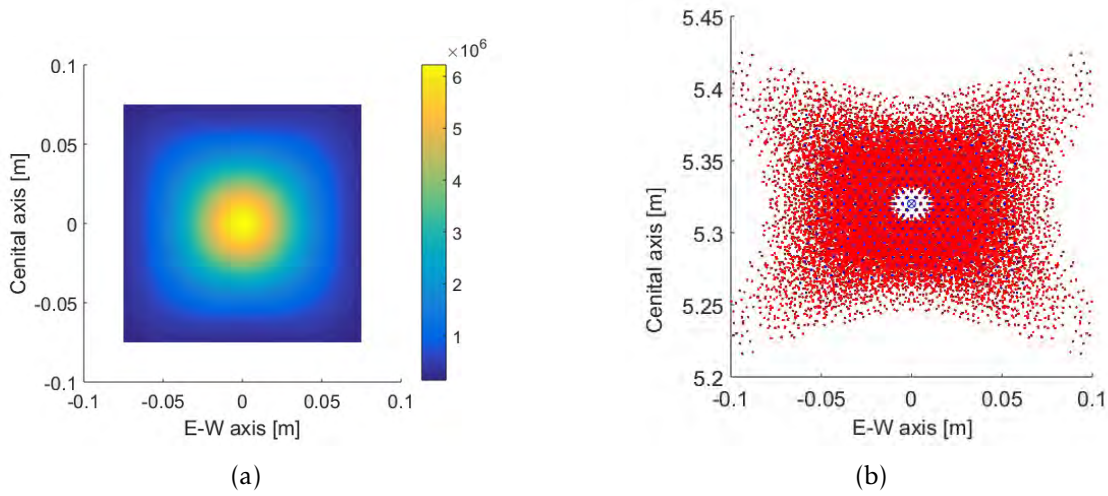


Figura 2.5: (a) Distribución de flux en el receptor. (b) Puntos incidentes en el receptor

$$z = 0 \quad (2.24)$$

$$z = H \quad (2.25)$$

Para determinar los puntos de intersección de cada rayo con las tres superficies, se deben de sustituir las ecuaciones (2.26), (2.27) y (2.28) en cada una de las ecuaciones de los planos involucrados.  $\vec{V}$  es el vector dirección del rayo,  $V_x$ ,  $V_y$  y  $V_z$  son las componentes del vector de dirección en coordenadas cartesianas. Las componentes del vector de posición en la intersección  $(x_2, y_2, z_2)$  se denotan con el subíndice 2, mientras que las componentes del vector de posición de la procedencia del rayo  $(x_1, y_1, z_1)$  se denotan con el subíndice 1. Y  $D_j$  es la distancia recorrida desde la posición de procedencia del rayo a la posición de intersección con alguna de las superficies.

$$x_2 = x_1 + \frac{V_x}{|\vec{V}|} D_j \quad (2.26)$$

$$y_2 = y_1 + \frac{V_y}{|\vec{V}|} D_j \quad (2.27)$$

$$z_2 = z_1 + \frac{V_z}{|\vec{V}|} D_j \quad (2.28)$$

Para el caso de la superficie plana de entrada al canal, sustituimos en la ecuación (2.24) la variable  $z$  por la ecuación (2.28), obteniendo la ecuación (2.29). En esta ecuación, se conocen todas las variables excepto la distancia entre la procedencia del rayo y su intersección con el plano superior. En la ecuación (2.30) se muestra como se calculó la distancia entre un punto de procedencia hasta la posible intersección con la entrada del canal.

$$z_1 + \frac{V_z}{|\vec{V}|} D_j = 0 \quad (2.29)$$

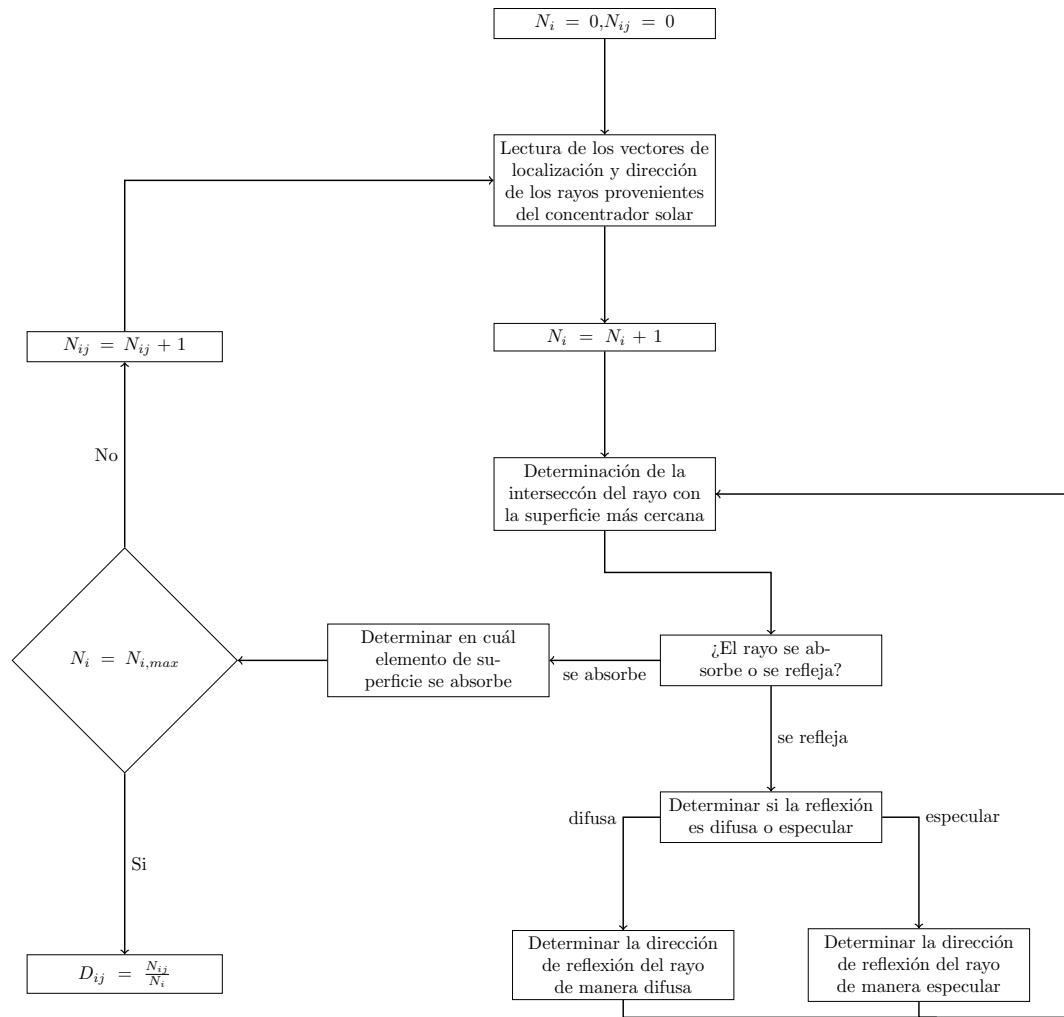


Figura 2.6: Diagrama de flujo para la implementación del trazado de Rayos por el método de Monte Carlo (Mahan 2002).

$$D_j = -z_1 \frac{|\vec{V}|}{V_z} \quad (2.30)$$

De la misma forma se realiza el cálculo de la distancia entre la apertura final del canal y el punto de procedencia del rayo. Se sustituye en la ecuación (2.25) la ecuación (2.28), obteniendo la ecuación (2.31). Al despejar la distancia, obtenemos la ecuación (2.32).

$$z_1 + \frac{V_z}{|\vec{V}|} D_j = H \quad (2.31)$$

$$D_j = (H - z_1) \frac{|\vec{V}|}{V_z} \quad (2.32)$$

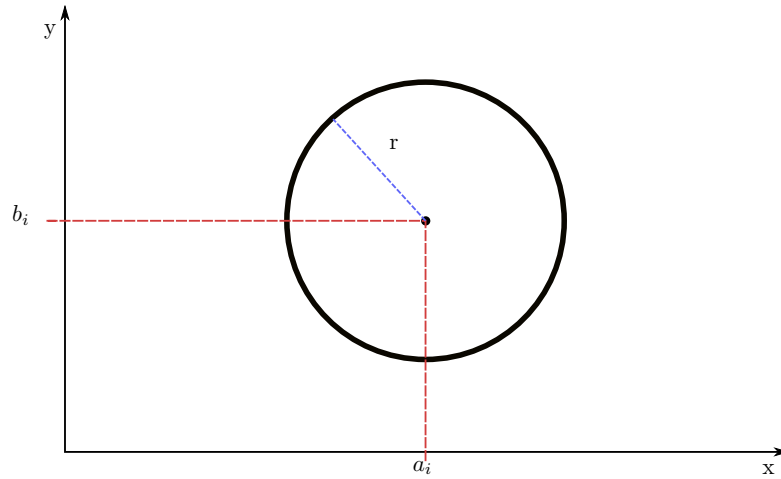


Figura 2.7: Esquema representativo en el plano  $xy$  de un canal  $i$  con centro fuera del origen

Para la superficie interna del canal, se sustituyen las ecuaciones (2.26) y (2.27) en la ecuación (2.23), obteniendo la ecuación (2.33).

$$\left[ \left( x_1 + \frac{V_x}{|\vec{V}|} D_j \right) - a_i \right]^2 + \left[ \left( y_1 + \frac{V_y}{|\vec{V}|} D_j \right) - b_i \right]^2 = r^2 \quad (2.33)$$

Desarrollando la expresión mostrada en la ecuación (2.33), se puede llegar a la ecuación (2.34):

$$A_r D_j^2 + B_r D_j + C_r = 0 \quad (2.34)$$

en donde las variables  $A_r$ ,  $B_r$  y  $C_r$  se definen en las ecuaciones (2.35), (2.36) y (2.37) respectivamente:

$$A_r = \left( \frac{V_x}{|\vec{V}|} \right)^2 + \left( \frac{V_y}{|\vec{V}|} \right)^2 \quad (2.35)$$

$$B_r = 2 \left[ \frac{V_x}{|\vec{V}|} (x_1 - a_i) + \frac{V_y}{|\vec{V}|} (y_1 - b_i) \right] \quad (2.36)$$

$$C_r = x_1^2 + y_1^2 + a_i^2 + b_i^2 - 2(x_1 a_i + y_1 b_i) - r^2 \quad (2.37)$$

Al resolver la ecuación (2.34) para la distancia, por ser ecuación cuadrática obtenemos dos valores.

Se obtienen 4 distancias entre la procedencia del rayo y sus posibles intersecciones, dos que se relacionan con las intersecciones con el cilindro y otras dos que se relacionan con



los planos de entrada y salida. Para seleccionar el punto de intersección de la trayectoria del rayo, se deben de seguir las siguientes reglas:

1. Eliminar el punto de salida.
2. Eliminar a los puntos en dirección contraria o “back candidates”, que son los que cumplen la condición enunciada en la ecuación (2.38). Donde  $\hat{i}$ ,  $\hat{j}$  y  $\hat{k}$  son los vectores que conforman la base canónica en  $\mathbb{R}^3$

$$[(x_2 - x_1)\hat{i} + (y_2 - y_1)\hat{j} + (z_2 - z_1)\hat{k}] \cdot \hat{n} < 0 \quad (2.38)$$

3. De los puntos candidatos que han sobrevivido a las anteriores dos pruebas, elegir al que tenga menor magnitud  $D_i$

Para ejemplificar lo antes mencionado, véase la figura 2.8. La trayectoria de un rayo básicamente es una línea recta que intersecta con todos los planos siempre y cuando no sean paralelos a la línea. El primer caso, que se muestra en la figura 2.8a, el rayo parte del punto A que es la entrada al poro, la trayectoria de la línea intersecta a los planos en los puntos A, B y C. Con la regla número uno, eliminamos el punto A, que es el punto de partida. Con la regla tres, discriminaría al punto C, ya que la distancia  $\overline{AB}$  es menor en magnitud que la distancia del tramo  $\overline{AC}$ . El segundo ejemplo, que se muestra en la figura 2.8b, el rayo parte del punto B con una nueva dirección. El punto B es eliminado por la regla uno. El punto A es un ejemplo de un “back point”, que es eliminado por la regla dos. Por lo tanto se selecciona el punto C.

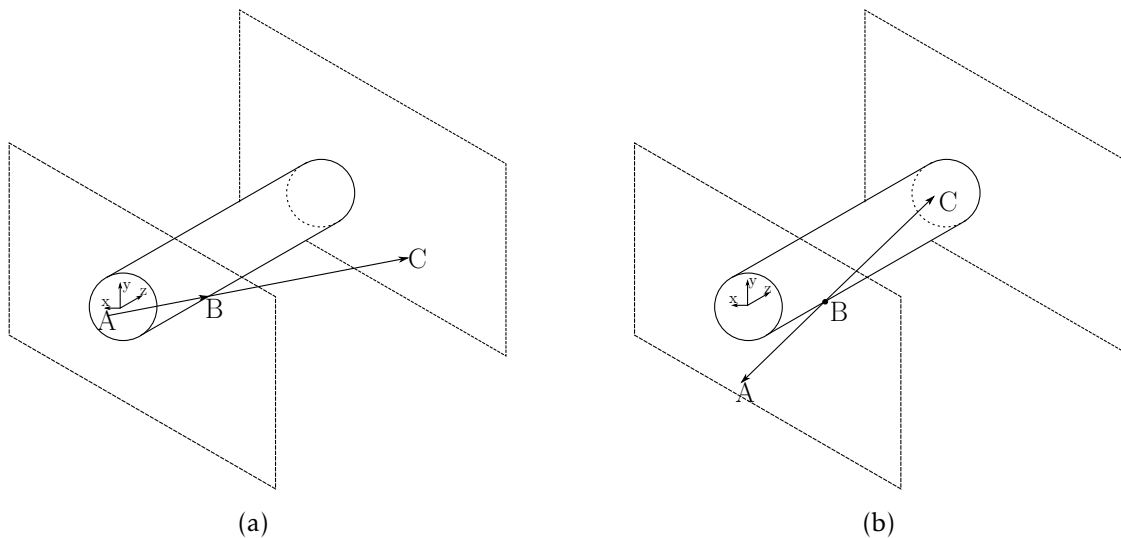


Figura 2.8: Esquema de intersección de un rayo con las superficies del sistema. (a) Para un rayo proveniente de la entrada del canal. (b) Para un rayo que se refleja y continua su trayectoria.

### 2.2.2.3. Determinación de la absorción o reflexión del rayo

Una vez el rayo incide en una superficie, se tiene que determinar si el rayo se refleja o se absorbe en la superficie de acuerdo a la absorptividad de ésta. Se interpreta la absorptividad como la probabilidad de que un rayo incidente sea absorbido. Esta interpretación probabilística de las propiedades ópticas de la superficie es la esencia del método de trazado de rayos Monte Carlo. Un número aleatorio  $R_\alpha$ , uniformemente distribuido entre cero y la unidad, es generado en el código para ser comparado con la absorptividad de la superficie ( $\alpha$ ). Se tienen dos posibilidades:

- si  $R_\alpha < \alpha$  el rayo se refleja.
- si  $R_\alpha > \alpha$  el rayo se absorbe.

### 2.2.2.4. Determinación del tipo de reflexión

En caso de que el rayo se refleje, se tiene que determinar si la reflexión es difusa o especular. Se genera el número aleatorio  $R_r$  para compararse con el índice de especularidad  $r_s$ , teniendo las siguientes dos posibilidades:

- si  $R_r < r_s$  se refleja de forma especular.
- si  $R_r > r_s$  se refleja de forma difusa.

Donde  $r_s$  se puede calcular como se muestra en la ecuación (2.39)

$$r_s = \frac{\rho^s}{\rho} = \frac{\rho^s}{\rho^s + \rho^d} \quad (2.39)$$

En la ecuación (2.39)  $\rho^s$  es la componente especular la de reflectividad y  $\rho^d$  es la componente difusa de la reflectividad.

### 2.2.2.5. Reflexión especular

Si la reflexión es especular, el vector de dirección con la que se refleja el rayo se puede calcular como se muestra en la ecuación (2.40). En donde  $\hat{V}_i$  se define como se muestra en la ecuación (2.41). Como el vector  $\hat{V}_i$  y  $\hat{V}_r$  no son vectores unitarios, sólo restaría normalizar el vector dirección  $\hat{V}_r$  como se muestra en la ecuación (2.42). En la figura 2.9 se muestra un esquema donde se puede visualizar la reflexión especular de un rayo.

$$\hat{V}_r = \hat{V}_i - 2(\hat{V}_i \cdot \hat{n})\hat{n} \quad (2.40)$$

$$\hat{V}_i = (x_2 - x_1)\hat{i} + (y_2 - y_1)\hat{j} + (z_2 - z_1)\hat{k} \quad (2.41)$$

$$\hat{V}_r = \frac{\hat{V}_i}{|\hat{V}_i|} = \frac{\hat{V}_i}{\sqrt{(V_{r,x})^2 + (V_{r,y})^2 + (V_{r,z})^2}} \quad (2.42)$$

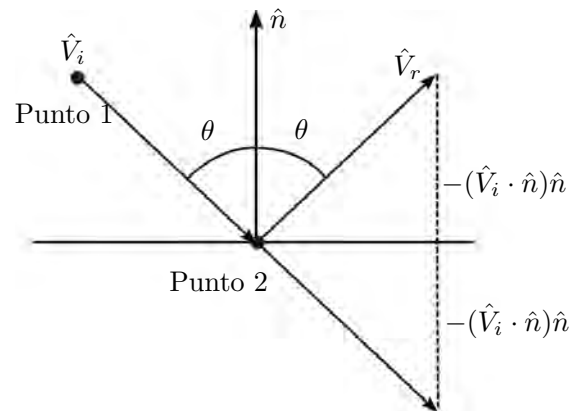


Figura 2.9: Esquema de la reflexión especular

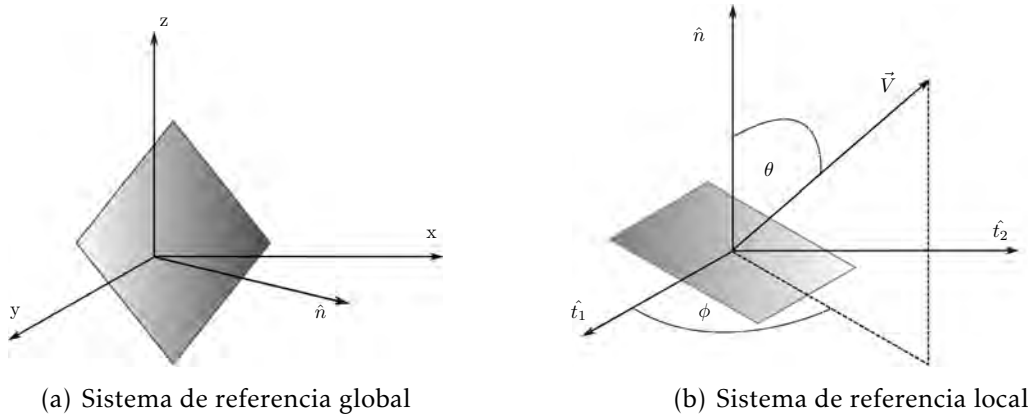
### 2.2.2.6. Reflexión difusa

Si la reflexión es difusa para determinar la dirección se siguen los siguientes pasos.

1. Generando los números aleatorios  $R_\theta$  y  $R_\phi$  calculamos los ángulos de dirección con respecto al sistema local  $\phi$  y  $\theta$  como se muestra en las ecuaciones (2.43) y (2.44) respectivamente. en la figura 2.10(b) se muestra un esquema donde se aprecia ambos ángulos de dirección.

$$\phi = 2\pi R_\phi \quad (2.43)$$

$$\theta = \arcsin \sqrt{R_\theta} \quad (2.44)$$



(a) Sistema de referencia global

(b) Sistema de referencia local

Figura 2.10: Relación entre el sistema de referencia local y global (Mahan 2002).

2. Se calcula el primer vector unitario tangente  $\hat{t}_1$  haciendo el producto vectorial del vector normal de la superficie  $\hat{n}$  con cualquiera de los tres vectores unitarios  $\hat{i}$ ,  $\hat{j}$  o  $\hat{k}$ , y posteriormente normalizarlo; como ejemplo véase la ecuación (2.45). En seguida se calcula el segundo vector unitario tangente  $\hat{t}_2$  como se muestra en la ecuación (2.46)

$$\hat{t}_1 = \frac{\hat{n} \times \hat{i}}{|\hat{n} \times \hat{i}|} \quad (2.45)$$

$$\hat{t}_2 = \hat{n} \times \hat{t}_1 \quad (2.46)$$

3. Cuando se conozcan los vectores  $\hat{t}_1$  y  $\hat{t}_2$  las componentes del vector dirección resultante se calculan como se muestra en las ecuaciones (2.47), (2.48) y (2.49), respectivamente.

Ahora sólo basta calcular el vector dirección:

$$V_{e,x} = V_e i = (n_x \cos \theta + t_{1,x} \sin \theta \cos \phi + t_{2,x} \sin \theta \sin \phi) \hat{i} \quad (2.47)$$

$$V_{e,y} = V_e j = (n_y \cos \theta + t_{1,y} \sin \theta \cos \phi + t_{2,y} \sin \theta \sin \phi) \hat{j} \quad (2.48)$$

$$V_{e,z} = V_e k = (n_z \cos \theta + t_{1,z} \sin \theta \cos \phi + t_{2,z} \sin \theta \sin \phi) \hat{k} \quad (2.49)$$

### 2.2.2.7. Determinar el elemento de superficie donde se absorbe el rayo

En caso de que se absorba el rayo, debe determinarse en que elemento de superficie fue absorbido. El interior de la superficie del canal se fraccionó en 2500 elementos con la misma área cada uno. En la figura 2.11 se muestra un esquema del mallado en la superficie interna del canal. Dentro del código desarrollado, se encuentran las relaciones para identificar el elemento de superficie en función del vector posición en donde es absorbido el rayo.

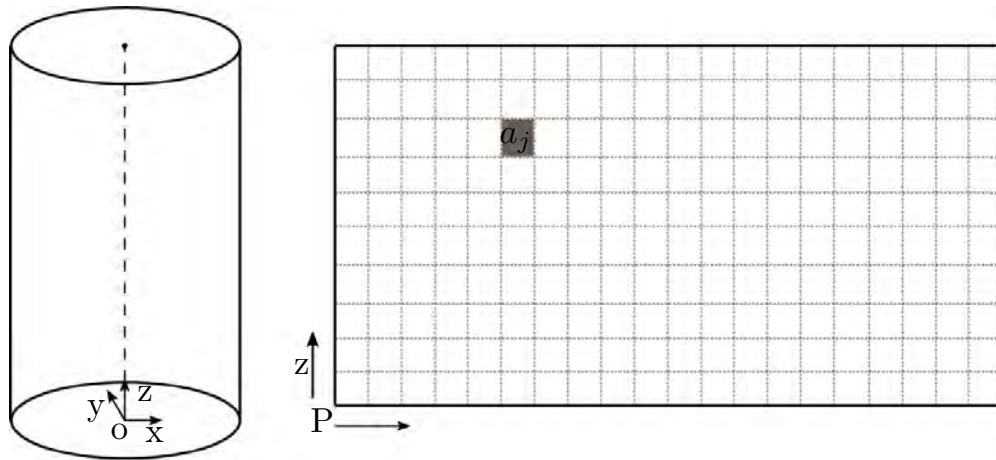


Figura 2.11: Esquema del mallado de la superficie interior del poro

### 2.2.2.8. Distribución del flux de radiativo en la superficie del poro

Una vez termine la lectura y seguimiento de todos los rayos incidentes del horno solar, se calcula la distribución de radiación en los elementos de superficie. En el algoritmo de este trabajo en específico, para cada uno de los elementos de superficie en el interior del poro se va sumando la energía asociada al rayo que se absorbe, denominando a la energía absorbida por el elemento de superficie  $a_j$  como  $P_{0j}$ .

### 2.2.3. Equilibrio radiativo

El siguiente paso es hacer un seguimiento de rayos asociados a la energía que va a emitir cada elemento de superficie, siguiendo los pasos descritos en la sección pasada. Una vez que se han emitido fotones de cada uno de los elementos de superficie y se han contado en que elemento de superficie se absorbió, se calcula el factor de distribución  $\mathcal{D}_{ij}$  como se muestra en la ecuación (2.50). En esta ecuación  $N_{ij}$  es el número de rayos emitidos desde el elemento de superficie  $i$  que se absorben en el elemento de superficie  $j$ .  $N_i$  es el número de emisiones provenientes de la superficie  $i$ .

$$\mathcal{D}_{ij} = \frac{N_{ij}}{N_i} \quad (2.50)$$

Se plantea un balance de energía para el elemento de superficie  $a_j$ . La potencia emitida por el elemento de superficie  $a_j$  se calcula con la ecuación (2.51), donde  $\epsilon_j$  es la emitancia del elemento superficial,  $\sigma$  es la constante de Stefan-Boltzmann,  $T_j$  es la temperatura en el elemento superficial y  $\Delta s_j$  es el área del elemento superficial. La potencia recibida por el elemento de superficie  $j$  es aquella que llega directamente del concentrador solar,  $P_{0j}$  y la que llega de las demás superficies, como se muestra en la ecuación (2.52).

$$P_{emitida} = \epsilon_j \sigma T_j^4 \Delta s_j \quad (2.51)$$

$$P_{recibida} = P_{0j} + \sum_{i=1}^n \epsilon_i \sigma T_i^4 \mathcal{D}_{ij} \Delta s_i \quad (2.52)$$

Al suponer el equilibrio radiativo se igualan las ecuaciones (2.51) y (2.52), como se muestra en la ecuación (2.53).

$$\epsilon_j \sigma T_j^4 \Delta s_j = P_{0j} + \sum_{i=1}^n \epsilon_i \sigma T_i^4 \mathcal{D}_{ij} \Delta s_i \quad (2.53)$$

Restando la suma de potencia proveniente de los otros elementos de superficie de ambos lados de la ecuación (2.53) obtenemos la ecuación (2.54)

$$\epsilon_j \sigma T_j^4 \Delta s_j - \sum_{i=1}^n \epsilon_i \sigma T_i^4 \mathcal{D}_{ij} \Delta s_i = P_{0j} \quad (2.54)$$

Uno se puede percatar que el balance de todos los elementos de superficie es un sistema de ecuaciones lineales con un número  $n$  de ecuaciones e incógnitas, donde  $n$  es el número de elementos de superficie y las incógnitas son la temperatura elevada a la cuarta potencia de cada elemento de superficie. En la ecuación (2.55) se muestra la simplificación del sistema de ecuaciones.

$$A_{ij}T_i^4 = b_j \quad (2.55)$$

La matriz  $A_{ij}$  se define como se muestra en la ecuación (2.56), y el vector  $b_j$  es igual a la radiación recibida del concentrador solar en el elemento de superficie  $P_{0j}$ . El sistema de ecuaciones se resuelve mediante el método numérico de Gauss-Siedel (BALDERRAMA et al. n.d.).

$$A_{ij} = \begin{cases} \text{si } i = j & \Delta s_i \epsilon_i \sigma (1 - \mathcal{D}_{ii}) \\ \text{si } i \neq j & -\Delta s_j \epsilon_j \sigma \mathcal{D}_{ij} \end{cases} \quad (2.56)$$

## 2.3. Propiedades Ópticas

### 2.3.1. Método de matriz de característica

Las propiedades ópticas utilizados en la simulación de trazado de rayos Monte Carlo fueron calculadas mediante la implementación del método de matriz característica, utilizado para el modelado de propiedades ópticas en películas delgadas (Born & Wolf 2000) (Valadés-Pelayo et al. 2016), y toma en cuenta un arreglo de multicapas con diferentes propiedades ópticas, donde cada capa es descrita con una matriz característica como la que se muestra en la ecuación (2.57), donde  $\tau$  es el espesor de la capa,  $\psi$  es el ángulo de incidencia, que se determina por el concentrador,  $k_0 = 2\pi/\lambda$  es el número de onda,  $n_c = n + ik$  es el índice de refracción complejo del material.

$$M(d) = \begin{bmatrix} \cos(k_0 n_c \tau \cos \psi) & -\frac{i}{p} \sin(k_0 n_c \tau \cos \psi) \\ ip \sin(k_0 n_c \tau \cos \psi) & \cos(k_0 n_c \tau \cos \psi) \end{bmatrix} \quad (2.57)$$

La variable  $p$  tiene dos formas de calcular según la polarización de la luz, como se muestran en la ecuación (2.58); para ondas transversas eléctricas (TE) y para ondas transversas magnéticas (TM). En esta ecuación  $\mu$  es la permeabilidad magnética del material.

$$p = \begin{cases} n_c \mu^{-1} & \text{TE} \\ \mu n_c^{-1} & \text{TM} \end{cases} \quad (2.58)$$

La matriz característica de una multicapa  $M'$  es obtenida realizando el producto entre las matrices características de cada una de las capas que componen la multicapa. Con las componentes de la matriz  $M'$  se calcula la reflectancia y transmitancia de la multicapa como se muestra en la ecuaciones (2.59) y (2.60), respectivamente. En estas dos ecuaciones,  $m'_{jk}$  representa los componentes complejos de la matriz  $M'$ ,  $p_i$  y  $p_f$  son los valores

de  $p$  para el medio inicial y final, respectivamente. Con la ecuación (2.61) se calcula la absorptancia de la multicapa.

$$r = \left| \frac{(m'_{11} + m'_{12}p_f)p_i - (m'_{21} + m'_{22}p_f)}{(m'_{11} + m'_{12}p_f)p_i - (m'_{21} + m'_{22}p_f)} \right|^2 \quad (2.59)$$

$$\tau = \left| \frac{2p_i}{(m'_{11} + m'_{12}p_f)p_i - (m'_{21} + m'_{22}p_f)} \right|^2 \quad (2.60)$$

$$\alpha = 1 - r - \tau \quad (2.61)$$

Como se puede observar, este método requiere como entrada el índice de refracción complejo de los materiales involucrados. Para la atmósfera de Argón, se considera un valor constante de 1.0002820 (Bideau-Mehu et al. 1981). Para la película de ferrita de zinc ( $ZnFe_2O_4$ ) se tomaron de dos fuentes los datos: en el rango de 0.2 a 2.5  $\mu m$  se tomaron los datos de Sultan & Singh (2009); y para el rango de 2.5 a 10  $\mu m$  se utilizó los datos extraídos de Shimada et al. (2004). Para el soporte de zirconia ( $ZrO_2$ ) del índice de refracción fueron obtenidos de Wood & Nassau (1982) y los datos del coeficiente de extinción Boulouz et al. (1998) para un rango de 0.1 a 0.8  $\mu m$ . Para el rango de 0.8 a 10  $\mu m$  fueron obtenidos con la ecuación y los datos de Pecharroman et al. (1996). En el anexo A.1 se muestra el análisis de las propiedades ópticas y la obtención del coeficiente de extinción complejo para los materiales involucrados.

### 3.1. Propiedades ópticas

#### 3.1.1. Propiedades ópticas del soporte de zirconia

Se midieron las reflectancias difusa y especular de una muestra de zirconia en un espectrofotómetro Shimadzu UV-3101PC. Para la medición de reflexión difusa se utilizó el accesorio de esfera integradora. En esta prueba se utilizó sulfuro de bario ( $BaSO_4$ ) para realizar la línea base, utilizando la información de reflectancia hemisférica del  $BaSO_4$  medida por Grum & Luckey (1968) para realizar el ajuste de la reflectancia de la zirconia medida. En la figura 3.1 se muestra los valores de reflectancia difusa y especular ajustados en un rango de los 250 a los 2500 nm.

En el trabajo de Sani et al. (2015), se midieron de manera experimental la reflectancia espectral de la zirconia de un rango de 300 a 16000 nm. Al comparar los mediciones de reflectancia de la zirconia sobre el rango medido, el comportamiento coincide, por ejemplo en el rango de los 1000 a los 2000 nm se tienen reflectancias alrededor del 80%.

Para utilizar esta información se realizó un promedio simple sobre el rango de longitud de onda medido. Estos promedios, que serán utilizados en la simulación de transferencia radiativa, son los que se muestran en la tabla 3.1

Tabla 3.1: Propiedades ópticas de la muestra de zirconia promediada de manera simple en el espectro entre 250-2500 nm

Propiedad óptica	Valor
Reflectancia difusa	0.7778340643
Reflectancia especular	0.0093076137
Índice de reflectividad	0.0118245723
Absortividad	0.212858322



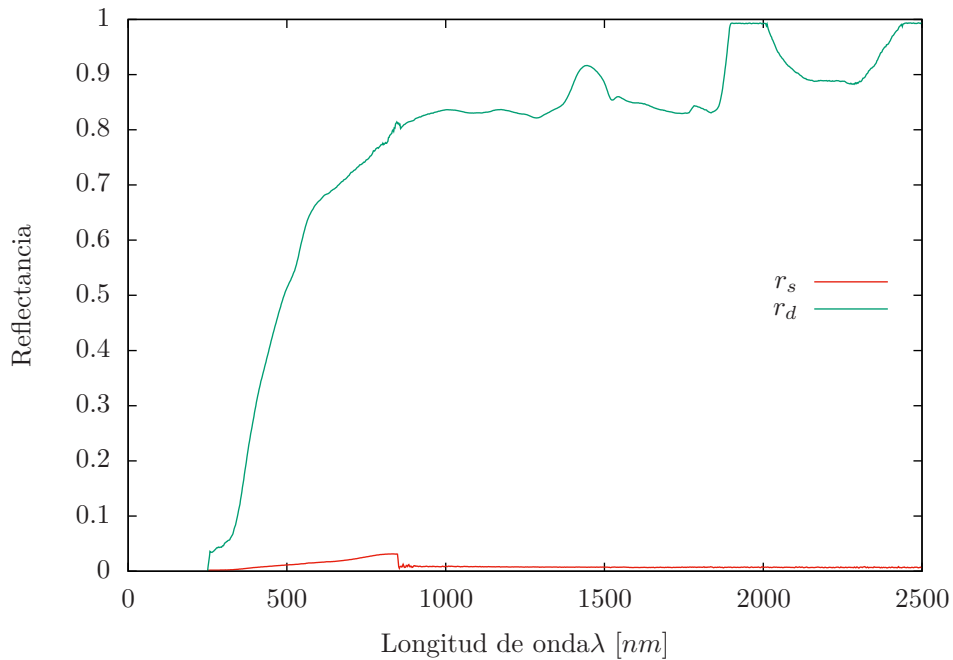


Figura 3.1: Resultados de la medición de una muestra de zirconia en el espectrofotómetro en función de la longitud de onda.

### 3.1.2. Propiedades ópticas de las películas de $ZnFe_2O_4$

Para validar el uso del método de la matriz característica, que se muestra en la subsección 2.3.1, se calcularon las propiedades ópticas de una película delgada de  $ZnFe_2O_4$  soportado en  $SiO_2$  con una atmósfera de oxígeno, con base a los datos de índice de refracción y coeficiente de extinción obtenidos del trabajo de Sultan & Singh (2009) y se comparó la transmitancia calculada con la medida en este mismo trabajo. Como se puede observar en la figura 3.2, la transmitancia calculada siguen la misma tendencia que las mediciones experimentales, aunque existe una diferencia de 12% en un máximo localizado en la longitud de onda de  $0.75\mu m$ , esto puede ser debido a que experimentalmente no manejaron un medio perfectamente homogéneo (Valadés-Pelayo et al. 2016). A pesar de esta diferencia, se puede validar con estos resultados el método y los datos de índice de refracción y coeficiente de extinción para el  $ZnFe_2O_4$  tomados de esta fuente.

Una vez validado el método, se calcularon las propiedades ópticas de la película delgada de  $ZnFe_2O_4$  y de el sistema multicapas  $ZrO_2/ZnFe_2O_4$ .

Para la película delgada de ferrita se consideraron tres espesores: 100, 300 y 500 nm. Se considera que la película recubre un soporte de zirconia y está rodeada de una atmósfera de argón.

En la figura 3.3(a) se muestran para las tres películas las propiedades ópticas de reflectancia, transmitancia y absortancia en función del ángulo de incidencia del haz de luz promediadas para el espectro solar, que va de 0.2 a  $2.5\mu m$ . En la gráfica se puede apreciar que el espesor de la película tiene un mayor impacto en la transmitancia y la absortancia,

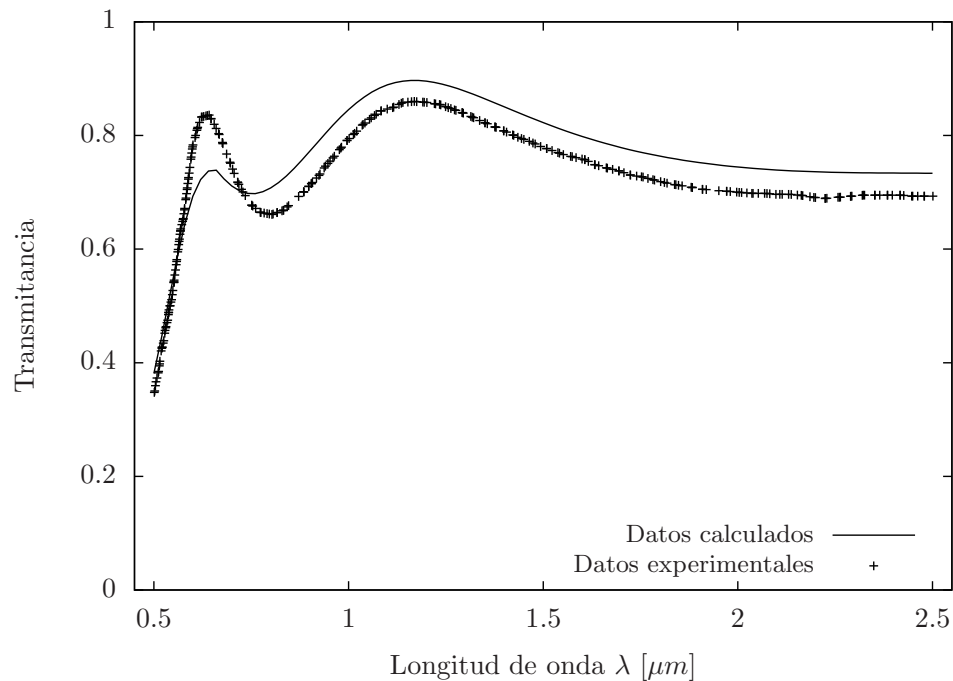


Figura 3.2: Transmitancia con respecto a la longitud de onda calculada con el método de matriz característica comparada con la medida por Sultan & Singh (2009).

mientras que en la reflectancia la diferencia es mínima. Al incrementar el espesor de la película de ferrita la transmitancia decrece de 0.8 a 0.7 aproximadamente, sin embargo cuando el espesor de la película aumenta de 300 a 500 nm, la reflectancia ya casi no disminuye. En el caso de la absorptancia, se aprecia que al incrementar el espesor de la película, aumenta la absorptancia y al igual que la reflectancia, cuando la película incrementa su espesor de 300 a 500 nm, el aumento de la absorptancia es mínimo.

Se puede apreciar que la película es transparente para ángulos de incidencia entre  $0^\circ$  a  $60^\circ$ , ya que tiene valores de transmitancia  $\tau$  entre 0.69 a 0.79. Por otro lado, la reflectancia  $r$  va aumentando a partir de los  $70^\circ$  de ángulo de incidencia hasta llegar a un valor de 0.9 para todos los espesores de película.

En la figura 3.3(a) se muestran también para las tres películas las propiedades ópticas de reflectancia, transmitancia y absorptancia en función del ángulo de incidencia del haz de luz promediadas para la energía emitida por un cuerpo negro a 2000K (en un rango de longitud de onda de 0.1 a 5  $\mu\text{m}$ ). Los resultados muestran que las películas delgadas de ferrita de zinc son más transparentes para el rango de la energía emitida, ya que los valores de la transmitancia  $\tau$  varían entre 0.75 a 0.85 para ángulos de incidencia de entre  $0^\circ$  a  $60^\circ$ , comparado con los valores promediados en el espectro solar que van de 0.7 a 0.8 aproximadamente. En este caso también se observa que al incrementar el espesor de la película, la transmitancia disminuye de 0.85 a 0.76. Por otro lado, el valor de la absorptancia aumenta de 0.05 a 0.12 al incrementar el espesor de la película. En el caso de la reflectancia, se aprecia que ésta no se afecta por el cambio en el espesor de la película.

A partir de los  $70^\circ$  del ángulo de incidencia, se puede notar como la reflectancia  $r$  va aumentando mientras que la transmitancia disminuye. La absorptancia de las tres capas varia entre 0.04 a 0.1, y disminuye considerablemente cuando al ángulo de incidencia se acerca a la normal.

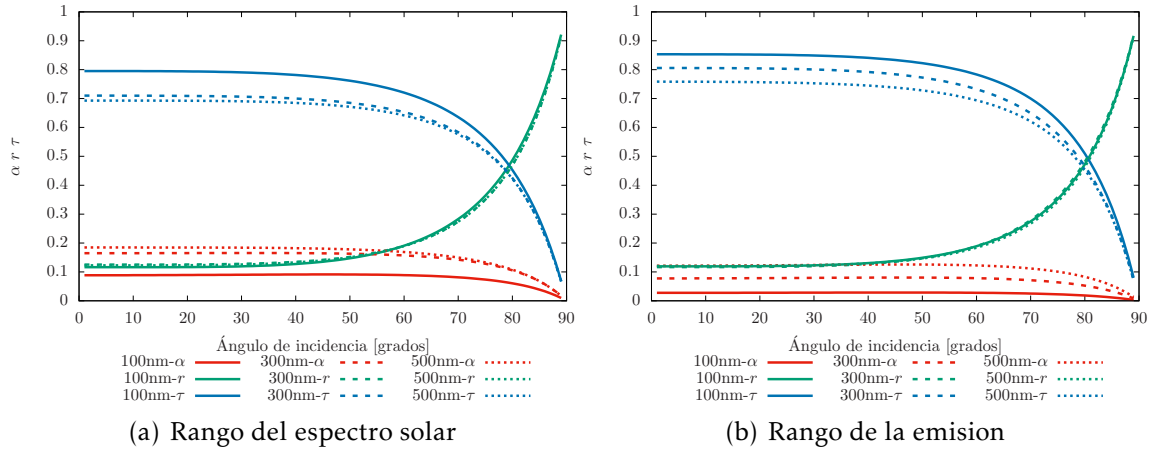


Figura 3.3: Propiedades ópticas de una película delgada de  $ZnFe_2O_4$  en función del ángulo de incidencia calculadas para el rango del espectro solar y el rango de la emisión (2000K).

Para el sistema  $ZrO_2/ZnFe_2O_4$  se obtienen sus propiedades ópticas por el mismo método, considerando los mismos espesores para la capa de ferrita de zinc, mientras que para la capa de zirconia se considera un espesor de 1 mm, ambas capas rodeadas de una atmósfera de argón. En la figura 3.4 se pueden observar dos gráficas que muestran la absorptancia, reflectancia y transmitancia del sistema para los diferentes espesores de película de ferrita de zinc. En la figura 3.4(a) se muestra las propiedades ópticas del sistema multicapa en función del ángulo de incidencia promediados sobre el espectro solar (entre  $0.1$  a  $2.5 \mu m$ ). Y en la figura 3.4(b) se muestra la misma información pero promediada en el rango de emisión del cuerpo negro a 2000K (entre  $0.1$  a  $5 \mu m$ ). Se puede observar que en ambos casos, las propiedades ópticas no varían en función del espesor de la capa de ferrita de zinc, esto se debe a que la película es altamente transparente y, comparado con la capa de zirconia, es mucho más delgada, por lo tanto en el cálculo de las propiedades va a influir más la capa más gruesa, que corresponde al  $ZrO_2$ . Comparando las propiedades ópticas entre las promediadas con respecto el espectro solar y a la energía de emisión se puede observar que la absorptancia aumenta de 0.87 a 0.89 aproximadamente, a ángulos de incidencia de  $0$  a  $60^\circ$ . Mientras que la reflectancia mantiene los mismos valores para ambos espectros. En ambos casos se aprecia también que a ángulos de incidencia mayores de  $70^\circ$  hay una disminución considerable en la absorptancia y un aumento en la reflectancia. También se puede comprobar que el sistema  $ZrO_2/ZnFe_2O_4$  se le puede considerar como un cuerpo opaco, ya que la transmitancia en ambos casos es prácticamente cero.

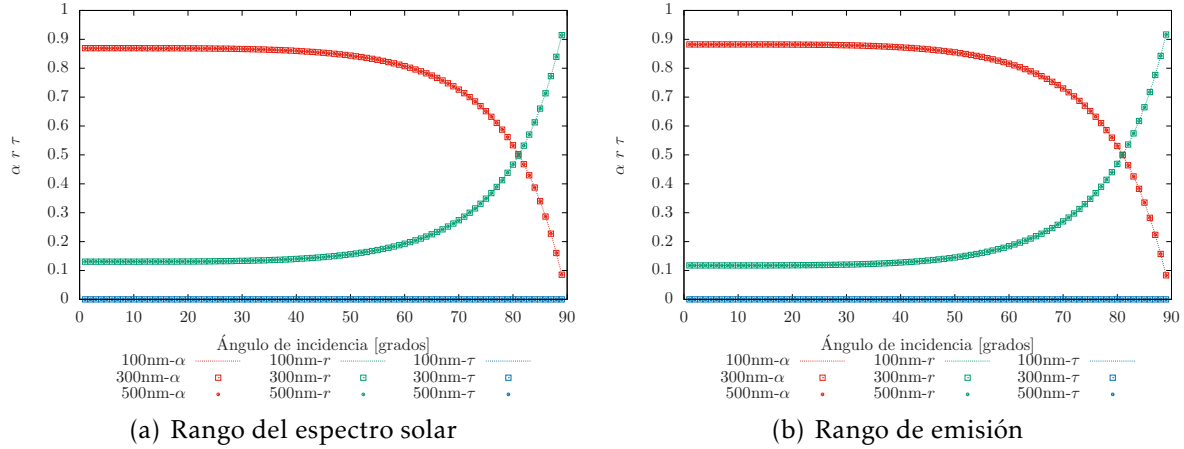


Figura 3.4: Propiedades ópticas en función del ángulo de incidencia para el sistema  $ZrO_2/ZnFe_2O_4$  calculadas para el rango del espectro solar y el rango de la emisión (2000K).

### 3.2. Análisis del trazado de rayos en el medio poroso sin película reactiva

Primero se realizó la simulación para el monolito de zirconia sin película reactiva posicionándolo en el foco del HOSIER, a 5 cm y 10 cm fuera del foco del HOSIER. Posteriormente, se propusieron cambios a la geometría del receptor, en largo y diámetro de canal, para determinar una configuración en la cuál se obtiene un perfil de temperaturas más homogéneo.

Una vez que se obtiene la posición con respecto al foco del Horno Solar y la configuración del monolito que nos den temperaturas de reacción más homogéneas (que van de los 1500 a 1800K), se realizará la simulación de transferencia de calor radiativa añadiendo la película reactiva, probando tres diferentes espesores de película 100, 300 y 500 nm.

La configuración del monolito de zirconia fue generada con un algoritmo que agrupa los canales cilíndricos en arreglos hexagonales, considerando un espacio entre canales y un borde de monolito sin canal, así como el diámetro del diámetro de canal y el del monolito. La configuración presentada en la figura 3.5 considera un diámetro de canal de 3mm, un espacio entre canales de 3mm, y un diámetro de monolito de 64mm. El borde del monolito sin poros es de 4mm, y se generó un total de 199 canales.

Cabe destacar que se seleccionaron solo algunos canales del monolito de zirconia que se encuentran sobre una misma posición angular, pero a distintas posiciones radiales. Los canales seleccionados se muestran en la figura 3.5. La numeración de los canales es arbitraria, sólo se relaciona con el algoritmo anteriormente descrito. En la tabla 3.2 se muestra la posición de los centros de los canales seleccionados en el plano  $xy$  y su posición radial con respecto al centro del monolito.

Para justificar el hecho de que sólo se tomaron ocho canales con la misma posición an-

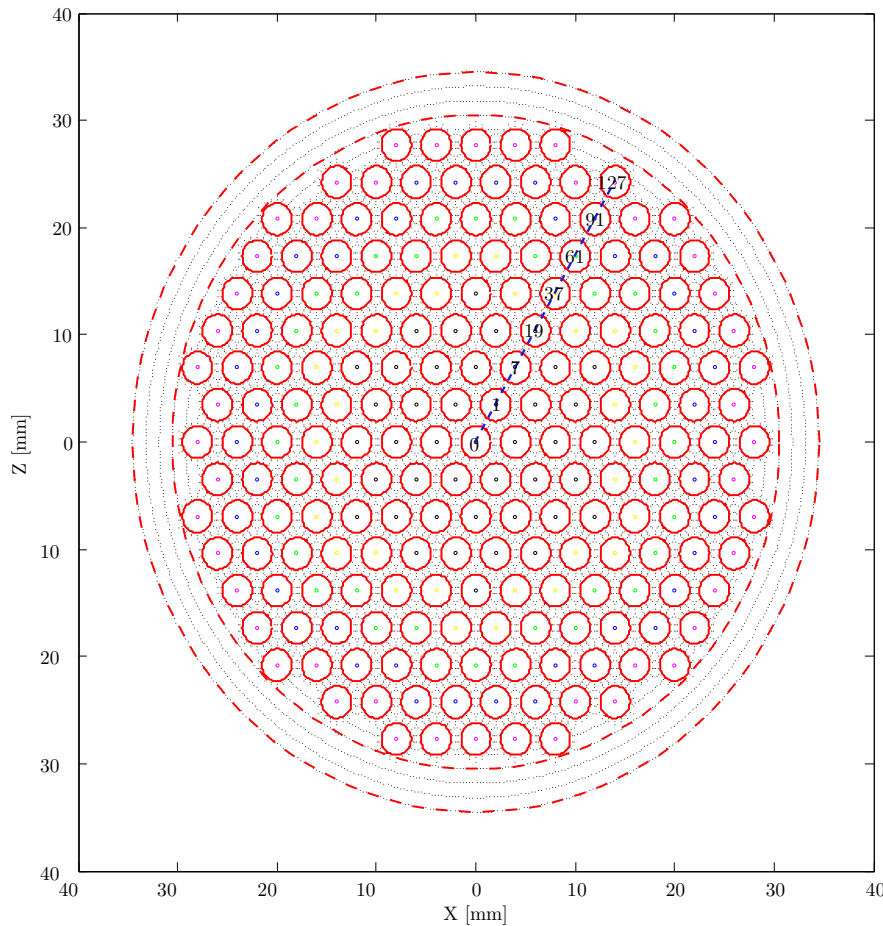


Figura 3.5: Esquema del medio poroso monolítico indicando los canales que son objeto de análisis

gular en el monolito para realizar el análisis de transferencia de calor radiativa, se realizó un análisis de potencia y direccionalidad en distintas posiciones de la mancha solar desplazada 5cm del foco del Horno. Los datos fueron tomados de la simulación del HOSIER descrita en la sub-sección 2.2.1.

En la figura 3.6 se muestra el flux radiativo incidente en un diferencial de área en la mancha solar que recorre los  $360^\circ$  de la coordenada angular  $\theta$  para diferentes posiciones radiales. Se puede observar que la variación de potencia recibida en el mismo diferencial de área disminuye de manera significativa conforme el diferencial de área se aleja del centro de la mancha solar. Sin embargo, la variación de la potencia incidente en el diferencial de área permanece estable cuando se recorre alrededor de la mancha solar para una misma posición radial. Con esto podemos afirmar que la potencia incidente varía de forma significativa con respecto a la posición radial, más no depende de la posición angular.

En la figura 3.7(a) se muestra la distribución del ángulo cenital  $\phi$  de los rayos incidentes para diferentes posiciones angulares a una sola posición radial, que en este caso es a 12

Tabla 3.2: Localización de los centros de los canales con respecto al eje  $x$  y al eje  $y$ , y la posición radial.

No. de Canal	X [mm]	Y [mm]	R [mm]
0	0.00	0.00	0.00
1	2.00	3.46	4.00
7	4.00	6.93	8.00
19	6.00	10.39	12.00
37	8.00	13.86	16.00
61	10.00	17.32	20.00
91	12.00	20.78	24.00
127	14.00	24.25	28.00

mm del centro de la mancha solar. Se puede observar que no importa la posición angular en la que se encuentre el diferencial de área, la distribución es muy similar para todas las posiciones angulares.

En la figura 3.7(b) se muestra la distribución del ángulo azimutal de los rayos incidentes para diferentes posiciones angulares a una sola posición radial, a 12mm del centro como en el caso anterior. Se puede apreciar que la distribución de ángulo azimutal a diferentes posiciones angulares no es similar, pero tiene la misma tendencia y cubre el mismo rango.

Todos estos resultados nos indican que, la reducción del campo radiativo a un campo axisimétrico, supone una simplificación razonable. Con base en esto, se realizarán simulaciones para diferentes canales ubicados a distinta posiciones radiales, y a una misma posición angular.

### 3.2.1. Medio poroso con canales de 3mm de diámetro

El objeto de realizar las simulaciones del medio poroso monolítico sin la película reactiva de  $ZnFe_2O_4$  es conocer el comportamiento térmico de monolito y proponer el cambio parámetros geométricos como el largo y el diámetro de los canales con el objeto de tener una distribución de temperaturas más uniforme.

Como previamente se mencionó, se realizaron simulaciones colocando el receptor en el foco, alejándolo 5 y 10 cm, considerando las dimensiones mencionadas en la sección 1.8, es decir un diámetro de 3 mm y una longitud de 15 mm.

Después se mostraran los resultados de una serie de simulaciones en donde se varió la longitud del monolito. Este ejercicio se realizó tanto para un diámetro de canal de 3 mm, como para un diámetro de 4 mm.

Para estas simulaciones, las propiedades ópticas que se tomaran en cuenta, son un promedio simple sobre la longitud de onda de las propiedades ópticas medidas en el espectrofotómetro que se muestran en la tabla 3.1.

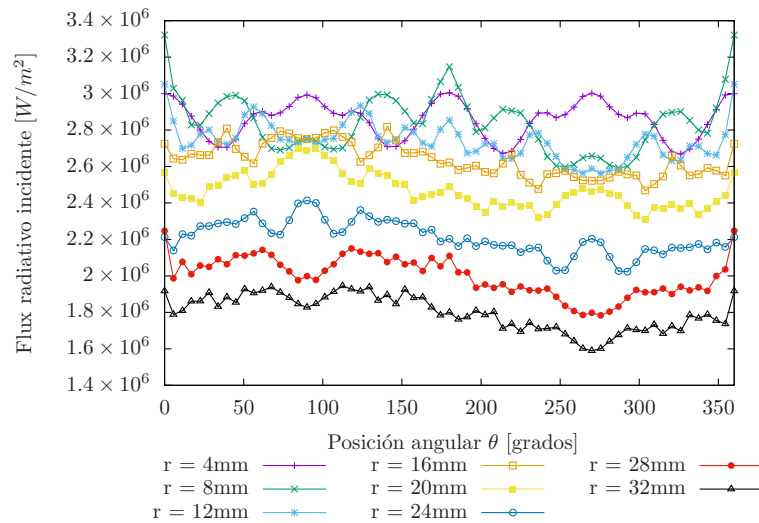


Figura 3.6: Flux radiativo incidente a lo largo de la coordenada angular para distintas posiciones radiales

### 3.2.1.1. En el foco

Para la simulación en la cuál se posicionó el medio poroso justo en el foco del horno solar, se obtuvieron los perfiles de temperatura después de hacer el trazo de rayos de la energía radiante proveniente del HOSIER y de la energía emitida por la superficie zirconia.

A continuación se muestra en la figura 3.8 un par de ejemplos del mapa de flux radiativo incidente y la distribución de temperatura para el canal 0, o central, y para el canal más alejado del centro. La figura 3.8(a) muestra el flux radiativo incidente en la superficie interna del canal, proveniente de la energía concentrada por el HOSIER. Se puede observar que gran parte de la radiación incidente se absorbe en las cercanías de la entrada del canal, llegando menos radiación mientras a posiciones más lejanas de la entrada del canal. En la figura 3.8(b) se muestra la distribución de temperaturas obtenida al equilibrio radiativo. La distribución de temperaturas nos muestra que las más altas temperaturas se presentan del inicio del canal a unos 6 mm.

En la figura 3.8 (c) y (d) se muestra el flux de radiación incidente y la distribución de temperaturas en la superficie interior del canal respectivamente. En magnitud, el flux radiativo incidente es menor en comparación con la radiación entrante en el poro 0. En la distribución de temperaturas se nota que la zona con las temperaturas más altas, ahora se encuentran entre la entrada de canal a los 4 mm de profundidad.

En la figura 3.9 se muestra el perfil de temperatura promedio alrededor del perímetro del canal cilíndrico a lo largo de la profundidad del canal. Se puede observar que el poro 0 o central, alcanza temperaturas más altas en comparación a los demás canales. A pesar de eso, en todos se nota la misma tendencia; llegan a un pico de temperatura a una profundidad de 2 mm, y a partir de ahí, en todos los canales va disminuyendo la tempe-

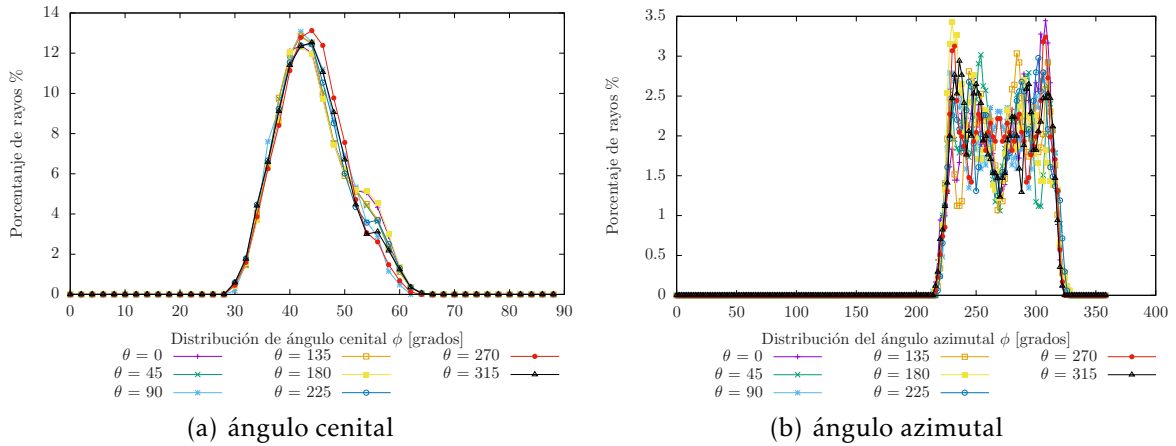


Figura 3.7: Distribución de los ángulos cenital y azimutal de los rayos incidentes para distintas posiciones angulares con la posición radial fija ( $R=12\text{mm}$ )

ratura hasta el final del canal. En la tabla 3.3 se muestra para cada poro su temperatura promedio, desviación estándar, temperatura máxima y temperatura mínima para los canales del monolito bajo las condiciones previamente mencionadas. Se puede observar que la temperatura promedio del poro del centro es mayor, a su vez, el rango de temperaturas de este poro es mayor en comparación con los poros. También podemos observar que la desviación estándar para esta configuración varía entre los 298.40K a los 336.98K.

La desviación estándar del campo de temperaturas superficiales dentro del canal, sirve como parámetro para determinar la homogeneidad de la distribución de energía solar. Debido a la dependencia no lineal de la reacción de reducción de un óxido metálico con la temperatura, entre menor sea la desviación estándar, menor será la incertidumbre en este fenómeno.

Tabla 3.3: Temperatura promedio, desviación estándar, temperatura máxima y temperatura mínima del perfil de temperaturas en la superficie interna del poro de 3 mm de diámetro para la simulación en el foco del concentrador

Poros #	Radio (mm)	T. prom. (K)	$\sigma$ (K)	T. máx. (K)	T. mín. (K)
0	0.00	1807.92	315.19	2597.25	1138.13
1	4.00	1473.48	341.35	2470.06	875.40
7	8.00	1520.81	336.98	2478.25	850.84
19	12.00	1657.12	314.87	2629.86	1013.27
37	16.00	1449.80	331.77	2400.50	866.00
61	20.00	1483.91	325.42	2397.80	874.28
91	24.00	1439.74	314.73	2289.23	858.75
127	28.00	1412.91	298.40	2281.95	855.70

Posteriormente, se realizaron una serie de simulaciones en donde se varió el largo del



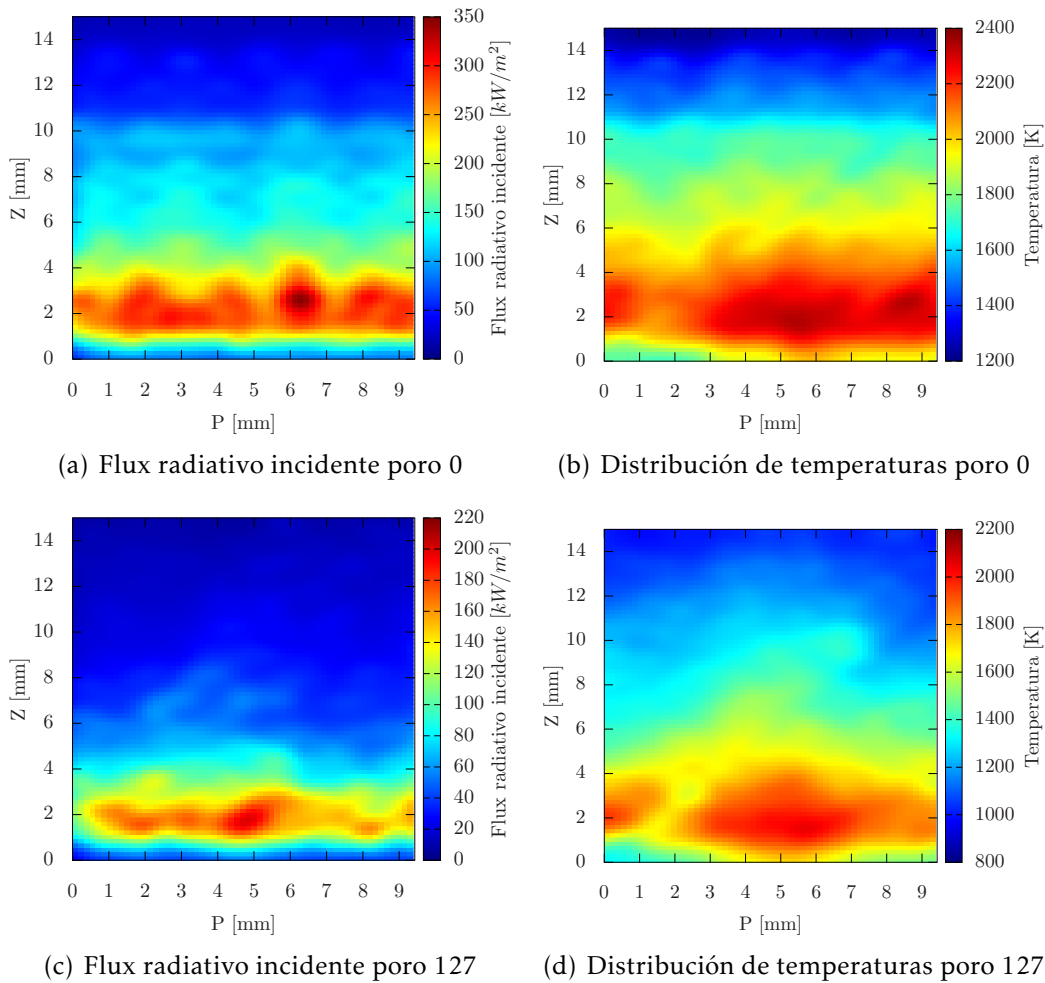


Figura 3.8: Resultados obtenidos para el poro central cuando el medio poroso esta en el foco del HOSIER

medio los canales del monolito de zirconia. En la figura 3.10 se muestra la desviación estándar calculada para los canales seleccionados a distintas longitudes de canal. Se puede apreciar que para las longitudes 6 y 8 mm, se obtuvieron las menores desviaciones estándar para todos los canales.

### 3.2.1.2. 5 cm fuera de foco

En la figura 3.11, se muestra el perfil de temperatura perimetral promedio a lo largo del canal, para distintos canales correspondiente al caso de 5 cm fuera del foco del concentrador. Se puede observar una diferencia entre la figura 3.11 y la figura 3.9 en la brecha temperatura entre el canal central y los demás canales. En este caso hay una brecha menor de los 100K, mientras que cuando está en el foco la brecha es de poco mayor a los 200K. Al igual que en el caso anterior, se puede observar que llega a un pico de temperatura a

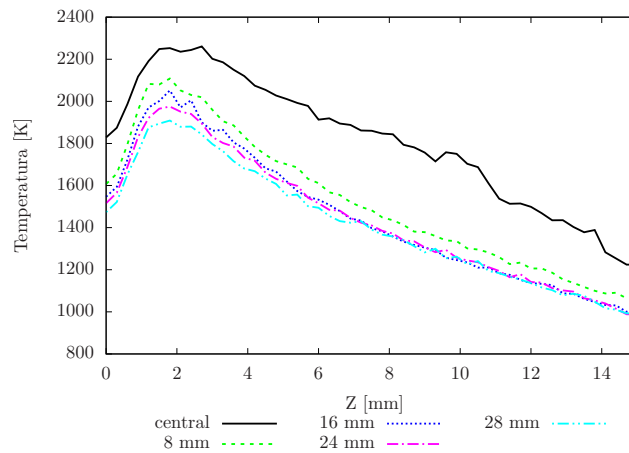


Figura 3.9: Temperatura perimetral promedio con respecto a la longitud del canal de 3 mm de diámetro en el foco del concentrador

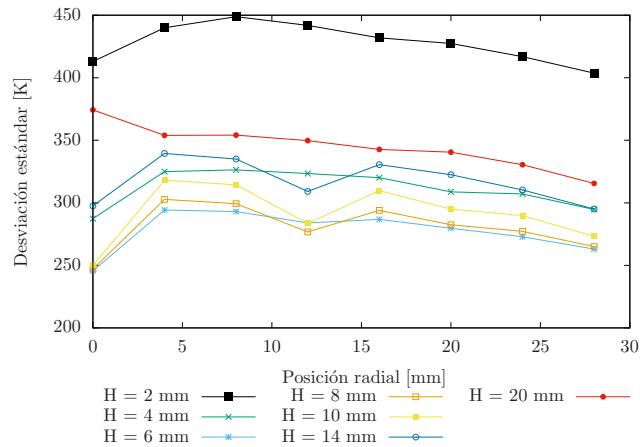


Figura 3.10: Desviación estándar con respecto a la posición radial del canal de 3mm de diámetro para distintas longitudes de canal en el foco

los 2 mm de distancia de la entrada, para disminuir hasta los 1000K.

En la tabla 3.4 se muestra para cada poro la temperatura promedio, la desviación estándar del perfil de temperaturas, la temperatura máxima y temperatura mínima para cuando el monolito se ubica 5 cm antes de la zona focal. Se puede observar para esta configuración que el poro central no presenta temperaturas mucho más altas que los demás poros, inclusive el rango entre la temperatura máxima y mínima se mantiene poco variable. El rango de la desviación estándar para todos los canales se encuentra entre 272.27-302.60K, un rango menor comparado con el caso del monolito en el foco del concentrador. Con estos datos se puede decir que al colocar el monolito 5 cm fuera del foco, se pueden obtener perfiles de temperatura más homogéneos.

De la misma forma que en el caso anterior, se realizaron la serie de simulaciones variando el largo del medio poroso. En la figura 3.12 se muestra la desviación estándar para

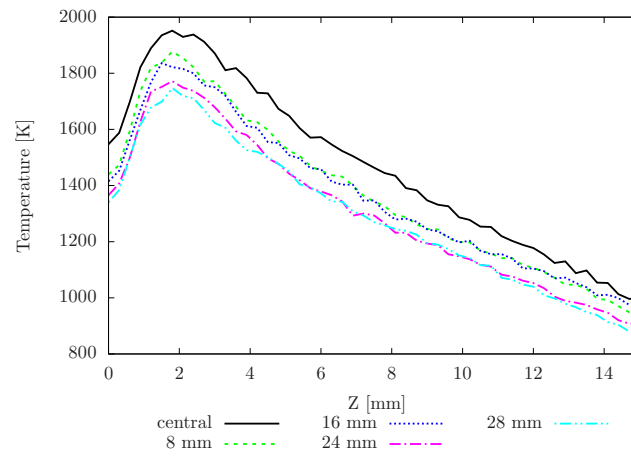


Figura 3.11: Temperatura perimetral promedio con respecto a la longitud del canal de 3 mm de diámetro a 5 cm del foco del concentrador

Tabla 3.4: Temperatura promedio, desviación estándar, temperatura máxima y temperatura mínima del perfil de temperaturas en la superficie interna del poro de 3 mm de diámetro para la simulación de 5 cm fuera del foco del concentrador

Poros #	Radio (mm)	T. prom. (K)	$\sigma$ (K)	T. máx. (K)	T. mín. (K)
0	0.00	1467.31	302.60	2185.26	890.64
1	4.00	1389.47	287.51	2187.02	828.76
7	8.00	1370.94	296.54	2316.34	825.13
19	12.00	1373.08	287.81	2249.04	776.75
37	16.00	1363.60	283.34	2216.74	775.75
61	20.00	1316.07	276.99	2136.68	804.78
91	24.00	1302.43	280.28	2141.65	759.23
127	28.00	1288.57	272.27	2066.49	756.57

cada canal a diferentes longitudes de éste. Al igual que en caso anterior, se puede observar que para las longitudes de 6 mm y 8 mm se obtienen los menores valores de desviación estándar para todos los canales.

### 3.2.1.3. 10 cm fuera de foco

Basado en la premisa de que al alejarse de foco del Horno Solar se consigue una distribución de temperaturas que tiende a ser homogénea, se realizó nuevamente la simulación, ahora colocando 10 cm fuera del foco el monolito. En la figura 3.13 se muestra el perfil de temperaturas promedio alrededor del perímetro del canal cilíndrico a lo largo de la profundidad del canal para los distintos canales, correspondiente al caso de 10 cm fuera de foco. Al igual que los perfiles anteriores, se puede observar que tiene un pico de temperatura a los 2 cm de largo, y a partir de ese punto disminuye hasta por debajo de los

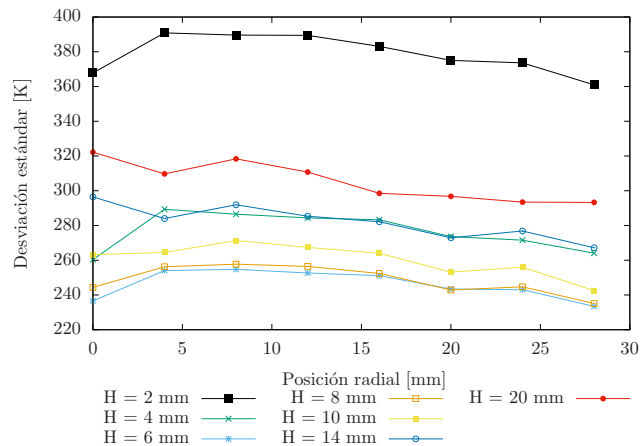


Figura 3.12: Desviación estándar con respecto a la posición radial del canal de 3mm de diámetro para distintas longitudes  $H$  de canal a 5 cm del foco

1000K. El pico de temperaturas es menor comparado con los casos del foco y 5 cm fuera de foco.

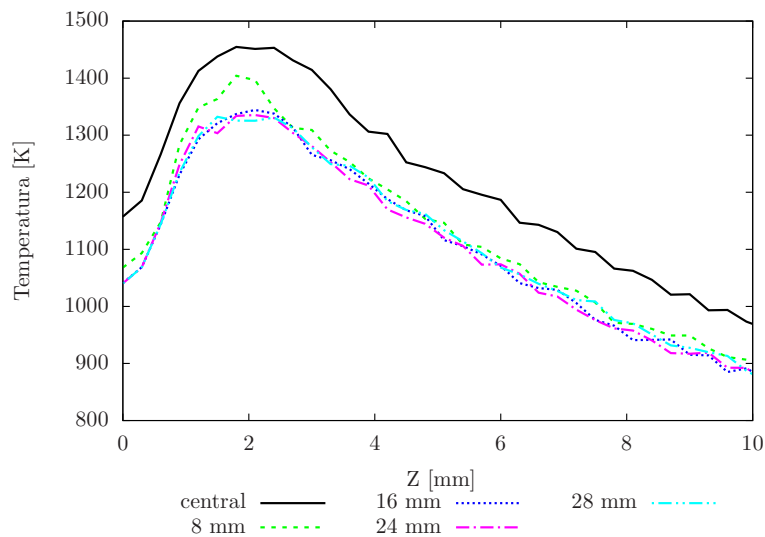


Figura 3.13: Temperatura perimetral promedio con respecto a la longitud del canal de 3 mm de diámetro a 10cm del foco del concentrador

En la tabla 3.5 se muestra para cada uno de los poros seleccionados su temperatura promedio, máxima y mínima, así como la desviación estándar del perfil de temperaturas. El rango de la desviación estándar va desde 209.59K a 223.95K, mucho menor que las reportadas en la tabla 3.4. Sin embargo, las temperaturas promedio disminuyen en comparación con el caso anterior, así como el rango entre temperatura máxima y mínima, se puede apreciar que para este caso en ningún punto de la superficie se pueden alcanzar los 2000K como en los dos casos anteriores.

Tabla 3.5: Temperatura promedio, desviación estándar, temperatura máxima y temperatura mínima del perfil de temperaturas en la superficie interna del poro de 3 mm de diámetro para la simulación 10 cm fuera del foco del concentrador

Poros #	Radio (mm)	T. prom. (K)	$\sigma$ (K)	T. máx. (K)	T. mín. (K)
0	0.00	1097.42	223.95	1658.20	665.63
1	4.00	1003.69	212.52	1551.84	576.72
7	8.00	1022.31	216.34	1649.20	611.60
19	12.00	1029.01	215.02	1640.06	598.13
37	16.00	1000.73	212.00	1611.84	591.49
61	20.00	1021.76	213.76	1622.60	610.26
91	24.00	999.21	210.84	1581.63	581.63
127	28.00	1006.89	209.59	1642.47	599.91

También se realizó la misma serie de simulaciones para variar el la longitud del monolito. La figura 3.14 se muestra la desviación estándar para cada canal a diferentes longitudes. De la misma forma que en los casos anteriores, para las longitudes de 6 mm y 8mm, se obtiene distribuciones de temperatura más homogéneas.

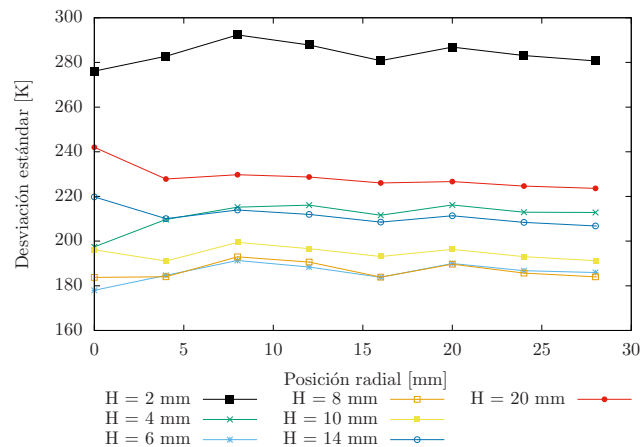


Figura 3.14: Desviación estándar con respecto a la posición radial del canal de 3mm de diámetro para distintas longitudes de canal a 10cm del foco

### 3.2.2. Medio poroso con canal de 4mm de diámetro

Se realizaron las mismas simulaciones variando el diámetro de canal a 4 mm. Sólo se aumento a este diámetro ya que era el máximo diámetro que permitía mantener la configuración que se muestra en la figura 3.5, que es la que representa más adecuadamente el medio poroso real. De igual forma se realizaron las simulaciones colocando el medio poroso en justo en el foco, a 5cm y a 10 cm de distancia del foco. De igual forma, para cada caso se realizó una serie de simulaciones variando la longitud del canal.

## 3.2.2.1. En el foco

Al variar el diámetro de 3 mm a 4 mm para una longitud de 15 mm, los resultados de la simulación posicionando el medio poroso en el foco del horno solar se muestran en la figura 3.15. En la gráfica se observa el promedio perimetral de temperatura en función de la longitud para los distintos canales. De manera similar al mismo caso, pero con un diámetro menor, se puede observar que la temperatura es más alta en el poro 0, en comparación a los demás, llegando a un pico de 2400K de temperatura en comparación al pico de 2200 de los demás poros. En la tabla 3.6 se muestra para los canales seleccionados la temperatura promedio, máxima y mínima, así como la desviación estándar del perfil de temperaturas de la superficie interna del canal. Se puede observar que la desviación estándar de la distribución de temperaturas es mayor comparada con la simulación en la misma posición, pero con un diámetro menor.

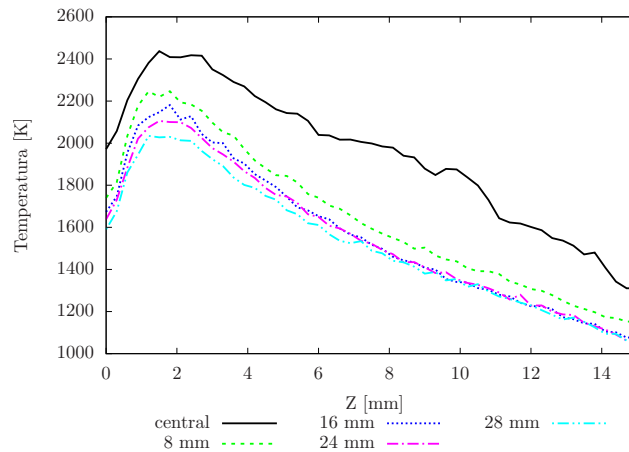


Figura 3.15: Temperatura perimetral promedio con respecto a la longitud del canal de 4 mm de diámetro en el foco del concentrador

Tabla 3.6: Temperatura promedio, desviación estándar, temperatura máxima y temperatura mínima del perfil de temperaturas en la superficie interna del poro de 4 mm de diámetro para la simulación en el foco del concentrador

Poros #	Radio (mm)	T. prom. (K)	$\sigma$ (K)	T. máx. (K)	T. mín (K)
0	0.00	2019.45	335.97	2729.50	1213.25
1	4.00	1660.04	368.13	2658.12	907.55
7	8.00	1710.68	361.00	2631.97	977.96
19	12.00	1838.44	335.09	2744.07	1042.19
37	16.00	1627.94	356.26	2559.09	934.00
61	20.00	1660.33	348.51	2514.50	927.09
91	24.00	1615.16	337.78	2418.14	894.85
127	28.00	1582.02	319.78	2400.52	913.30

De la misma forma que se ha realizado en los casos anteriores, se realizaron la serie de simulaciones cambiando el largo de los canales de los poros. En la figura 3.16 se encontró que las longitudes con el menor valor de desviación estándar para todos los poros son 6 y 8mm como en los casos anteriores.

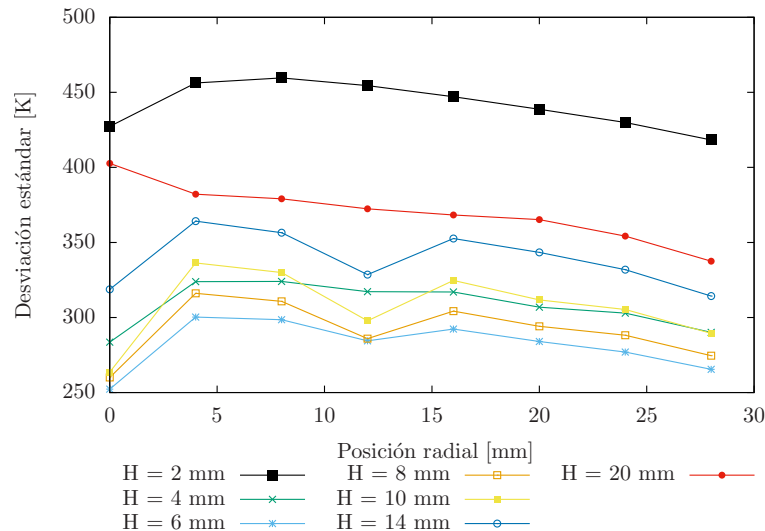


Figura 3.16: Desviación estándar con respecto a la posición radial del canal de 4mm de diámetro para distintas longitudes de canal en el foco

### 3.2.2.2. 5cm fuera de foco

En la figura 3.17 se muestra la temperatura promedio perimetral a lo largo de los distintos canales con diámetro de 4mm y posicionado el monolito 5cm fuera del foco del Horno Solar. Se puede observar que el poro 0, se encuentra menos alejado de los demás poros, teniendo un pico de temperatura por encima de los 2000K, mientras los demás tienen un pico entre los 1800 y 1900 K. En la tabla 3.7 se muestra la temperatura promedio, máxima y mínima, así como la desviación estándar del perfil de temperaturas de la superficie interna de cada canal para este caso. Podemos ver que la desviación estándar es menor en comparación al caso donde se coloca el receptor en el foco con el mismo diámetro de canal. Sin embargo, al comparar con el caso en la misma posición con respecto al foco del horno pero con un diámetro más pequeño (3 mm), se puede observar que se tienen desviaciones estándar más grandes, por lo tanto, se puede decir que los perfiles de temperatura son menos homogéneos al aumentar el diámetro del canal.

Nuevamente, se realizó la serie de simulaciones para obtener una longitud óptima en función de la desviación estándar del perfil de temperaturas. En la figura 3.18 se muestra de manera gráfica la desviación estándar con respecto a la posición radial para diferentes longitudes de canal. Los resultados son similares para todos los casos anteriores; se obtiene una distribución de temperaturas más homogénea con las longitudes de 6 y 8mm.

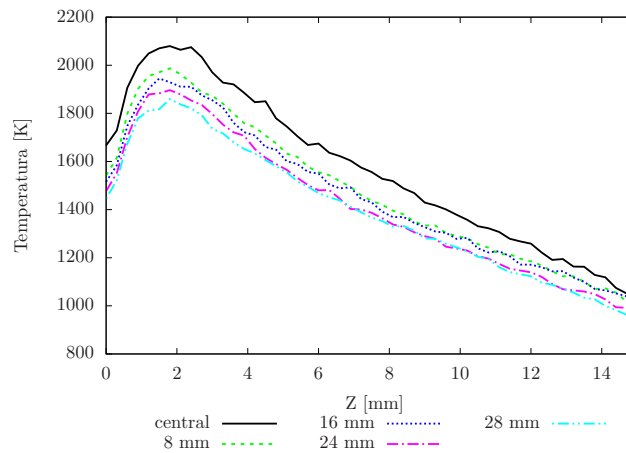


Figura 3.17: Temperatura perimetral promedio con respecto a la longitud del canal de 4 mm de diámetro a 5cm del foco del concentrador

Tabla 3.7: Temperatura promedio, desviación estándar, temperatura máxima y temperatura mínima del perfil de temperaturas en la superficie interna del poro de 4 mm de diámetro para la simulación 5cm fuera del foco del concentrador

Poros #	Radio (mm)	T. prom. (K)	$\sigma$ (K)	T. máx. (K)	T. mín (K)
0	0.00	1626.93	325.69	2295.99	960.70
1	4.00	1550.43	307.89	2307.54	866.94
7	8.00	1530.36	314.78	2451.02	864.00
19	12.00	1541.01	305.35	2358.85	882.50
37	16.00	1511.19	302.61	2341.82	853.30
61	20.00	1470.32	299.91	2248.37	841.96
91	24.00	1465.40	299.12	2281.05	839.76
127	28.00	1445.74	287.81	2188.16	800.08

### 3.2.2.3. 10 cm fuera de foco

Para el caso en donde se coloca el monolito a 10cm del punto focal, considerando la modificación del diámetro de canal a 4mm, el resultado de la simulación se muestra en la figura 3.19. En esta figura se puede observar que la diferencia entre el poro 0 y los demás es poca, sin embargo la temperatura disminuye hasta 1500K en su pico y se observan temperaturas mínimas de entre 800 y 750 K.

En la tabla 3.8 se muestra las temperaturas promedio, máxima y mínima, así como la desviación estándar de los diferentes poros. De igual forma, se observa que comparado con el mismo caso pero con un diámetro de canal de 3mm, se obtiene un valor de desviación estándar mayor, por lo tanto, se obtiene un perfil de temperaturas menos homogéneo.

En la figura 3.20 se muestra la desviación estándar con respecto a la posición radial del canal de 4mm de diámetro 10cm del foco para distintas longitudes de canal. De manera similar a los demás casos, las longitudes de canal de 6 y 8 mm son las que tiene menor



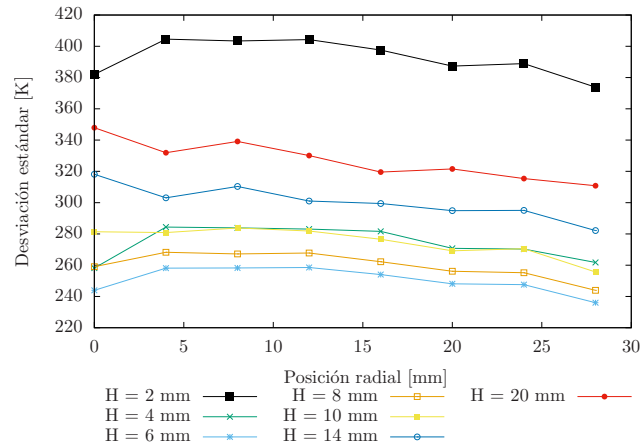


Figura 3.18: Desviación estándar con respecto a la posición radial del canal de 4mm de diámetro para distintas longitudes de canal a 5cm del foco

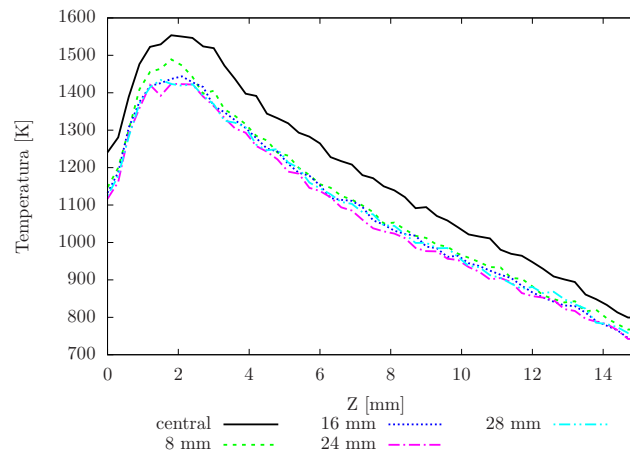


Figura 3.19: Temperatura perimetral promedio con respecto a la longitud del canal de 4 mm de diámetro a 10cm del foco del concentrador

desviación estándar del perfil de temperatura.

#### 3.2.2.4. Conclusión de las simulaciones

Considerando los resultados obtenidos al cambiar el diámetro y longitud del canal, y la posición relativa del monolito, se determina que, a fin de evitar un gradiente de temperaturas considerable, sería recomendable considerar cambiar la morfología del canal: utilizar una longitud de canal entre 6 y 8mm, y posicionar el monolito fuera de foco.

Tabla 3.8: Temperatura promedio, desviación estándar, temperatura máxima y temperatura mínima del perfil de temperaturas en la superficie interna del poro de 4 mm de diámetro para la simulación a 10cm del foco del concentrador

Poros #	Radio (mm)	T. prom. (K)	sigma (K)	T. máx. (K)	T. mín (K)
0	0.00	1222.51	239.61	1750.68	723.32
1	4.00	1126.43	227.58	1664.97	643.89
7	8.00	1142.48	231.01	1737.45	656.67
19	12.00	1148.48	230.59	1743.64	642.25
37	16.00	1127.28	227.88	1743.22	632.17
61	20.00	1139.27	228.05	1677.92	646.21
91	24.00	1113.34	225.10	1653.21	634.64
127	28.00	1125.87	223.73	1700.28	629.33

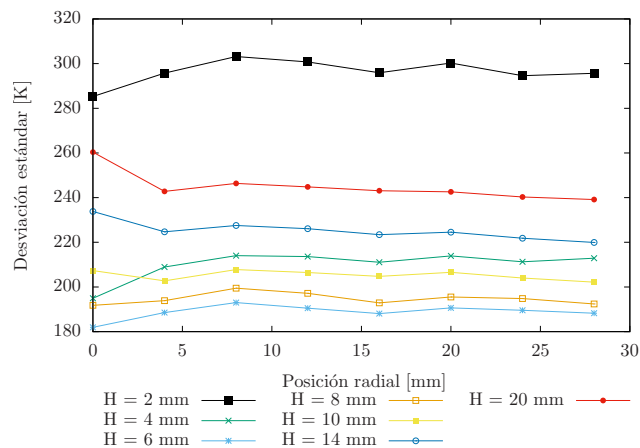


Figura 3.20: Desviación estándar con respecto a la posición radial del canal de 4mm de diámetro para distintas longitudes de canal a 10 cm del foco

### 3.3. Análisis de trazado de rayos en el medio poroso con película reactiva

Al agregar la película reactiva, sólo se realizaron las simulaciones para las configuraciones de canal óptimas descritas en la sección 3.2, esto es: 3 mm de diámetro y largo de 6 y 8 mm, y medio poroso ubicado fuera de foco. Por comparación se realizó una simulación del poro de 3mm de diámetro con una longitud de 15 mm. En estas simulaciones también se varió la apertura del atenuador para tener un rango de temperatura lo más homogéneo posible entre 1500K a los 1800K, que son las temperaturas recomendadas para llevar a cabo la reducción de la ferrita de zinc ( $ZnFe_2O_4$ ) (Kaneko et al. 2004). Las propiedades ópticas que se van a utilizar (figura 3.4), consideran la absorptividad en función del ángulo de incidencia.

### 3.3.0.1. 5 cm fuera de foco

Las primeras simulaciones a que se realizaron fueron para el canal de 3mm de diámetro y 15mm de longitud, tanto a 5cm como a 10cm del punto focal, esto con objeto de poder comparar con las simulaciones donde se consideran la misma posición y geometría, pero sin película reactiva. En la figura 3.21 se muestra la temperatura perimetral promedio con respecto a la longitud del canal de 3 mm de diámetro a 5cm del foco del concentrador. Se puede notar que aumenta la temperatura si se compara con el perfil de temperaturas mostrado en la figura 3.11. El máximo de la curva alcanza los 3000K de temperatura, contra los calculados con las propiedades ópticas de la película sola, donde la temperatura máxima es de 1800K. En el mínimo se alcanzan los 1000K en ambos casos.

También podemos observar de la figura 3.21 que el perfil de temperatura de todos los canales se encuentran muy cercano, es decir, que varía muy poco con respecto a la posición radial del centro del monolito. Por ello, de aquí en adelante, se toma la temperatura de un solo canal al comparar casos con diferente espesor de película y diferente apertura en el atenuador.

En la tabla 3.9 se muestran las temperaturas promedio, máxima y mínima, así como la desviación estándar del perfil de temperaturas de los diferentes canales recubiertos de la película de ferrita de zinc de 100nm de espesor a 5cm del foco del concentrador. Se puede ver que las temperaturas máximas alcanzadas están por encima de los 3000K; pero a su vez las temperaturas mínimas rondan entre los 720-830K, por debajo de las temperaturas en donde Kaneko et al. (2004) reporta el inicio del desprendimiento de  $O_2$ , aproximadamente a los 900K. En base al parámetro de la desviación estándar del perfil de temperatura, muestran valores altos entre los 650-700K, dando a entender el gradiente de temperaturas en la superficie interna es grande, y por lo tanto es poco homogéneo el perfil de temperaturas.

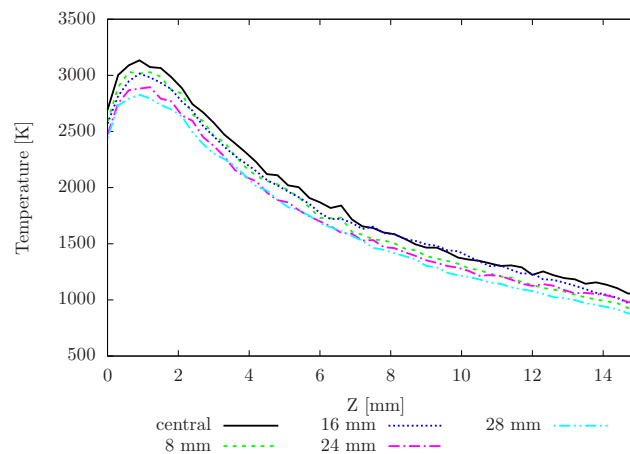


Figura 3.21: Temperatura perimetral promedio con respecto a la longitud del canal de 3mm de diámetro y longitud de 15mm con película reactiva de 100 nm de espesor

Tabla 3.9: Temperatura promedio, desviación estándar, temperatura máxima y temperatura mínima del perfil de temperaturas en la superficie interna del poro de 3 mm de diámetro y 15mm de longitud para la simulación a 5cm del foco del concentrador con película reactiva de 100nm de espesor

Poros #	Radio	T. prom. (K)	$\sigma$ (K)	T. máx. (K)	T. mín. (K)
0	0.00	1,858.64	693.43	3,715.36	835.87
1	4.00	1,797.38	693.54	3,683.64	768.40
7	8.00	1,760.08	703.23	3,689.55	780.68
19	12.00	1,775.78	689.25	3,741.55	775.69
37	16.00	1,797.51	663.69	3,690.74	777.98
61	20.00	1,703.00	659.60	3,584.50	795.70
91	24.00	1,704.53	646.37	3,480.36	810.42
127	28.00	1,657.10	652.51	3,541.50	720.28

En el caso en donde la geometría del canal es de 3mm de diámetro y 6mm de longitud, colocando el monolito a 5cm del foco del concentrador, los resultados de la simulación se muestran en la figura 3.22. Al igual que el canal de longitud de 15mm, el canal de 6mm de longitud alcanza los 3000K de temperatura perimetral promedio, pero al final del canal solo llega a los 1500K. Para confirmar esto, en la tabla 3.10 se puede observar que si se alcanzan picos de temperatura cercanos a los 4000K, y las mínimas rondan en los 1100K. Si se observa la desviación estándar, se nota que los valores son menores que cuando se tiene un canal más largo. Sin embargo, el perfil de temperaturas no es tan homogéneo.

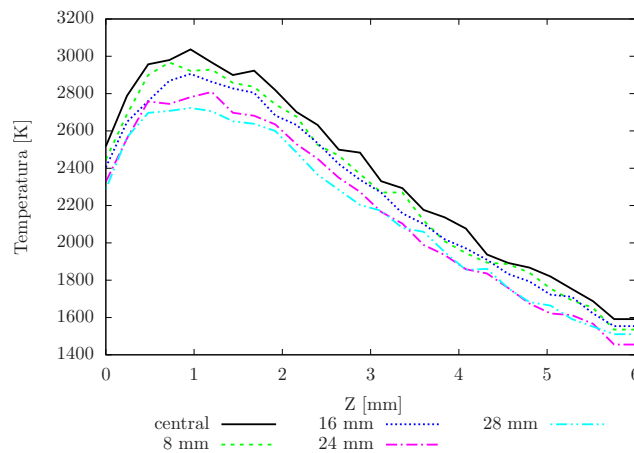


Figura 3.22: Temperatura perimetral promedio con respecto a la longitud del canal de 3mm de diámetro y longitud de 6mm con película reactiva de 100 nm de espesor

En la figura 3.23 se muestra la temperatura perimetral promedio del canal de 3mm de diámetro y 8mm de longitud. De forma similar a los dos casos anteriores, la gráfica presenta un máximo de 3000K a 1mm de profundidad. Después del máximo, la temperatura

Tabla 3.10: Temperatura promedio, desviación estándar, temperatura máxima y temperatura mínima del perfil de temperaturas en la superficie interna del poro de 3 mm de diámetro y 6mm de longitud para la simulación a 5cm del foco del concentrador con película reactiva de 100nm de espesor

Poros #	Radio	T. prom. (K)	$\sigma$ (K)	T. máx. (K)	T. mín. (K)
0	0.00	2,363.44	581.17	3,918.96	1,074.06
1	4.00	2,311.21	573.35	3,804.52	1,208.73
7	8.00	2,303.80	578.08	3,723.21	1,248.89
19	12.00	2,289.86	570.37	3,718.95	1,195.83
37	16.00	2,268.45	565.12	3,602.00	1,184.49
61	20.00	2,198.47	548.38	3,554.00	1,143.23
91	24.00	2,181.66	549.04	3,580.77	1,140.78
127	28.00	2,162.01	528.62	3,419.72	1,126.30

desciende monótonicamente, hasta alcanzar los 1400K.

En la tabla 3.11 se muestran las temperaturas promedio, máxima y mínima, así como la desviación estándar del perfil de temperaturas para los canales descritos en el párrafo anterior. De igual forma se puede observar que se obtiene temperaturas puntuales máximas cercanas a los 4000K, mientras que las temperaturas puntuales mínimas registradas rondan los 1000K. La desviación estándar indica que se tiene un perfil menos homogéneo que en el caso donde se tiene una longitud  $H$  de 6mm.

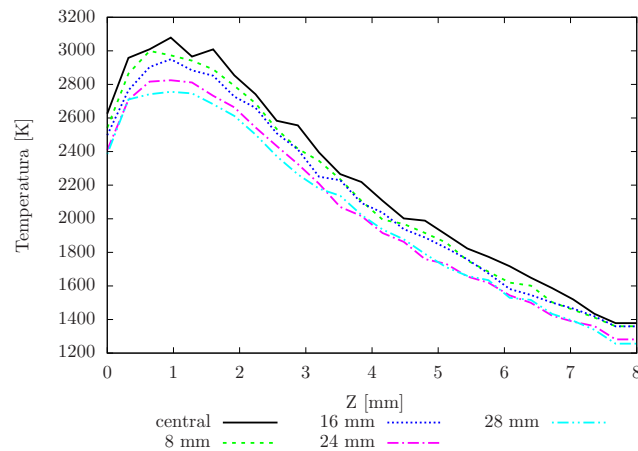


Figura 3.23: Temperatura perimetral promedio con respecto a la longitud del canal de 3mm de diámetro y longitud de 8mm con película reactiva de 100 nm de espesor

### 3.3.0.2. 10 cm fuera de foco

A continuación analizaremos las distintas geometrías de canal pero colocando el molinito a 10 cm del foco del Horno solar. La primera geometría a analizar es el canal de

Tabla 3.11: Temperatura promedio, desviación estándar, temperatura máxima y temperatura mínima del perfil de temperaturas en la superficie interna del poro de 3 mm de diámetro y 8mm de longitud para la simulación a 5cm del foco del concentrador con película reactiva de 100nm de espesor

Poros #	Radio	T. prom. (K)	$\sigma$ (K)	T. máx. (K)	T. mín. (K)
0	0.00	2,215.57	636.16	3,912.72	968.74
1	4.00	2,179.88	612.74	3,815.93	1,124.76
7	8.00	2,149.84	627.11	3,695.95	1,111.33
19	12.00	2,149.81	616.86	3,739.44	1,102.99
37	16.00	2,121.58	615.42	3,656.68	1,088.39
61	20.00	2,059.79	591.84	3,471.66	1,079.31
91	24.00	2,038.40	595.93	3,547.71	1,073.13
127	28.00	2,021.71	580.61	3,372.13	1,032.78

3mm de diámetro y 15mm de largo. En la figura 3.24 se muestra el promedio perimetral de temperatura a lo largo del canal. Se puede observar que esta temperatura tiene un máximo de 2300K en los 2mm de longitud. Conforme va avanzando a lo largo del canal la temperatura va decayendo hasta que llega a los 800K al final del canal.

Para verificar lo mostrado en la figura 3.24, en la tabla 3.12 se muestran las temperaturas promedio, máxima y mínima, así como la desviación estándar para el perfil de temperaturas. Se puede observar que la temperatura puntual máxima en el perfil de temperaturas rondan los 2600-2800K en los canales analizados, mientras que la temperatura puntual mínima ronda los 570-620K. A pesar de que la gráfica de la figura 3.24 nos sugiere que ya nos encontramos cerca del rango de temperatura deseado, todavía hay puntos en el perfil de temperatura muy alejados del rango de reducción de la ferrita de zinc.

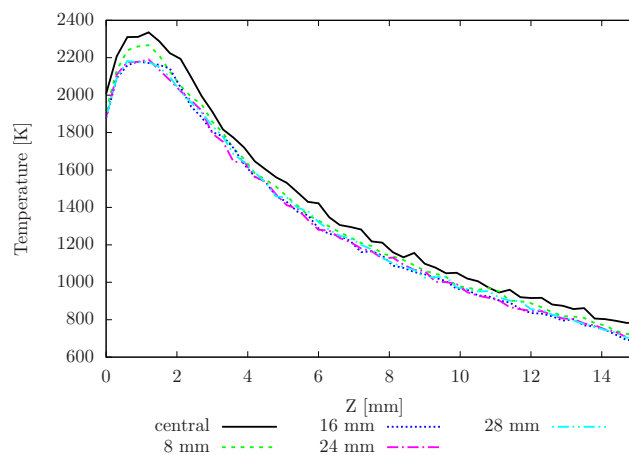


Figura 3.24: Temperatura perimetral promedio con respecto a la longitud del canal de 3mm de diámetro y longitud de 15mm con película reactiva de 100 nm de espesor a 10cm del foco del concentrador

Tabla 3.12: Temperatura promedio, desviación estándar, temperatura máxima y temperatura mínima del perfil de temperaturas en la superficie interna del poro de 3 mm de diámetro y 15mm de longitud para la simulación a 10cm del foco del concentrador con película reactiva de 100nm de espesor

Poros #	Radio (mm)	T. prom. (K)	sigma (K)	T. máx. (K)	T. mín (K)
0	0.00	1381.30	524.18	2793.87	587.18
1	4.00	1298.05	504.33	2711.58	564.79
7	8.00	1327.33	510.57	2813.24	601.10
19	12.00	1338.80	508.54	2813.98	618.77
37	16.00	1294.82	503.30	2684.90	568.19
61	20.00	1328.25	506.59	2711.79	607.41
91	24.00	1295.57	499.49	2690.21	570.97
127	28.00	1304.39	500.64	2710.94	582.57

Para la geometría de canal de 3mm de diámetro y 6mm de longitud, posicionando el medio poroso a 10cm del punto focal, los resultados se muestran en la figura 3.25, en la que se muestra la temperatura perimetral a lo largo del canal. Se puede observar que tiene los mismos picos de temperatura promedio perimetral, pero al final del canal, llega a una temperatura de 1200K.

En la tabla 3.13 se muestran las temperatura promedio, máxima y mínima, así como la desviación estándar para el canal de 3mm de diámetro y 6mm de longitud posicionado a 10cm del foco de concentrador. Se puede observar que los canales tienen una temperatura puntual máxima en un rango entre los 2600-2800K. La temperatura mínima esta entre los 700-800K. Y la desviación estándar es menor en comparación con los canales de 15mm de longitud, esta vez están en el rango de los 450-500K, lo que quiere decir que es un perfil de temperatura más homogéneo.

Tabla 3.13: Temperatura promedio, desviación estándar, temperatura máxima y temperatura mínima del perfil de temperaturas en la superficie interna del poro de 3 mm de diámetro y 6mm de longitud para la simulación a 10cm del foco del concentrador con película reactiva de 100nm de espesor

Poros #	Radio (mm)	T. prom. (K)	sigma (K)	T. máx. (K)	T. mín (K)
0	0.00	1768.82	434.96	2867.61	815.00
1	4.00	1680.47	416.34	2744.15	894.38
7	8.00	1708.45	428.63	2825.99	896.50
19	12.00	1711.34	429.19	2697.76	883.42
37	16.00	1677.45	414.88	2657.02	881.15
61	20.00	1706.21	419.21	2687.97	898.25
91	24.00	1667.79	419.61	2762.95	884.47
127	28.00	1678.76	412.66	2675.80	876.10

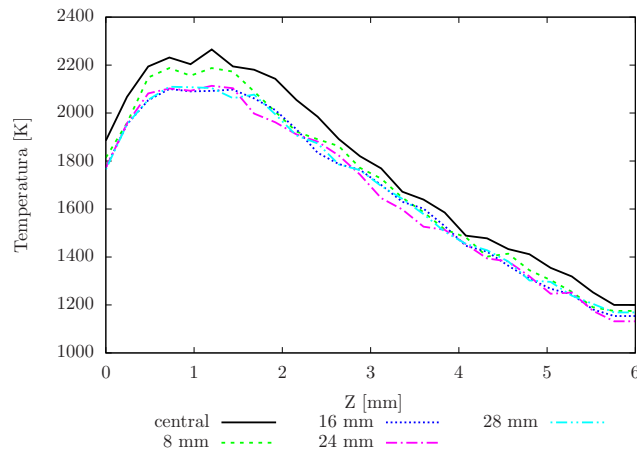


Figura 3.25: Temperatura perimetral promedio con respecto a la longitud del canal de 3mm de diámetro y longitud de 6mm con película reactiva de 100 nm de espesor a 10cm del foco del concentrador

Para la geometría del canal de 3mm de diámetro y 8mm de longitud, los resultados de la simulación se muestran en la figura 3.26. Se puede observar que es muy parecido el comportamiento con respecto a las gráficas de las figuras 3.24 y 3.25, con respecto al pico de 2200K. Solo que al final del canal llega a una temperatura de 1000K.

Para verificar lo anterior, se puede observar la tabla 3.14, donde se muestra la temperatura promedio, máxima y mínima, así como la desviación estándar del perfil de temperaturas de los canales de 8mm de largo. La temperatura puntual máxima varía entre 2600-2800K, y la temperatura puntual mínima se encuentra entre los 850-900K. La desviación estándar es un poco mayor para el canal de 6mm de largo, estando en un rango de entre los 410-430K.

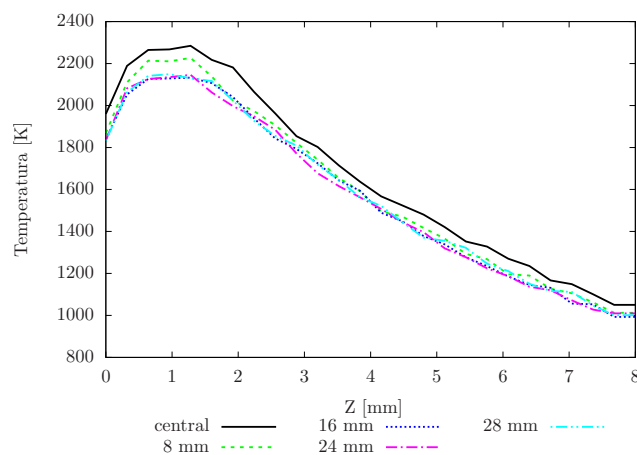


Figura 3.26: Temperatura perimetral promedio con respecto a la longitud del canal de 3mm de diámetro y longitud de 8mm con película reactiva de 100 nm de espesor a 10cm del foco del concentrador



Tabla 3.14: Temperatura promedio, desviación estándar, temperatura máxima y temperatura mínima del perfil de temperaturas en la superficie interna del poro de 3 mm de diámetro y 8mm de longitud para la simulación a 10cm del foco del concentrador con película reactiva de 100nm de espesor

Poros #	Radio (mm)	T. prom. (K)	$\sigma$ (K)	T. máx. (K)	T. mín (K)
0	0.00	1660.24	473.41	2832.93	743.16
1	4.00	1576.31	450.85	2675.23	815.72
7	8.00	1598.60	463.30	2758.92	821.72
19	12.00	1607.40	463.40	2694.54	841.06
37	16.00	1567.47	451.01	2662.09	799.49
61	20.00	1600.92	455.49	2706.80	844.87
91	24.00	1561.84	452.00	2671.24	810.71
127	28.00	1574.27	449.56	2700.81	839.40

### 3.3.0.3. Conclusiones de la simulaciones con película

Con el análisis de estas cosas, es posible comparar la influencia del cambio de la distancia con respecto al punto focal, mientras más cercano se esté, se obtendrán temperaturas más altas en la zona cercana a la entrada de la radiación.

Entre más largo es el canal, más disminuye la temperatura de las zonas alejadas. Esto se traduce en temperaturas medias más bajas y perfiles de temperatura no homogéneos; un canal corto es más fácil de calentar y homogeneizar

### 3.3.1. Comparación entre distintos espesores de película reactiva

Otro de los parámetros a modificar es la variación del espesor de la película de ferrita de zinc. Aunque desde la evaluación de las propiedades ópticas de las películas de  $ZnFe_2O_4$  en la subsección 3.1.2 se puede predecir que este parámetro no va a afectar a la simulación de transferencia de calor radiativa, se realizaron una serie de simulaciones para comparar directamente este parámetro.

Se tomo un mismo canal para hacer esta comparación, que es el canal central o poro 0, con un diámetro de 3mm y las tres distintas longitudes propuestas (6mm, 8mm y 15mm), para el caso donde el monolito se encuentra a 5cm de foco del HOSIER.

En la figura 3.27 se muestra la comparación de la temperatura perimetral promedio para la geometría de canal de 3mm de diámetro y 6mm de largo de canal, para los tres diferentes espesores de película delgada. En la gráfica se puede apreciar que la temperatura perimetral promedio coincide en los mismos puntos para los tres diferentes espesores de película.

Para la geometría de canal de 3mm de diámetro y 8mm de longitud pasa exactamente el mismo fenómeno. En la figura 3.28 se muestra la temperatura perimetral promedio

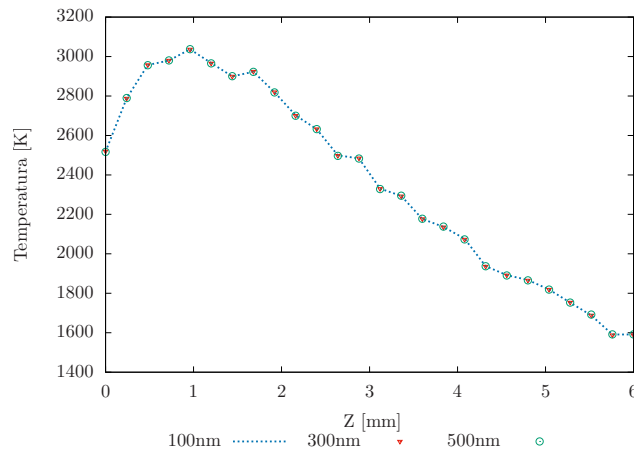


Figura 3.27: Temperatura perimetral promedio a lo largo del canal central de 6mm de largo para 100nm, 300nm y 500nm de espesor de película reactiva

del canal central o poro cero, para la geometría antes descrita. Se puede observar que la temperatura para los tres espesores de película coincide.

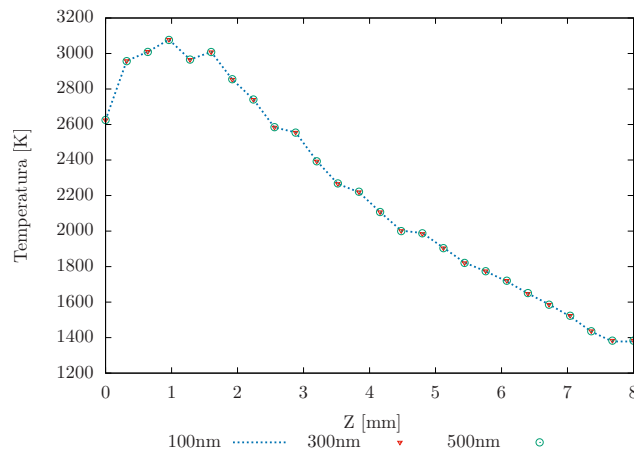


Figura 3.28: Temperatura perimetral promedio a lo largo del canal central de 8mm de largo para 100nm, 300nm y 500nm de espesor de película reactiva

Un comportamiento idéntico muestra la figura 3.29, que corresponde a la temperatura perimetral promedio del canal central para la geometría de 3mm de diámetro y 15mm de largo. Las temperaturas para los tres distintos espesores coinciden.

Con estos ejemplos, se puede concluir que el espesor de la película delgada de ferrita de zinc no es un parámetro a optimizar, ya que no hay diferencia entre los resultados obtenidos para los tres tipos de espesores. Como se explicaba anteriormente, esto se debe que, al ser la película delgada de ferrita de zinc muy transparente y mucho más delgada que el soporte, las propiedades de la zirconia dominan en el cálculo de las propiedades del sistema  $ZnFe_2O_4/ZrO_2$ .

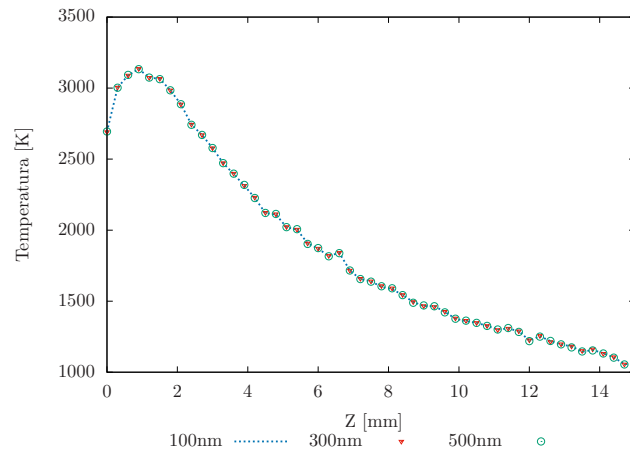


Figura 3.29: Temperatura perimetral promedio a lo largo del canal central de 15mm de largo para 100nm, 300nm y 500nm de espesor de película reactiva

### 3.3.2. Comparación con distinta apertura del atenuador

En los análisis anteriores se realizaron las simulaciones considerando que en el trazado de rayos no existe ninguna interferencia entre el helióstato y el conjunto de espejos que forman el concentrador del horno solar, es decir, que el atenuador se encuentra totalmente abierto.

En la siguiente sección se analizará el efecto del atenuador a distintos porcentajes de apertura. Se propone hacer aperturas de 5%, 20%, 40%, 60%, 80% y 100% para hacer este comparativo. Se toma como referencia el canal central o poro 0, para poder realizar las comparaciones. Al igual que en los ejercicios anteriores, se toman tres geometrías del canal y 2 posiciones con respecto al foco del horno solar.

#### 3.3.2.1. 5cm fuera de foco

El primer caso a analizar es el de una geometría de canal de 3mm de diámetro y 6mm de longitud colocando el monolito poroso a 5cm del foco del HOSIER. En la figura 3.30 se muestra la temperatura perimetral promedio para el canal central para las distintas aperturas del atenuador. Para la apertura de 5% se puede observar una curva de temperatura casi constante dentro de un rango entre los 900-1400K.

Al aumentar la apertura del atenuador a 20%, se empieza a notar el pico de temperatura 1mm alejado de la entrada de la radiación. El rango de temperatura alcanzado aumenta y ronda entre los 1000-2000K, la cuál ya se encuentra dentro del rango de temperatura de la reacción de oxidación de la ferrita de zinc, ya que Kaneko et al. (2004) reporta que partir de los 900K se empieza a registrar el desplazamiento del oxígeno ( $O_2$ )

Para una apertura de 40%, el rango de temperatura que se obtiene esta 1500-2300K, temperaturas que se encuentran también en el rango ideal de la reacción de reducción de la ferrita de zinc. Para la apertura de 60% se puede observar que se encuentra en un rango

1800-2600K, que al parecer en este rango de temperaturas tiene como límite inferior la temperatura ideal de la reacción de reducción.

Si se observa las líneas correspondientes a la apertura de 80% y 100%, se puede percatar que sobrepasa el rango requerido por la reacción. Para la apertura de 80% son 1900-2800K. Para la apertura del 100% se ha descrito ya anteriormente en los primeros análisis de este capítulo.

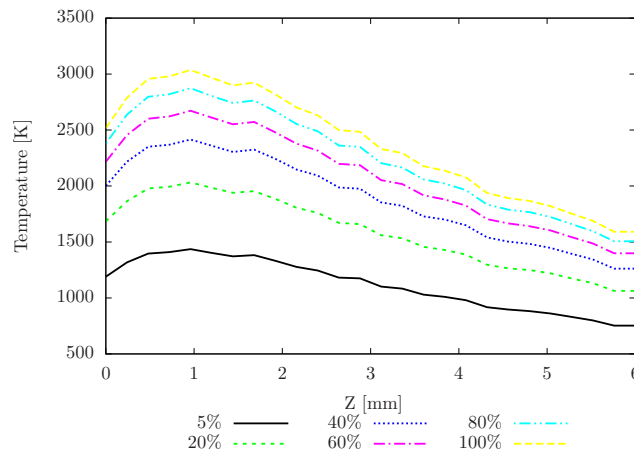


Figura 3.30: Temperatura perimetral promedio a lo largo del canal central de 6mm de largo para diferentes aperturas del atenuador del Horno Solar, a 5cm de su foco

En la figura 3.31 se muestra el resultado para el caso de un canal de geometría de 3mm de diámetro y 8mm de largo. Los límites superiores del rango de temperatura obtenidos son los mismos que los enunciados para el canal de 6mm de largo. Sin embargo, los límites inferiores disminuyen aproximadamente entre 100 y 200K. De nueva cuenta las aperturas de 20% y 40% parecen ser las que más se ajustan al rango de temperatura de la reacción de reducción.

Para la geometría de 3mm de diámetro y 15mm de largo, los resultados se muestran en la figura 3.32. Tiene la misma tendencia, sólo que el límite inferior del rango baja aún más, entre 200-300K comparado con el de la geometría de 6mm de largo. Como los límites inferiores para la apertura de 20% y 40% son 1000K y 1200K respectivamente, por ello todavía es un rango dentro de las temperaturas sugeridas para realizar la reducción de la ferrita de zinc. Sin embargo, va a existir un gradiente de temperaturas considerable entre la entrada de la radiación al canal y el final de este.

### 3.3.2.2. 10 cm fuera de foco

Alejando el monolito 10cm del foco del concentrador, se obtienen en general menores temperaturas. En la figura 3.33 se muestran los resultados de la simulación del poro central a diferentes aperturas para la geometría de canal de 3mm de diámetro y 6mm de largo. Para la apertura de 5% alcanza apenas un rango entre los 600-1000K, rango de tem-

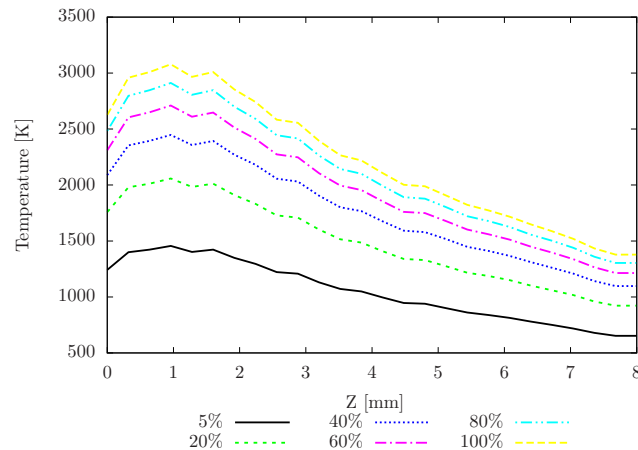


Figura 3.31: Temperatura perimetral promedio a lo largo del canal central de 8mm de largo para diferentes aperturas del atenuador del Horno Solar, a 5cm de su foco

peraturas insuficiente para realizar la reducción de ferrita de zinc. La apertura de 20% cae en el rango, pero no alcanza la temperatura ideal, ya que va de 1000-1400K.

Para la apertura de 40% se puede observar que el rango de temperaturas va de los 1200-1700K. Este rango de temperaturas está dentro del rango necesario para que empiece la reacción, aunque no sobrepase los 1500K recomendados. Para la apertura de 60% el rango de temperaturas alcanzado está entre los 1300-1900K. En esta apertura se llega en una parte encima de la temperatura óptima para llevar a cabo la reacción.

Para la apertura de 80% el rango de temperatura se encuentra entre 1400-2100K, mientras que la apertura de 100% ya se ha analizado en el bloque anterior.

Se puede observar que partir de la apertura de 60% se obtienen los rangos de temperatura necesarios para llevar a cabo la reacción de oxidación. Se debe de considerar el límite de 80% para no superar el punto de fusión de la base de  $ZrO_2$ , que es de 2950K (Linstrom & Mallard 2001)

Para la geometría de canal con diámetro de 3mm y longitud de 8mm, los límites superiores de los rangos de temperatura se mantienen igual con respecto al canal de 6mm de largo con la misma apertura. Sin embargo, los límites inferiores de los rangos de temperatura bajan entre 100-200K con respecto al mismo caso de apertura del canal de 6mm de longitud. Lo anteriormente descrito se puede apreciar en la figura 3.34

En última instancia se analiza el caso con geometría de 3mm de diámetro y 15mm de longitud. En la figura 3.35 se muestra la temperatura promedio para el poro central para este caso. De la misma forma que en las geometrías de 6 y 8mm de longitud, se mantienen los mismos límites superiores del rango de temperaturas, pero los límites inferiores bajan entre 200-300K con respecto a la geometría de 6mm de longitud.

En general, la geometría de 15mm de largo, ya sea a 5cm o a 10cm del foco del horno solar, se descarta como geometría óptima, ya que, a pesar de llegar al rango de temperatura deseado, el gradiente de temperatura es mayor en comparación a las otras dos longitudes. Y al tener gradientes de temperatura tan altos puede provocar la fractura del

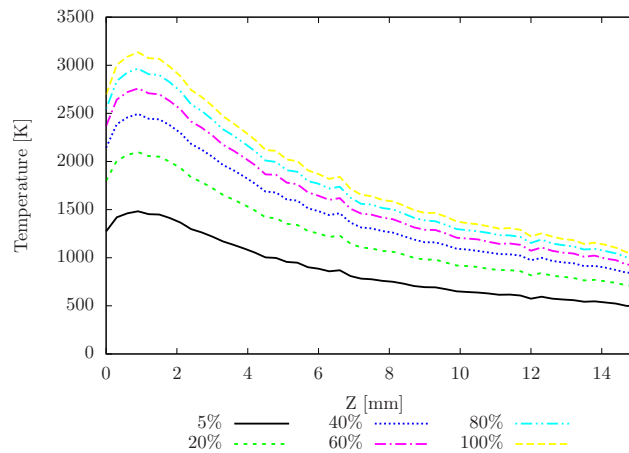


Figura 3.32: Temperatura perimetral promedio a lo largo del canal central de 15mm de largo para diferentes aperturas del atenuador del Horno Solar, a 5cm de su foco

material

### 3.3.3. Geometría recomendada para la reducción de ferrita de zinc

El rango de temperatura deseado se puede obtener en la geometría de 6mm de largo, ya sea a 5cm del foco abriendo un 40% el atenuador del horno del HOISER. También se puede llevar al rango de temperatura colocando el monolito poroso a 10cm de foco del concentrador abriendo el atenuador del HOISER por encima del 60% hasta un 80%.

En seguida se muestran los perfiles de temperatura de algunos de los canales para los casos en donde se tiene un buen rango de temperatura para llevar a cabo la reacción de reducción de ferrita de zinc. Los casos son los siguientes:

- Canal con geometría de 3mm de diámetro y 6mm de longitud, colocando el monolito a 5cm del foco del concentrador y apertura del atenuador de 40%.
- Canal con geometría de 3mm de diámetro y 6mm de longitud, colocando el monolito a 10cm del foco del concentrador y apertura del atenuador de 60%.

Para el primer caso, 40% de apertura a 5cm del foco del Horno Solar, en la figura 3.36 los perfiles de temperatura en la superficie interna de distintos canales para este caso. En todos los perfiles se puede notar una región en donde se encuentran las más altas temperaturas alrededor de los 2800K, esta región comprende de la entrada del canal hasta una longitud de 3mm. En contraparte se puede observar que a partir de la zona de los 3mm de longitud hasta el final del canal, la temperatura empieza a disminuir, pero la temperatura no disminuye por debajo de los 1000K.

También se puede observar que la temperatura en general va disminuyendo conforme la posición del canal se encuentre más lejana del centro del poro. Esto puede apreciarse

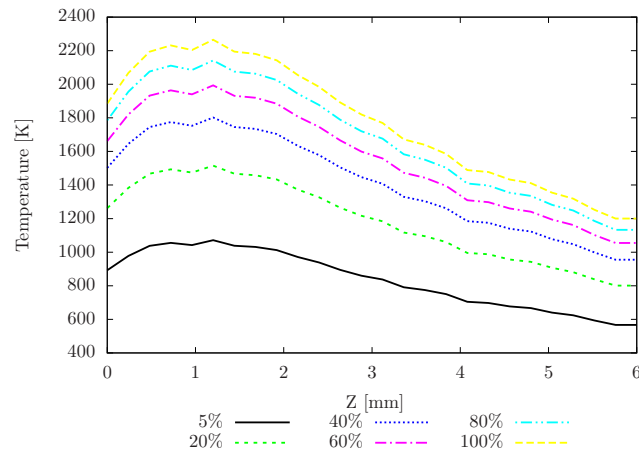


Figura 3.33: Temperatura perimetral promedio a lo largo del canal central de 6mm de largo para diferentes aperturas del atenuador del Horno Solar, a 10cm de su foco

de una mejor manera en la figura 3.37. El perfil de temperatura perimetral promedio va disminuyendo mientras el poro se va alejando del centro del monolito.

Como se puede observar en la tabla 3.15 el promedio de temperatura ronda los 1700-1880K en los distintos canales, que es muy cercano ya a la temperatura donde se tiene prácticamente una eficiencia del 100% de la reacción de reducción de la ferrita de zinc (Tamura & Kaneko 2005). Aunque las temperaturas máximas en algunos de los canales superen los 2800K, realmente son pocos los diferenciales de área en el mallado que superan tal temperatura. La parte positiva es que en casi todos los canales la temperatura mínima puntual no disminuye de los 900K, que es una temperatura en la que se asegura que ya hay reacción de reducción.

Tabla 3.15: Temperatura promedio, desviación estándar, temperatura máxima y temperatura mínima del perfil de temperaturas en la superficie interna del poro de 3 mm de diámetro y 6mm de longitud para la simulación a 5cm del foco del concentrador y apertura de 40% con película reactiva de 100nm de espesor

Poros #	Radio (mm)	T. prom. (K)	$\sigma$ (K)	T. máx. (K)	T. mín (K)
0	0.00	1879.15	462.31	3121.34	864.74
1	4.00	1837.55	456.70	3042.35	974.75
7	8.00	1832.37	459.43	2948.28	975.30
19	12.00	1820.74	453.30	2954.79	963.25
37	16.00	1803.95	449.57	2876.83	933.54
61	20.00	1748.23	436.58	2833.63	929.32
91	24.00	1734.59	437.42	2833.79	928.65
127	28.00	1719.73	420.63	2703.39	919.66

Ahora para el caso donde la distancia al foco es de 10cm y una apertura de 60%, los

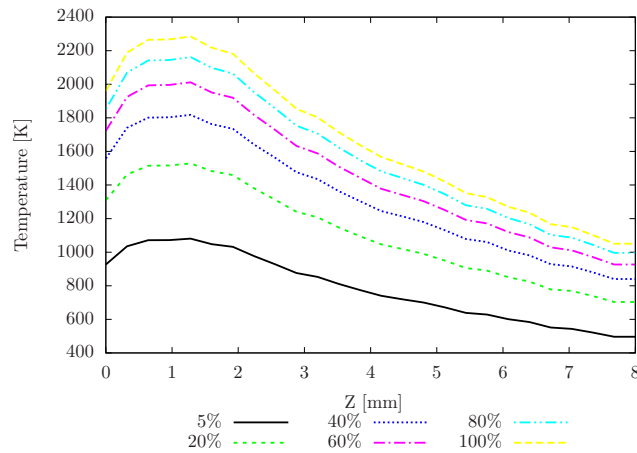


Figura 3.34: Temperatura perimetral promedio a lo largo del canal central de 8mm de largo para diferentes aperturas del atenuador del Horno Solar, a 10cm de su foco

perfiles de temperatura obtenidos se muestran en la figura 3.38. Al igual que en caso anterior, hay una zona de alta temperatura entre la entrada del canal hasta los 3mm de largo. Pero la temperatura a la máxima alcanzada según estos perfiles no son mayores a 2400K.

De igual manera mientras el canal se encuentra más lejos del centro disminuirá su temperatura, pero en este caso va a ser en menor medida, esto se puede observar con mayor claridad en la figura 3.39, donde se muestra el perfil de temperatura perimetral promedio. Basicamente todos los canales tienen una diferencia mínima con respecto a su posición radial.

La temperatura promedio ronda entre los 1450-1570K para todos los canales, como se puede apreciar en la tabla 3.16. Según Kaneko et al. (2004), 1500K es la temperatura en donde empieza a producir el oxígeno según cálculos termodinámicos. Para este caso encontramos una distribución de temperaturas más homogéneas, ya que los valores de desviación estándar son menores que los presentados en la tabla 3.15. Solo para un canal la temperatura máxima sobrepasa a lo mostrado en la figura 3.38. Con respecto a la temperatura mínima, se tiene reportada temperaturas mínimas por debajo de los 900K, que se localizan en la parte más lejana de la entrada de la radiación. Es muy probable que en las zonas que se encuentren por debajo de los 900K no se lleve a cabo la reacción, por lo cual se desperdiciaría reactivo.

En ambos casos teóricamente se podría llevar a cabo la reacción de reducción de ferrita de zinc. Un cuestionamiento queda abierto sobre cuál es el impacto a la reacción por las zonas donde la temperatura llega hasta los 2800K, en el caso donde el monolito se pone a 5cm del foco del concentrador.



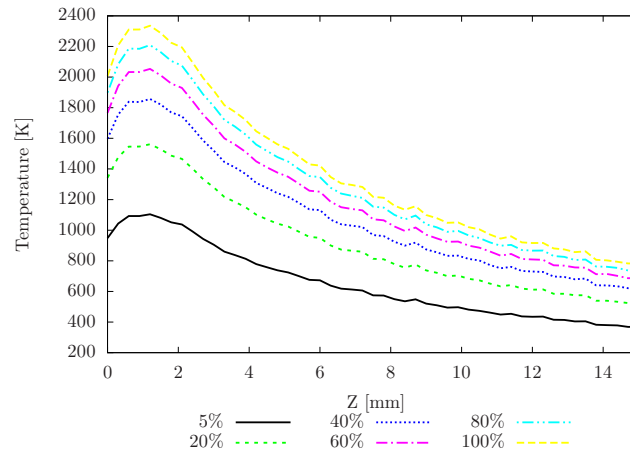


Figura 3.35: Temperatura perimetral promedio a lo largo del canal central de 15mm de largo para diferentes aperturas del atenuador del Horno Solar, a 10cm de su foco

Tabla 3.16: Temperatura promedio, desviación estándar, temperatura máxima y temperatura mínima del perfil de temperaturas en la superficie interna del poro de 3 mm de diámetro y 6mm de longitud para la simulación a 10cm del foco del concentrador y apertura de 60% con película reactiva de 100nm de espesor

Poros #	Radio (mm)	T. prom. (K)	$\sigma$ (K)	T. máx. (K)	T. mín (K)
0	0.00	1556.70	383.11	2524.62	733.66
1	4.00	1478.84	366.32	2407.80	786.94
7	8.00	1503.81	377.12	2475.94	791.07
19	12.00	1505.60	378.26	2368.60	797.30
37	16.00	1476.52	364.76	2342.13	786.53
61	20.00	1501.25	369.10	2374.59	791.86
91	24.00	1468.5976	368.8459	2435.53	759.84
127	28.00	1477.49	363.41	2355.74	791.36

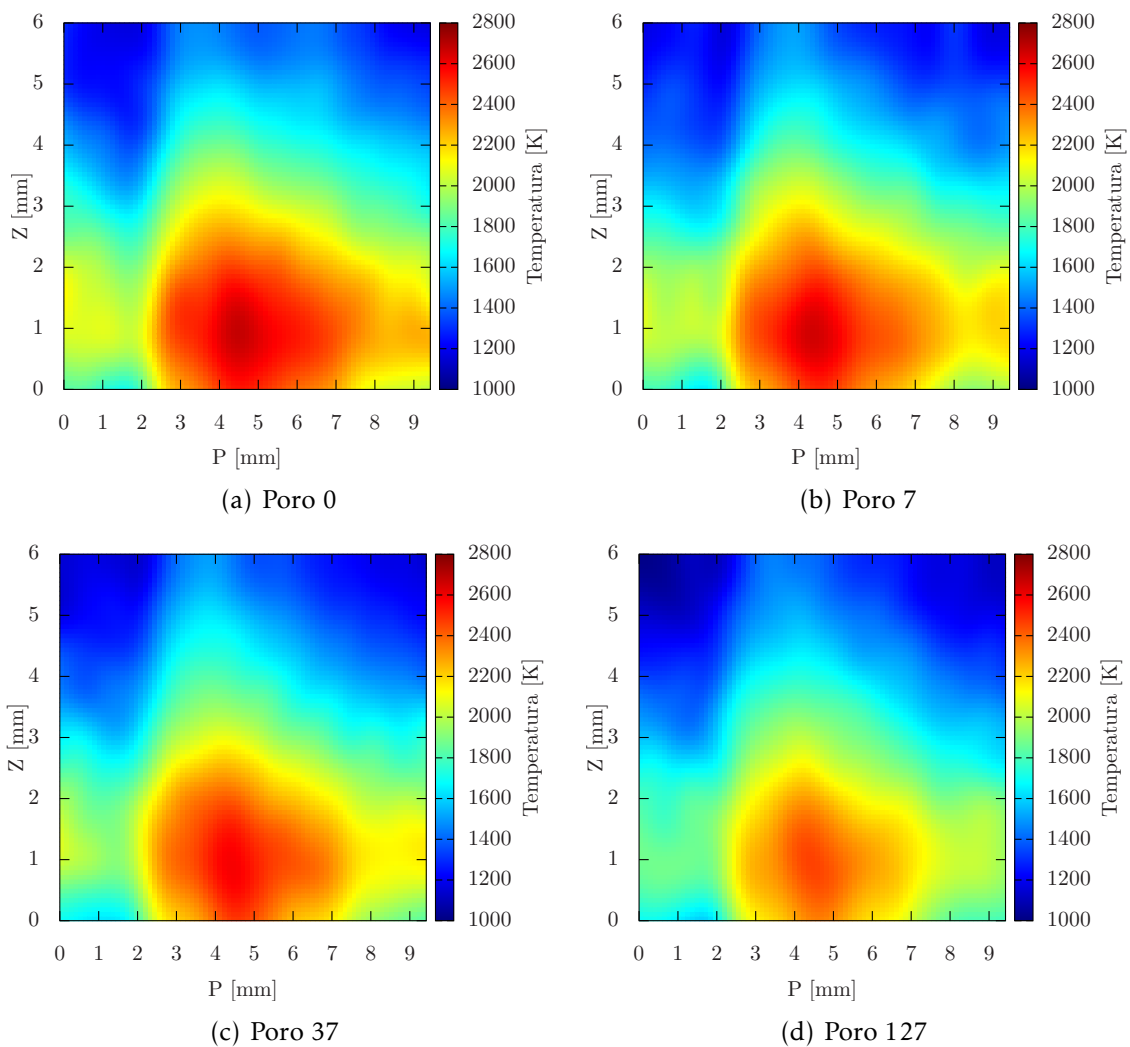


Figura 3.36: Perfiles de temperatura de distintos canales para una geometría de canal de 3mm de diámetro y 6mm de longitud, colocando el monolito a 5cm de foco y una apertura del atenuador del 40 %

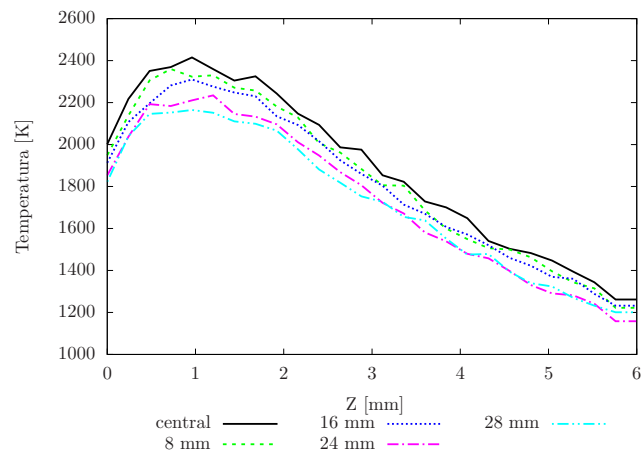


Figura 3.37: Temperatura perimetral promedio con respecto a la longitud del canal de 3mm de diámetro y longitud de 6mm con película reactiva de 100 nm de espesor a 5cm del foco del concentrador y 40% de apertura del concentrador

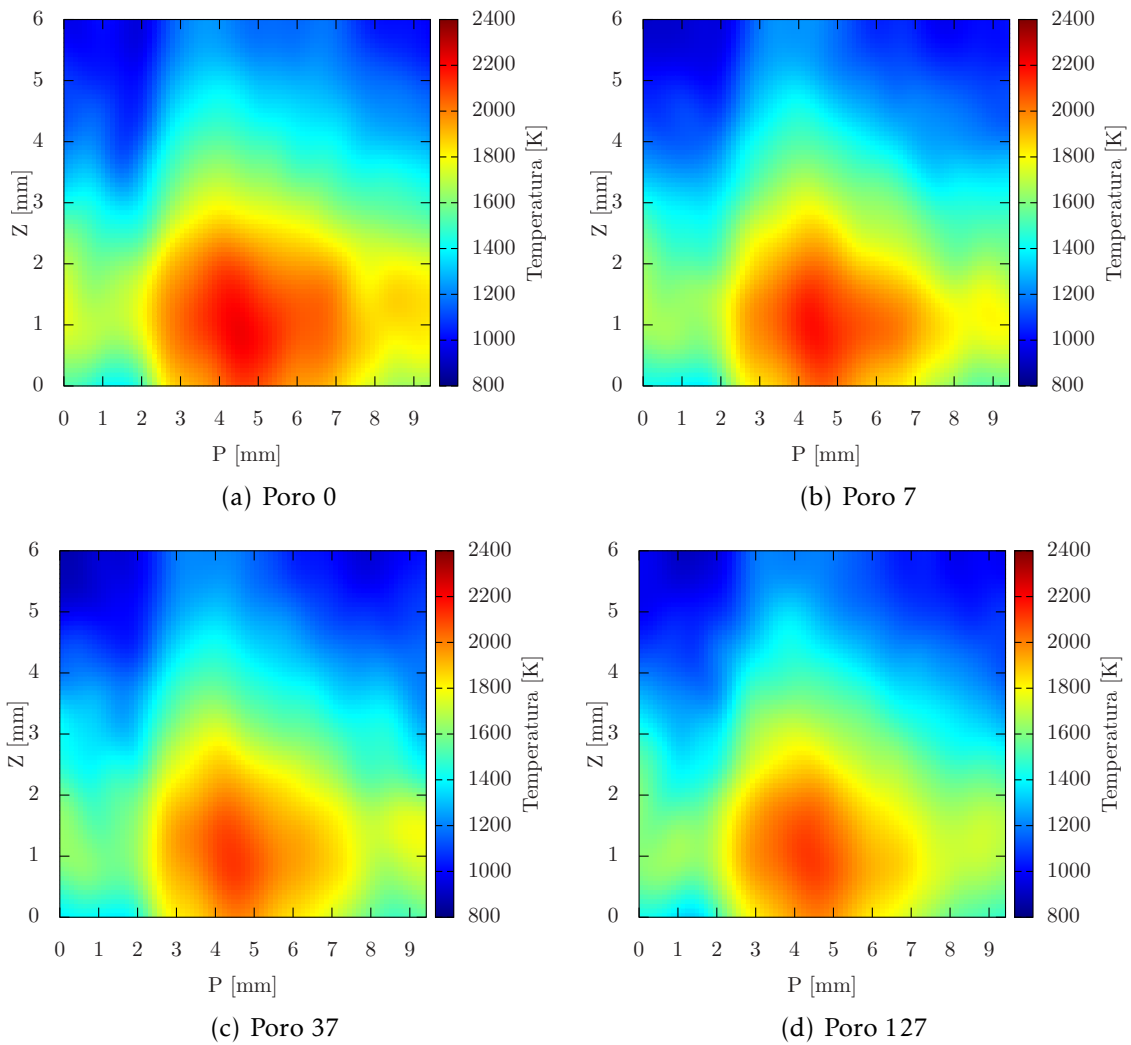


Figura 3.38: Perfiles de temperatura de distintos canales para una geometría de canal de 3mm de diámetro y 6mm de longitud, colocando el monolito a 10cm de foco y una apertura del atenuador del 60%

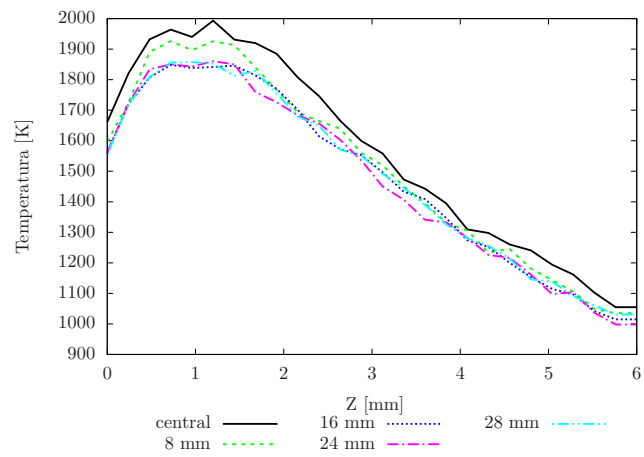


Figura 3.39: Temperatura perimetral promedio con respecto a la longitud del canal de 3mm de diámetro y longitud de 6mm con película reactiva de 100 nm de espesor a 10cm del foco del concentrador y 60% de apertura del concentrador

---

## Capítulo 4

# Conclusiones

---

En este trabajo se analizó la transferencia de calor radiativa en el interior de un reactor de absorción solar basado en un medio poroso de zirconia recubierto con una película delgada de ferrita de zinc. Con el fin de realizar este análisis se desarrolló un código computacional en lenguaje C, donde se realiza un trazado de rayos por el método Monte Carlo, tanto para el seguimiento de los rayos provenientes del concentrador solar como de la energía emitida por el soporte y la película. En el mismo código se ejecuta el balance radiativo de energía para calcular la temperatura de la superficie interna del canal.

Se realizaron simulaciones en donde se consideraba al soporte de zirconia sin la película reactiva, con el fin de evaluar el efecto de colocar el monolito poroso en la zona focal y fuera de ella, así como evaluar parámetros geométricos del receptor de zirconia. Se encontró que al posicionar el medio poroso en el foco del concentrador, se obtienen perfiles con altas temperaturas en los canales cercanos al centro del receptor, pero mientras los canales se van alejando del centro del receptor los valores de la distribución de temperaturas serán menores.

Al posicionar el receptor, ya sea 5cm o 10cm, se encontró que se obtenían perfiles de temperatura más cercanos con respecto a la posición radial de los canales del monolito de zirconia. Por esto, es altamente recomendable sacar el receptor del foco del concentrador para obtener una distribución de radiación y temperatura más homogénea.

Se hicieron pruebas modificando: el diámetro de canal y la longitud de canal. En cuanto al canal, se obtuvieron los perfiles de temperatura más homogéneos con un diámetro de canal de 3mm. Mientras que para el parámetro de longitud se encontró que un canal de 6mm de largo presenta la distribución más homogénea, ya que mientras aumentaba el largo, menos radiación penetraba al fondo del canal. Por ello no se llegan a alcanzar las altas temperaturas que pueden alcanzar los canales cerca de la entrada de la radiación solar.

Al agregar la película de ferrita de zinc, nos pudimos percatar de la importancia de la estimación de las propiedades ópticas de los materiales involucrados en el trazado de rayos. Al comparar las simulaciones sin película de óxido metálico con las que si la tenían, se pudo observar un cambio drástico en la temperatura obtenida. Esto es debido a que las propiedades ópticas de la zirconia fueron medidas de manera experimental, haciendo incidir un haz de luz normal, mientras que al calcular las propiedades ópticas por medio del método de la matriz característica, se obtuvieron propiedades ópticas en función del

ángulo de incidencia del haz de luz. Las propiedades ópticas de los materiales son un parámetro sensible para realizar este tipo de simulaciones.

Al variar el espesor de la película de ferrita de zinc, no hubo ninguna variación en los perfiles de temperatura calculados. Esto se debe que al calcular las propiedades ópticas del sistema  $ZnFe_2O_4/ZrO_2$  por el método de la matriz característica, pesaba más las propiedades de la zirconia porque el espesor de la capa de zirconia era mucho más gruesa que la de la película de ferrita de zinc, y también para los espesores que se propusieron, la película es muy transparente.

Al final se encontraron dos condiciones o casos en los que se recomiendan realizar la reacción de reducción de ferrita de zinc. Los parámetros geométricos fueron los mismos, 3mm de diámetro y 6mm de largo. El primer caso es colocar a 5cm del foco del concentrador el receptor y abrir hasta un 40% el atenuador de HOISER. El segundo caso es posicionar el monolito de zirconia a 10cm del foco del horno solar, y abrir el atenuador al 60%.

Debido a que en este trabajo únicamente se considero la transferencia de calor radiativa, como trabajo a futuro se propone incluir en el balance de energía del receptor transferencia por conducción a través del monolito. También sería importante incluir las pérdidas por convección debido al flujo de argón dentro del reactor. Al incluir estos dos mecanismos al problema se podría analizar el efecto en el perfil de temperaturas y el peso de cada uno de los tres mecanismos de transferencia de calor en esta situación.

En este trabajo, se partió de que se encuentra el sistema en el estado estacionario. Como un nuevo aporte, se podría integrar la dependencia con el tiempo e incluir la cinética de la reacción de reducción. Así se podría estimar el tiempo de operación necesario para reducir la ferrita de zinc y poder continuar con el siguiente paso del ciclo.

---

---

# Apéndice A

## Propiedades Ópticas

---

### A.1. Cálculo de índice de refracción

Para obtener el índice de refracción y el coeficiente de extinción para la ferrita de zinc y el dióxido de zirconio, se utilizaron diversas fuentes para cubrir un rango de longitud de onda de 0.1 a  $10\mu m$ .

Del trabajo de Shimada et al. (2004) se obtienen las propiedades ópticas de  $ZnFe_2O_4$  para el rango de longitud de 2.5 a  $10\mu m$ . Y del trabajo de Pecharroman et al. (1996) se obtiene las propiedades ópticas para el rango de longitud de onda de 0.8 a  $10\mu m$ . Las dos referencias citadas tienen en común el método de cálculo, ya que utilizan la relación de Lyddane-Sachs-Teller, que se muestra en la ecuación (A.1), de donde se calcula la permitividad  $\epsilon$  del material con el número de onda con los siguientes parámetros: la permitividad a altas frecuencias  $\epsilon_\infty$ , la frecuencia o número de onda  $\omega$ , las frecuencias longitudinal  $\Omega_{jLO}$  y transversal  $\Omega_{jTO}$ , y los factores de amortiguamiento longitudinal  $\gamma_{jLO}$  y transversal  $\gamma_{jTO}$ . En la tabla A.1 se muestran los parámetros utilizados en la ecuación (A.1) tanto para el dióxido de zirconio como para la ferrita de zinc.

$$\epsilon = \epsilon_\infty \prod_{j=1}^n \frac{\Omega_{jLO}^2 - \omega - i\omega\gamma_{jLO}}{\Omega_{jTO}^2 - \omega - i\omega\gamma_{jTO}} \quad (A.1)$$

El índice de refracción complejo tiene como parte real al índice de refracción, y en la parte imaginaria al coeficiente de extinción, como se muestra en la ecuación (A.2).

$$n_{complex} = n + i\kappa \quad (A.2)$$

La permitividad calculada con la ecuación (A.1) se relaciona con el índice de refracción complejo del material como se muestra en la ecuación (A.3).

$$n_{complex} = \sqrt{\epsilon} \quad (A.3)$$

La reflectancia a cierta frecuencia (o longitud de onda, ya que es su inverso), se calcula como se muestra en la ecuación (A.4).



$$r = \left| \frac{\epsilon^2 - 1}{\epsilon^2 + 1} \right| \quad (\text{A.4})$$

Tabla A.1: Permitividad a altas frecuencias, frecuencias y factores de amortiguamiento para la  $ZnFe_2O_4$  (Shimada et al. 2004) y  $ZrO_2$  (Pecharroman et al. 1996)

Compuesto	$ZnFe_2O_4$				$ZrO_2$			
$\epsilon_\infty$	4.974				4.3			
n	$\Omega_{jLO}$	$\gamma_{jLO}$	$\Omega_{jTO}$	$\gamma_{jTO}$	$\Omega_{jLO}$	$\gamma_{jLO}$	$\Omega_{jTO}$	$\gamma_{jTO}$
1	340.80	10.29	310.70	32.70	232.00	119.00	164.00	97.00
2	360.50	119.00	340.80	64.16	354.00	95.00	339.00	69.00
3	486.50	31.41	360.50	18.65	650.00	139.00	467.00	106.00
4	629.60	21.48	529.30	26.11	581.00	39.00	580.00	35.00
5					734.00	113.00	672.00	172.00

Para calcular el índice de refracción del óxido de zirconio en el rango de longitud de onda de 0.1 a  $0.8\mu m$ , se utiliza la ecuación de tres términos de Sellmeier propuesta por Wood & Nassau (1982), que se muestra en la ecuación (A.5). Las constantes  $A_i$  y  $L_i$  son constantes de ajuste, y se muestran en la tabla A.2 y  $\lambda$  es la longitud de onda en  $\mu m$ .

$$n^2 = 1 + \sum_{i=1}^3 \frac{A_i \lambda^2}{\lambda^2 - L_i^2} \quad (\text{A.5})$$

En donde las constantes  $A_i$  y  $L_i$  son constantes de ajuste que se muestran en la tabla,  $\lambda$  es la longitud de onda en micrómetros para el cuál se esta calculando el índice de refracción  $n$ .

Tabla A.2: Constantes utilizadas en la ecuación de tres términos de Sellmeier para el calculo del índice de refracción de la zirconia (Wood & Nassau 1982)

Constante	Valor	Constante	Valor
$A_1$	2.117788	$L_1$	0.166739
$A_2$	1.347091	$L_2$	0.062543
$A_3$	9.452943	$L_3$	24.320570

Para el coeficiente de extinción de  $ZrO_2$  en el rango de longitud de onda de 0.1 a  $0.8\mu m$  se utilizan directamente los datos que se encuentran en el trabajo de Boulouz et al. (1998).

Y por último para las propiedades ópticas de  $ZnFe_2O_4$  en un rango de longitud de onda de 0.1 a  $2.5\mu m$  se utilizan directamente los datos que se encuentran en el trabajo de Sultan & Singh (2009).

Al aplicar todo lo dicho anteriormente, obtenemos los parámetros necesarios para calcular las propiedades ópticas de la película de  $ZnFe_2O_4$  y del soporte e  $ZrO_2$ . En la figura A.1 se muestra el índice de refracción para ambos materiales. Y en la figura A.2 se muestra en coeficiente de extinción para ambos materiales.

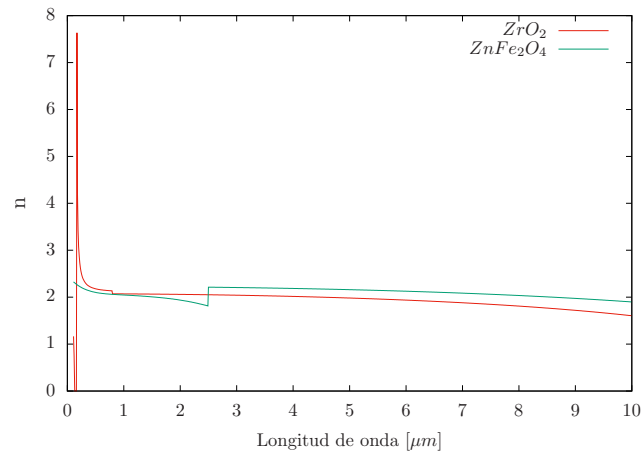


Figura A.1: Índices de refracción para  $ZrO_2$  y  $ZnFe_2O_4$  utilizados para calcular las propiedades ópticas con el método de la matriz característica

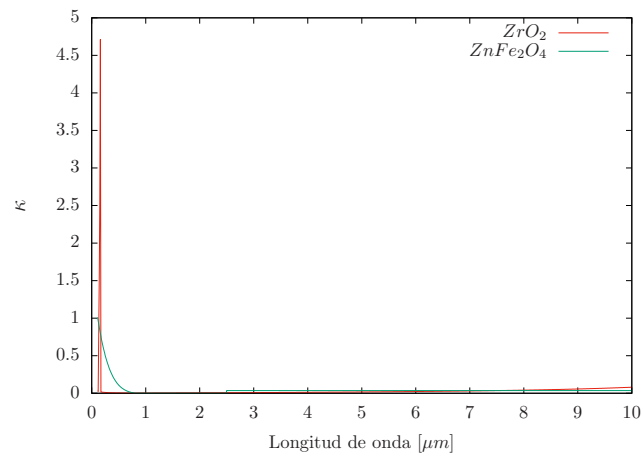


Figura A.2: Coeficientes de extinción para  $ZrO_2$  y  $ZnFe_2O_4$  utilizados para calcular las propiedades ópticas con el método de la matriz característica



---

## Apéndice B

# Pruebas de independencia

---

### B.1. Prueba de independencia de rayos

Para determinar el número de rayos que se utilizaron en las simulaciones, se realizó un estudio de independencia de rayos. Este estudio consistió en variar el número de rayos para una malla fija de 2500 elementos de la superficie para un canal cilíndrico de 3mm de diámetro y 15mm de longitud, sin tapas, al que se le hizo entrar 1000W de potencia de manera difusa. El número de fotones fue variando desde 100 a  $1 \times 10^9$ .

En la figura B.1 se muestra la temperatura promedio en función del número de rayos. Se puede notar que la temperatura comienza a permanecer casi constante a partir de los 100,000 rayos.

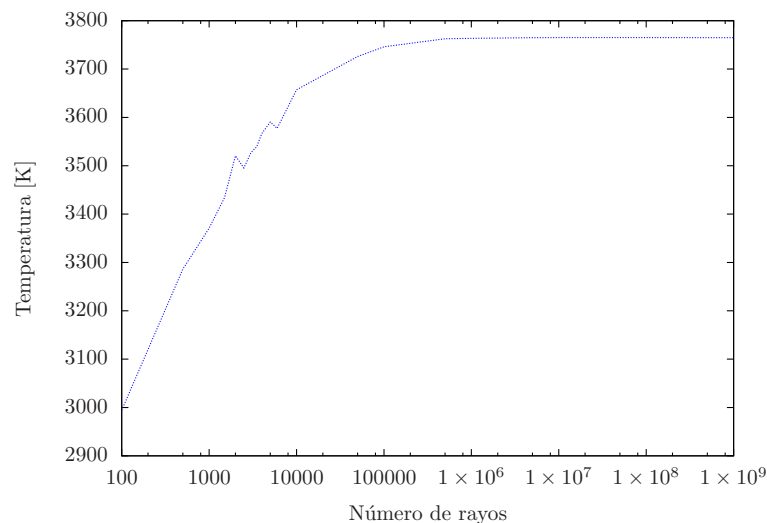


Figura B.1: Temperatura promedio del canal en función del número de rayos.

De igual forma, se contabilizó la potencia absorbida por la superficie del canal cilíndrico. En la figura B.2 se muestra la potencia absorbida en función del número de rayos. Del mismo modo se nota que a partir de los 100,000 rayos, la potencia que se absorbe en la superficie del cilindro es prácticamente constante.

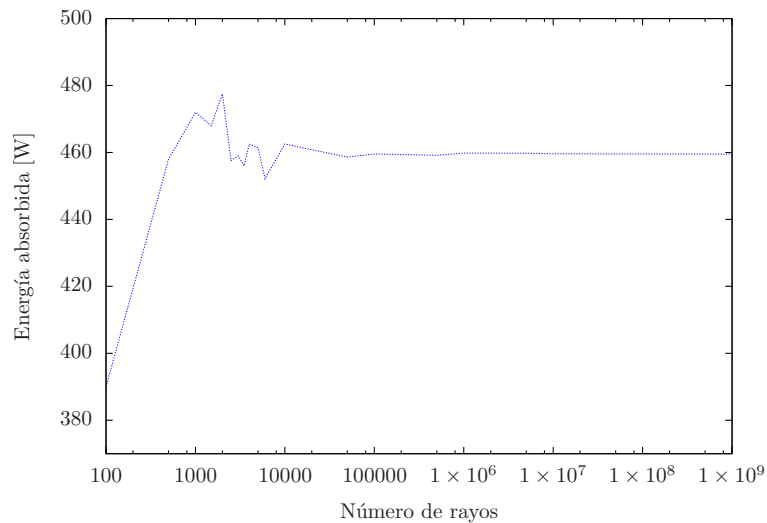


Figura B.2: Potencia absorbida en función del número de rayos

En vista de estos resultados, se decidió multiplicar la información proveniente del software Tonalli para que en cada uno de los canales del monolito cayeran del orden de 3 millones de rayos.

## B.2. Prueba de independencia de malla

Para las simulaciones realizadas, se utilizó una malla compuesta de 2500 elementos de superficie. Para elegir esta malla, se realizó un estudio de independencia de malla. Este análisis se realizó calculando la potencia absorbida dentro de un canal cilíndrico de 3mm de diámetro y 15mm de longitud, sin tapas, al que se le hizo entrar 1000W de potencia de manera difusa.

En la figura B.3 se muestra la relación entre la potencia absorbida y el número de elementos de superficie. Se puede observar que el tamaño de la malla es independiente de la radiación absorbida, ya que para todos los tamaños de malla se absorbe la misma cantidad de energía.

Sin embargo, se calculó también la temperatura al equilibrio radiativo. En la figura B.4 la temperatura promedio en función del número de elementos de la malla. Se puede notar que, aproximadamente, que cuando la malla tiene 100 elementos, la gráfica comienza a aparecer una constante.

Debido a estos resultados y para ahorrar recursos computacionales, se decidió utilizar una malla de 2500 elementos de superficie.

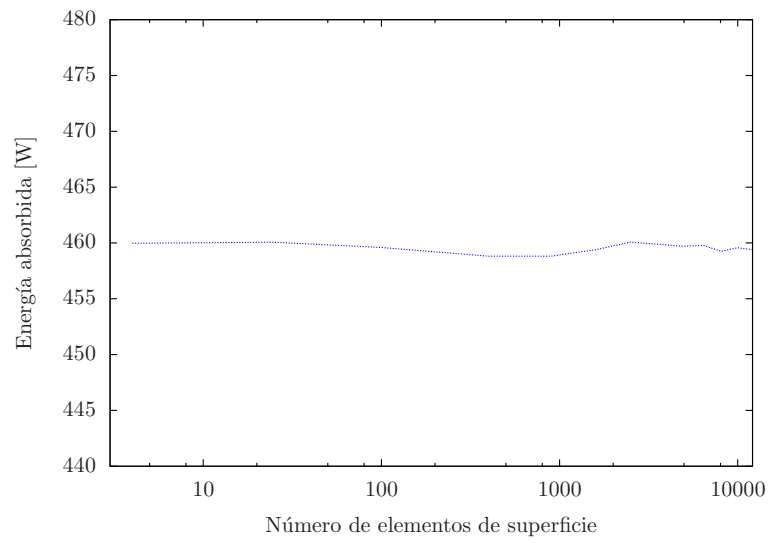


Figura B.3: Potencia absorbida en función del número de elementos de la malla

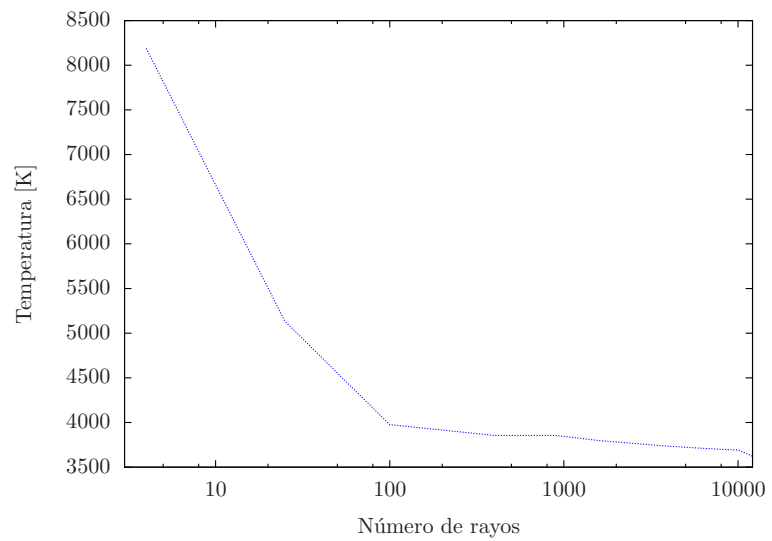


Figura B.4: Temperatura promedio en función del número de elementos de la malla



## Referencias

---

- Abanades, S., Charvin, P., Flamant, G. & Neveu, P. (2006), 'Screening of water-splitting thermochemical cycles potentially attractive for hydrogen production by concentrated solar energy', *Energy* **31**(14), 2805–2822.
- Agrafiotis, C. C., Pagkoura, C., Lorentzou, S., Kostoglou, M. & Konstandopoulos, A. G. (2007), 'Hydrogen production in solar reactors', *Catalysis today* **127**(1), 265–277.
- Agrafiotis, C., Roeb, M. & Sattler, C. (2015), 'A review on solar thermal syngas production via redox pair-based water/carbon dioxide splitting thermochemical cycles', *Renewable and Sustainable Energy Reviews* **42**, 254–285.
- Akolkar, A. & Petrasch, J. (2011), 'Tomography based pore-level optimization of radiative transfer in porous media', *International Journal of Heat and Mass Transfer* **54**(23), 4775–4783.
- Alonso, E. & Romero, M. (2015), 'Review of experimental investigation on directly irradiated particles solar reactors', *Renewable and Sustainable Energy Reviews* **41**, 53–67.
- Aoki, H., Kaneko, H., Hasegawa, N., Ishihara, H., Suzuki, A. & Tamaura, Y. (2004), 'The ZnFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/ZnO+Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> system for H<sub>2</sub> production using concentrated solar energy', *Solid State Ionics* **172**(1), 113–116.
- Argento, C. & Bouvard, D. (1996), 'A ray tracing method for evaluating the radiative heat transfer in porous media', *International journal of heat and mass transfer* **39**(15), 3175–3180.
- BALDERRAMA, I. V. et al. (n.d.), Metodos numericos/rafael iriarte v. balderrama., Technical report, UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO. FACULTAD DE INGENIERIA.
- Beltrán Rodríguez, L., Alexandri Rionda, R., Herrera Romero, J. & Ojeda Galicia, O. (2015), Balance nacional de energía 2014, Technical report, Secretaría de Energía.
- Bideau-Mehu, A., Guern, Y., Abjean, R. & Johannin-Gilles, A. (1981), 'Measurement of refractive indices of neon, argon, krypton and xenon in the 253.7–140.4 nm wavelength



- range. dispersion relations and estimated oscillator strengths of the resonance lines', *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **25**(5), 395–402.
- Born, M. & Wolf, E. (2000), *Principles of optics: electromagnetic theory of propagation, interference and diffraction of light*, CUP Archive.
- Boulouz, M., Boulouz, A., Giani, A. & Boyer, A. (1998), 'Influence of substrate temperature and target composition on the properties of yttria-stabilized zirconia thin films grown by rf reactive magnetron sputtering', *Thin Solid Films* **323**(1), 85–92.
- Chen, X., Xia, X.-l., Dong, X.-h. & Dai, G.-l. (2015), 'Integrated analysis on the volumetric absorption characteristics and optical performance for a porous media receiver', *Energy Conversion and Management* **105**, 562–569.
- Coelho, P., Goncalves, J., Carvalho, M. & Trivic, D. (1998), 'Modelling of radiative heat transfer in enclosures with obstacles', *International Journal of Heat and Mass Transfer* **41**(4-5), 745–756.
- Furler, P., Scheffe, J. R. & Steinfeld, A. (2012), 'Syngas production by simultaneous splitting of h<sub>2</sub>o and co<sub>2</sub> via ceria redox reactions in a high-temperature solar reactor', *Energy & Environmental Science* **5**(3), 6098–6103.
- Gebhart, B. (1961), 'Surface temperature calculations in radiant surroundings of arbitrary complexity—for gray, diffuse radiation', *International Journal of Heat and Mass Transfer* **3**(4), 341–346.
- Gomez-Garcia, F., González-Aguilar, J., Olalde, G. & Romero, M. (2016), 'Thermal and hydrodynamic behavior of ceramic volumetric absorbers for central receiver solar power plants: A review', *Renewable and Sustainable Energy Reviews* **57**, 648–658.
- Grum, F. & Luckey, G. (1968), 'Optical sphere paint and a working standard of reflectance', *Applied Optics* **7**(11), 2289–2294.
- Hickman, D. & Schmidt, L. (1993), 'Production of syngas by direct catalytic oxidation of methane', *SCIENCE-NEW YORK THEN WASHINGTON-* **259**, 343–343.
- Hogan, R., Skocypec, R., Diver, R., Fish, J., Garratt, M. & Richardson, J. (1990), 'A direct absorber reactor/receiver for solar thermal applications', *Chemical Engineering Science* **45**(8), 2751–2758.
- Hou, Y., Vidu, R. & Stroeve, P. (2011), 'Solar energy storage methods', *Industrial & Engineering Chemistry Research* **50**(15), 8954–8964.
- Huber, G. W., Iborra, S. & Corma, A. (2006), 'Synthesis of transportation fuels from biomass: chemistry, catalysts, and engineering', *Chemical reviews* **106**(9), 4044–4098.
-

- Hurtado, J. I. L. & Soria, B. Y. M. (2007), *El hidrógeno y la energía*, Asociación Nacional de Ingenieros del ICAI.
- Kalos, M. H. & Whitlock, P. A. (1986), *Monte Carlo Methods, Volume I*, John Wiley & Sons.
- Kaneko, H., Kodama, T., Gokon, N., Tamaura, Y., Lovegrove, K. & Luzzi, A. (2004), 'Decomposition of zn-ferrite for o<sub>2</sub> generation by concentrated solar radiation', *Solar Energy* **76**(1), 317–322.
- Lédé, J. & Ferrer, M. (1999), 'Solar thermochemical reactors', *Le Journal de Physique IV* **9**(PR3), Pr3–253.
- Lee, H.-J., Kim, J.-K., Lee, S.-N. & Kang, Y.-H. (2012), 'Consistent heat transfer analysis for performance evaluation of multichannel solar absorbers', *Solar energy* **86**(5), 1576–1585.
- Linstrom, P. J. & Mallard, W. (2001), 'Nist chemistry webbook; nist standard reference database no. 69'.
- Mahan, J. R. (2002), *Radiation heat transfer: a statistical approach*, Vol. 1, John Wiley & Sons.
- McKetta, J. (1996), *Encyclopedia of Chemical Processing and Design: Volume 56 - Supercritical Fluid Technology: Theory and Application to Technology Forecasting*, Chemical Processing and Design Encyclopedia, Taylor & Francis.  
**URL:** <https://books.google.com.mx/books?id=gb9UKnQEbeUC>
- Miller, J. E., Allendorf, M. D., Diver, R. B., Evans, L. R., Siegel, N. P. & Stuecker, J. N. (2008), 'Metal oxide composites and structures for ultra-high temperature solar thermochemical cycles', *Journal of Materials Science* **43**(14), 4714–4728.
- Modest, M. F. (2013), *Radiative heat transfer*, Academic press.
- Muir, J. F., Hogan, R. E., Skocypec, R. D. & Buck, R. (1994), 'Solar reforming of methane in a direct absorption catalytic reactor on a parabolic dish: I—test and analysis', *Solar energy* **52**(6), 467–477.
- Pecharroman, C., Ocana, M. & Serna, C. (1996), 'Optical constants of tetragonal and cubic zirconias in the infrared', *Journal of applied physics* **80**(6), 3479–3483.
- Petrash, J., Wyss, P. & Steinfeld, A. (2007), 'Tomography-based monte carlo determination of radiative properties of reticulate porous ceramics', *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **105**(2), 180–197.
- Riveros-Rosas, D., Herrera-Vázquez, J., Pérez-Rábago, C., Arancibia-Bulnes, C., Vázquez-Montiel, S., Sánchez-González, M., Granados-Agustín, F., Jaramillo, O. & Estrada, C. (2010), 'Optical design of a high radiative flux solar furnace for mexico', *Solar Energy* **84**(5), 792–800.
-

- Sani, E., Mercatelli, L., Sans, J.-L. & Sciti, D. (2015), 'Optical properties of black and white ZnO for solar receiver applications', *Solar Energy Materials and Solar Cells* **140**, 477–482.
- Shimada, T., Tachibana, T., Nakagawa, T. & Yamamoto, T. (2004), 'Site occupation study of ZnO and NiO by far-infrared reflectivity', *Journal of alloys and compounds* **379**(1), 122–126.
- Smestad, G. P. & Steinfeld, A. (2012), 'Review: Photochemical and thermochemical production of solar fuels from H<sub>2</sub>O and CO<sub>2</sub> using metal oxide catalysts', *Industrial & Engineering Chemistry Research* **51**(37), 11828–11840.
- Solargis (2016), 'World solar resource maps'.  
URL: <http://solargis.com/products/maps-and-gis-data/free/download/world/>
- Steinfeld, A. (2005), 'Solar thermochemical production of hydrogen—a review', *Solar energy* **78**(5), 603–615.
- Steinfeld, A. (2012), 'Thermochemical production of syngas using concentrated solar energy', *Annual Review of Heat Transfer* **15**(15), 255–275.
- Steinfeld, A. & Palumbo, R. (2001), 'Solar thermochemical process technology', *Encyclopedia of physical science and technology* **15**(1), 237–56.
- Sultan, M. & Singh, R. (2009), 'Structural and optical properties of rf-sputtered ZnO thin films', *Journal of Physics D: Applied Physics* **42**(11), 115306.
- Tamura, Y. & Kaneko, H. (2005), 'Oxygen-releasing step of ZnO/(ZnO+ Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>)-system in air using concentrated solar energy for solar hydrogen production', *Solar Energy* **78**(5), 616–622.
- Toor, J. & Viskanta, R. (1968), 'A numerical experiment of radiant heat interchange by the monte carlo method', *International Journal of Heat and Mass Transfer* **11**(5), 883–897.
- Valadés-Pelayo, P. J., Arancibia-Bulnes, C. A., Salgado-Tránsito, I., Villafán-Vidales, H. I., Peña-Cruz, M. I. & Jiménez-González, A. E. (2016), 'Effect of photocatalyst film geometry on radiation absorption in a solar reactor, a multiscale approach', *Chemical Engineering Science* .
- Villafán-Vidales, H., Abanades, S., Arancibia-Bulnes, C., Riveros-Rosas, D., Romero-Paredes, H., Espinosa-Paredes, G. & Estrada, C. (2012), 'Radiative heat transfer analysis of a directly irradiated cavity-type solar thermochemical reactor by monte-carlo ray tracing', *Journal of Renewable and Sustainable Energy* **4**(4), 043125.
- Villafán-Vidales, H., Abanades, S., Caliot, C. & Romero-Paredes, H. (2011), 'Heat transfer simulation in a thermochemical solar reactor based on a volumetric porous receiver', *Applied Thermal Engineering* **31**(16), 3377–3386.
-

- 
- Wang, F., Tan, J., Shuai, Y., Gong, L. & Tan, H. (2014), 'Numerical analysis of hydrogen production via methane steam reforming in porous media solar thermochemical reactor using concentrated solar irradiation as heat source', *Energy Conversion and Management* **87**, 956–964.
- Wang, Z., Roberts, R., Naterer, G. & Gabriel, K. (2012), 'Comparison of thermochemical, electrolytic, photoelectrolytic and photochemical solar-to-hydrogen production technologies', *International journal of hydrogen energy* **37**(21), 16287–16301.
- Wood, D. L. & Nassau, K. (1982), 'Refractive index of cubic zirconia stabilized with yttria', *Applied Optics* **21**(16), 2978–2981.
- Zhao, Y. & Tang, G. (2016), 'Monte carlo study on extinction coefficient of silicon carbide porous media used for solar receiver', *International Journal of Heat and Mass Transfer* **92**, 1061–1065.
-