

01178
6



Universidad Nacional Autónoma de México

Facultad de Ingeniería
División de Estudios de Posgrado

Simulación numérica del proceso de
gasificación para la utilización del carbón o
coque de petróleo



Tesis

que para obtener el grado de

**Maestro en Ingeniería
(Energética)**

presenta

José Salvador Ochoa Torres

Director: Dr. Javier E. Aguillón Martínez

Co-directores:

Dr. Ricardo Rivero Rodríguez

Dr. William Vicente y Rodríguez

293946

México D.F., Junio de 2001



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.

Dedicatoria

A Nidia, mi esposa.

Tu apoyo, comprensión y compañía,
dan sentido a todo el esfuerzo realizado.

A mi "Andreíta".

Espero recompensar todo el tiempo
que no pude jugar contigo.
Ojalá que pueda heredarte un ejemplo a seguir.
Todos mis logros te pertenecen hija mía.

A mis padres.

Los frutos que dan las ramas,
también pertenecen al árbol.

Agradecimientos

A Dios,
fuente inagotable de energía.

Agradezco a mi esposa e hija por todo su apoyo, ayuda y aliento, sobre todo cuando estuve lejos de ellas. Asimismo, agradezco a mi suegra por su apoyo durante este tiempo.

A mis padres, por darme la vida y enseñarme a luchar por lo que anhelo.

A mis hermanos, porque sus experiencias enriquecieron mi vida. Ojalá que ustedes puedan decir lo mismo de mí.

Al Doctor Javier Aguillón por haber sido mi profesor, amigo y director de Tesis.

Por su gran contribución en este trabajo, al Doctor William Vicente le digo: Gracias, sin ti no lo hubiera logrado. Te considero uno de mis mejores amigos.

Al Doctor Ricardo Rivero, quien me abrió las puertas del Instituto Mexicano de Petróleo en el grupo de exergía. Su guía y asesoría fueron muy importantes para el desarrollo de esta tesis.

Al Ing. Augusto Sánchez Cifuentes, por haber sido mi profesor, por tomarse la molestia de revisar este documento y por su franca amistad.

Al Dr. Francisco Solorio por brindarme su apoyo para seguir creciendo intelectualmente, por haber sido mi profesor y por revisar este documento.

A todos mis compañeros y amigos, cuyo nombre no incluiré por temor a olvidar el nombre de alguno. Sin embargo, no puedo pasar por alto a Juan Carlos Cedeño Vázquez, compañero y amigo desde hace ya muchos años. Ambos hemos sido testigos mutuos de muchos tropiezos y logros.

Deseo agradecer al Instituto Mexicano del Petróleo (IMP) por el apoyo económico, que con carácter de beca, proporcionó para culminación de esta investigación a través del Programa de Investigación en Medio Ambiente y Seguridad (PIMAS).

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por la beca brindada durante mis estudios de maestría.

De igual manera, agradezco al Instituto de Ingeniería de la UNAM por su apoyo económico y por el uso de sus instalaciones y equipo de cómputo, en especial a la Coordinación de Ingeniería de Procesos Industriales y Ambientales.

Finalmente, deseo expresar mi agradecimiento a la División de Estudios de Posgrado de la Facultad de Ingeniería de la UNAM, en especial a todos los profesores que compartieron sus conocimientos a través de las clases que tuve el privilegio de tomar.

J. Salvador Ochoa T.

Junio de 2001

Prefacio

La gasificación es un proceso que actualmente está creciendo en importancia en el ámbito mundial. México, a pesar de contar con excelentes oportunidades de aplicación de esta tecnología, no ha entrado en esta dinámica. Sin embargo, los requerimientos industriales y ambientales de contar con mejores tecnologías, ha hecho que algunos sectores se comiencen a interesar por el empleo de los procesos de gasificación.

Esta tesis se desarrolló en la Coordinación de Ingeniería de Procesos Industriales y Ambientales del Instituto de Ingeniería de la UNAM; y dentro del Grupo de Exergía, en el marco del Programa de Investigación en Medio Ambiente y Seguridad (PIMAS) del Instituto Mexicano del Petróleo (IMP).

Para el desarrollo de la investigación se contó con la asesoría por parte del Instituto del Ingeniería del Dr. Javier E. Aguillón Martínez, director de tesis, y del Dr. William Vicente y Rodríguez quien fungió como asesor en la simulación de fenómenos de combustión. Por parte del Instituto Mexicano del Petróleo, la asesoría y guía fue brindada por el Dr. Ricardo Rivero Rodríguez, co-director de la tesis, Jefe del Grupo de Exergía del IMP.

En el presente trabajo, se empleó el código numérico de simulación PHOENICS, en su versión 3.1, instalado en el Instituto de Ingeniería bajo una licencia académica. En este programa se codificó el modelo de gasificación descrito en esta Tesis.

El propósito de esta investigación es proporcionar una herramienta que contribuya al análisis de este tipo de tecnología, simulando numéricamente el comportamiento de distintos fenómenos que se presentan en la gasificación. Dada la complejidad del sistema, sin duda aún falta mucho por hacer, por lo que éste trabajo es tan sólo un importante paso hacia la conformación de un modelo numérico que permita un análisis integral de las tecnologías de gasificación.

José Salvador Ochoa T.
Junio de 2001.

Indice General

Prefacio	ii
Introducción	1
Capítulo 1 Antecedentes	5
1.1 La tecnología de gasificación	5
1.2 Clasificación de los gasificadores	6
1.3 Sistemas de gasificación	12
1.4 Potencial de aplicación de la gasificación en México	18
1.5 Conclusiones	20
Capitulo 2 Aspectos químicos y físicos de la gasificación	21
2.1 Procesos durante la gasificación	21
2.2 Combustión de sólidos	22
2.3 Secuencia de combustión	26
2.4 Reacciones de gasificación	27
2.5 Otros aspectos que influyen en el proceso de gasificación	28
2.6 Conclusiones	29
Capitulo 3 Descripción del modelo matemático	30
3.1 Técnicas de modelización	30
3.2 Descripción de modelo	31
3.3 Ecuaciones para las fracciones volumétricas	32
3.4 Ecuaciones de conservación para propiedades	32
3.5 Modelos de combustión	33
3.6 Componentes de la partícula de combustible	34
3.7 Secado de la partícula	35
3.8 Volatilización del carbón crudo	35
3.9 Reacciones heterogéneas	36

3.10 Reacciones homogéneas	37
3.11 Tamaño de la partícula de combustible	39
3.12 Transferencia de calor entre gas y partículas	40
3.13 Arrastre en la interfase	40
3.14 Modelado de la turbulencia	40
3.15 Dispersión turbulenta de partículas	42
3.16 Componentes de la fase gaseosa	42
3.17 Radiación térmica	42
3.18 Otras ecuaciones utilizadas	44
3.19 Conclusiones	44
Capítulo 4 Método de solución	45
4.1 La Dinámica de Fluidos Computacional (CFD)	45
4.2 Las ecuaciones de transporte	46
4.3 Diagrama de flujo del proceso de solución	47
4.4 El método de volúmenes finitos	48
4.5 Discretización de las ecuaciones	49
4.6 Acoplamiento entre velocidad y presión	52
4.7 Convergencia	53
4.8 Conclusiones	54
Capítulo 5 Resultados	55
5.1 Quemador unidimensional	55
5.2 Gasificador de flujo por arrastre	58
5.3 Simulación del caso "a" (empleando carbón como combustible)	61
5.4 Simulación del caso "b" (empleando coque de petróleo)	67
5.5 Gasificador tipo Texaco	74
5.6 Simulación del caso "c" (empleando carbón como combustible)	76
5.7 Simulación del caso "d" (empleando coque de petróleo)	81
5.8 Conclusiones	84
Conclusiones y recomendaciones para investigaciones futuras	86

Anexo 1	Resultados obtenidos por Fueyo y Gambón [1997]	90
Anexo 2	Parámetros para la cinética química de distintos combustibles sólidos	91
Anexo 3	Archivo de comandos en PHOENICS	92
	Referencias y bibliografía	103

Introducción

- **Requerimientos sociales y tecnológicos**

El incremento de la eficiencia energética en la industria es una meta planteada por muchos ingenieros e investigadores en todo el mundo. Aunado a esto, la progresión de la demanda energética y la exigencia de políticas y estrategias acordes a los principios del desarrollo sustentable, han convertido en prioridad el desarrollo de nuevas tecnologías dirigidas hacia un mejor aprovechamiento de la energía mediante esquemas de cogeneración y ciclo combinado.

La utilización de combustibles, como el carbón o el coque de petróleo, con alto contenido de azufre y metales pesados, requiere el uso de tecnologías adecuadas que reduzcan la generación de óxidos de azufre (SOx) y nitrógeno (NOx), de modo que las emisiones que produzcan sean menores a los límites permisibles establecidos en las normas ambientales mexicanas. En ese contexto, la tecnología de gasificación representa una alternativa viable para el aprovechamiento de estos combustibles.

La gasificación se empezó a utilizar desde principios del siglo XIX en la producción de gas para iluminación en Inglaterra y Estados Unidos. El proceso químico de gasificación convierte cualquier tipo de material que contenga carbón, en un gas de síntesis compuesto principalmente de monóxido de carbono e hidrógeno. Este gas puede ser usado como combustible para generar vapor o electricidad, o como materia prima en la industria química así como en una gran cantidad de procesos de la industria petroquímica y de refinación. Las propiedades del gas de síntesis producido dependen principalmente de las condiciones de gasificación, tipo del medio gasificador y el flujo de alimentación del combustible. El principal atractivo de la gasificación es el agregar valor a productos de valor bajo o negativo (por ejemplo, desechos o residuos de un proceso) en combustibles y productos que poseen un valor energético o comercial.

En los últimos años, el sector eléctrico en el ámbito mundial ha sido transformado por la aparición de grandes turbinas de gas para la generación de potencia. Esta tecnología, ya sea empleada en sistemas abiertos o en conjunto con recuperadores de calor en ciclos combinados, han demostrado poseer una mayor eficiencia, facilidad de operación y limpieza para generar electricidad. Sin embargo, la principal desventaja de las turbinas de gas es que sólo pueden operar con combustibles gaseosos (como el gas natural) o que puedan ser evaporados fácilmente (destilados de combustibles y aceites ligeros). Estos equipos no pueden utilizar como combustible el carbón, coque o aceites pesados, actuales soportes de la industria convencional de generación de potencia.

La gasificación constituye un puente entre los combustibles convencionales y las turbinas de gas, ya que convierte estos materiales en un gas con un poder calorífico, que después de limpiarse, puede ser usado en las turbinas de cualquier planta generadora. La combinación de la gasificación con un ciclo combinado (comúnmente conocida como IGCC, por sus siglas en inglés) es una tecnología basada en el uso del carbón que se aproxima al desempeño de un sistema que emplea gas natural.

Otra razón adicional del interés por la gasificación es su versatilidad en el empleo de combustibles, lo que abre un abanico de posibilidades en su empleo, sobre todo con los residuos municipales y biomásicos. Esta tecnología ofrece una manera de convertir estos residuos en un gas combustible para generación de potencia a pequeña o mediana escala, o alternativamente, desplazar parcialmente el uso de carbón en una planta convencional. La gasificación de la biomasa es de especial interés sobre todo para países en donde las emisiones de CO₂ son objeto de

presión internacional en materia ambiental. Un considerable número de proyectos de este tipo está en operación o en desarrollo, principalmente en el Norte y centro de Europa [DTI, 1998].

En resumen, la tecnología de gasificación ofrece los siguientes beneficios:

- generación de potencia con bajas emisiones contaminantes y alta eficiencia;
- generación de potencia a partir de residuos del petróleo (como el coque) y con la posibilidad de integrarse en las actividades de la refinería;
- producción de hidrógeno que puede emplearse para cubrir las demandas de este importante gas en los procesos de refinación del crudo;
- disposición ambientalmente benigna de residuos sólidos y líquidos con la posibilidad de recuperar energía; y
- utilización de biomasa para la generación de potencia, con la posibilidad de contribuir a la mitigación del efecto invernadero si se integra a un esquema de explotación sustentable de biomasa.

Pese a las bondades que ha demostrado tener esta tecnología, en México, no ha logrado penetrar en los sectores energéticos. En el caso de la refinación del petróleo, el país enfrenta una disyuntiva que debe resolver en el corto plazo ya que debido al programa de reconfiguración en las refinerías de Minatitlán, Madero y Cadereyta, tres nuevas unidades coquizadoras de petróleo crudo están siendo construidas con el objeto de incrementar la producción de gasóleo para la formación de gasolina. Estas unidades producirán importantes cantidades de coque de petróleo con alto contenido de azufre, lo cual representará un grave problema por resolver. Hasta ahora, no existe un proyecto para la utilización del residuo antes mencionado, sólo existen recopilaciones bibliográficas de experiencias en otras naciones por lo que contemplan a la tecnología de gasificación como una alternativa [PEMEX, 1997; Rivero, 1997]. Actualmente, un sector académico (Instituto de Ingeniería, UNAM e Instituto Mexicano del Petróleo) ha analizado la factibilidad de la emplear la tecnología de gasificación como alternativa viable para el aprovechamiento de ese coque [Martínez, 2000], remanente de la refinación del petróleo crudo, y de esta manera, convertir un residuo en un combustible económica y ambientalmente viable.

En otras áreas, existe el interés de incluir la tecnología de gasificación como alternativa para tratar los residuos sólidos municipales y biomásicos, aunque en este sector la falta de estudios y homogeneidad en los datos, pone incierto el panorama. Sin embargo, las experiencias en otros países estimulan este interés.

En ese ánimo, el desarrollo de la presente tesis pretende contribuir a ese esfuerzo, al dotar como herramienta de análisis la modelización numérica del proceso de gasificación.

• **Métodos de predicción**

El mejor aprovechamiento e implementación de esta tecnología en la industria requiere un conocimiento de la hidrodinámica del fluido y de su interacción con la cinética química de las reacciones de gasificación. El sistema a analizar en esta tesis es geoméricamente multidimensional y consta de una mezcla bifásica sólido-gas reaccionando químicamente. Adicionalmente, el flujo, como en la mayoría de las aplicaciones industriales, es de régimen turbulento.

El sistema puede ser abordado mediante dos técnicas: ensayos experimentales en laboratorio y la simulación numérica en computadora. El trabajo experimental requiere un prototipo o modelo físico a escala del sistema donde se puedan hacer los ensayos y cuya construcción y operación en frecuentemente lenta y costosa. Por otro lado, las mediciones requieren técnicas de medida fiables y sin interferencias, que en muchas ocasiones son difíciles de implementar en los

prototipos. Adicionalmente, el conseguir reproducir fielmente las variables que gobiernan el proceso de gasificación dificultan la construcción del modelo físico así como su instrumentación y operación.

El costo y las escalas temporales asociadas a la experimentación promueven cada vez más el uso (frecuentemente con carácter complementario) de la simulación numérica en computadora. Esta técnica, conocida generalmente como "Dinámica de Fluidos Computacional" (o CFD, por sus siglas en inglés), es a menudo más económica que la experimentación, y proporciona información completa y detallada de las variables relevantes del flujo.

Cuando en un flujo turbulento, como el abordado en este documento, ocurre un proceso de combustión, el análisis numérico del problema tiene la dificultad de añadir la interacción entre la hidrodinámica y la cinética química, interacción que tiene lugar en las más pequeñas escalas del flujo. La complejidad de la cinética química de la combustión involucra, incluso para los combustibles más simples, un gran número de reacciones y de especies.

Para simular el flujo se tienen básicamente tres alternativas: la Simulación Numérica Directa (*Direct Numerical Simulation*, DNS); el uso de ecuaciones promediadas (*Reynolds o Favre Averaged Navier-Stokes Equations*, RANS); y la Simulación de Grandes Escalas (*Large Eddy Simulation*, LES).

La DNS consiste en discretizar directamente, mediante Series de *Fourier*, las ecuaciones instantáneas que gobiernan el movimiento del flujo, válidas tanto para flujo laminar como turbulento, y resolverlas numéricamente. Las ecuaciones que se resuelven son las de conservación de masa, las de cantidad de movimiento, la de energía, el tamaño y componentes de la partícula sólida, y las de especies químicas. La discretización resuelve todas las escalas, espaciales y temporales, de las variables del flujo, y por lo tanto, no requiere de ninguna aproximación o modelo. Sin embargo, se ha determinado que en un flujo turbulento sin reacción, para capturar todas las escalas, el número de puntos de discretización es función del número de Reynolds elevado prácticamente al cubo [Moin & Mahesh, 1998; Tennekes & Lumley, 1977]. Si el problema incluye especies reactivas, como es el caso, aparecerán escalas aún menores, que exigirán más detalle en la simulación. Así pues, la aplicación de este método está limitada por la potencia de los equipos de cálculo.

La aproximación de la Simulación de Grandes Escalas (LES) trata de resolver para las fluctuaciones de mayor tamaño, modelando el efecto de las pequeñas fluctuaciones sobre ellas [Jiménez, 1998]. Aunque esta técnica puede mejorar sustancialmente la dinámica del flujo, sobre todo cuando se presentan estructuras transitorias de vorticidad que dominan los procesos, la mayor parte de las reacciones químicas asociadas a la combustión siguen sucediendo en estructuras que están por debajo de la resolución de la malla, y por lo tanto, hay que modelar su efecto en las estructuras resueltas.

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

En las aproximaciones de LES y RANS se precisan por tanto modelos que representen el transporte de la cantidad de movimiento, energía y especies químicas por parte del campo fluctuante no resuelto. También en ambas alternativas de simulación se hace necesario la representación de valores medios (RANS) o filtrados (LES), de la tasa de reacción química.

El método RANS es la alternativa empleada en este trabajo, por lo que el transporte turbulento de la cantidad de movimiento, energía o especies se modela mediante algunos de los llamados "modelos de turbulencia", específicamente el ' κ - ϵ ' [Jones, 1979; Jones, 1994]

En sistemas con combustión, la cinética química involucra un gran número de reacciones y de especies. Incluir un mecanismo real en cálculos con geometrías complejas (multidimensional) puede demandar una gran cantidad de memoria y tiempo de cálculo. Por lo tanto, es necesario

recurrir a sistemas químicos simplificados que reteniendo las características más relevantes del fenómeno, reduzcan el tiempo de cálculo. En este trabajo se tomaron las reacciones más representativas del proceso de gasificación y se emplean modelos de combustión como el *Eddy Break Up* o las aproximaciones de *Arrhenius* para modelarlas.

- **Objetivos de la tesis**

El objetivo de la tesis es *elaborar un modelo numérico para la simulación de las principales reacciones de gasificación para la utilización del carbón o coque de petróleo*. Lo anterior, con el fin de tener una herramienta matemática que intervenga eficazmente en el análisis y diseño de equipos de gasificación.

El cumplimiento óptimo del objetivo, involucró en primer término, una revisión del proceso de gasificación así como de la tecnología y sistemas comerciales más representativos; seguido de la comprensión de los procesos físicos y químicos del fenómeno. Como resultado de la anterior, se integró un modelo numérico que simula la gasificación mediante la incorporación de las reacciones y fenómenos más representativos del proceso, obteniendo con ello la veracidad y exactitud adecuada en los resultados.

El modelo numérico se valida primeramente bajo condiciones de combustión (ricas en oxidante) y los resultados son comparados con los obtenidos por Fueyo y Gambon [1997] para una geometría unidimensional. Posteriormente, se aplica el modelo a una geometría bidimensional, la cual trata de representar un gasificador de flujo por arrastre (*entrained bed*, en inglés) que corresponde a un equipo con capacidad para gasificar 200 toneladas por día de carbón, e instalado en una planta IGCC piloto en el Japón [Araki, 1993. Cabe señalar que dada la complejidad del sistema y la carencia de trabajos similares, esta tesis constituye un primer avance hacia la conformación de una herramienta de cálculo que permita el análisis de la tecnología de gasificación.

- **Estructura de la tesis**

Tras la sección introductoria, el capítulo uno presenta una revisión de la tecnología de gasificación, su clasificación y sistemas comerciales más representativos; complementándose con una breve discusión sobre el potencial de la gasificación en México. El siguiente tema aborda los principios físicos y químicos que constituyen el proceso de gasificación, haciendo hincapié en la analogía y diferencia con los procesos de combustión. Este capítulo sienta las bases teóricas sobre las cuales se desarrolla la simulación. El capítulo tres introduce las técnicas de modelización para sistemas bifásicos y muestra el conjunto de ecuaciones y submodelos que integran el modelo euleriano-euleriano del proceso de gasificación.

El capítulo cuatro se dedica al método de solución de las ecuaciones de transporte que describen el flujo reactivo, mediante la técnica de la integración de volúmenes de control o volúmenes finitos. El último capítulo muestra y discute los resultados obtenidos con el modelo, para finalmente presentar la sección de conclusiones y algunas recomendaciones para trabajos futuros.

Capítulo 1

Antecedentes

La gasificación es el proceso químico que mediante la reacción entre una fuente de carbono (carbón mineral o vegetal, coque de petróleo, biomasa, etc.) con una de oxígeno (y vapor de agua generalmente) se produce un gas compuesto en su mayoría de monóxido de carbono e hidrógeno. Este producto, denominado generalmente como gas de síntesis o *syngas*, se puede usar como combustible para generar vapor o electricidad, como materia prima en la industria química, y en una gran cantidad de procesos de la industria petroquímica y de refinación. Entre los principales atractivos de la gasificación se encuentra el producir un gas que se puede emplear como combustible o materia prima para otros procesos, a partir de residuos o materiales de escaso valor comercial. La gasificación es un proceso cuyos orígenes datan de principios del siglo XIX. Las primeras aplicaciones fueron en la producción de gas para iluminación en Inglaterra y Estados Unidos. Sin embargo, su empleo no floreció durante mucho tiempo debido principalmente a la creciente oferta de combustibles derivados del petróleo y de "fácil manejo" como la gasolina y el diesel. Aunado a esto, la abundancia de tecnologías basadas en este tipo de energéticos favorecieron a que la gasificación no se expandiera. Actualmente, las condiciones han cambiado. Las crisis energéticas de las últimas décadas han puesto de manifiesto la frágil dependencia de muchos países al petróleo. Adicionalmente, las normas ambientales cada vez más estrictas, restringen las formas convencionales de producción de energía. Dado lo anterior, la gasificación está creciendo en importancia, particularmente con su integración a los ciclos combinados (IGCC) para producción de electricidad. En este documento se aborda el caso de la gasificación de un combustible sólido compuesto de los elementos: carbono, hidrógeno, oxígeno, nitrógeno y azufre; por lo que el uso de la palabra carbón, se emplea indistintamente algunas veces para cualquier material que contenga estos materiales (coque de petróleo o cualquier tipo de carbón mineral o vegetal). Además, se presenta una descripción y clasificación de la tecnología de gasificación con el objetivo de brindar un panorama general de estos sistemas y el potencial de su aplicación en nuestro país.

1.1 La tecnología de gasificación

Existen diversos tipos de procesos de gasificación que difieren según el diseño técnico, la escala y el combustible utilizado. Sin embargo, comparten ciertas características generales en la producción del gas de síntesis. Los materiales que más comúnmente se pueden utilizar en un gasificador son los que están basados en el petróleo (crudos y combustibles de alto contenido de azufre, plásticos, coque de petróleo y otros residuos de refinería), carbón, madera y residuos orgánicos. Estos elementos combustibles reaccionan dentro del equipo con una corriente de oxígeno puro o aire a una determinada temperatura y presión en una atmósfera reductora (con deficiencia de oxígeno). En algunos diseños, también existe una corriente de vapor que en ocasiones participa en las reacciones de gasificación o sirve como moderadora de la temperatura. Todo esto produce un gas de síntesis (*syngas*) compuesto principalmente de monóxido de carbono e hidrógeno y pequeñas cantidades de dióxido de carbono y metano.

La alta temperatura en el gasificador convierte los materiales inorgánicos del combustible (cenizas y metales) en materiales vitrificados en forma de arenas de diferentes tamaños. Con algunos combustibles, es posible efectuar una concentración y recuperación de metales para su

reúso. El material vitrificado, generalmente denominado escoria, es inerte y tiene una variedad de usos en la industria de la construcción [Basu & Fraser, 1991].

Una vez producido el gas de síntesis, es necesario tratarlo para eliminar las trazas de elementos o impurezas que arrastre así como la eliminación y recuperación del azufre ya sea en su forma elemental o como ácido sulfúrico. Para lograr lo anterior existen tecnologías comercialmente disponibles que forman parte integral de una planta de gasificación. Uno de los usos más comunes del *syngas* es su empleo como combustible para producir electricidad, mediante un Ciclo Combinado con Gasificación Integrada. Esta configuración (figura 1.1) para la generación de potencia, es una de las más limpias y eficientes maneras de producir electricidad a partir del carbón, residuos del petróleo (coque), biomasa u otros materiales susceptibles de quemarse.

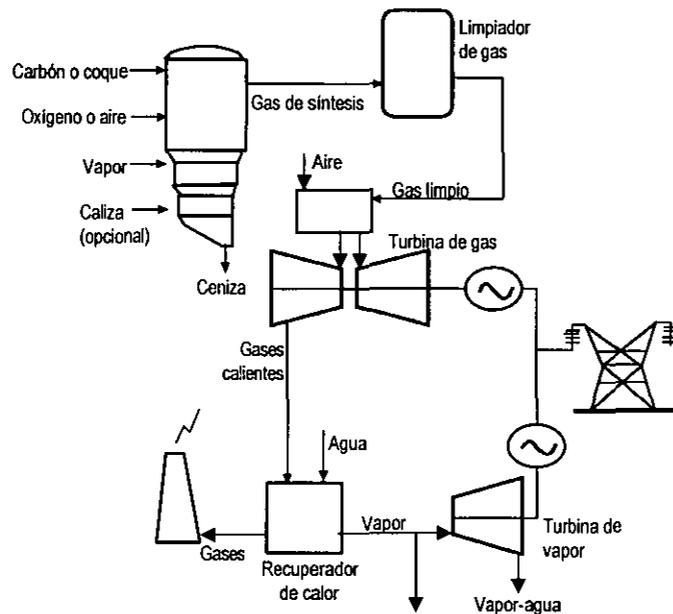


Figura 1.1 Configuración IGCC para la generación de potencia [DOE, 2000].

Los sistemas de ciclo combinado tienen dos componentes básicos en su caso más simple. Uno es una turbina de gas de alta eficiencia, extensamente usada para la generación de potencia, la cual emplea el gas de síntesis como combustible. El otro es un recuperador de calor en donde los gases de escape de la turbina se introducen para producir vapor que será empleado en un ciclo tradicional para generar otra cantidad adicional de electricidad.

El gas de síntesis también puede ser procesado usando tecnología comercialmente disponible para producir una amplia variedad de productos químicos como fertilizantes o gases industriales. La capacidad de producir tanto potencia como otros productos de valor a partir del *syngas*, depende principalmente de la configuración de la planta así como de las condiciones técnicas y de mercado específicas del sitio.

1.2 Clasificación de los gasificadores

De acuerdo a la Organización Latinoamericana de Energía [OLADE, 1987], los procesos y equipos de gasificación pueden ser clasificados de la siguiente manera.

a) Según la fuente de energía para el proceso de gasificación.	<i>Alotérmico</i>	Fuente externa de energía, es decir, que no sea el propio combustible.
	<i>Autotérmico</i>	La combustión parcial del combustible proporciona la energía para el proceso de gasificación.
b) Según la presión de operación en el gasificador	<i>Baja presión</i>	Gasificador que opera a presión atmosférica Ligeramente positiva (más alta que la presión atmosférica), o negativa (un poco más baja de la presión atmosférica).
	<i>Alta presión</i>	Trabaja con presión más alta que la atmosférica. Usados en grandes instalaciones generando cantidades considerables de gas de síntesis.
c) Según el movimiento relativo de los gases y el combustible	<i>Flujo concurrente</i>	El combustible sólido y los gases generados se mueven en la misma dirección y, en general, hacia abajo (<i>downdraft</i>).
	<i>Flujo contracorriente</i>	El combustible y los gases se desplazan en direcciones contrarias y, en general, los gases se mueven hacia arriba (<i>updraft</i>).
	<i>Flujo cruzado.</i>	Los gases generados se mueven transversalmente al flujo de combustible (<i>crossflow</i>).
d) Según el régimen de flujo en el gasificador	<i>Lecho fijo</i>	Considerado por diversos autores como referencia a la zona de reacción fija en los gasificadores convencionales, en los cuales, se lleva el combustible sólido a dicha zona.
	<i>Lecho fluidizado</i>	Cuando las partículas del combustible se mantienen en suspensión en un fluido.
	<i>Flujo por arrastre</i>	Cuando se mezclan las partículas del combustible con el agente de gasificación y la mezcla es inyectada en una cámara donde en donde ocurren las reacciones.

e) En cuanto a la forma de cargar combustible y de descargar cenizas	<i>Intermitentes</i>	Carga en grandes cantidades y descarga con los gasificadores inoperantes.
	<i>Continuo o semicontinuo</i>	La carga del combustible y la descarga de cenizas se hace de manera continua o discreta y con el gasificador en operación, sin interferir en su desempeño.
f) En cuanto a la clase de comburente	<i>Oxígeno</i>	
	<i>Aire</i>	
	<i>Oxígeno/vapor</i>	
	<i>Aire/vapor</i>	

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

1.2.1 Gasificador a contracorriente.

Este gasificador tiene la ventaja de secar el combustible que desciende al reactor por el gas ascendente, eliminando la humedad de la carga introducida. Se distinguen las zonas de pirólisis, reducción y oxidación (Figura 1.2). Trabajan generalmente con material muy seco, proporcionando condiciones para la obtención de un elevado rendimiento térmico, con un gas limpio y seco que posee un poder calorífico inferior (PCI) del orden de 6 300 kJ/Nm³ [OLADE, 1997].

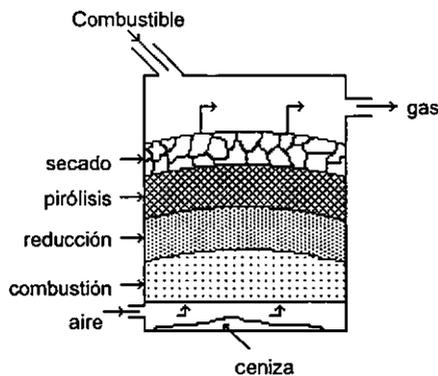


Figura 1.2 Gasificador de flujo a contracorriente.

En condiciones operacionales el gas que sale por la parte superior del gasificador, arrastra gran cantidad de volátiles, constituidos por vapor de agua, ácidos y alquitranes. Este hecho reduce el rendimiento del equipo en 20 a 25% y requiere de dispositivos que eliminen estos volátiles para proteger el ambiente. El gas de síntesis generado presenta temperaturas de 500 a 650 °C. Esta variación es función de la temperatura de la zona de oxidación, altura del lecho sobre la zona de pirólisis y de la humedad del combustible sólido.

Las temperaturas en el interior del gasificador a contracorriente son:

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

El control de las temperaturas en este gasificador requiere la adición de vapor de agua en el flujo de aire o de entrada, ya que la humedad del combustible sólido, una vez siendo evaporada, es arrastrada con los gases generados.

La granulometría del combustible sólido debe estar entre 20 y 100 milímetros, pudiendo llegar a 150 milímetros como dimensión máxima.

1.2.2 Gasificador concurrente.

Este gasificador se desarrolló para convertir el alquitrán producido en gas combustible y eliminar el problema de la condensación del mismo en tuberías largas o en motores de combustión interna. En este sistema el gas fluye en el mismo sentido descendente que el combustible sólido (figura 1.3).

Las zonas de pirólisis y secado se encuentran inmediatamente arriba de la zona de oxidación del reactor. El calor se transmite hasta la parte superior del lecho de combustible sólido por radiación, convección y conducción, secando parcialmente la materia prima. El vapor de agua liberado es forzado a moverse en el sentido descendente hasta la zona de reducción, en donde participa en las reacciones de gasificación.

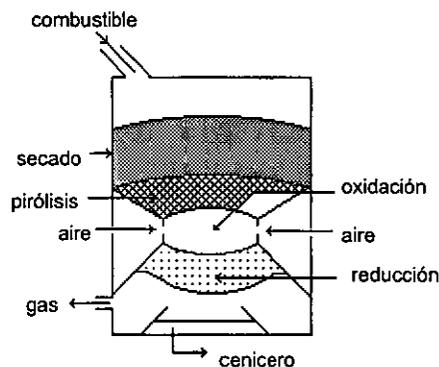


Figura 1.3 Gasificador de flujo concurrente.

Los gasificadores de flujo concurrente no requieren el uso de vapor de agua combinado con la corriente de aire, cuando el combustible sólido presenta un grado de humedad adecuado, como el caso de la leña. Sin embargo, en este equipo la humedad de la materia prima afecta el rendimiento térmico del proceso y el poder calorífico del gas generado. Para combustibles con alto contenido de humedad, es necesario un secado previo. Las temperaturas en las zonas del reactor son las mismas que para el gasificador a contracorriente.

El alquitrán y los ácidos arrastrados por los gases generados son forzados a cruzar la zona de reducción en donde la temperatura predominante (650 °C), descompone los ácidos y gran parte del alquitrán. El gas generado sale del reactor con la temperatura, entre 400 y 500 °C, después de un intercambio indirecto de calor con la zona de secado del gasificador, presentando reducida cantidad de alquitranes y otras fracciones orgánicas.

1.2.3 Gasificador a flujo cruzado

En este sistema el flujo de aire y gases generados es transversal al movimiento del combustible sólido (figura 1.4). Operan a temperaturas muy elevadas (alcanzando aproximadamente 2000°C). Requiere un combustible con bajo contenido de alquitrán y de fina granulometría, a causa del bajo tiempo de contacto entre el aire y el combustible.

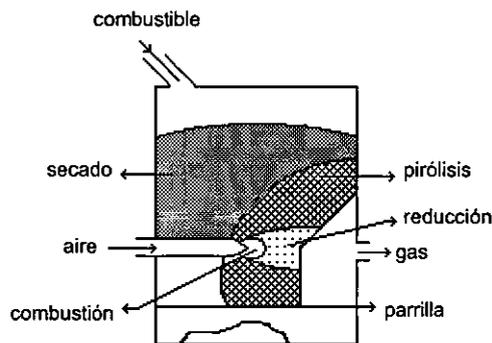


Figura 1.4 Gasificador de flujo cruzado.

Los gasificadores de flujo cruzado se caracterizan por la simplicidad de construcción y rapidez de arranque. Se recomienda para tamaños de partícula de aproximadamente 5-10 mm.

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

1.2.4 Gasificador de lecho fijo

En los gasificadores de lecho fijo se presenta una zona de reacción fija hacia la cual, tanto combustible como oxidante son conducidos. En este gasificador el carbón se suministra por la parte superior del equipo y es calentado conforme cae sobre su parrilla rotatoria, mientras que el aire y el vapor entran por la parte inferior del equipo (figura 1.5). La gasificación ocurre en toda la cámara de combustión, donde los gases son desalojados en una región cercana a la parte superior del gasificador. Normalmente se utilizan tamaños de partícula del orden de 3 a 50 milímetros.

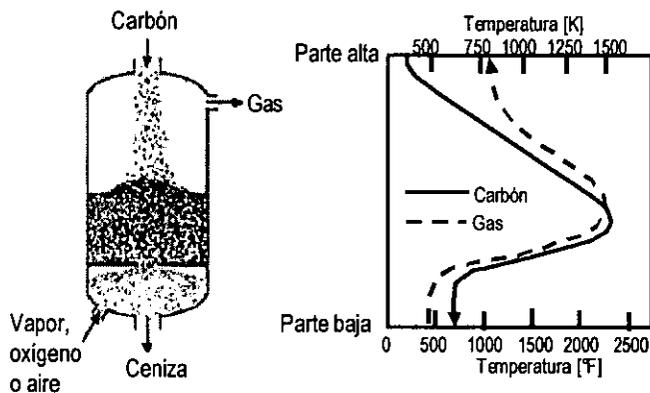


Figura 1.5 Gasificador de lecho fijo [Hobbs et al, 1993].

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

1.2.5 Gasificador de lecho fluidizado

El gasificador de lecho fluidizado se compone de un reactor vertical dotado de una parrilla en la parte inferior, a través de la cual, se inyecta el oxidante o aire. Las partículas de combustible (<8mm) se inyectan por encima de la parrilla (figura 1.6). Al entrar en contacto con la corriente ascendente de aire, las partículas sólidas son suspendidas, formando un lecho fluidizado en el cual se realizan las reacciones termoquímicas de gasificación.

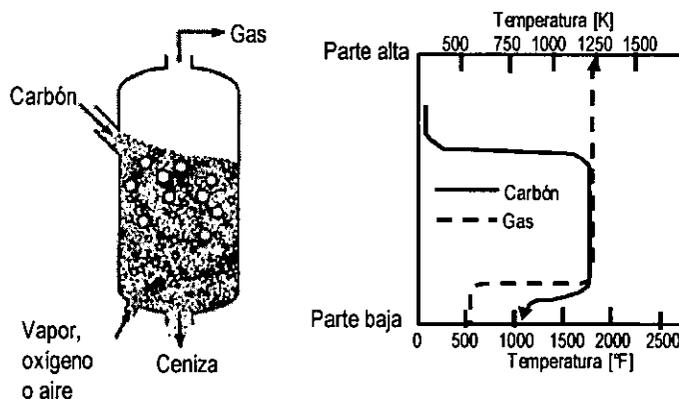


Figura 1.6 Gasificador de lecho fluidizado [Hobbs et al, 1993].

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

Las principales características de la gasificación en lechos fluidizados son: alto reciclado de inquemados, temperatura moderada y uniforme, requerimientos moderados de oxígeno y vapor, y dificultades en el manejo de algunos combustibles. Este tipo de tecnología se encuentra aún en fase de investigación y está siendo desarrolladas principalmente en Estados Unidos, Europa y Japón.

1.2.6 Gasificador de flujo por arrastre

En el gasificador de flujo por arrastre, el combustible y oxidante se mezclan y entran a la cámara de gasificación presurizada (figura 1.7). Este gasificador requiere partículas finas de carbón (>0,1mm) y opera normalmente a temperaturas de aproximadamente 1500 K. Este tipo de tecnología también se encuentra aún en fase de desarrollo.

Los gasificadores de flujo por arrastre están siendo desarrollados en los Estados Unidos, Europa, Japón y otros países.

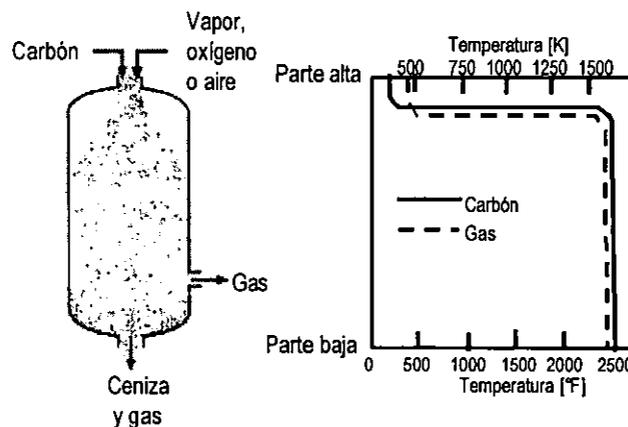


Figura 1.7 Gasificador de flujo por arrastre [Hobbs et al, 1993].

1.3 Sistemas de gasificación

1.3.1 El sistema *Lurgi*

Las tecnologías de gasificación de lecho fijo ya han sido aplicadas extensivamente. El más importante gasificador de este tipo disponible comercialmente es el gasificador desarrollado por la compañía *Lurgi* en Alemania alrededor de los años 30's. El sistema *Lurgi* (figura 1.8) usualmente opera a presiones entre 30 y 35 atmósferas. Las partículas del carbón tienen una granulometría grande (entre 5 y 50 milímetros) y es alimentado a través de una tolva cerrada en la parte de arriba. El oxidante es una mezcla de oxígeno y vapor, y se introduce por medio de una rejilla en la parte inferior del gasificador. La carga de carbón y el medio gasificante se mueven en direcciones opuestas, es decir, a contracorriente. La temperatura de operación a este patrón de flujo no es uniforme. En la parte baja (zona de combustión) la temperatura se sitúa entre los 1400 K, mientras que en las partes altas es alrededor de 800 K y el gas de síntesis presenta una temperatura aproximadamente de 600 K [Simbeck et. al., 1983]. La reacción del oxígeno con el carbón para formar dióxido de carbono (CO_2) produce el calor necesario para sostener las reacciones endotérmicas vapor-carbón y carbón- CO_2 . El gas de síntesis, que consta principalmente de monóxido de carbono (CO), hidrógeno (H_2) y algunas trazas de metano (CH_4), salen del gasificador hacia un proceso de limpieza en donde se desulfuriza. Un gasificador *Lurgi* típico tiene cuatro

metros de diámetro y posee una capacidad nominal de 55 000 m³/hr de gas seco a condiciones estándar.

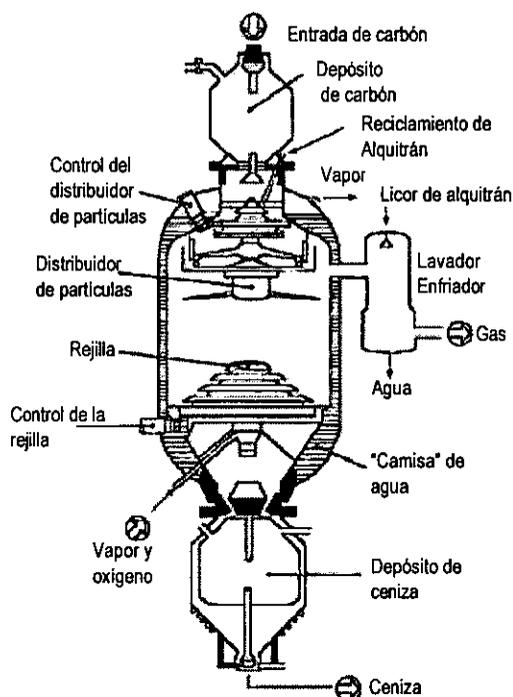


Figura 1.8 Gasificador *Lurgi* [Smooth & Smith, 1985].

1.3.2 El sistema *Winkler*

Las tecnologías de gasificación de lecho fluidizado están aún en fase de desarrollo e investigación. El sistema más representativo y que ha sido comercialmente probado es el gasificador *Winkler*. Esta tecnología, mostrada en la figura 1.9, es un gasificador de lecho fluidizado a presión atmosférica, aunque también se encuentran equipos que trabajan a presiones arriba de cuatro atmósferas. La temperatura del lecho es usualmente mantenida entre 1070 y 1370 K para evitar la fusión de cenizas. A estas temperaturas, el combustible es convertido principalmente a CO, H₂ y CO₂ con pequeñas cantidades de CH₄; los alquitranes u otros hidrocarburos pesados no se presentan. Estas temperaturas relativamente bajas restringen al gasificador *Winkler* a los carbones más reactivos. El gas producido a temperaturas entre 600 y 800 K es enfriado a través de un intercambiador de calor instalado en la parte alta del gasificador para finalmente ser desulfurizado en un sistema removedor de azufre. Un gasificador comercial-*Winkler* típico tiene 5.5 m de diámetro y 23 m de altura y posee la capacidad de gasificar aproximadamente 110 toneladas por día a presión atmosférica y 1800 ton/día a cuatro atmósferas [Parekh, 1982; Nowaki, 1981].

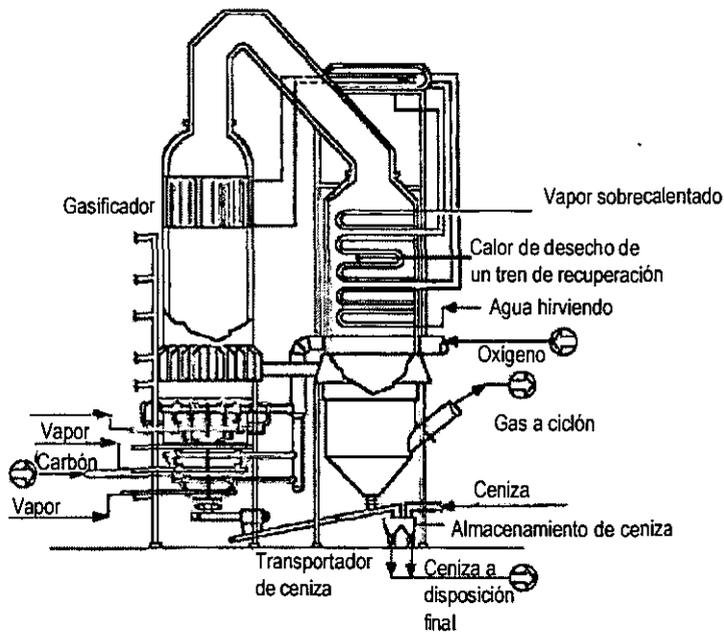


Figura 1.9 Gasificador *Winkler* [Parekh, 1982].

1.3.3 El sistema *Koppers-Totzek*

Este sistema se muestra en la figura 1.10. y es un gasificador de flujo por arrastre a presión atmosférica. El carbón a alimentar se seca y pulveriza. Típicamente, 70 a 80% de este carbón pasa a través de 200 mallas de 74 μm de apertura y se inyecta por medio de dos quemadores opuestos entre sí. El combustible reacciona con oxígeno y vapor para producir una temperatura de aproximadamente 2 200 K en la zona de flama. La temperatura del gas se reduce alrededor de 1760 K a través de intercambio de calor con vapor que circula por alrededor de las paredes. A esta temperatura, el carbón se convierte principalmente a CO , H_2 y CO_2 y mucha de la ceniza es fundida. El gas de síntesis que sale del gasificador se enfría con agua a una temperatura de 1200 K lo que contribuye a la solidificación de las cenizas. El gas entonces se procesa en un sistema removedor de azufre. Los gasificadores *Koppers-Totzek* que poseen dos quemadores procesan alrededor de 210 Ton/día de carbón, mientras que los de 4 quemadores a 90° procesan 430 Ton/día. Las aplicaciones más comunes de estos equipos hasta ahora han sido en la producción de amonio y metanol [Parekh, 1982; Simbeck *et. al.*, 1983].

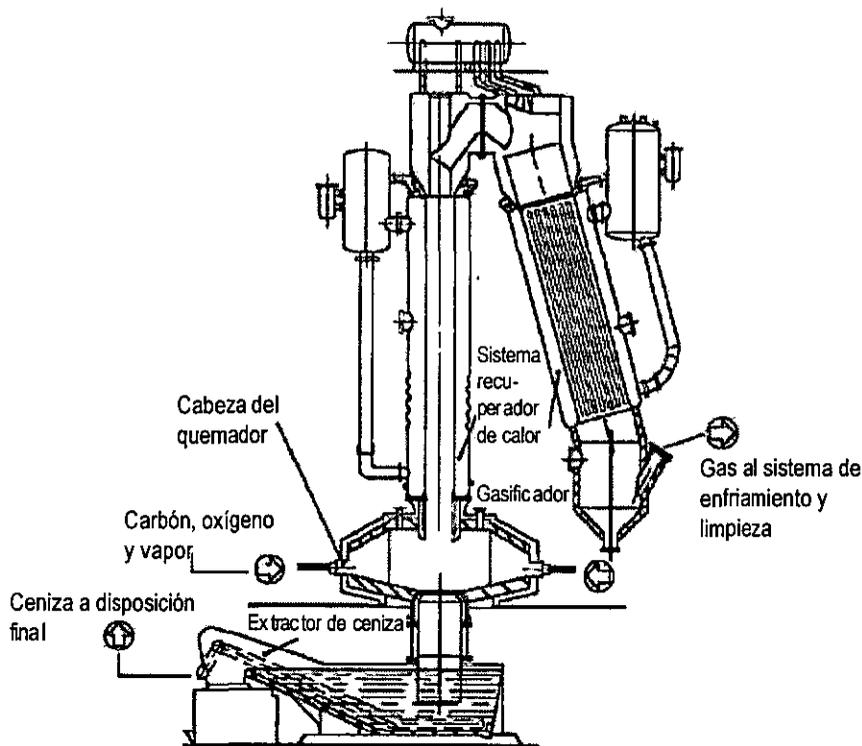


Figura 1.10 Gasificador *Koppers-Totzek* [Parekh, 1982].

1.3.4 El sistema *Texaco*

El sistema de *Texaco*, mostrado con sus auxiliares en la figura (1.11), posee un gasificador de flujo por arrastre, presurizado y de alimentación lechosa. El carbón pulverizado se mezcla con agua y condensados reciclados en un tanque con agitador. Esta mezcla carbón-agua, junto con el oxígeno o aire, se bombea a un quemador en la parte alta del gasificador. El agua de la mezcla se evapora y reacciona con el carbón, moderando la temperatura. La gasificación se da a temperaturas entre 1530 K y 1760 K. A estas condiciones el carbón se transforma principalmente a CO , H_2 y CO_2 con pequeñas cantidades de CH_4 ; no se presentan alquitranes u otros aceites. El Nitrógeno del combustible se convierte a N_2 con algo de NH_3 , mientras que el azufre se reduce a H_2S y pequeñas cantidades de COS . La ceniza se funde y abandona el gasificador. El gas producido se enfría y se lava con agua. Una importante aplicación de la gasificación de *Texaco* ha sido en las plantas de ciclo combinado, las cuales emplean esta tecnología para convertir aproximadamente 900 toneladas de carbón por día a un gas de poder calorífico medio, que se quema en una turbina de gas para producir electricidad.

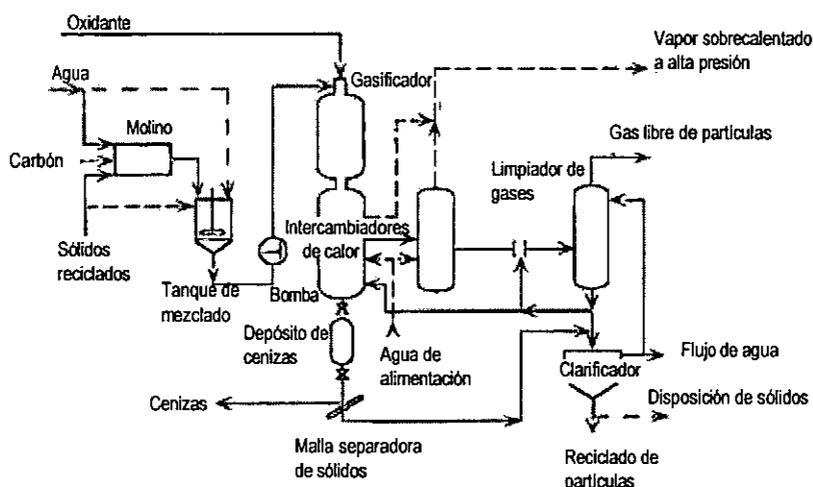


Figura 1.11 Sistema de gasificación *Texaco* [Simbeck et al 1983].

1.3.5 El sistema *Shell*

El proceso de gasificación *Shell*, mostrado en la figura 1.12 fue desarrollado por la *Shell Oil Company*. Se compone esencialmente de cuatro partes: 1) el reactor de gasificación; 2) el recuperador de efluentes, que incluye un intercambiador con el fin de recuperar el calor liberado por los gases calientes de salida del gasificador; 3) el intercambiador economizador que precalienta el agua que se alimenta al calentador; y 4) el sistema de recuperación de carbón para su reciclaje. En el gasificador, el hidrocarburo o carbón alimentado se atomizan en una mezcla de oxígeno (o aire) con vapor y reaccionan para formar CO , H_2 , H_2O y pequeñas cantidades de CO_2 y ceniza en la porción más baja del reactor. El azufre que acompaña a la alimentación se convierte en H_2S y COS , mientras una porción del nitrógeno se pasa a NH_3 y trazas de HCN . Aunque los gasificadores de este proceso generalmente son diseñados para operar a presiones bajas, se ha visto que un aumento en la presión beneficia los resultados [Ortiz & Hidalgo, 1995]. El gas obtenido se enfría en el intercambiador de calor a una temperatura de 400°C , generando vapor sobrecalentado de alta presión para su posterior integración al ciclo combinado. Los gases fríos son llevados al sistema de remoción y recuperación de sólidos; para que una vez limpios de partículas, pasen a un hidrolizador catalítico para la conversión de COS a H_2S . Posteriormente pasan por un sistema de para la eliminación de gases ácidos (*Rectisol*), donde se separa el H_2S y el CO_2 , los cuales son enviados a un proceso *Claus* para la recuperación de azufre. Los gases finalmente pueden ser incorporados a un ciclo combinado.

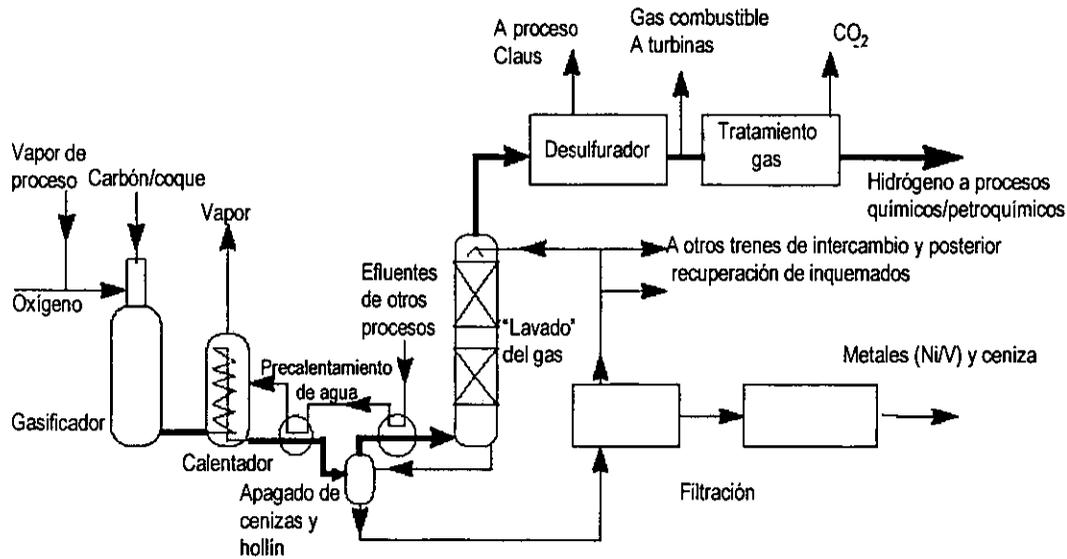


Figura 1.12 Sistema de gasificación *Shell* [De Graaf & Chen, 2000].

1.3.6 Gasificación bajo tierra

La gasificación bajo tierra es un proceso similar al que ocurre en los gasificadores de lecho fijo. El principio se ilustra en la figura (1.13). La gasificación se lleva a cabo bajo una capa de tierra, para lo cual, se hacen perforaciones que faciliten por un lado la inyección de oxígeno o aire junto con vapor de agua, y por el otro la extracción del gas producido. Entre las perforaciones se establecen tres zonas: de combustión, gasificación y volatilización. En la de combustión, CO_2 y H_2O son producidos para posteriormente quedar reducidos a CO y H_2 mediante reacciones endotérmicas en las zonas de gasificación y volatilización. En esta última zona, se producen además hidrocarburos ligeros. El gas producido posee un poder calorífico medio. Este proceso generalmente se emplea para combinar la extracción y conversión del carbón en un solo paso, sin embargo hay que considerar los posibles impactos ambientales por la contaminación del subsuelo. La investigación y desarrollo de este proceso ha sido intensa en la antigua Unión Soviética. Muchas instalaciones a escala industrial operaron durante muchos años [Olness & Gregg, 1977].

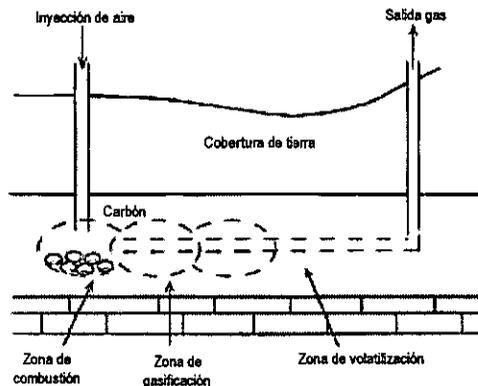


Figura 1.13 Sistema de gasificación bajo tierra [Carabotta, et. al., 1984].

1.4 Potencial de aplicación de la gasificación en México.

El desarrollo de la tecnología de gasificación ha respondido a tendencias mundiales que afectan las economías de la energía eléctrica y productos refinados. Ya que los crudos de petróleo se vuelven más pesados, los sistemas de refinería a menudo confrontan altos volúmenes de subproductos residuales de bajo valor y tóxicos para el medio ambiente.

Por otro lado, existe un enorme interés mundial por aprovechar los residuos biomásicos a través de la gasificación. Todo esto, abre un abanico de posibilidades de aplicación de esta tecnología en el mediano plazo.

1.4.1 Generación eléctrica

Hoy en día, México quema una gran cantidad de barriles de combustóleo de alto contenido de azufre, una parte del cual se emplea para la generación de energía eléctrica. Aunado a esto, las refinerías de PEMEX están produciendo coque de petróleo y otras corrientes de desperdicios que no están siendo completamente recicladas o convertidas en productos útiles. En este contexto, la gasificación de los residuos de la destilación de crudos y residuos pesados, como el coque de petróleo, resultan especialmente atractivos. Este es el caso de México, ya que dentro de sus reservas y volúmenes de producción presenta una tendencia cada vez mayor hacia la obtención de hidrocarburos de alto peso molecular, debido a la naturaleza de sus fuentes.

Adicionalmente, se estima que la demanda de gas natural en México se verá duplicada en los próximos 10 años [Rodarte, 1998]. Si se gasificara el coque de petróleo de PEMEX para la generación de energía eléctrica, el gas de producido sería equivalente a una contribución de 1.5 billones de pies cúbicos diarios de gas natural, con lo cual, este último combustible podría ser reservado para usos específicos en el sector residencial y en la industria química.

La gasificación permite su integración a un ciclo combinado, que es térmicamente más eficiente con respecto al ciclo *Rankine*. Esto hace suponer que es adecuado su incorporación a los esquemas de generación eléctrica; sin embargo, es necesario considerar los costos de inversión, operación y mantenimiento que repercuten en el costo por kilowatt-hora (kWh) generado afin de tomar una decisión.

1.4.2 Refinación del petróleo

Como resultado de la reestructuración del Sistema Nacional de Refinación de PEMEX, se espera que para el 2001 México producirá alrededor de 5.16×10^6 toneladas métricas por año de coque de alto contenido de azufre [PEMEX, 1997]. El uso de la tecnología de gasificación para convertir el material en hidrógeno, electricidad y vapor es una solución económica y ambientalmente factible.

La coquización de residuos de vacío es un proceso de los llamados "tecnologías de fondo de barril", que permite obtener gasóleo para su posterior carga a las unidades de craqueo catalítico fluidizado, previa desulfuración [Rivero, 1997]. Si bien la producción de gasóleo es importante, es fundamental encontrar una utilización para el coque que se genera en estos procesos. Una de las opciones tecnológicas más viables consiste precisamente en implementar una unidad de gasificación que permita obtener un gas de síntesis susceptible de ser utilizado en la generación de electricidad o en algún proceso de refinación, ya que la producción de hidrógeno en estos procesos debe considerarse también como un punto favorable adicional.

1.4.3 Biomasa

La preocupación mundial para reducir las emisiones de gases de efecto invernadero ha aumentado el interés en el uso de la biomasa para la obtención de energía. De igual manera, el alto nivel de dependencia del país en combustibles fósiles y la creciente atención a la protección del medio ambiente dan lugar a la necesidad de abrir el abanico de alternativas energéticas y tecnológicas y así transitar a una mayor diversificación energética y a la reducción de los impactos ambientales en la generación de electricidad

Cuando un combustible fósil es quemado, el carbón reacciona con el oxígeno para formar CO₂. El incremento de este elemento en la atmósfera, es motivo de preocupación mundial ya que este gas es posiblemente uno de los principales responsables del efecto invernadero y el consecuente cambio climático. Una alternativa para limitar el incremento de CO₂ en la atmósfera es el uso de la biomasa como fuente de energía mediante esquemas que aseguren su uso sustentable. La biomasa es básicamente un material orgánico, por lo cual, su contenido incluye principalmente carbono e hidrógeno. Por lo tanto, dentro de esta definición se incluyen materiales tales como la madera, residuos agrícolas, desechos humanos y animales, algunos desechos sólidos municipales y del procesamiento de la comida entre otros.

La tecnología de gasificación permite el uso de la biomasa para generar un gas susceptible de ser empleado como fuente de energía. Este hecho es útil, sobre todo en las áreas rurales dispersas de países como México, en las cuales se carece de la infraestructura necesaria para ser interconectados a la red eléctrica nacional.

Gran parte de las áreas rurales de México presenta actualmente un proceso acelerado de degradación ambiental y un empobrecimiento de los recursos forestales. El empleo de tecnologías como los gasificadores y esquemas productivos basados en el uso de recursos renovables, son elementos muy importantes para revertir las tendencias mencionadas y coadyuvar a un proceso de desarrollo sustentable.

1.4.4 Desechos Sólidos Municipales

La gasificación es una excelente manera de tratar los desechos municipales, e incluso tiene ventajas sobre la incineración, ya que sólo produce un residuo inerte eliminado el problema de la generación de dioxinas. Se estima que para el 2010, el 15% de las nuevas plantas tratadoras de desechos municipales en Europa estarán basadas en la gasificación [DTI, 1998].

En México, sobre todo en las áreas densamente pobladas como el Distrito Federal, se generan miles de toneladas de basura. Mediante la gasificación de la parte orgánica de estos desechos, se podría contribuir a mejorar el entorno ecológico y a la vez generar electricidad.

1.4.3 Aspectos ambientales

En lo que respecta a la calidad del aire, México, como el resto del mundo, está aplicando normas ambientales cada vez más estrictas. En sus estándares ambientales, restringe rigurosamente los niveles permisibles de SO_x y NO_x tanto de fuentes estacionarias como móviles. Por ejemplo, la norma NOM-085-ECOL-1994 [Diario Oficial de la Federación, 1994] establece que los niveles máximos permisibles de emisiones de SO₂ son de 0.086 kg/10⁵ kJ para la zona metropolitana de la ciudad de México y de 0.344 kg/10⁶ kJ para otras regiones críticas (Guadalajara, Monterrey, Irapuato, Celaya, Veracruz). Aunque esta norma se aplica para equipos de calentamiento directo e indirecto por combustión (hornos y calderas) sirve como parámetro de referencia para comparar los gasificadores. De acuerdo algunos documentos [DTI, 1998] los gasificadores integrados a ciclos combinados (IGCC) presentan emisiones de SO_x del orden de 60 g/GW.

En cuanto a la generación de óxidos de nitrógeno, la misma norma señala como máximo permisible el valor de 0.074 kg/GJ, y como se puede apreciar en el cuadro 1.A, los valores registrados en la bibliografía para los sistemas de gasificación más representativos salvan perfectamente esta restricción.

Cuadro 1.1 Generación de NO_x de dos sistemas de gasificación representativos.

Tecnología	Combustible	NO_x (kg/GJ)	Norma (kg/GJ)
Shell	Carbón	≈ 0,026	0.074
Texaco	No especificado	≈ 0,030	

Fuente: Martínez, 2000

1.5 Conclusiones

La gasificación es un proceso que cuenta ya con más de un siglo de existencia. Sin embargo, en los últimos años, ha recobrado mayor importancia debido a las crisis petroleras y el establecimiento de nuevas normas ambientales que imponen sanciones cada vez más severas a la emisión de contaminantes. Lo anterior ha conducido al desarrollo de tecnologías más eficientes y ambientalmente benignas.

En los últimos años, ha crecido el interés por usar la gasificación integrada a un ciclo combinado para generar electricidad mediante turbinas de gas. Esta integración se conoce como IGCC.

Existe una variedad de gasificadores. Estos difieren en general en el diseño técnico, la escala y el tipo de combustible manejado. La clasificación más común es por el tipo de flujo, es decir, la manera en que el combustible y el oxidante fluyen a través del equipo. De esta manera tenemos tres grupos de gasificadores: los de lecho fijo, lecho fluidizado, y los de flujo por arrastre. En cada grupo existen sistemas comerciales que actualmente se encuentran en el mercado a precios competitivos y con el antecedente de uno o varios equipos funcionando.

En el siguiente capítulo se adentrará en las bases teóricas del proceso de gasificación, revisando los conceptos físicos y químicos que involucra el proceso.

Capítulo 2

Aspectos químicos y físicos de la gasificación

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

2.1 Procesos durante la gasificación

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

Una partícula de carbón se puede considerar compuesta básicamente de cuatro materiales: 1)carbón "crudo", 2)agua o humedad, 3)carbonizado (*char*) y 4)ceniza (figura 2.1). Cuando la partícula se inyecta al gasificador se calienta por medio de la conducción de calor que proviene de la fase gaseosa, esto causa que el contenido de humedad en la partícula se transfiera a la corriente gaseosa en forma de vapor de agua (proceso de secado). Las temperaturas presentes en el equipo causan la pirolisis del carbón crudo. De este proceso, se obtienen algunos volátiles que son incorporados a la fase gaseosa y un sólido o residuo carbonizado (*char*) que permanece en la partícula. Este último dará origen a reacciones heterogéneas de superficie con los componentes de la corriente gaseosa, lo que provocará una disminución de la partícula de carbón. La ceniza es el contenido de material inerte de la partícula y durante los procesos de gasificación se considera que no se transforma. Los cuatro componentes de la partícula están dados por medio del análisis inmediato o aproximado del carbón o coque de petróleo y son contabilizados por medio de sus fracciones másicas. Los procesos anteriores se llevan a cabo dentro de un régimen turbulento inducido por la fase gaseosa.

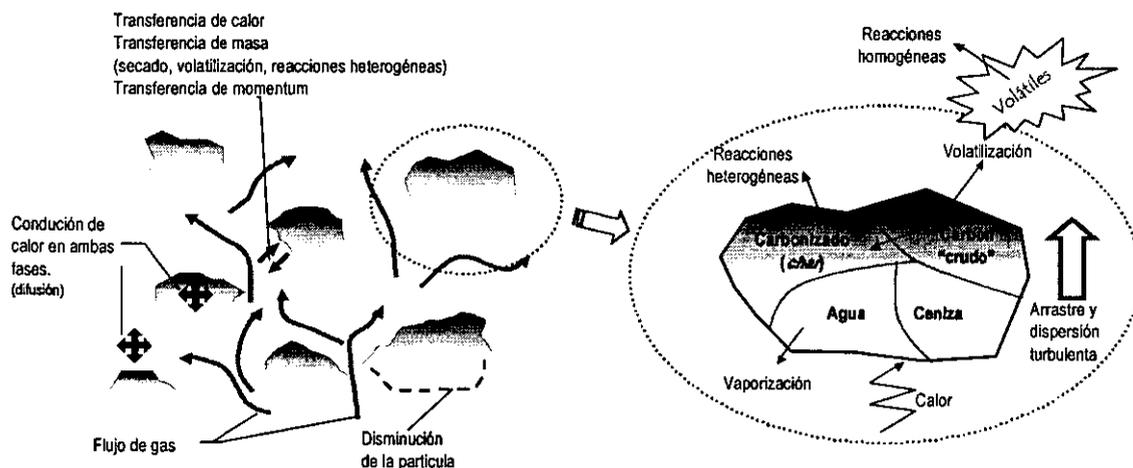


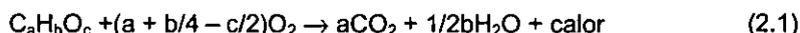
Figura 3.1 Procesos en la interfase y componentes de la partícula

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

2.2 Combustión de sólidos

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

Estequiométricamente la combustión de sólidos puede representarse en un paso de reacción de acuerdo a la ecuación 2.1:



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

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

A continuación se describen brevemente las tres fases.

1) Secado y calentamiento:

Durante este proceso, las partículas de combustible sufren cambios físicos, ya que éstas se contraen y pueden fracturarse. El grado de contracción es una función del contenido de humedad y del tipo de combustible, donde además ocurre una reducción en el diámetro de los poros. La fracturación se presenta cuando el líquido contenido en las partículas (humedad) se

evapora y genera una presión lo suficiente para romper la estructura de las mismas, o también, cuando este vapor no puede escapar suficientemente rápido.

Es un proceso endotérmico (necesita calor para llevarse a cabo) donde se controla la transferencia de calor, que depende del contenido de humedad, contenido de cenizas, dimensiones de las partículas, calor específico, conductividad térmica, difusividad y la geometría del equipo de combustión. El secado ocurre cuando la temperatura en la reacción excede los 105°C al punto en el que la humedad se convierte en vapor y se traslada a través de la estructura del poro a la superficie de la partícula (pasando la capa límite de ésta), como se muestra en la figura 2.2 siendo la conducción el mecanismo de transferencia de calor (Q), que se evalúa mediante la siguiente expresión:

$$Q = k_t S \left[\left(\frac{T_1 - T_2}{r_p} \right) \right] \quad (2.2)$$

Donde:

T_1 → temperatura en la superficie de la partícula;

T_2 → temperatura al centro de la partícula;

r_p → radio de la partícula;

k_t → conductividad térmica; y

S → superficie de la partícula

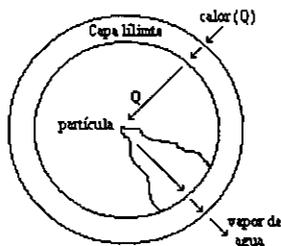


Figura 2.2 Esquema del proceso de calentamiento y secado de la partícula

2) Pirólisis:

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

Este proceso inicia cuando parte de las partículas del combustible alcanzan la temperatura de reacción, que es aproximadamente de 450-500°C, dependiendo del tipo de carbón. Este proceso involucra cambios físicos y químicos en el carbón.

Los cambios físicos sufridos son la contracción que se origina cuando los volátiles producidos se trasladan a la superficie de la partícula y ocurren reacciones químicas secundarias, originando alquitranes que pueden tapar los poros y por lo tanto se genera una presión interna que rompe la estructura de la partícula del combustible. Los cambios difieren para carbones que exhiben y que no exhiben un comportamiento de ablandamiento. Para carbones que no exhiben un comportamiento de ablandamiento, la estructura del poro cambia, según análisis estadísticos, como una serie de árboles (familia

de poros) como se muestra en la figura 2.3. Para carbones que exhiben un comportamiento de ablandamiento, ocurre un cambio físico durante la pirólisis, formándose un *metaplast* (sólido fundido), el cual puede alterar la transferencia de masa asociada a la combustión del carbón.

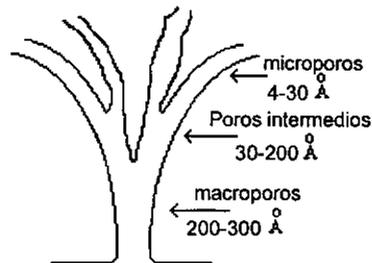


Figura 2.3 Estructura del árbol de poros del carbón

Los cambios químicos modifican las propiedades termodinámicas y de transporte en las partículas de combustible, por medio de reacciones que ocurren en la zona activa de pirólisis, siendo la temperatura de reacción la que se tiene entre la zona no reactiva del combustible y la zona activa de pirólisis (figura 2.4).

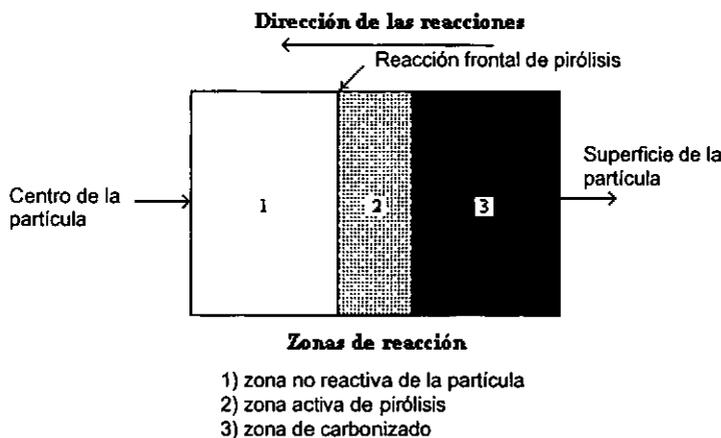
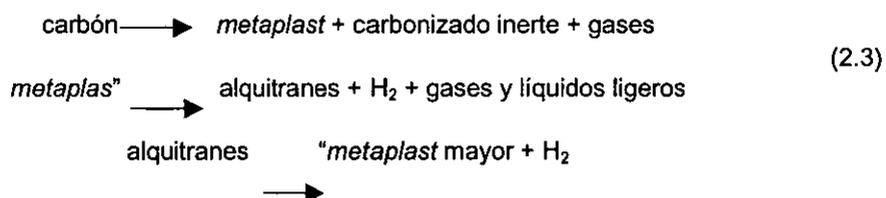


Figura 2.4 Zonas de reacción de la partícula

Suuberg [1981] propone un modelo que explica el proceso de pirólisis, como se indica a continuación:



Este proceso de oxidación inicia con una reacción primaria del carbón, donde existe una ruptura en las uniones débiles del compuesto, particularmente en las uniones C-C y C-O, como se muestra en la primera parte de la figura 2.5, obteniéndose el sólido

fundido o *metaplast* y gases volátiles condensables e incondensables. En la segunda parte de la figura antes citada se muestra la división de la estructura del material.

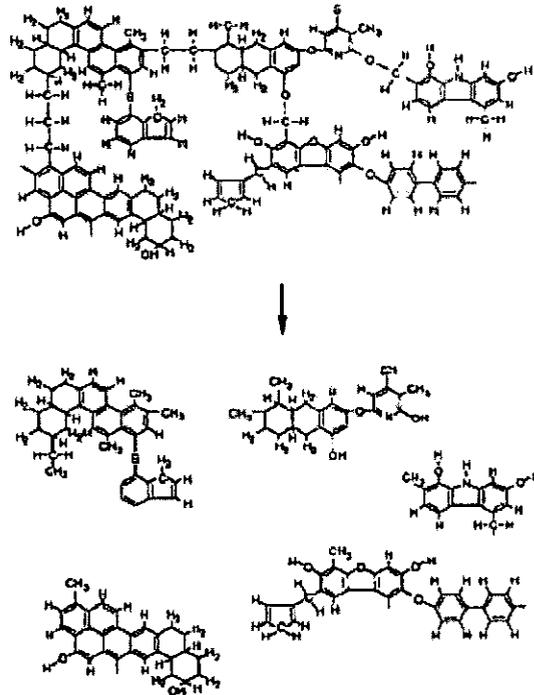


Figura 2.5 Ruptura primaria de cadenas

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

3) Carbonizado (*char*)

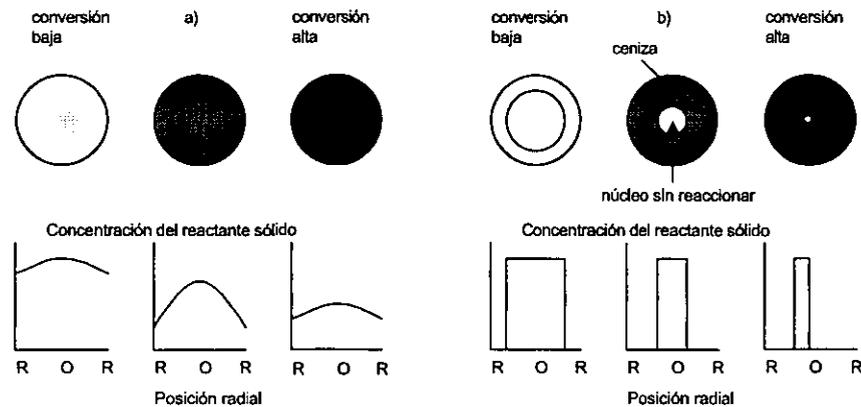
El carbonizado contiene cantidades de carbono, hidrógeno, oxígeno, nitrógeno, así como materiales residuales inertes. Físicamente tiene una serie de árboles de poros, cuyo diámetro es mayor [Hertzberg 1988]. El proceso de oxidación es por difusión de oxígeno controlado (control por transferencia de masa), donde esta difusión se efectúa del medio ambiente a la capa límite del carbonizado. A altas temperaturas (1204°C) la difusión se lleva a cabo en la superficie del carbonizado, a temperaturas intermedias (816-1204°C) la difusión se efectúa en los macroporos de la partícula y a bajas temperaturas (menores a 816°C) la difusión no tiene límite.

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



2.3 Secuencia de combustión

La oxidación parcial de una partícula de carbón o coque sigue la secuencia de secado y pirólisis, descritas en la sección anterior, y se llevan a cabo en un recipiente presurizado, mediante reacciones fluido-sólido no catalíticas (el sólido es un reactante). La fase sólida se transforma en una gaseosa (excepto por la cantidad de cenizas que se forman). El análisis del proceso de reacción, se efectúa por medio del comportamiento de una partícula sólida, que presenta dos modelos teóricos: de conversión progresiva y de núcleo sin reaccionar (Figura 2.6)



Notas:

R → radio; O → centro de la partícula

Figura 2.6 Modelos para reacciones no catalíticas gas-sólido.

1) Modelo de conversión progresiva:

Considera que el gas reaccionante penetra y reacciona simultáneamente en toda la partícula sólida, aunque normalmente las velocidades de reacción son diferentes en distintos lugares de la partícula. Por consiguiente el reactante sólido se transforma continua y progresivamente, como se muestra en la figura 2.6a.

2) Modelo de núcleo sin reaccionar:

La reacción inicia en la superficie exterior de la partícula, posteriormente la zona de reacción se desplazan hacia el interior del sólido, dejando atrás al material completamente convertido y al sólido inerte (cenizas). Así durante la reacción existirá un núcleo de material sin reaccionar, cuyo tamaño disminuirá a medida que transcurre la reacción, como se observa en la figura 2.6b.

Los dos modelos son válidos para integrar las velocidades de reacción. El modelo empleado en esta tesis es el de núcleo sin reaccionar, ya que es capaz de estimar valores adecuados con el fenómeno y puede evaluarse con cierta facilidad. Cabe señalar que el

comportamiento de las partículas sólidas durante la reacción tiende a disminuir en su tamaño hasta desaparecer.

2.4 Reacciones de gasificación

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

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

Las principales reacciones durante la gasificación, que envuelven al carbono, hidrógeno y oxígeno, se presentan en el cuadro 1.1. Las reacciones de (A) a (F) involucran oxígeno libre, mientras que las reacciones de (G) a (N) envuelven oxígeno combinado, generalmente con vapor de agua.

Cuadro 1.1 Reacciones clásicas de gasificación y combustión

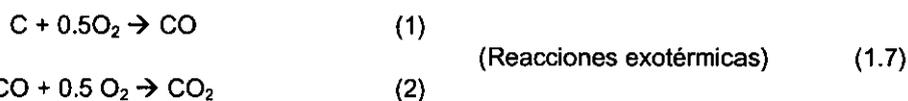
Reacciones químicas	Variación de entalpia ¹ $\Delta H \left[\frac{kJ}{kmol} \right]$	Ecuación
Con oxígeno libre		
$C + O_2 \rightarrow CO_2$	414602	(A)
$H_2 + 0,5 O_2 \rightarrow H_2O$	241700	(B)
$CO + 0,5 O_2 \rightarrow CO_2$	282940	(C)
$CH_4 + 2 O_2 \rightarrow CO_2 + 2 H_2O$	802954	(D)
$C + 0,5 O_2 \rightarrow CO$	110732	(E)
$CH_4 + 0,5 O_2 \rightarrow CO + 2 H_2$	36615	(F)
Con oxígeno combinado		
$CO + H_2O \rightarrow CO_2 + H_2$	41240	(G)
$C + CO_2 \rightarrow 2 CO$	172208	(H)
$C + 2 H_2 \rightarrow CH_4$	74117	(I)
$C + H_2O \rightarrow CO + H_2$	172827	(J)
$C + H_2O \rightarrow CO_2 + 2 H_2$	89727	(K)
$CH_4 + H_2O \rightarrow CO + 3 H_2$	205085	(L)
$CH_4 + 2 H_2O \rightarrow CO + 4 H_2$	163844	(M)
$CH_4 + 2 CO_2 \rightarrow CO + 2 H_2$	246325	(N)

Notas: ¹ Entalpia para agua en fase de vapor

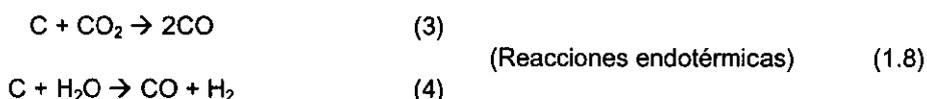
Fuente: Meunier, J (1958)

Como se puede observar, las reacciones de gasificación son complejas y el sistema se vuelve aún más complejo cuando se utiliza madera u otros residuos celulósicos, que producen alquitrán y ácidos piroleñosos durante la fase de pirólisis del combustible. No obstante la complejidad de las reacciones que implican la gasificación del carbono, es posible elaborar un modelo matemático que permita simular el proceso, considerando las reacciones mas representativas, por ejemplo:

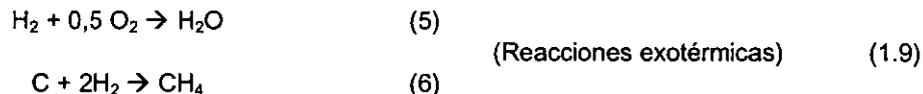
a) *Reacciones de combustión*



b) *Reacciones de gasificación*



c) *Otras reacciones*



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

2.5 Otros aspectos que influyen en el proceso de gasificación

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

a) *Temperatura:*

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

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

b) *Presión:*

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

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

Los sistemas de succión presentan menores problemas de pérdidas y son más utilizados en gasificadores de flujo concurrente (*downdraft*), en los cuales, los contenidos de ácido piroleñosos y alquitrán son menores.

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

c) *Materia prima para gasificación:*

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

d) *Humedad del combustible:*

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

2.6 Conclusiones

La gasificación es la conversión de materiales sólidos o líquidos (carbón, coque de petróleo o combustóleos) en gas cuyos componentes principales son el monóxido de carbono (CO) y el hidrógeno (H₂).

Los procesos que intervienen en la combustión son similares a los de gasificación, la diferencia la marcan principalmente las reacciones de oxidación parcial y endotérmicas que se originan; pero una partícula de combustible experimenta en ambos fenómenos procesos similares.

Los agentes oxidantes para la gasificación pueden ser oxígeno (O₂) o aire, y usualmente vapor de agua, que ayuda como moderador de la temperatura y participa en algunas reacciones de gasificación.

La ausencia de oxígeno en algunos puntos de un gasificador no impide que se lleven a cabo otros procesos de degradación térmica como la pirólisis y algunas reacciones de reducción.

En el siguiente capítulo, se trata de integrar un modelo computacional a los fenómenos anteriormente descritos

Capítulo 3

Descripción del modelo matemático

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

La integración de un conjunto de expresiones que describan el proceso de gasificación en el seno de un equipo, involucra la interacción entre ecuaciones de conservación, de transporte, modelos teóricos y empíricos, ecuaciones de estado, propiedades, etc. Lo anterior da como resultado la dependencia entre modelos, de tal forma que para obtener el comportamiento de algunos parámetros, se deben simular primeramente otros procesos. El objetivo del presente capítulo, es describir las ecuaciones y submodelos más representativos del proceso de gasificación del carbón o coque de petróleo para su integración en un modelo matemático que sirva como herramienta para el análisis de esta tecnología. Todas las expresiones empleadas provienen de la literatura.

3.1 Técnicas de modelización

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

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

Los modelos eulerianos-lagrangianos de gasificadores son más comunes en la literatura [Fletcher *et al*, 2000] [Chen *et al*, 2000] debido a que ofrecen algunas ventajas, sobre todo en la mayor simplicidad de las ecuaciones. Comparados con estos modelos, los eulerianos-eulerianos presentan algunas ventajas y desventajas. Entre las últimas, como ya se mencionó, los modelos son mucho más complicados y se ven afectados por la difusión numérica, la cual está ausente en los métodos lagrangianos. Sin embargo, los modelos eulerianos ofrecen también algunas ventajas sobre los lagrangianos, entre las cuales está el incluir una más completa formulación que facilita el uso de códigos paralelos y una mejor adaptabilidad a diferentes mallas. También, la dispersión de partículas debido a la turbulencia es mejor representada en estructuras eulerianas si el gradiente

de difusión del modelo es aceptable [Fueyo & Gambon, 1997]. En esta tesis la naturaleza del flujo a estudiar se considera bifásica (sólido-gas) y se utiliza un modelo del tipo euleriano-euleriano. Una adecuada predicción para estos fenómenos debe incorporar el cálculo de:

- Componentes de velocidad para cada fase
- Una fracción de volumen para cada fase
- Entalpías y temperaturas
- Especies químicas
- Velocidades de reacción
- Presión
- Cantidades de turbulencia (por ejemplo κ y ϵ)
- Tamaño de la partícula
- Radiación
- Etc.

Como corresponde a un modelo de este tipo, las propiedades de cada una de las fases (tales como velocidad o temperatura) diferirán en general en cada punto; se considera sin embargo que ambas fases comparten la presión. En su coexistencia en el mismo espacio las fases pueden intercambiar masa y otras propiedades como cantidad de movimiento o entalpía.

La variable que mide la cantidad local de cada fase es la fracción volumétrica r_i . Esta es una variable que depende del espacio y del tiempo, y es el volumen que ocupa la fase i por unidad de volumen local. Es condición necesaria que la suma de todas las fracciones volumétricas sea igual a uno.

3.2 Descripción del modelo

Un modelo representativo de la gasificación necesita tomar en cuenta los procesos relevantes que le ocurren a una partícula sólida de combustible (carbón o coque de petróleo), los cuales fueron descritos en el capítulo 2. La figura 3.1 representa un esquema del modelo implementado.

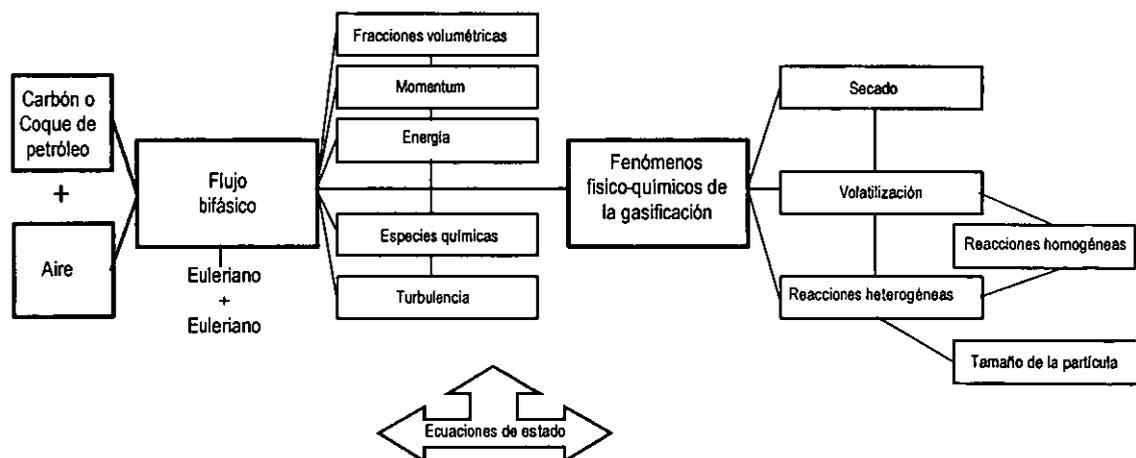


Figura 3.1 Esquema del modelo de gasificación

3.3 Ecuaciones para las fracciones volumétricas.

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

$$\frac{\partial(\rho_i r_i)}{\partial t} + \nabla(\rho_i r_i V_i) - \nabla(\Gamma_{r_i} \nabla r_i) = m_{j \rightarrow i} \quad (3.1)$$

Transitorio
Convección
Difusión de la fase
Fuente

En donde:

$i = 1$ en el caso del gas; $i = 2$ para el carbón;

ρ_i es la densidad de la fase;

V_i es el vector velocidad de la fase;

Γ_{r_i} es un coeficiente de difusión; y

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

Las fracciones de volumen están sujetas siempre a la siguiente condición:

$$r_1(x,y,z,t) + r_2(x,y,z,t) = 1 \quad (3.2)$$

La ecuación (3.1) se aproxima a la ecuación de continuidad empleada en flujos monofásicos, con las siguientes modificaciones: i) la aparición de la fracción volumétrica; ii) la aparición de un término difusivo para ésta; y iii) el término de intercambio de masa, que representa la masa que llega a la fase 1 proveniente de la fase 2 por unidad de volumen y unidad de tiempo.

3.4 Ecuaciones de conservación para propiedades

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

$$\frac{\partial(\rho_i r_i \Phi_i)}{\partial t} + \nabla(\rho_i r_i \Phi_i V_i) - \nabla(\Gamma_{r_i} \nabla r_i) - \nabla(\Gamma_{\Phi_i} \nabla \Phi_i) = S_{\Phi_i} \quad (3.3)$$

Transitorio
Convección
Difusión de la fase
Difusión de Φ_i
Fuente

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

Transporte entre fases

La propiedad conservada Φ_i puede representar:

- los componentes de la velocidad (ecuaciones de conservación de cantidad de movimiento en las tres componentes espaciales);
- la entalpía, (conservación de energía);

- fracción másica de una especie química (conservación de especies); o
- energía cinética turbulenta

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

Φ_* representa el valor de Φ en la masa que proviene de la fase j a la i ($m_{j \rightarrow i}$) y que esta ingresando a la fase i ; Φ_* tiene un significado similar ya que representa la masa que sale de la fase i hacia la j ($m_{i \rightarrow j}$). La doble barra ($\| \ \|$) en la ecuación (3.3) es un operador "upwind" el cual toma el valor máximo entre cero y la cantidad encerrada.

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

Finalmente, S_{Φ_i} representa otras fuentes, por ejemplo los gradientes de presión en las ecuaciones de momentum.

En la ecuación (3.3) aparecen dos términos de difusión en el lado izquierdo. El primero, determina la difusión turbulenta dentro de la fase, y solo está presente en la fase gaseosa, por lo que es determinado como en los casos monofásicos, a partir de la modelación de las correlaciones $\overline{V' \phi'}$; (la correlación entre las velocidades de fluctuación y la fluctuación de la propiedad). El segundo, es el transporte de Φ_j debido a la difusión turbulenta de r_i en la ecuación (3.1).

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

3.5 Modelos de combustión

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

3.5.1 Modelo de Arrhenius

Una primera clase de modelos de combustión turbulenta son los de la aproximación de Arrhenius. En este modelo esta basado en la cinética química mediante velocidades de reacción finitas y asume que la turbulencia no juega ningún rol en la combustión. Aquí, el término de producción está evaluado a partir de una forma típica de Arrhenius (3.4)

$$k_{Ar} = -A[X_i]^a [X_j]^b [X_k]^c e^{\frac{-E}{RT}} \quad (3.4)$$

Donde:

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

3.5.2 Modelo Eddy Break Up (EBU)

En el modelo EBU propuesto por Spalding [1976] se basa en la idea de que la química es más rápida que el mezclado, es decir, la velocidad de reacción media se modela considerando que la cinética química no juega un rol explícito (a diferencia del modelo de *Arrhenius* en donde la turbulencia es la que no juega un papel) y esta dada en términos de un tiempo de turbulencia típico y por la fluctuación local media cuadrática del combustible (ecuación 3.5)

$$k_{EBU} = C_{EBU} Y_k^{rms} \rho \frac{\varepsilon}{k} \quad (3.5)$$

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

$$Y_k^{rms} = \min\{Y_k, \alpha_k Y_{O_2}\} \quad (3.6)$$

Donde $\alpha_k Y_{O_2}$ es la fracción másica máxima de las especies k que son capaces de reaccionar con el oxígeno local.

3.5.3 Modelo del concepto de disipación turbulenta(EDC)

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

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

Sin embargo, en ocasiones la validez de asumir exclusivamente una u otra condición puede no ser muy representativo del sistema. Una solución intermedia es el modelo EDC, aunque al ser combinación de los modelos anteriores, posee parte de las limitaciones anteriormente descritas. En esta aproximación la velocidad de reacción química se modela limitándose por el más pequeño de los dos valores de las ecuaciones 3.5 y 3.6:

$$k_{EDC} = \min\{k_{Ar}, k_{EBU}\} \quad (3.7)$$

3.6 Componentes de la partícula de combustible

La composición de la partícula se representa en todo momento mediante la solución en todo el dominio de ecuaciones como la (3.3) para las fracciones másicas de los componentes de la partícula ($Y_2^{\text{carbonizado}}$, $Y_2^{\text{carbón crudo}}$, Y_2^{agua}). La fracción másica de la ceniza se calcula mediante la resta de éstas a la unidad de acuerdo a la siguiente relación:

$$Y_2^{\text{ceniza}} = 1 - Y_2^{\text{carbonizado}} - Y_2^{\text{carbón crudo}} - Y_2^{\text{agua}} \quad (3.8)$$

Los procesos por los cuales atraviesa la partícula y representados en la figura 3.1 son el secado, la volatilización del carbón crudo, reacciones heterogéneas del carbonizado (*char*) y reacciones homogéneas de los volátiles y otros gases combustibles. Los aspectos físicos y químicos de estos procesos fueron descritos en el capítulo 2, por lo que en los párrafos siguientes se mencionará la forma en que son simulados.

3.7 Secado de la partícula.

El secado de la partícula se considera asumiendo que, mientras la partícula contenga agua, todo el calor transferido a partir de la fase gaseosa se usa como calor latente de vaporización. Con lo cual, la transferencia de masa asociada a este proceso esta dada por la ecuación 3.9:

$$\dot{m}_{\text{secado}} = \frac{\dot{q}_{1 \rightarrow 2}}{L} \text{ para } Y_2^{\text{agua}} > 0; \quad \dot{m}_{\text{secado}} = 0 \text{ para } Y_2^{\text{agua}} = 0 \quad (3.9)$$

Donde:

$L \rightarrow$ calor latente de vaporización del agua, y

$q_{1 \rightarrow 2} \rightarrow$ representa la transferencia de calor de la fase gaseosa a la sólida, definida en la sección 3.13

3.8 Volatilización del carbón "crudo".

La volatilización origina que el carbón "crudo" sea consumido mediante la pirolisis para formar el carbonizado o *char* en la partícula y los volátiles en el gas. Esto es modelado a través de la ecuación 3.10:

$$1 \text{ kg de carbón "crudo"} \rightarrow Y \text{ kg de volátiles} + (1-Y) \text{ kg de } \textit{char} \quad (3.10)$$

Los volátiles son considerados como un hidrocarburo genérico CH_x , donde el coeficiente x se calcula a partir del análisis inmediato (el cual da la proporción de *char* y volátiles en la partícula) y el último (el cual da la composición elemental del carbón). De esta forma, el coeficiente x representa relación carbón-hidrógeno de la materia volátil.

La tasa o velocidad de volatilización que determina la transferencia de masa por este proceso se modela a través de una expresión del tipo de *Arrhenius* como:

$$\dot{m}_{\text{volatilización}} = -A_v Y r_2 \rho_2 Y_2^{\text{carbón"crudo"}} e^{\frac{-E_v}{RT_2}} \quad (3.11)$$

Donde A_v y E_v son constantes cinéticas las cuales dependen del tipo de carbón o coque utilizado. Los valores de estas constantes pueden encontrarse en la literatura para varios tipos de carbonos [Smith, 1983; Hargrave *et al*, 1986; Ryback & Zembrzusi, 1986].

3.9 Reacciones heterogéneas.

El modelo incorpora tres reacciones heterogéneas (sólido-gas) que se describen a continuación:

1) Oxidación parcial:

Reacción exotérmica en donde el carbonizado o *char* resultante del proceso de volatilización atraviesa por una oxidación parcial caracterizada por la siguiente reacción:

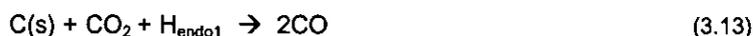


Donde:

$$\Delta H_{hetero} \rightarrow \text{Calor liberado} = 9.21 \text{ MJ/kg [Hobbs et al, 1993]}$$

2) Gasificación con CO₂:

Reacción endotérmica entre el carbonizado y el CO₂ dada por la siguiente expresión:



Donde:

$$\Delta H_{endo1} \rightarrow \text{Calor necesario para que se efectuó la reacción} = 14.33 \text{ MJ/kg [Hobbs et al, 1993]}$$

3) Gasificación con H₂O:

Reacción endotérmica entre el carbonizado o *char* y el H₂O dada por la siguiente expresión:



Donde:

$$\Delta H_{endo1} \rightarrow \text{Calor necesario para que se efectuó la reacción} = 9.36 \text{ MJ/kg [Hobbs et al, 1993]}$$

En las ecuaciones 3.12, 3.13, y 3.14, el CO y H₂ producidos se incorporan a la fase gaseosa para que posteriormente, si las condiciones de oxígeno lo permiten, sean oxidados completamente a CO₂ y H₂O respectivamente, mediante reacciones homogéneas.

Si el orden aparente de las velocidades de reacción es igual a uno, la transferencia de masa se obtiene de acuerdo a la expresión :

$$\dot{m}_{heterogénea} = \frac{6}{D} r_2 k_i P_k \quad (3.15)$$

Donde:

$D \rightarrow$ diámetro de la partícula de carbón

$r_2 \rightarrow$ fracción volumétrica de la fase sólida

$P_{O_2} \rightarrow$ presión parcial del O_2 , CO_2 ó H_2O

$k_t \rightarrow$ es la tasa de reacción global, la cual puede ser dada por las ecuaciones:

$$k_t = \min (k_c, k_d) \quad \text{ó} \quad (3.16)$$

$$k_t = (k_c^{-1} + k_d^{-1})^{-1}$$

Donde k_c es la tasa de reacción considerando que el proceso es gobernado por la cinética química y k_t es la tasa considerando que gobiernan los mecanismos de difusión en el fluido [Smoot and Smith, 1985]. Las respectivas ecuaciones son:

$$k_c = A_n e^{\frac{-Eh}{RT_2}} \quad (3.17)$$

$$k_d = \frac{ShD_k M_c}{RT_1 D} \quad (3.18)$$

Donde:

$Sh \rightarrow$ numero de *Sherwood*

$D_{O_2} \rightarrow$ coeficiente de difusión del O_2 , CO_2 ó H_2O

$M_c \rightarrow$ peso molecular del carbón

$R \rightarrow$ Constante universal de los gases.

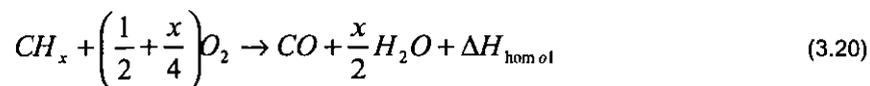
Si el orden aparente de las velocidades de reacción es de 0.5, la transferencia de masa debida a las reacciones heterogeneas esta determinada por:

$$m_{heterogénea} = \frac{6r_2 k_c}{2Dk_d} \left[-k_c + \left(k_c^2 + 4k_d^2 P_i \right)^{\frac{1}{2}} \right] \quad (3.19)$$

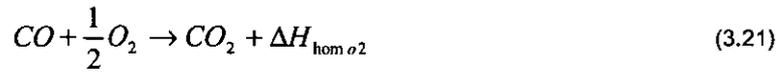
3.10 Reacciones homogéneas.

1) Oxidación de los volátiles y monóxido de carbono:

En esta parte del modelo, se realiza la oxidación parcial de los volátiles CH_x producidos en el proceso de pirólisis o volatilización mediante el paso de reacción de la ecuación 3.20.



Posteriormente, el CO producido, junto con el proveniente de las reacciones heterogéneas, se transforma completamente a CO_2 :



Donde:

$\Delta H_{\text{hom o2}} \rightarrow 23.59 \text{ MJ/kg}$ [Hobbs et al, 1993] y $\Delta H_{\text{hom o1}}$ se determina haciendo un ajuste con el poder calorífico inferior del combustible de acuerdo a la expresión:

$$\Delta H_{\text{hom o2}} = \frac{PCI}{\left[(1 - Y_2^{\text{agua}}) - (Y_c^{\text{char}})(\Delta H_{\text{hetero}} + \Delta H_{\text{hom o2}}) \right] (Y_c^{\text{volátiles}})} \quad (3.22)$$

Donde:

PCI \rightarrow Poder calorífico inferior del carbón

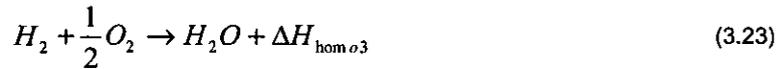
$Y_2^{\text{agua}} \rightarrow$ Fracción másica del agua contenida en la partícula de carbón crudo

$Y_c^{\text{char}} \rightarrow$ Fracción másica de carbono (C) en el carbón seco que evoluciona hacia *char* o carbonizado

$Y_c^{\text{volátiles}} \rightarrow$ Fracción másica de carbono (C) en el carbón seco que evoluciona hacia los volátiles

2) Oxidación del Hidrógeno:

El hidrógeno producido en las ecuaciones heterogéneas, se transforma en H_2O en las regiones donde exista oxígeno de acuerdo a la reacción:



Donde

$\Delta H_{\text{hom o3}} \rightarrow 120.9 \text{ MJ/kg}$ [Hobbs et al, 1993]

Para las velocidades de reacción en las ecuaciones 3.20, 3.21 y 3.23 el modelo incorpora cuatro opciones:

1) de acuerdo a un modelo del tipo Eddy Break Up:

$$\dot{k} = C_{EBU} \frac{\epsilon}{k} \min\left(\frac{y_1^i}{S_i}, \frac{y_1^j}{S_j}\right) \quad (3.24)$$

Donde:

$y_1^i; y_1^j \rightarrow$ son dos fracciones másicas de las especies que participan, y

$S_i; S_j \rightarrow$ son los coeficientes estequiométricos asociados.

2) Con una forma típica de Arrhenius:

$$\dot{k} = A \rho e^{\frac{E}{RT}} \quad (3.25)$$

Donde E es la energía de Activación; R la constante universal de los gases y la constante A es el factor pre-exponencial.

3) Con la aproximación EDC:

$$\dot{k} = \min(\dot{k}_{Ar}, \dot{k}_{EBU}) \quad (3.26)$$

4) Con el promedio armónico de las dos tasas de reacción:

$$\dot{k} = (\dot{k}_{Ar}^{-1} + \dot{k}_{EBU}^{-1})^{-1} \quad (3.27)$$

3.11 Tamaño de partícula de combustible

El carbón (o coque de petróleo) cambia tanto química como físicamente a medida que va pasando por los procesos anteriormente descritos (ver capítulo 2). El cálculo del tamaño de la partícula es uno de los principales ingredientes en la simulación de un sistema bifásico. Específicamente para el caso de la combustión o gasificación del carbón, el tamaño de la partícula juega un rol importante en los procesos de interfase gas-sólido que controlan las reacciones en el carbón tales como el arrastre de las partículas y la dispersión turbulenta, el calentamiento y pirolisis, y la reacciones heterogéneas. El tamaño de las partículas y la presencia de cenizas también tienen una clara influencia en la transferencia de calor radiactiva dentro de los equipos [Fueyo *et al*, 1996].

El modelado del tamaño de la partícula en esta tesis se lleva a cabo mediante un método desarrollado por Fueyo *et al* [1996], el cual a su vez es una extensión del método "shadow" creado por Spalding [1982]. En este último, el tamaño de la partícula se calcula resolviendo para la fracción volumétrica de una fase adicional que se comporta como la fase de la partícula, pero no participa en la transferencia de masa. A diferencia del método original, la presente técnica permite seleccionar los procesos de transferencia de masa que contribuirán a un cambio en el tamaño.

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

$$\frac{\partial(\rho_2 r_2 \Phi_s)}{\partial t} + \nabla(\rho_2 r_2 \Phi_s V_2) - \nabla(\Gamma_{r_2} \nabla r_2) = S_{\Phi_s} \quad (3.28)$$

En la ecuación 3.28, Φ_s incluye todas fuentes asociadas a la fase 2 debido a todos los procesos que no contribuyen a una disminución en el tamaño de la partícula. En esta tesis, se considera que el único proceso de transferencia de masa que contribuye a una disminución en tamaño es el dado por las reacciones heterogéneas (reacciones de superficie). Lo racional de este método es que el producto $\Phi_s r_2$ es r_s , la fracción volumétrica de la fase "shadow" del método de Spalding.

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

$$D = D_i \Phi_s^{-\frac{1}{3}} \quad (3.29)$$

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

3.12 Transferencia de calor entre gas y partículas.

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

$$q_{j \rightarrow i} = 6 \frac{r_2}{D^2} \rho_1 Nu k_g (T_j - T_i) \quad (3.30)$$

Donde k_g es la conductividad térmica del gas, y el número de *Nusselt* se calcula como [Fueyo & Gambon, 1997]:

$$Nu = 2.0 + 0.65 Re^{0.5} Pr^{0.333} \quad (3.31)$$

3.13 Arrastre en la interfase

La fuerza de arrastre entre el gas y las partículas es modelada como una fuerza que actúa sobre partículas esféricas (la esfericidad es igual a uno). El algoritmo es tomado del modelo PCGC (*Pulverized Coal Gasification or Combustión*) desarrollado por la Universidad de Brigham Young [Smith et al, 1981; Smoot et al, 1988; Brewster et al, 1993]. La densidad del número de partículas, como función de la fracción volumétrica y del diámetro de la partícula es $\frac{6}{\pi D^3} r_2$, y por lo tanto la fuerza total de arrastre (por unidad de volumen y velocidad de deslizamiento) es:

$$f_{i \rightarrow j} = f_{j \rightarrow i} = \frac{3r_2}{4D} \rho_1 C_D |V_1 - V_2| \quad (3.32)$$

Donde C_D es el coeficiente de arrastre definido como:

$$C_D = \frac{24(1 + 0.15 Re^{0.687})}{Re} \quad (3.33)$$

3.14 Modelado de la turbulencia

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

Dentro de las posibilidades de simulación de flujos turbulentos, están los llamados "modelos de turbulencia", que básicamente consisten en promediar las fluctuaciones turbulentas y resolver ecuaciones para los valores medios de las propiedades del fluido. Los modelos más empleados en la ingeniería son los modelos de viscosidad turbulenta, que se basan en una

analogía entre el flujo turbulento (macroscópico) y el flujo molecular (microscópico). Por ejemplo, del mismo modo que en el nivel molecular el flujo de calor es proporcional al gradiente de temperatura, el flujo turbulento de Φ se supone proporcional al gradiente de Φ . El factor de proporcionalidad es la viscosidad turbulenta, la cual, es el objeto de los modelos de turbulencia.

El modelo más popular de este tipo, es el modelo κ - ϵ , (empleado en este trabajo), y en donde la viscosidad turbulenta ν_T se define como:

$$\nu_T = C_\mu \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\epsilon}} \quad (3.34)$$

Donde C_μ es una constante determinada experimentalmente y los valores de \tilde{k} y de $\tilde{\epsilon}$ se calculan a partir de ecuaciones de transporte [Jones & Launder, 1972; Rodi, 1984].

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

$$\frac{\partial}{\partial t}(\tilde{\rho}\tilde{k}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\tilde{\rho}\tilde{u}_j\tilde{k}) = \tilde{\rho}(P_k - \tilde{\epsilon}) + \frac{\partial}{\partial j} \left(\tilde{\rho} \frac{\nu_T}{\sigma_k} \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_j} \right) \quad (3.35)$$

Donde:

$$P_k = \nu_T \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \left(\tilde{k} + \nu_T \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i} \quad (3.36)$$

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

$$\frac{\partial}{\partial t}(\tilde{\rho}\tilde{\epsilon}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\tilde{\rho}\tilde{u}_j\tilde{\epsilon}) = \tilde{\rho} \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}} (C_{\epsilon 1} P_k - C_{\epsilon 2} \tilde{\epsilon}) + \frac{\partial}{\partial j} \left(\tilde{\rho} \frac{\nu_T}{\sigma_\epsilon} \frac{\partial \tilde{\epsilon}}{\partial x_j} \right) \quad (3.37)$$

Las constantes de las ecuaciones 3.34, 3.35 y 3.37 se muestran en el cuadro 3.1

Cuadro 3.1 Constantes del modelo κ - ϵ

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

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

3.15 Dispersión turbulenta de partículas

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

$$\overline{r_2 V_2} = -\frac{v_t}{\sigma_{r_2}} \nabla r_2 \quad (3.38)$$

Donde la aproximación de Rizk y Elgobashi [1989] es usada para σ_{r_2} :

$$\sigma_{r_2} = \left[1 + \frac{3}{2} 0.85 \frac{|V_1 - V_2|^2}{k} \right]^{0.5} \quad (3.39)$$

Donde k es la energía cinética turbulenta.

3.16 Componentes de la fase gaseosa

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

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

Ecuaciones de transporte como la 3.3 son resueltas para todas las especies excepto para el nitrógeno ($y_1^{N_2}$), el cual es determinado de la condición de que la suma de todas las fracciones másicas es igual a uno. Como se puede observar, el modelo no incorpora reacciones para el azufre del combustible. Este elemento se considera como "inerte" y pasa directamente a las cenizas.

3.17 Radiación térmica

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

La ecuación de la intensidad radiante I es una compleja expresión integro-diferencial que se muestra en la ecuación 3.40 en una forma integrada espectralmente (sin dependencia de la longitud de onda).

$$\frac{dI}{ds} = \underbrace{-aI}_{\substack{\text{Absorción} \\ A}} \underbrace{-sI}_{\substack{\text{Dispersión} \\ \text{Emitida} \\ DD}} + \underbrace{a \frac{\sigma T^4}{\pi}}_{\substack{\text{Emisión} \\ E}} \underbrace{\int p(\Omega, \Omega') I d\Omega'}_{\substack{\text{Dispersión} \\ \text{Recogida} \\ DR}} \quad (3.40)$$

Donde:

$I \rightarrow$ intensidad radiante;

$a \rightarrow$ se asume $a = \epsilon = \alpha$;

$\epsilon \rightarrow$ emisividad (relación entre la energía emitida por un cuerpo y la que emitiría un cuerpo negro);

$\alpha \rightarrow$ absorptividad (fracción de la energía radiante incidente que es absorbida);

$s \rightarrow$ coeficiente de dispersión (*scattering*);

$\Omega, \Omega' \rightarrow$ Direcciones de dispersión de la radiación.

$\sigma \rightarrow$ constante de *Stefan-Boltzmann*.

El significado de la ecuación es más evidente por referencia a la figura 3.2, que expresa las pérdidas y ganancias (por unidad de longitud) en intensidad I que sufre un rayo que viaja en una dirección determinada al atravesar un volumen de fluido.

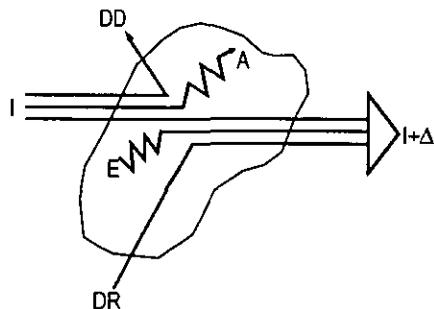


Figura 3.2. Pérdidas y ganancias de la ecuación de intensidad de radiación I

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

En la ecuación 3.40, la dirección en la que viaja el rayo es una variable independiente que a su vez está determinada por dos cosenos directores. La solución de esta ecuación, incluso obviando el término integral, es muy compleja. Se han desarrollado varios métodos computacionales, entre los que se encuentran los métodos estocásticos de Montecarlo, el método de transferencia discreta y los métodos de flujos [Docherty & Fairweather, 1992]. Esta última opción es la empleada en esta tesis.

3.18 Otras ecuaciones utilizadas

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

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

$$\rho = \frac{p}{RT \sum_{k=1}^n \frac{y_k}{W_k}} \quad (3.41)$$

Donde:

$p \rightarrow$ presión

$R \rightarrow$ Constante universal de los gases

$T \rightarrow$ Temperatura

y_k y $W_k \rightarrow$ Fracciones másicas y pesos moleculares de las especies k

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

$$h = \sum_{k=1}^n y_k h_k \quad (3.42)$$

Donde h_k es la entalpía de cada especie de la mezcla. La entalpía de la especie k es la suma de las entalpias térmica y química:

$$h_k = \int_{T^0}^T C_{p_k} dT + \Delta h_{f,k} \quad (3.43)$$

Donde:

$T^0 \rightarrow$ temperatura de referencia

$C_{p_k} \rightarrow$ calor específico a presión constante

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

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

3.19 Conclusiones

Las ecuaciones que integran el modelo desarrollado en este documento, representan la mayoría de los fenómenos relevantes que ocurren en la gasificación del carbón o coque de petróleo. Las expresiones provienen de diversas fuentes de información y requieren de parámetros que al igual, provienen de la bibliografía citada. Todos los submodelos descritos y ecuaciones son incorporadas al modelo computacional mediante subrutinas que son acopladas al código numérico PHOENICS. De esta forma, se da el intercambio de parámetros entre ecuaciones de transporte y de estado, modelos de combustión y turbulencia y demás algoritmos que constituyen los procesos anteriormente señalados.

El método y forma de abordar estas ecuaciones para obtener una solución adecuada se discute en el siguiente capítulo.

Capítulo 4

Método de solución

Este capítulo presenta el método de solución de las ecuaciones que componen el modelo del flujo reactivo presentadas en el capítulo 3 para así obtener la información sobre campos de presiones, velocidades, temperaturas, especies, etc. Como se observó en el capítulo anterior, las ecuaciones que describen el fenómeno son complejas y hasta la fecha no hay solución analítica para la gran mayoría de éstas; motivo por el cual, es necesario recurrir a los métodos numéricos para encontrar soluciones óptimas

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

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

4.1 La dinámica de fluidos computacional (CFD)

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

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

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

- Un pre-procesador,

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

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

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

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

4.2 Las ecuaciones de transporte

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

$$\frac{\delta(\rho\phi)}{\delta t} + \text{div}(\rho v\Phi) - \Gamma_{\phi} \text{grad}\Phi = S_{\phi} \quad (4.1)$$

Transitorio	Convección	Conducción	Fuente
-------------	------------	------------	--------

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

De este modo, dependiendo del tipo de propiedad ϕ_i representada, la expresión general se convierte en la ecuación de conservación de dicha cantidad física. Así, se puede construir el cuadro 4.1.

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

- variación de presiones en el tiempo,
- gradientes de presión,
- términos de producción o destrucción de especies químicas,
- fuerzas de gravedad o electromagnéticas,
- fuerzas de fricción o centrifugas, etc.

Cuadro 4.1 Términos más comunes de ϕ_i para la ecuación general de conservación

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

4.3 Diagrama de flujo del proceso de solución

Los códigos CFD generalmente abordan un problema de manera similar. El proceso en general consta de seis etapas que pueden observarse en la figura 4.1. Las etapas 1 y 2 forman parte del pre-procesamiento; en éstas, se debe plantear el sistema de ecuaciones diferenciales que define nuestro problema, la geometría debe quedar perfectamente acotada y el dominio es dividido en pequeños subdominios. Las etapas 3, 4 y 5 integran la parte medular del procesamiento e involucran el método de discretización que convierte las ecuaciones diferenciales a un conjunto de ecuaciones algebraicas lineales así como el método de solución de estas últimas. Y el paso 6, es el post-procesamiento del campo calculado en las etapas posteriores y la manipulación de éste.

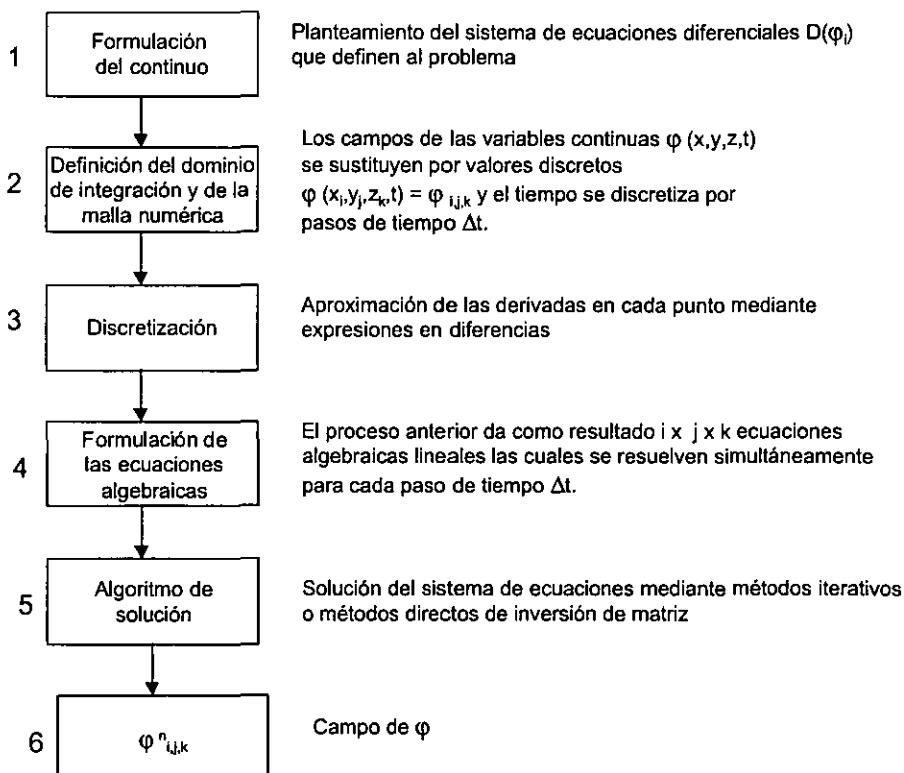


Figura 4.1 Proceso para la solución de un problema mediante CFD

4.4 El método de volúmenes finitos.

En este trabajo se resuelven las ecuaciones de transporte (representadas por la ecuación 4.1) mediante el método de la integración de volúmenes de control o volúmenes finitos. Este método consiste de los siguientes pasos:

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

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

Las ecuaciones algebraicas obtenidas por este método son derivadas de la integración de las ecuaciones diferenciales sobre volúmenes de control de tamaño finito llamados subdominios o "celdas", las cuales son tipológicamente cartesianas, teniendo seis lados y ocho esquinas.

La figura 2.3 representa la división de un dominio en celdas, así como un volumen de control típico con la nomenclatura empleada para la discretización de las ecuaciones diferenciales.

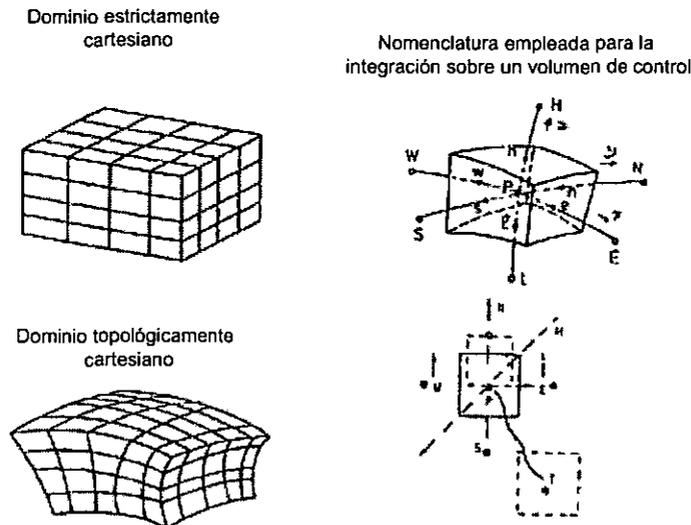


Figura 4.2 Representación del sistema discretizado en volúmenes finitos

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

Si integramos la ecuación (4.1) en un volumen de control:

$$\int_{vc} \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} dV + \int_{vc} \text{div}[\rho\phi u] dV = \int_{vc} \text{div}[\Gamma \text{ gra } d(\phi)] dV + \int_{vc} S_{\phi} dV \quad (4.2)$$

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

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{vc} \rho \phi dV + \int_{sc} n \cdot [\rho \phi u] dV = \int_{sc} n \cdot [\Gamma \text{ gra } d(\phi)] dV + \int_{vc} S_{\phi} dV \quad (4.3)$$

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

$$\int_{\Delta t} \left(\frac{\partial}{\partial t} \int_{vc} \rho \phi dV \right) + \int_{\Delta t sc} n \cdot [\rho \phi u] dV = \int_{\Delta t sc} n \cdot [\Gamma \text{ gra } d(\phi)] dV + \int_{\Delta t vc} S_{\phi} dV \quad (4.4)$$

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

$$a_p T_p = a_N \phi_N + a_S \phi_S + a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_H \phi_H + a_L \phi_L + b \quad (4.5)$$

Donde:

$a_p, a_N, \text{ etc.}$, son coeficientes;

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

Los subíndices, de acuerdo a la figura 4.2, tiene el siguiente significado:

P → Nodo típico sobre el cual se esta discretizando la ecuación;

N → Nodo vecino al norte, es decir, en dirección y-positiva;

S → Nodo vecino al sur, es decir, en dirección y-negativa;

E → Nodo vecino al este, es decir, en dirección x-positiva;

W → Nodo vecino al oeste, es decir, en dirección x-negativa;

H → Nodo vecino alto, es decir, en dirección z-positiva;

L → Nodo vecino bajo, es decir, en dirección z-negativa;

Se resuelve el conjunto de ecuaciones algebraicas de volumen finito para todas las celdas y ϕ 's en cuestión de una manera iterativa. La deducción detallada de la ecuación 4.5 y mayores detalles acerca de la discretización de la ecuación integrodiferencial (4.4) pueden consultarse en textos de fluidodinámica computacional, por ejemplo Patankar [1980]; Versteeg y Malalasekera [1995].o a Ferziger y Peric [1996]; en la siguiente sección se presenta un resumen que dará al lector un contexto de dicha discretización..

4.5 Discretización de las ecuaciones.

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

como el mostrado en la figura 4.3 (el espesor de la celda en la dirección z puede considerarse la unidad).

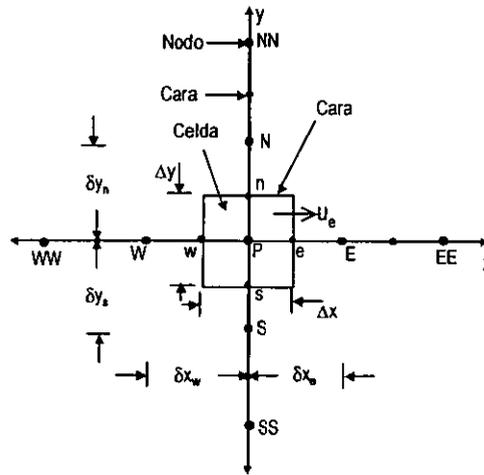


Figura 4.3 Diagrama esquemático de un volumen de control bidimensional

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

En la figura 4.3 se muestra la notación de la celda y de sus vecinas. Dada Una celda P, sus vecinas se notan de acuerdo a los puntos cardinales (en ingles) y como *Low* y *High* en la dirección z. Las caras de las celdas se nombran con la misma nomenclatura, pero con letras minúsculas. El tiempo también se discretiza, y las celdas en la dirección temporal se llaman intervalos temporales. La celda P en el paso temporal se nota como T.

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

$$F = \tilde{\rho} \tilde{v}_i; \quad D = \frac{\Gamma}{\delta_i}; \quad Pe = \frac{F}{D} \tag{4.6}$$

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

Los coeficientes de la ecuación 4.5 están definidos como:

$$a_i = D_i f(Pe_i) + \max(-F_i, 0) \tag{4.7}$$

Los valores de F y D en la cara de la celda de la ecuación 4.7 son:

$$F_i = (\bar{\rho} \tilde{v}_i)_i \Delta i; \quad D_i = \frac{\Gamma_i \Delta_i}{\delta_i}; \quad i = n, s, e, w \quad (4.8)$$

Donde Δi es la longitud de la cara i .

Para determinar F_i se necesita conocer ρ y \vec{v}_i en la cara de la celda. El término de la ecuación de transporte (4.1) requiere también el conocimiento de los escalares Φ en la cara de la celda. La velocidad \vec{v}_i está calculada en la cara si la malla es decalada; pero ρ y Φ están calculados en el nodo y necesitan ser interpolados a la cara para calcular los coeficientes a_i de la ecuación discretizada 4.5. La obtención de estas variables en la cara de la celda es importante en la precisión y convergencia de la solución. El cálculo de ρ y Φ da lugar a los llamados esquemas de discretización. La función $f(|Pe|)$ de la ecuación 4.7 depende del esquema empleado. Por ejemplo, en el esquema de diferencias desplazadas, $f(|Pe|) = 1$, y para el sistema híbrido [Patankar, 1980]:

$$f(|Pe|) = \max(0, 1 - 0.5|Pe|) \quad (4.9)$$

El coeficiente para el término transitorio es

$$a_T = \frac{\rho \Delta x \Delta y}{\Delta t} \quad (4.10)$$

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

$$\Gamma_e = \frac{\Delta x (\Gamma_P + \Gamma_E)}{2\delta x_e}; \quad \text{ó} \quad \Gamma_e = \frac{2\delta x_e}{\Delta x \left(\frac{1}{\Gamma_P} + \frac{1}{\Gamma_E} \right)} \quad (4.11)$$

El término fuente de la ecuación general 4.5 se linealiza como:

$$\bar{S}_\Phi = \bar{S}_{\Phi,C} + \bar{S}_{\Phi,V} \Phi_P \quad (4.12)$$

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

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

$$B = \bar{S}_{\phi,c} \Delta x \Delta y + a_T \Phi_T \quad (4.13)$$

$$a_p = a_e + a_w + a_n + a_s + a_T - \bar{S}_{\phi,v} \Delta x \Delta y \quad (4.14)$$

La ecuación 4.5 se aplica en cada celda del dominio, para cada Φ y para cada paso temporal Δt , por lo que se tiene un sistema de ecuaciones lineales en donde los coeficientes a pueden depender, directa o indirectamente de Φ , por lo que el sistema es realmente pseudo-lineal.

Para resolver este sistema de ecuaciones se puede utilizar cualquier método de resolución de ecuaciones lineales, por ejemplo el método de matrices tridiagonales "TDMA" adaptado para tres dimensiones. Esta adaptación consiste en aplicar el método a cada grupo de celdas que se encuentren a un mismo índice en dirección 'z'. A cada grupo se le llama "slab" y el procedimiento se llama "slab-by-slab" (ver figura 4.4). El proceso se da tantas veces sea necesario, hasta que la solución alcance la convergencia.

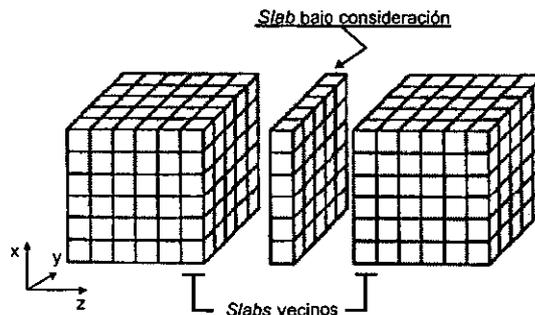


Figura 4.4 Secuencia del método TDMA adaptado para tres dimensiones

4.6 Acoplamiento entre velocidad y presión.

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

Una solución ampliamente utilizada es transformar la ecuación de continuidad en una ecuación para la presión. Entre los algoritmos iterativos que se basan en este procedimiento están los de la familia SIMPLE (*Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations*) [Patankar and Spalding, 1972] [Patankar, 1980]. El algoritmo empleado en esta tesis para resolver el problema de acoplamiento velocidad-presión es el IPSA (*Inter-Phase Slip Algorithm*) el cual es análogo a los de la familia SIMPLE, pero fue diseñado específicamente para el caso de flujos bifásicos [Spalding, 1981].

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

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

4.7 Convergencia.

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

La relajación es la técnica más usada para procurar la convergencia. La idea de esta técnica es disminuir la velocidad a la que el procesador de ecuaciones lineales procede, con el fin de evitar que grandes cambios a los valores de las variables introducidas durante el proceso iterativo causen la divergencia del mismo. El método de relajación es aplicable tanto para las variables dependientes como para las propiedades y fuentes. Se emplean dos tipos de relajación: la inercial y la lineal.

La relajación inercial (o de falso paso temporal) se emplea principalmente para velocidades y consiste en añadir a la ecuación algebraica un término fuente (ecuación 4.15) que es idéntico al que resulta de discretizar el término temporal de la ecuación de conservación.

$$\bar{S}_{\phi, v} = \frac{\rho_P V_P}{\Delta t_f} (\Phi^{n-1} - \Phi^n) \quad (4.15)$$

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

La relajación lineal consiste simplemente en aceptar un valor para cada variable en cada celda que es una combinación lineal del valor pre-existente (resultado de la iteración anterior) y del valor proporcionado por el procesador de ecuaciones algebraicas. Este es el tipo de relajación empleado generalmente para la presión y densidad y esta dada por la siguiente expresión:

$$\Phi_p^n = \alpha \Phi_p^{sol} + (1 - \alpha) \Phi_p^{n-1} \quad (4.16)$$

Donde α es el factor de relajación, el cual, normalmente toma valores entre 0 y 1; y el superíndice *sol* se refiere al valor de la propiedad proporcionado por el procesador (*solver*) en la iteración actual. Nótese que al alcanzar la convergencia, $\Phi_p^n = \Phi_p^{n-1}$, con lo cual se demuestra que la relajación no cambia la solución final, sino sólo la velocidad a la que se alcanza.

4.8 Conclusiones

La Dinámica de Fluidos Computacional es una disciplina en la que coexisten diversas técnicas alternativas para la solución a un sistema de ecuaciones. En este documento se presenta brevemente el método de volúmenes finitos, utilizado por el código numérico PHOENICS. Las técnicas de discretización, el acoplamiento entre la velocidad y la presión así como los métodos para procurar la convergencia generalmente son válidos en todos los códigos CFD.

En el siguiente capítulo, se presentan y discuten los resultados obtenidos al aplicar el modelo a diversas formas de gasificadores y condiciones de operación de dichos equipos.

Capítulo 5

Resultados

Una vez presentado el modelo, así como el método empleado para la resolución de ecuaciones, en el presente capítulo se muestran los resultados obtenidos al simular tres configuraciones para las cuales se cuenta con datos experimentales y con datos de simulaciones, cuando se emplea carbón como combustible. Primero se presenta un quemador unidimensional con el cual se calibra el modelo y se ilustran los diferentes procesos en ambas fases. Los resultados son comparados con los obtenidos por Fueyo y Gambon, [1997]. Posteriormente, el modelo se aplica a un gasificador de flujo por arrastre (*entrained bed*, en inglés) instalado en una central IGCC en Nakoso, Japón. Los resultados al emplear carbón se comparan con los datos experimentales disponibles y con los obtenidos mediante un modelo euleriano-lagrangiano [Chen et al, 2000]. Una tercera configuración representa un gasificador tipo Texaco y los resultados con carbón se comparan con datos experimentales y los obtenidos por Goving & Shah [1984]. Con la finalidad de probar la funcionalidad del modelo, se presentan los resultados al simular los dos gasificadores, usando como combustible coque de petróleo.

En general, los resultados muestran una buena precisión en la composición del gas producido (O_2 , CO_2 , CO , H_2 , H_2O , CH_x y N_2) y predicen adecuadamente los fenómenos de gasificación.

5.1 Quemador unidimensional

5.1.1 Configuración

El quemador unidimensional se presenta en esta tesis para verificar la funcionalidad del modelo y para ilustrar los diversos procesos que toman lugar en la fase gaseosa y en la partícula de carbón.

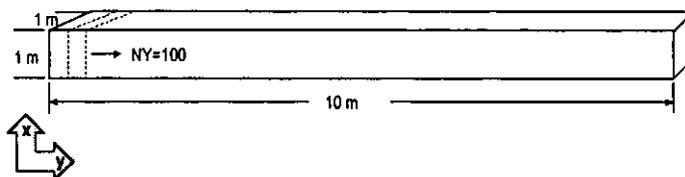


Figura 5.1 Geometría del quemador unidimensional

El caso considera la inyección de una corriente de aire y carbón a alta temperatura (773 K). Las condiciones de combustión están dadas para el funcionamiento de la instalación tomando en cuenta que utiliza carbón como combustible. La relación aire combustible es de 9.66 kg de aire por cada kg de carbón. El carbón es del tipo bituminoso con un poder calorífico inferior de 2193 kJ kg^{-1} . En el cuadro 5.1 se resumen los parámetros de operación y composición del carbón utilizado. Los resultados se comparan con los obtenidos por Fueyo y Gambon [1997].

5.1.2 Detalles numéricos

El presente flujo se simula con el modelo multifásico euleriano descrito en el capítulo 3. La simulación se hace en una dimensión (coordenadas cartesianas). El dominio de cálculo tiene 10 m en la dirección Y, y se discretiza en 100 celdas (figura 5.1). Los parámetros de las reacciones

heterogéneas (ecuaciones 3.17 y 3.18, del capítulo 3) se presentan en el cuadro 5.1 para un orden aparente de uno en la ecuación *char*-O₂ y de 0.5 para las restantes. Con estas condiciones, el tiempo de cálculo es de aproximadamente 10 min en un HP Apolo 700. Los resultados obtenidos en este primer estudio se presentan en la sección siguiente.

Cuadro 5.1 Condiciones y parámetros de la simulación del quemador unidimensional

Carbón	Flujo	0.04825 kg s ⁻¹		
	Temperatura	773 K		
	Composición	<i>Análisis inmediato (% masa):</i>		<i>Análisis último (% masa):</i>
		Humedad: 1.47 Ceniza: 32.61 Carbón: 57.2 Volátiles: 8.73		Carbón: 60.3 Hidrógeno: 2.11 Oxígeno: 2.45 Nitrógeno: 1.12 Azufre: 1.41
	Poder Calorífico Inferior		2193 kJ kg ⁻¹	
	Datos para la cinética química	Factor Pre-exponencial (kg Pa ^{-0.5} s ⁻¹ m ⁻²)	C - H ₂ O	0.0782
C - CO ₂			0.0732	
Energía de activación (kJ mol ⁻¹)		C - H ₂ O	115	
		C - CO ₂	112.5	
		C - O ₂	79.5	
Aire	Flujo	0.4662 kg s ⁻¹		
	Temperatura	773 K		
	Presión	1 atm		

5.1.2 Resultados de la simulación del quemador unidimensional

En esta sección se presentan los resultados obtenidos de la simulación del quemador unidimensional y se comparan con los obtenidos por Fueyo y Gambon [1997]. En el anterior estudio, los autores presentan un modelo para la combustión del carbón, por lo cual, sólo incorporan reacciones entre el combustible y el oxidante (aire) despreciando las reacciones endotérmicas de reducción. Lo anterior es válido para condiciones en las cuales se asegura en todo momento la presencia de oxígeno suficiente para lograr la combustión (exceso de aire), como por ejemplo en calderas y hornos. De acuerdo a capítulos anteriores, en el caso de un gasificador, la relación entre oxidante y combustible es generalmente menor a la relación estequiométrica, y un modelo diseñado con reacciones que dependan exclusivamente de la oxidación, podría no representar adecuadamente el comportamiento en un gasificador.

Un modelo para simular la gasificación debe tener la capacidad de funcionar tanto en condiciones ricas en oxidante como ante la ausencia o deficiencia de oxígeno. En ese contexto, el quemador unidimensional es presentado para probar el modelo en condiciones de combustión, comparando el comportamiento de éste, con el reportado por los citados autores.

Las figuras 5.2. a 5.9 presentan la evolución espacial de los fenómenos más relevantes del proceso de combustión. La alta temperatura causa la rápida pirolisis del carbón "crudo" (figura 5.2), el cual desaparece produciendo el carbonizado o *char* en la fase sólida, y los volátiles en la fase gaseosa. Los volátiles son consumidos rápidamente (figura 5.3) reaccionando con el aire (combustión homogénea), mientras que el carbonizado va desapareciendo también (figura 5.4) al reaccionar con el aire (reacción heterogénea exotérmica) y con el dióxido de carbono (reacción

heterogénea endotérmica). Las reacciones homogéneas son generalmente más rápidas que las heterogéneas, lo cual se ve reflejado en las figuras.

La cantidad de ceniza permanece constante a través de los procesos, pero su fracción másica se incrementa a uno ya que las partículas son totalmente quemadas y todos los otros componentes desaparecen (figura 5.5).

En el modelo empleado, el monóxido de carbono es el resultado inmediato (figura 5.6), tanto de las reacciones heterogéneas como de las homogéneas. Dado que existe suficiente cantidad de oxígeno (figura 5.7), el CO es posteriormente oxidado a CO₂ (figura 5.8). La temperatura de la fase gaseosa se incrementa conforme se van desarrollando los demás procesos (figura 5.9).

Las gráficas obtenidas por Fueyo y Gambon [1997] se pueden consultar en el Anexo 1. En general, se observa que ambos modelos muestran comportamientos similares tanto para la fase sólida como la gaseosa. En el caso del CO, las diferencias en comportamiento presentadas se pueden deber a las reacciones endotérmicas incorporadas en esta tesis y que favorecen su formación.

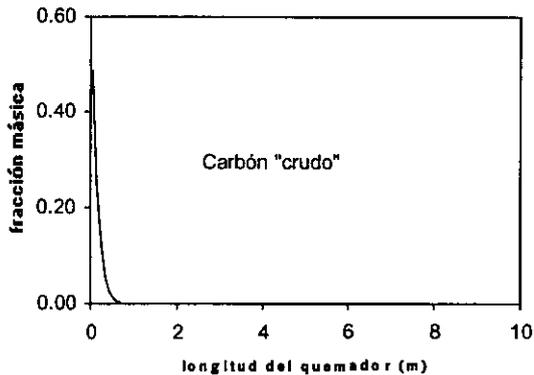


Figura 5.2 Evolución del carbón crudo

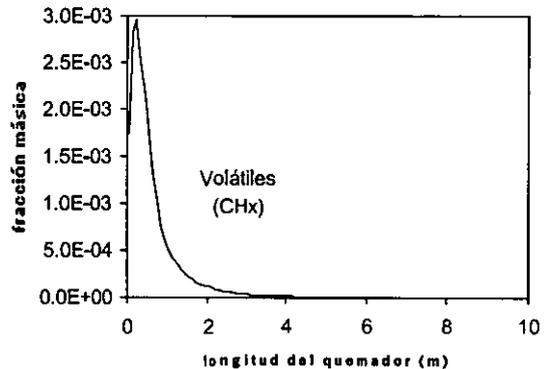


Figura 5.3 Evolución de los volátiles

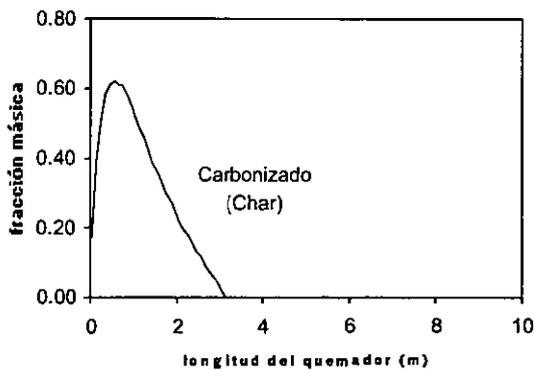


Figura 5.4 Evolución del carbonizado (*char*)

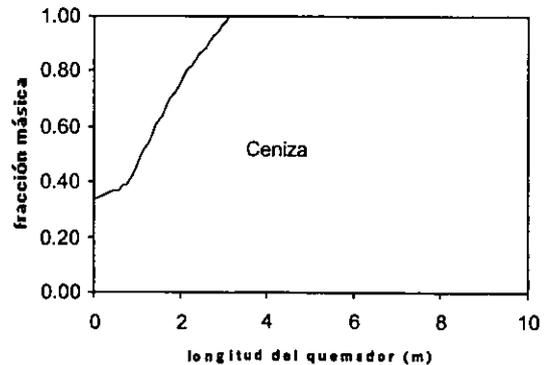


Figura 5.5 Evolución de las cenizas

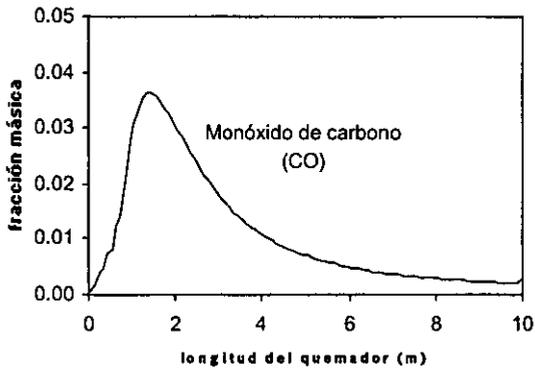


Figura 5.6 Evolución del CO

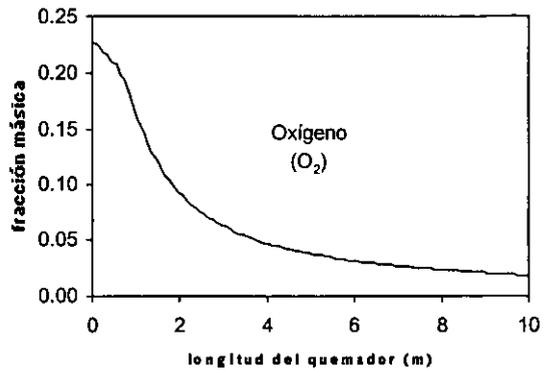


Figura 5.7 Evolución del O₂

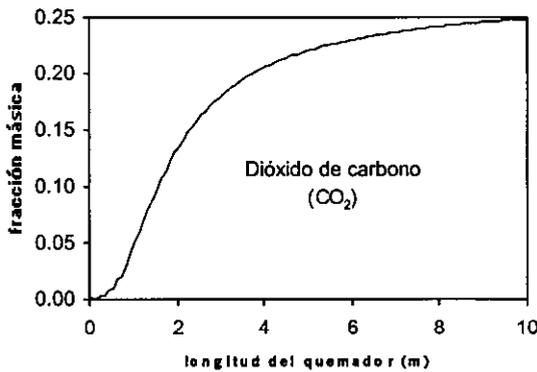


Figura 5.8 Evolución del CO₂

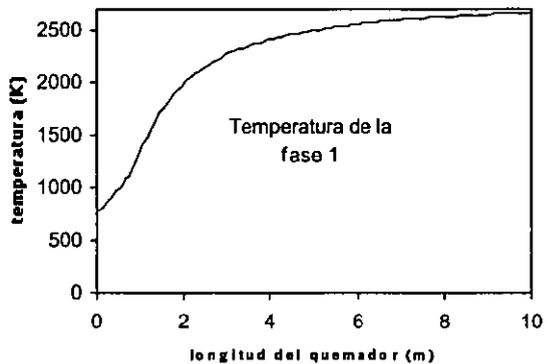


Figura 5.9 Temperatura del gas

5.2 Gasificador de flujo por arrastre

5.2.1 Configuración del equipo

En esta sección se describen la configuración del equipo y los detalles numéricos de la simulación del gasificador de flujo por arrastre para dos casos de acuerdo al tipo de combustible utilizado:

- A. empleando carbón (se compara con datos experimentales y con datos de simulaciones numéricas); y
- B. empleando coque de petróleo.

Los resultados del caso a) se presentan en la sección 5.3 y los del caso b) en la 5.4. La configuración corresponde a un equipo se encuentra actualmente en operación en una planta IGCC piloto en Nakoso, Japón [Araki, 1993]. La capacidad de gasificación del sistema es de 200 toneladas de carbón por día usando aire como oxidante. La geometría de este gasificador es parecida al sistema comercial *Koppers-Totzek* descrito en el capítulo 1. El diagrama del sistema del ciclo combinado de la central se muestra en la figura 5.10.

El esquema del gasificador se muestra en la figura 5.11. El gasificador es un reactor que posee tres secciones: combustor, difusor y reductor; los flujos de gas y las partículas de carbón entran por los quemadores dispuestos en tres distintos niveles en la dirección axial. En la parte

baja se localiza la cámara de combustión, a la cual, se introducen carbón y aire mediante los dos primeros niveles de quemadores. Enseguida viene la garganta y el difusor, en donde, se localiza el tercer nivel de quemadores. Las relaciones aire/carbón son distintas en cada nivel, de tal forma que en los dos primeros se asegura la suficiente cantidad de oxidante para que se den las condiciones de combustión y en el tercero las de gasificación. La última parte es el reductor, en el cual, finalizan los procesos y se homogeneizan las concentraciones.

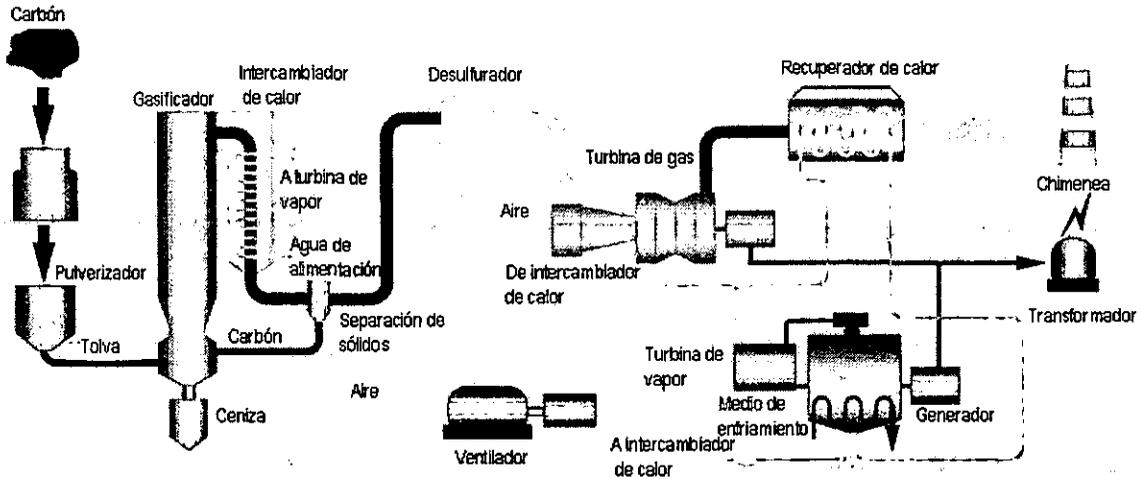


Figura 5.10 Diagrama IGCC de la central de Nakoso, Japón. [TEPCO, 2001]

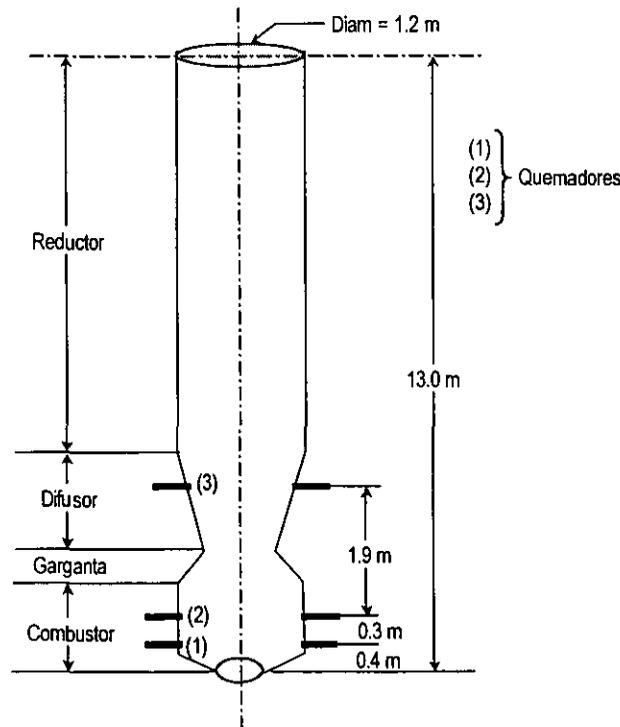


Figura 5.11 Gasificador

5.2.2 Detalles numéricos de la simulación

Los fenómenos más relevantes de la gasificación, se simularon con el modelo descrito en el capítulo 3. La simulación del equipo se realiza en dos dimensiones (coordenadas cartesianas). El dominio de cálculo se discretiza con una malla de 12 x 70 en las direcciones X y Y respectivamente.

En la figura 5.12 se presenta el dominio y la discretización para la simulación numérica. Cabe mencionar que este número de celdas se utilizó después de verificar la independencia de los resultados con la malla y el esquema de discretización del término convectivo de las ecuaciones de transporte que describen el flujo reactivo. En las secciones de la cámara de combustión, la garganta y el difusor, la densidad de la malla es mayor, ya que en estas regiones los fenómenos se dan con mayor intensidad. El esquema de discretización utilizado para resolver el término convectivo de las ecuaciones de transporte fue el híbrido [Spalding, 1972].

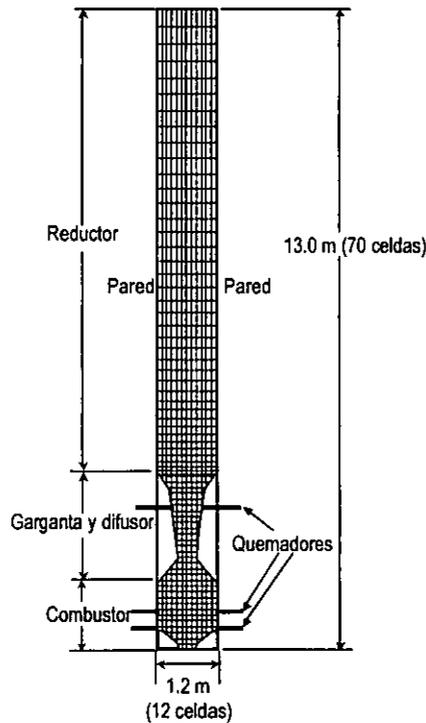


Figura 5.12 Representación del dominio de simulación. El número de celdas en la dirección X=12, y en la dirección Y = 70.

El flujo reactivo está confinado mediante paredes, en las cuales se especificó la condición de "no deslizamiento". Para simular la radiación térmica se utilizó el modelo de radiación indicado en el capítulo 3; los parámetros de este modelo se presentan en los cuadros 5.2 y 5.4. Estas condiciones fijaron el tiempo de cálculo en un promedio de 6 horas (5000-6000 iteraciones) para una HP Apollo 700. En lo que respecta a la relajación, especial atención se pone en las fuentes de transferencia de masa debidas a las reacciones, ya que las ecuaciones que gobiernan estos procesos no son lineales con la temperatura. Los resultados obtenidos para este caso se presentan en las secciones siguientes.

5.3 Simulación del gasificador de flujo por arrastre (caso “A”)

5.3.1 Condiciones de operación

Las condiciones de operación para este caso se muestran en el cuadro 5.2. Se presenta la composición del carbón utilizado, que corresponde a uno del tipo bituminoso [Chen et al, 2000].

Cuadro 5.2 Parámetros y condiciones de operación para el modelo del gasificador de flujo por arrastre

Carbón	Flujos	Primer nivel: 0.118 kg s ⁻¹ Segundo nivel: 0.278 kg s ⁻¹ Tercer nivel: 0.458 kg s ⁻¹		
	Temperatura	600 K (para los tres niveles)		
	Composición ¹	<i>Análisis inmediato (% masa):</i> Humedad: 5.3 Ceniza: 12.1 Carbón: 35.8 Volátiles: 46.7	<i>Análisis último (% masa):</i> Carbón: 77.6 Hidrógeno: 6.5 Oxígeno: 13.9 Nitrógeno: 1.13 Azufre: 0.22	
	Tamaño medio de la partícula a la entrada	39.8 x 10 ⁻⁶ m		
	Poder Calorífico Superior	27400 kJ kg ⁻¹		
	Datos para la cinética química	Factor Pre-exponencial (kg Pa ^{-0.5} s ⁻¹ m ⁻²)	C – H ₂ O	0.0782
			C – CO ₂	0.0732
Energía de activación (kJ mol ⁻¹)		C – H ₂ O	115	
		C – CO ₂	112.5	
		C – O ₂	61	

Aire	Flujo	Primer nivel: 1.177 kg/s Segundo nivel: 1.177 kg/s Tercer nivel: 0.458 kg/s		
	Temperatura	600 K (para los tres niveles)		
	Presión	2.7 Mpa		

Modelo de radiación	Temperatura en la pared: Combustor 1897 K Difusor: 1073 K Reductor: 873 K Coeficiente de absorción: 0.3 Coeficiente de dispersión: 0.14		
---------------------	--	--	--

Las velocidades de reacción (ecuaciones 3.17 y 3.18 del capítulo 3) son tomadas de la literatura para un carbón similar [Mann & Kent, 1994] con un orden aparente de reacción de 0.5. En el anexo 2, se presentan algunos datos encontrados en la bibliografía para diversos tipos de carbón, incluido el coque de petróleo y la biomasa.

5.3.2 Resultados de la simulación y discusión

- Campos de velocidades

La figura 5.12 muestra los vectores de velocidad media dentro del equipo. En esta representación, se aprecia como el fluido se acelera al pasar el sistema garganta-difusor y tiende a uniformizarse antes de la salida. La condición de “no-deslizamiento” impuesta en las paredes laterales afecta al campo de vectores. Un detalle de la parte baja del gasificador permite apreciar

como el fluido aumenta su velocidad debido principalmente a la disminución del área transversal en la garganta.

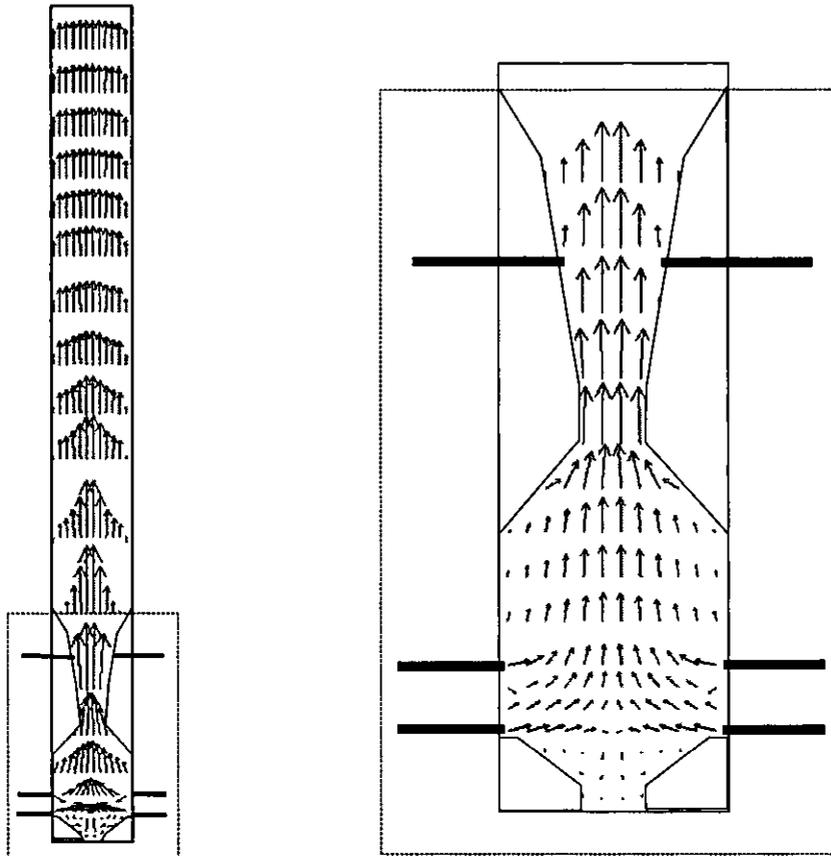


Figura 5.13 Representación del campo de velocidad

- Contornos de temperatura y fracciones másicas de la fase gaseosa

En las figuras 5.14 a 5.19 se muestran los contornos de temperatura y de fracción másica del CO_2 , CO , H_2 , H_2O y CH_x obtenidas de la simulación numérica. En general, las distribuciones simuladas presentan simetría axial, mientras que a lo largo del gasificador los cambios son desiguales. Se presenta con mayor detalle la sección del gasificador donde las reacciones son más intensas (cámara de combustión, garganta y difusor) dadas las condiciones de entrada de aire y carbón.

Como se ilustra en las figuras, la temperatura disminuye a lo largo de la altura del gasificador, y está ligada a la composición de los gases. Esto significa que altas concentraciones de CO_2 y H_2O en la cámara de combustión son debidas a las temperaturas altas; mientras que por otro lado, las concentraciones mayores de CO y H_2 se presentan en el reductor, acompañadas de temperaturas relativamente más bajas. Las diferencias en temperatura entre el combustor y el reductor se deben a las condiciones de alimentación del combustible; ya que los quemadores de los niveles 1 y 2 operan bajo una relación más rica en oxidante que los del nivel 3. Por esta misma razón, las mayores temperaturas se presentan dentro de la cámara de combustión donde CO_2 y H_2O se producen debido a la combustión del carbón y los volátiles producidos.

Saliendo de la cámara de combustión, la temperatura del gas disminuye gradualmente hasta los quemadores del nivel 3, en donde sufre un cambio brusco debido a la entrada de carbón

y oxidante. La temperatura alcanza los niveles más bajos en la zona de reducción, coincidiendo con bajas concentraciones de CO_2 y H_2O , y con altas concentraciones de CO y H_2 .

Contrario al comportamiento del CO_2 , el CO se incrementa a lo largo de la altura del gasificador, y el incremento es mayor después de los quemadores del nivel 3 donde alcanza su máximo valor, posteriormente disminuye una vez que se mezclan los gases.

Dado que se está considerando como agente oxidante al aire seco, el H_2O producido proviene de la humedad del combustible y como producto de la combustión de los volátiles. Este vapor de agua, formado principalmente en la zona de combustión, es uno de los responsables de la producción de H_2 en la zona reductora.

A la salida del gasificador se observa como prácticamente todas las composiciones alcanzan un valor uniforme, teniendo el gas de síntesis producido una temperatura aproximada de 1200 K.

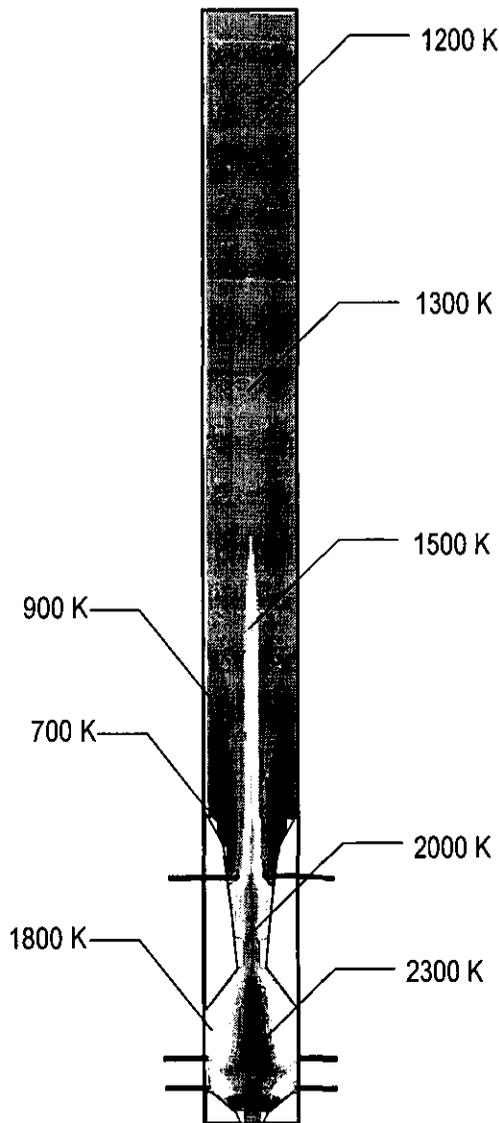


Fig. 5.14 Contorno de Temperatura

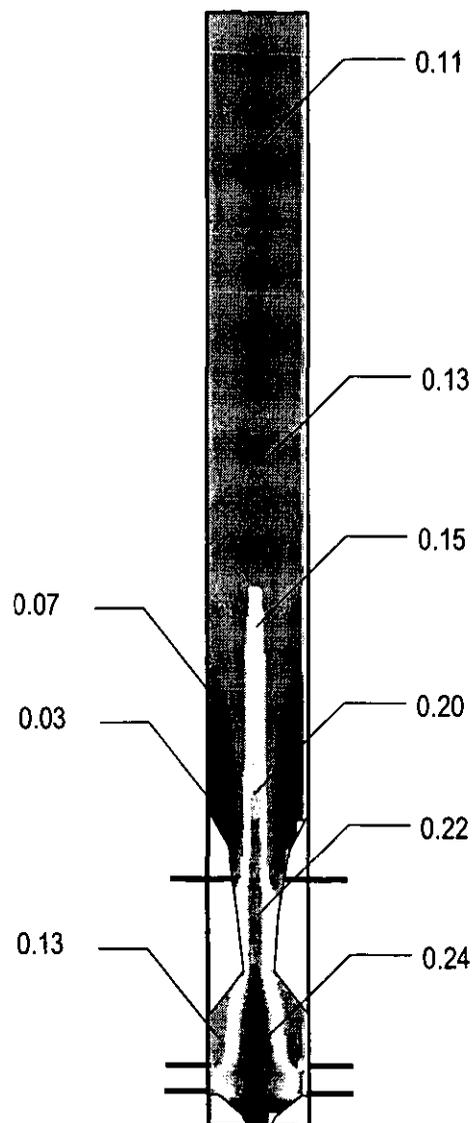


Fig. 5.15 Contorno de fracción másica del CO_2

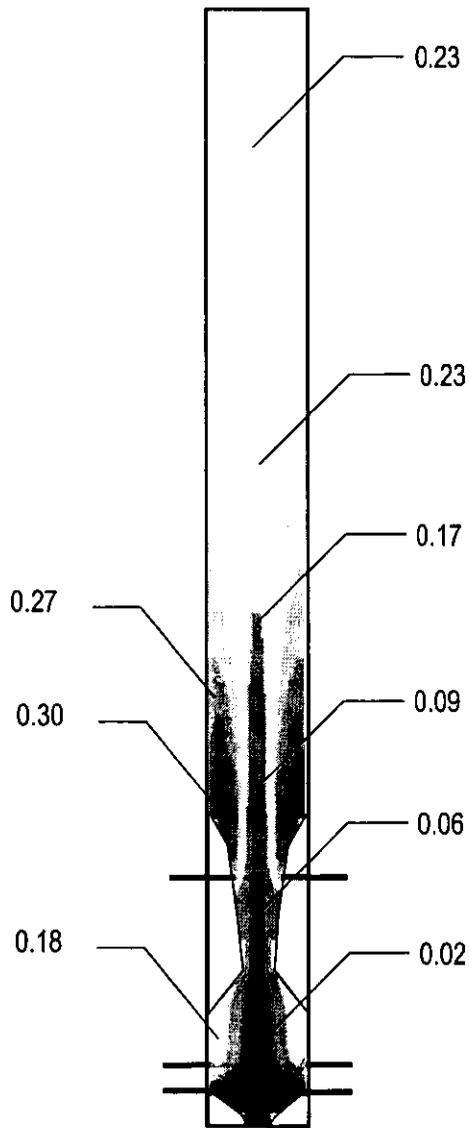


Fig 5.16 Contorno de fracción másica del CO

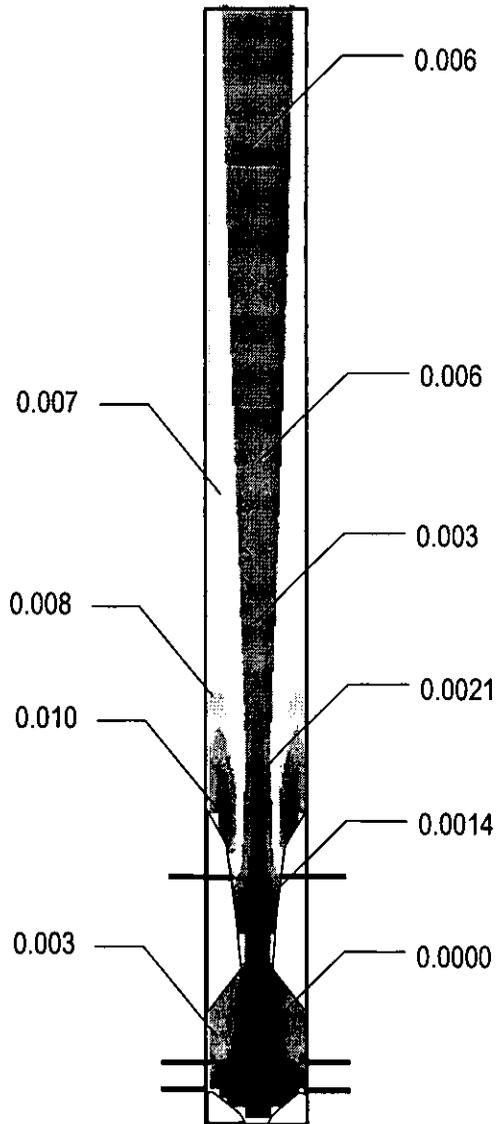


Fig. 5.17 Contorno de fracción másica del H₂

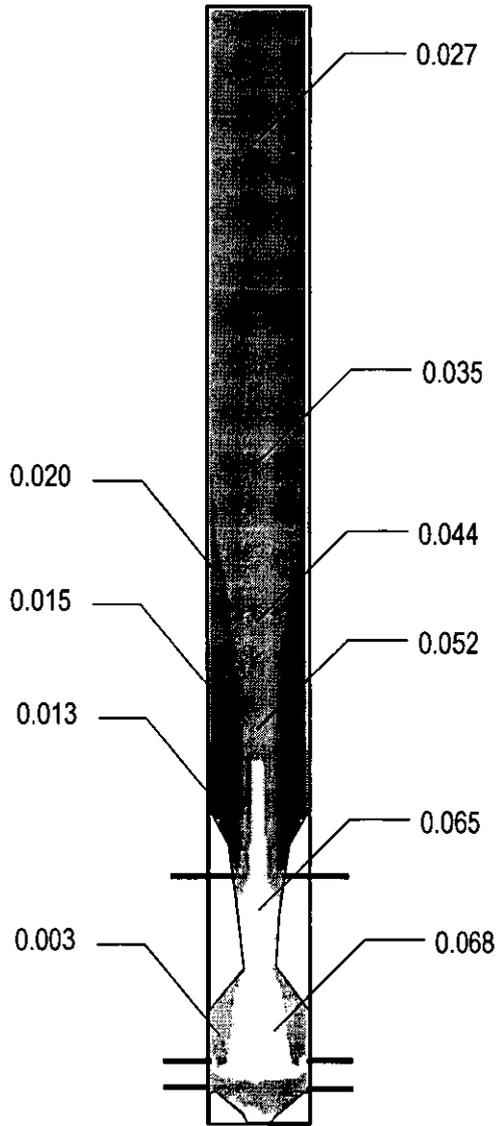


Fig 5.18 Contorno de fracción másica del H₂O

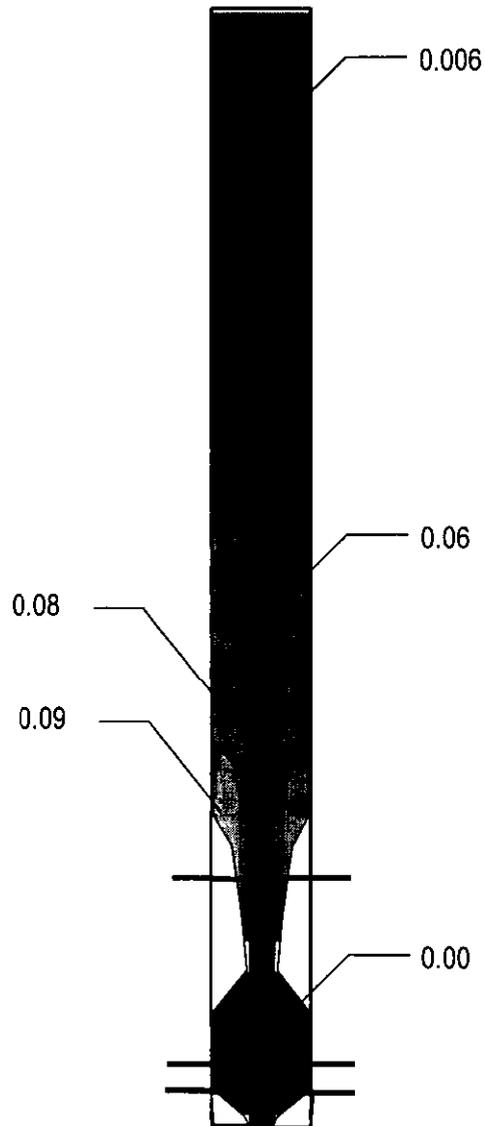


Fig. 5.19 Contorno de fracción másica del CH_x

Las figuras 5.20 a 5.25 representan con mayor detalle las zonas donde los procesos de transferencia de masa son más relevantes. Como se percibe en la figura 5.20, en la cámara de combustión, la temperatura del gas se incrementa rápidamente hasta aproximadamente 2300 K en dirección hacia el centro de la cámara de combustión, mientras el incremento es más lento en la dirección paralela a la pared.

La forma de los contornos de las concentraciones de los gases, coincide con el campo de temperatura. Los valores pico H₂O y CO₂ se presentan en la región de temperatura más elevada.

El oxígeno (O_2) se consume rápidamente después de entrar al equipo (figura 5.25) y los volátiles son consumidos instantáneamente en esta región. El CO_2 tiende a decrecer mientras que el CO y el H_2 aumentan debido a las reacciones entre el *char*- CO_2 y *char*- H_2O .

En la región central de la cámara de combustión, la alta temperatura es mantenida con altas concentraciones de CO_2 y nulas concentraciones de CO y H_2 ; esto implica que las reacciones de gasificación *char*- CO_2 y *char*- H_2O en esta región son prácticamente nulas, debido a que no existen partículas de combustible.

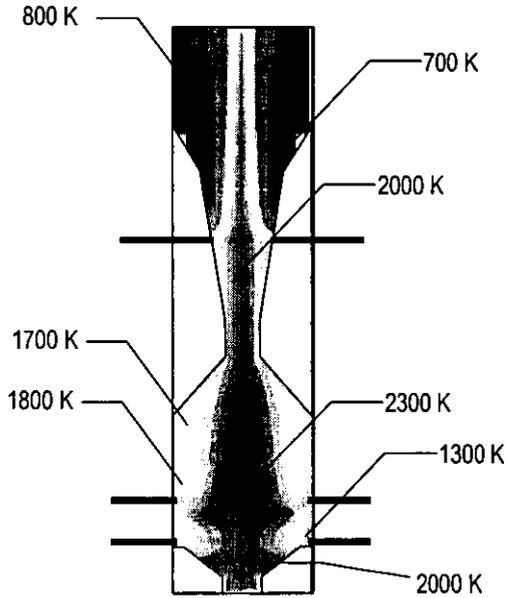


Fig. 5.20 Detalle de la temperatura

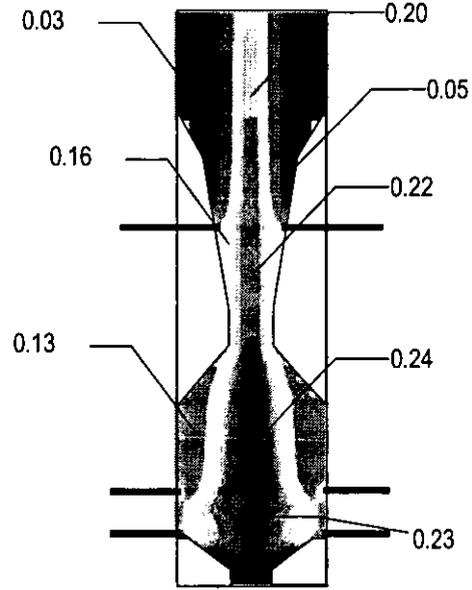


Fig. 5.21 Detalle del CO_2
(fracción másica)

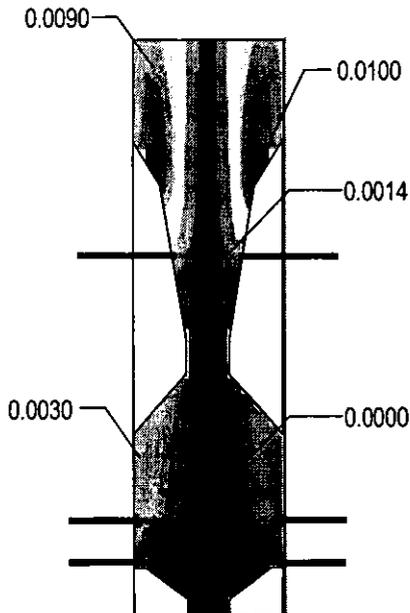


Fig. 5.22 Detalle del CO
(fracción másica)

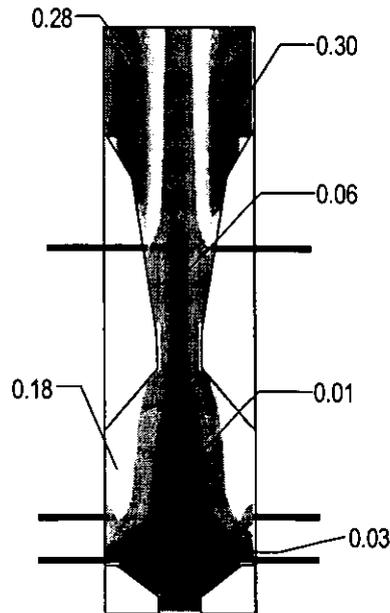


Fig. 5.23 Detalle del H_2
(fracción másica)

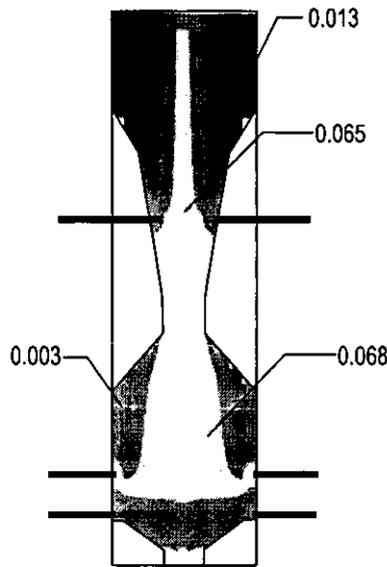


Fig. 5.24 Detalle del H₂O (fracción másica)

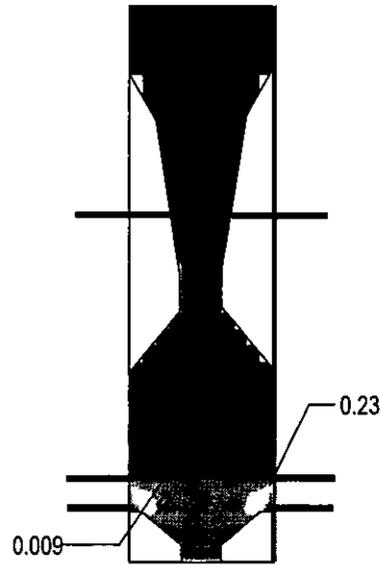


Fig. 5.25 Detalle del O₂ (fracción másica)

5.3.3 Especies de la fase gaseosa. Comparaciones con datos experimentales

Con la finalidad de validar el modelo, las fracciones volumétricas medias del gas de síntesis producido, obtenidas en la simulación, se comparan con mediciones experimentales y las obtenidas mediante un modelo euleriano-lagrangiano [Chen et al, 2000]. En el cuadro 5.3 se muestran estas comparaciones.

Cuadro 5.3 Comparación de la composición del gas de síntesis (% vol)

Fuente	CO	H ₂	CH ₄	CO ₂	H ₂ O	N ₂
Mediciones experimentales	23.3	10.1	0.4	4.7	-	61.5
Predicciones de Chen et al [2000]	22.4	12.1	0	5.3	2.1	58.1
	20.3	11	0	6.4	2.4	59.9
Modelo de esta tesis	21.6	8.5	1.0 ^(a)	6.6	3.9	58.3

Notas:

^(a) Se emplea para comparación la composición volumétrica obtenida del CH_x (hidrocarburo genérico)

5.4 Simulación del gasificador de flujo por arrastre (caso "B")

5.4.1 Condiciones de operación

La configuración empleada es la misma que la usada para la validación del modelo en la sección anterior (figuras 5.11 y 5.12). Las condiciones de operación para el modelo se muestran en el cuadro 5.4. La composición del coque de petróleo, así como su poder calorífico, son los

considerados típicamente por PEMEX [Martínez, 2000]. Como se puede apreciar en el mismo cuadro, los datos para los mecanismos de la cinética química se consideraron iguales a los utilizados con carbón, excepto para la reacción $char-O_2$, que son de Smith [1984] para coque de petróleo con un orden aparente de 0.5.

Cuadro 5.4 Parámetros y condiciones de operación para el modelo del gasificador operando con coque de petróleo

Coque de petróleo	Flujos	Primer nivel: 0.118 kg s^{-1} Segundo nivel: 0.278 kg s^{-1} Tercer nivel: 0.458 kg s^{-1}		
	Temperatura	600 K (para los tres niveles)		
	Composición ¹	Análisis inmediato (% masa): Humedad: 8.0 Ceniza: 0.29 Carbón: 82.32 Volátiles: 9.20	Análisis último (% masa): Carbón: 88.39 Hidrógeno: 3.12 Oxígeno: 0.49 Nitrógeno: 0.96 Azufre: 6.7	
	Tamaño medio de la partícula a la entrada	$39.8 \times 10^{-6} \text{ m}$		
	Poder Calorífico Superior	31298 kJ kg^{-1}		
	Datos para la cinética química	Factor Pre-exponencial ($\text{kg Pa}^{-0.5} \text{ s}^{-1} \text{ m}^{-2}$)	C – H ₂ O	0.0782
			C – CO ₂	0.0732
Energía de activación (kJ mol^{-1})		C – O ₂	0.000697	
		C – H ₂ O	115	
		C – CO ₂	112.5	
		C – O ₂	82.46	
Aire	Flujo	Primer nivel: 1.177 kg/s Segundo nivel: 1.177 kg/s Tercer nivel: 0.458 kg/s		
	Temperatura	600 K (para los tres niveles)		
	Presión	2.7 MPa		
Modelo de radiación	Temperatura en la pared: Combustor 1897 K Difusor: 1073 K Reductor: 873 K Coeficiente de absorción: 0.3 Coeficiente de dispersión: 0.14			

5.4.2 Resultados de simulación y discusión

- Campos de velocidades

La figura 5.26 muestra los vectores de velocidad media dentro del equipo. En esta representación, se aprecia como el fluido se acelera al pasar el sistema garganta-difusor y tiende a uniformizarse antes de la salida. La condición de "no-deslizamiento" impuesta en las paredes laterales afecta al campo de vectores. Un detalle de la parte baja del gasificador permite apreciar como el fluido aumenta su velocidad debido a la disminución del área transversal en la garganta. En general, el empleo del coque de petróleo como combustible no afecta el campo de velocidades

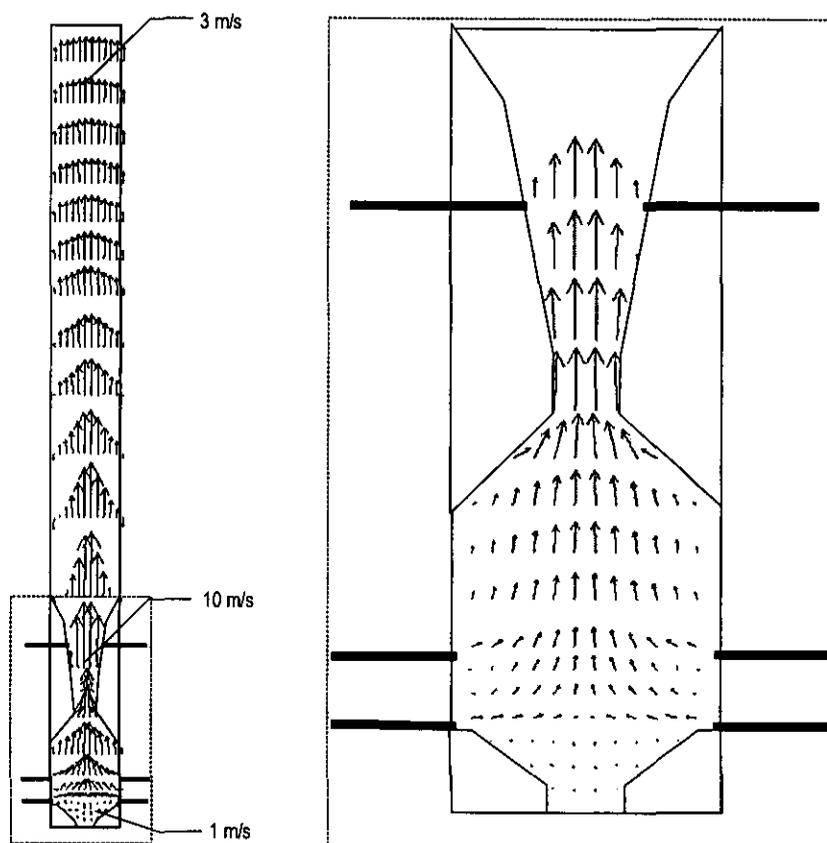


Figura 5.26 Representación del campo de velocidad

- Contornos de temperatura y fracciones másicas de la fase gaseosa

Los contornos de temperatura y de fracción másica del CO_2 , CO , H_2 , H_2O y CH_x calculados se muestran en las figuras 5.27 a 5.32 se muestran los contornos. En general, las distribuciones simuladas son similares a las presentadas en el caso del carbón; con simetría axial y cambios no uniformes a lo largo del gasificador.

Como se ilustra en las figuras, la distribución de la temperatura y los gases no se ve grandemente afectada al usar coque de petróleo. En el caso de la temperatura, se aprecia un ligero incremento. Esto posiblemente se deba a la diferencia entre los poderes caloríficos (mayor en el caso del coque). En cuanto a los gases, existe de igual manera una correspondencia con la temperatura. Las más altas concentraciones de CO_2 y H_2O se presentan en la cámara de combustión (a temperaturas altas); y las de CO y H_2 se presentan en el reductor, acompañadas de temperaturas más bajas. Las mayores temperaturas se presentan dentro de la cámara de combustión donde CO_2 y H_2O se producen debido a la combustión del *char* y los volátiles producidos.

La concentración del gas de síntesis a la salida del gasificador cambia ligeramente con respecto a la simulación con carbón. En cuanto a las fracciones másicas del CO y de CO_2 , se observa que el primero aumenta mientras que el segundo disminuye. Lo anterior se puede deber a: i) una mayor contribución de la reacción *char*- O_2 ; y ii) la fracción másica del carbono (C) en el coque de petróleo es mayor que la del carbón empleado mientras que la cantidad de oxidante es la misma para ambos casos. En cuanto a los demás gases, el H_2O se presentó una disminución, causada posiblemente por la menor cantidad de CH_x (materia volátil del coque), ya que la

producción de este gas está ligada a la combustión de este componente. La humedad considerada en este caso (mayor que la tomada en la simulación del carbón) incidió en un aumento del H_2 a la salida del gasificador.

Las figuras 5.33 a 5.38 representan con mayor detalle la zona donde los procesos de transferencia de masa son más relevantes. De igual manera la forma de los contornos de las concentraciones de los gases, coincide con el campo de temperatura. Los valores pico de H_2O y CO_2 se presentan en la región de temperatura más elevada.

El oxígeno (O_2) se consume rápidamente después de entrar al equipo (figura 5.38) y los volátiles son consumidos instantáneamente en esta región. El CO_2 tiende a decrecer mientras que el CO y el H_2 aumentan debido a las reacciones entre el *char*- CO_2 y *char*- H_2O .

En la región central de la cámara de combustión, la alta temperatura se mantiene con altas concentraciones de CO_2 y bajas concentraciones de CO y H_2 ; esto implica que las reacciones de gasificación *char*- CO_2 y *char*- H_2O en esta región son prácticamente nulas, debido a que no existen partículas de combustible.

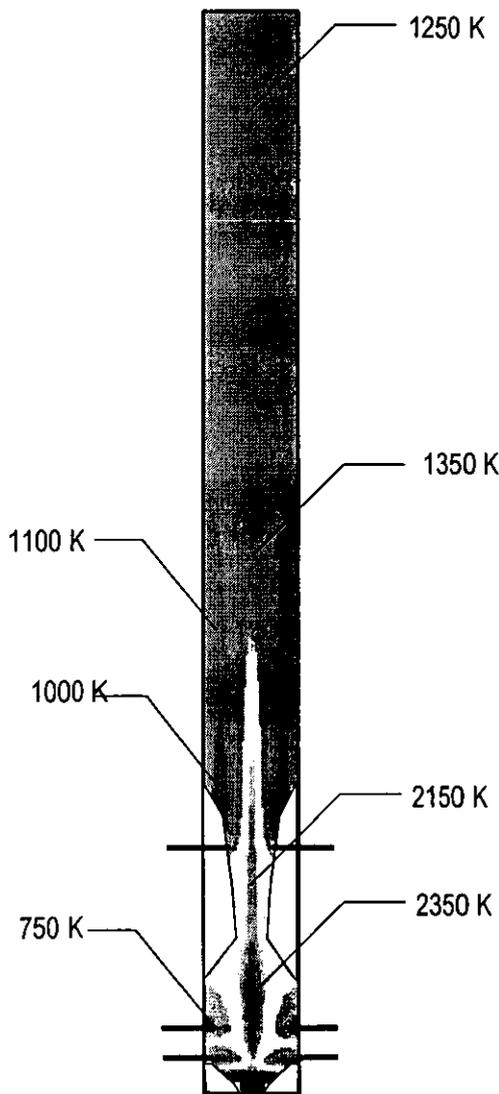


Fig. 5.27 Contorno de temperatura

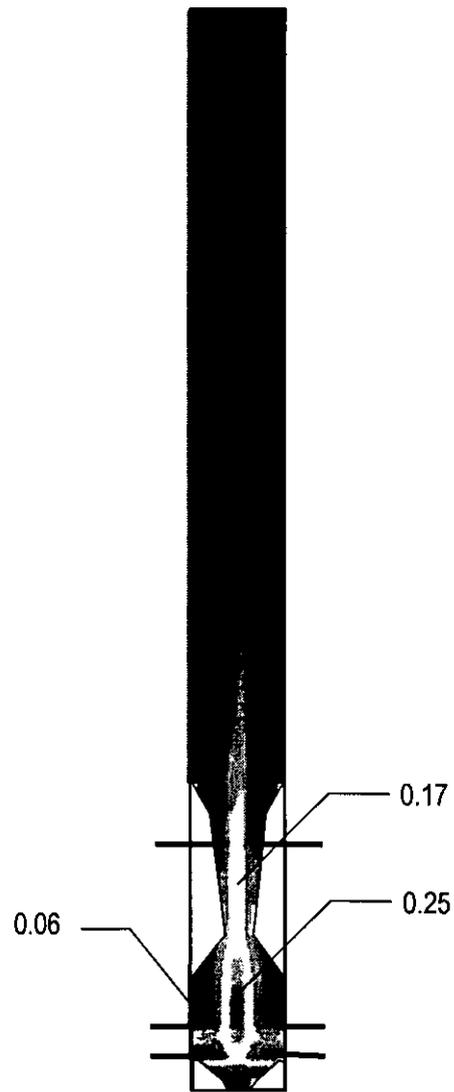


Fig. 5.28 Contorno de fracción másica del CO_2

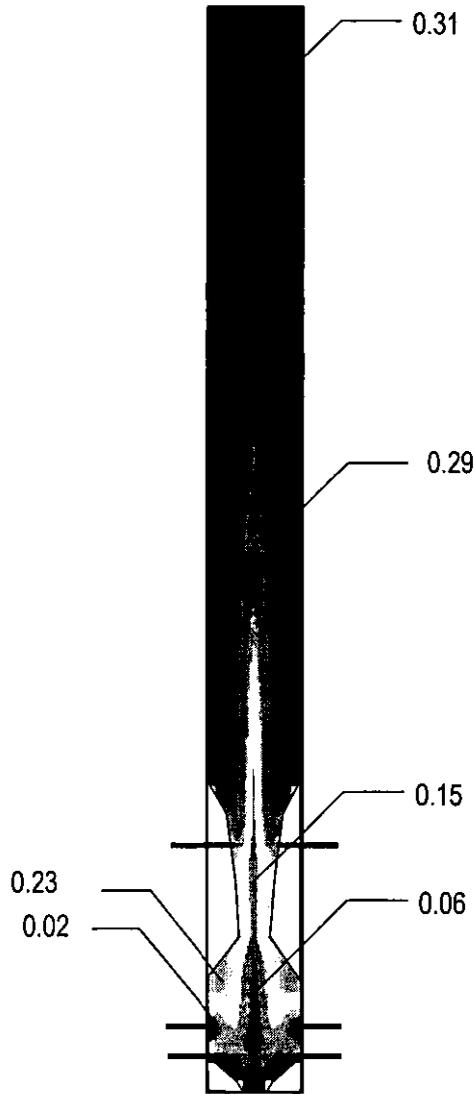


Fig 5.29 Contorno de fracción másica del CO

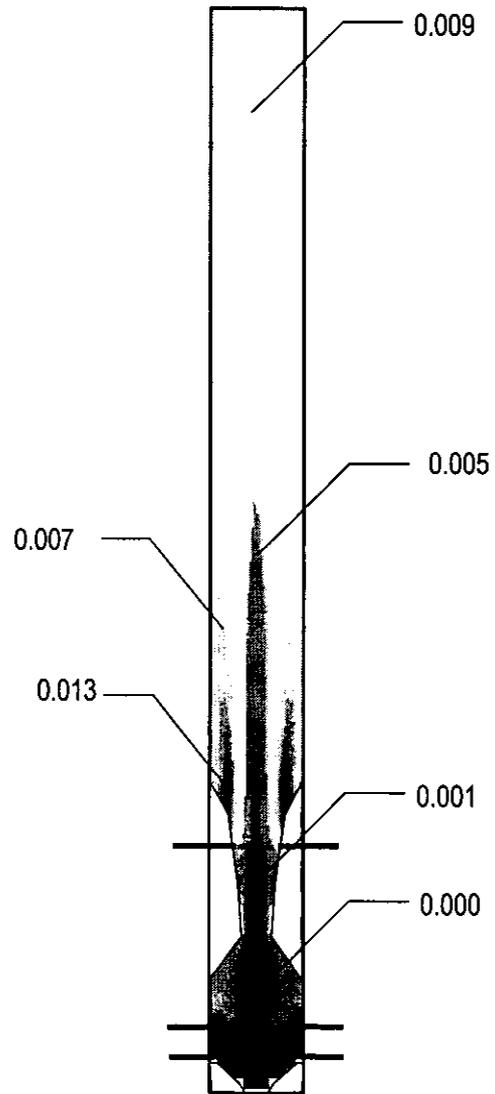


Fig. 5.30 Contorno de fracción másica del H₂



Fig 5.31 Contorno de fracción másica del H₂O

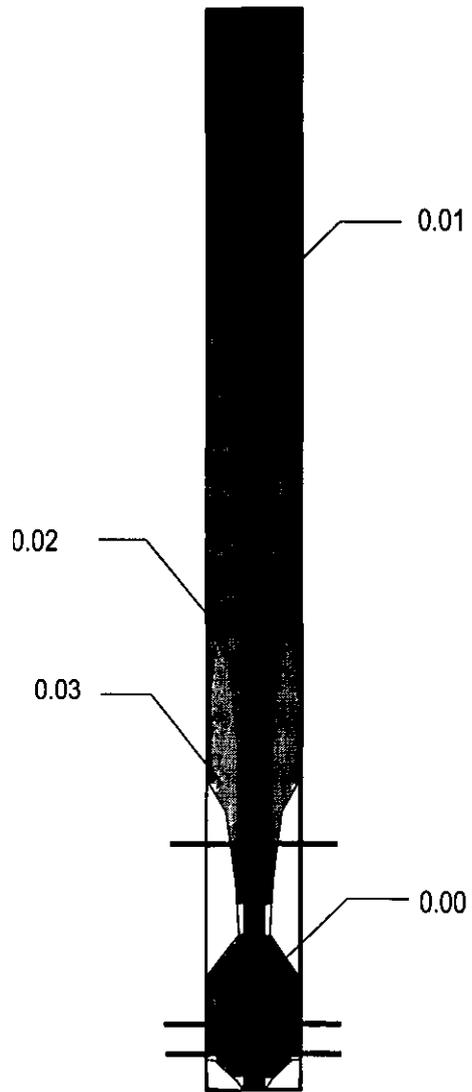


Fig. 5.32 Contorno de fracción másica del CH_x

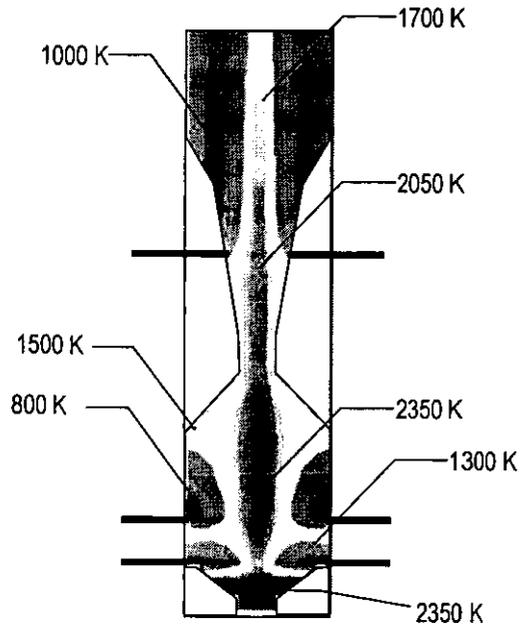


Fig. 5.33 Detalle de la temperatura

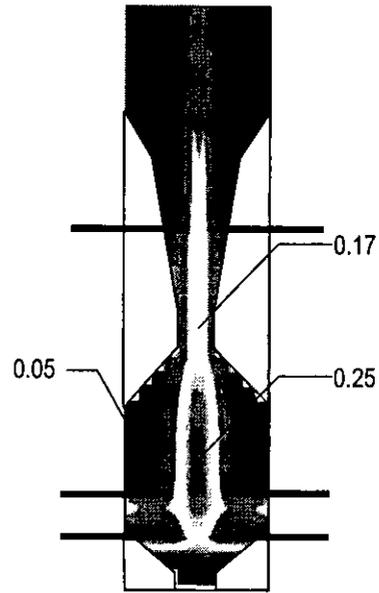


Fig. 5.34 Detalle del CO_2
(fracción másica)

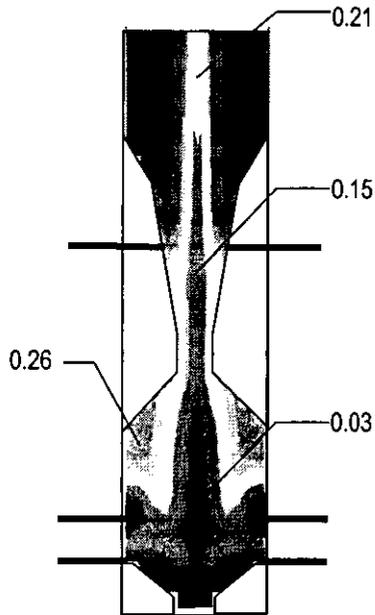


Fig. 5.35 Detalle del CO
(fracción másica)

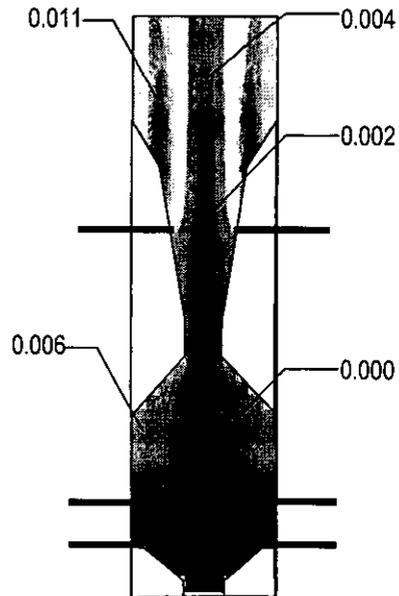


Fig. 5.36 Detalle del H_2
(fracción másica)

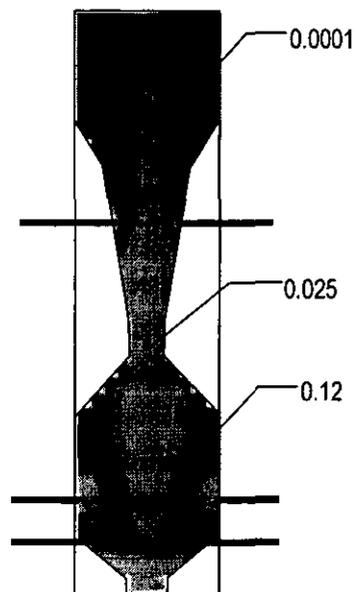


Fig. 5.37 Detalle del H₂O
(fracción másica)

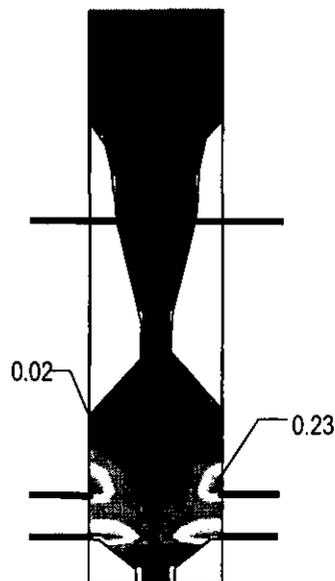


Fig. 5.38 Detalle del O₂
(fracción másica)

5.5 Gasificador tipo Texaco

5.5.1 Configuración del equipo

Es esta sección se presenta la configuración del equipo y los detalles numéricos para la simulación de un gasificador tipo Texaco para dos casos de acuerdo al combustible utilizado:

- C empleando carbón (se compara con datos experimentales y numéricos); y
- D empleando coque de petróleo.

Este tipo de equipos también pertenecen a la clasificación de flujo por arrastre. Tal y como se describió en el capítulo 1, estos equipos son una tecnología comercial que cuenta con varios equipos instalados en el mundo. Básicamente existen dos variantes en esta tecnología y la diferencia entre ambas estriba en la forma de enfriar el gas producido. Las configuraciones típicas de estos gasificadores se muestran en la figura 5.39.

Como se aprecia en la figura, en la parte superior del reactor se alimenta el combustible (generalmente es una mezcla de carbón con agua) y el oxidante (usualmente oxígeno con vapor de agua). Tanto el vapor como el agua actúan como moderadores de temperatura, además de participar en algunas reacciones. El gasificador es en si mismo, un recipiente a presión rodeado con material refractario. La mayoría de los equipos en operación emplean la variante del apagado de cenizas sin recuperación de calor, ya que a pesar de ser térmicamente menos eficiente, es más económica y versátil en su funcionamiento [DTI, 1998].

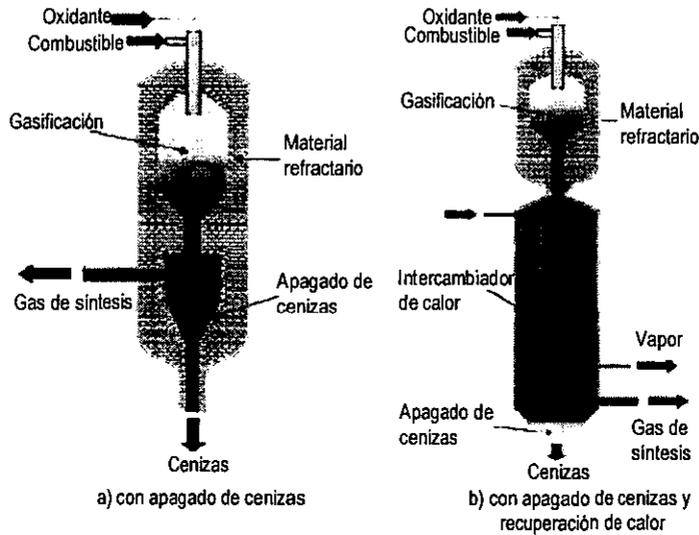


Figura 5.39 Configuraciones típicas de un gasificador Texaco [DTI, 1998]

5.5.2 Simulación numérica

Los fenómenos más relevantes de la gasificación, se simularon con el modelo descrito en el capítulo 3. La simulación del equipo se realiza en dos dimensiones (coordenadas cartesianas). El dominio de cálculo se discretiza con una malla de 20 x 40 en las direcciones X y Y respectivamente.

El la figura 5.40 se presenta el dominio y la discretización para la simulación. Este número de celdas se utilizó después de verificar la independencia de los resultados con la malla y el esquema de discretización del término convectivo de las ecuaciones de transporte que describen el flujo reactivo. El esquema de discretización que se utilizó para resolver el término convectivo de las ecuaciones de transporte fue el híbrido [Spalding, 1972].

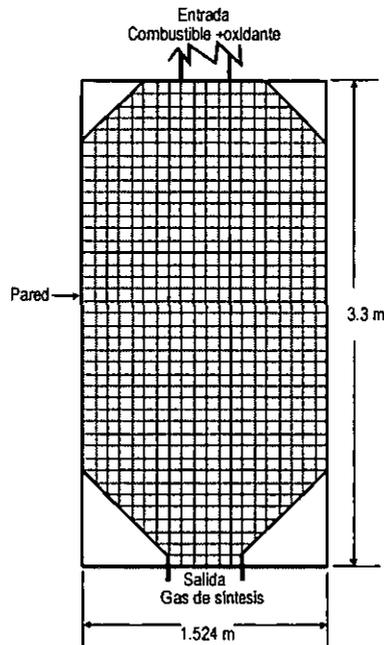


Figura 5.40 Representación del dominio de simulación para el gasificador Texaco.

En general, las especificaciones generales son similares a las del gasificador presentado en las sección anterior. El flujo reactivo está confinado mediante paredes, en las cuales se específico la condición de "no deslizamiento". Para simular los efectos radiación térmica se utilizó el modelo de radiación indicado en el capítulo 3; los parámetros de este modelo se presentan en el cuadro 5.5.

Con estas condiciones el tiempo de cálculo es de aproximadamente 6 horas (5000-6000 iteraciones) en un HP Apolo 700. En lo que respecta a la relajación, especial atención se pone a las fuentes de transferencia de masa debidas a las reacciones, ya que como se puede ver, las ecuaciones que gobiernan estos procesos no son lineales con la temperatura. Los resultados obtenidos para esta configuración se presentan en la siguientes secciones.

5.6 Simulación del gasificador tipo Texaco (caso "C")

5.6.1 Condiciones de operación

Para efectos de la simulación de este tipo de equipos, se consideró únicamente la sección en la que toma lugar la gasificación, sin incluir el apagado de cenizas o el intercambiador de calor. Los datos de operación se muestran en el cuadro 5.5. La mayoría de éstos, fueron tomados de Goving & Shah [1984] empleando como combustible los residuos de la licuefacción de un carbón Illinois no.6. Los datos para la cinética química fueron los de [Mann & Kent, 1994].

Cuadro 5.5 Parámetros y condiciones de operación para el modelo del gasificador tipo Texaco

Combustible (residuos de la licuefacción de un carbón Illinois #6)	Flujo	0.07666 kg s ⁻¹		
	Temperatura	505.22 K		
	Composición	<i>Análisis inmediato (% masa):</i> Humedad: 8.0 Ceniza: 15.53 Carbón: 82.32 Volátiles: 9.20		<i>Análisis último (% masa):</i> Carbón: 74.05 Hidrógeno: 6.25 Oxígeno: 1.32 Nitrógeno: 0.71 Azufre: 1.77 Ceniza: 15.53
	Tamaño medio de la partícula a la entrada	35.8 x 10 ⁻⁶ m		
	Poder Calorífico Superior	29000 kJ kg ⁻¹		
	Datos para la cinética química	Factor Pre-exponencial (kg Pa ^{-0.5} s ⁻¹ m ⁻²)	C - H ₂ O	0.0782
			C - CO ₂	0.0732
Energía de activación (kJ mol ⁻¹)		C - H ₂ O	115	
		C - CO ₂	112.5	
Oxidante	Flujo	$\frac{\text{Relación vapor}}{\text{combustible}}$	0.241	Flujo total = 0.0849 kg s ⁻¹
		$\frac{\text{Relación Oxígeno}}{\text{combustible}}$	0.866	
	Temperatura	385 K		
	Presión	2.735 Mpa		

Modelo de radiación	Temperatura en la pared: 1000 K Coeficiente de absorción: 0.3 Coeficiente de dispersión: 0.14
---------------------	---

5.6.2 Resultados de simulación y discusión

- Campos de velocidades

La figura 5.41 muestra los vectores de velocidad media dentro del equipo. El fluido entra a una velocidad de alrededor de 0.6 m/s, tendiendo a disminuir hasta aproximadamente 0.2 m/s. Posteriormente tiende a acelerarse conforme se aproxima a la salida. Se percibe ligeramente que la condición de "no-deslizamiento" impuesta en las paredes laterales afecta al campo de vectores.

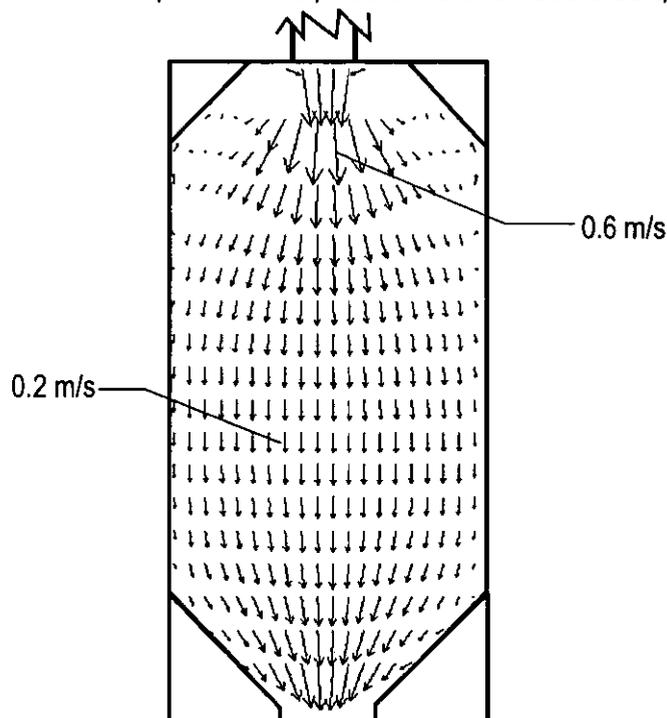


Figura 5.41 Representación del campo de velocidad en el gasificador Texaco

- Contornos de temperatura y fracciones másicas de la fase gaseosa

Las figuras 5.42 a 5.48 muestran los contornos de temperatura y de fracción másica del CO_2 , CO , H_2 , H_2O y CH_x obtenidas de la simulación de este gasificador. En general, las distribuciones simuladas presentan simetría axial, cambiando su valor muy rápidamente cerca de la entrada, debido a las bajas velocidades que se tienen en el equipo.

En la figura 5.42 se aprecia como la temperatura del gas se incrementa rápidamente de las condiciones a la entrada (385 K) hasta 1910 K debido a las reacciones exotérmicas, y posteriormente disminuye hasta 1750 K a la salida. Esta temperatura puede emplearse para producir vapor de agua mediante un intercambiador de calor (configuración de la figura 5.39b). La zona de alta temperatura coincide con la mayor concentración de CO_2 y H_2O (figuras 5.43 y 5.46), y contrariamente, con las menores concentraciones de CO y H_2 (figuras 5.44 y 5.45). A medida que la temperatura va disminuyendo, principalmente por las reacciones endotérmicas, las concentraciones de CO_2 y H_2 van siendo menores, mientras que las de CO y H_2 aumentando.

En este gasificador, a diferencia del presentado en las secciones anteriores, se emplea como agente oxidante una mezcla de oxígeno (O_2) y vapor de agua (H_2O). Este último elemento, al actuar como moderador de la temperatura, puede ser el causante de que esta variable no rebase los 2000 K. Otra diferencia substancial al emplear una mezcla de oxígeno y vapor de agua en lugar de aire, es la mayor cantidad de O_2 y H_2O en el equipo, lo que se traduce en mayores concentraciones de CO y de H_2 .

El incremento inicial en la temperatura, coincide con el rápido consumo del oxígeno (figura 5.48), lo que implica que hasta ese punto, las reacciones $char-O_2$, $CHx-O_2$, $CO-O_2$ y H_2-O_2 dejan de efectuarse, y el resto del equipo, solo predominan las reacciones $char-CO_2$ y $char-H_2O$. Esto explica los picos en CO_2 y H_2O y su posterior disminución a lo largo del equipo; y por otro lado, el aumento en CO y H_2O a medida que los gases se aproximan a la salida. En lo que respecta a los volátiles (CHx), una vez que se termina el O_2 , su concentración permanece constante (figura 5.47).

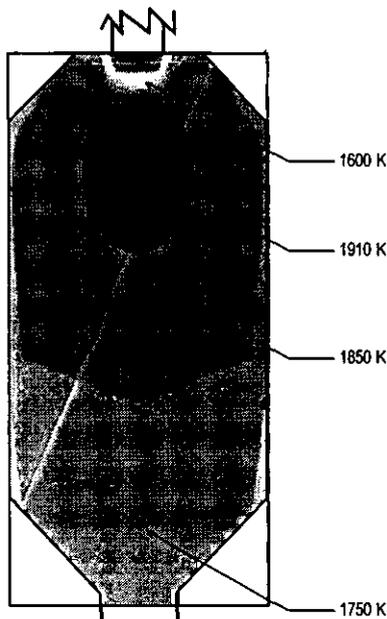


Fig 5.42 Contorno de temperatura

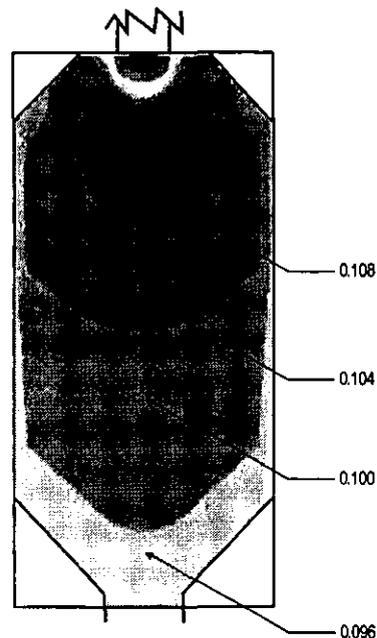


Fig. 5.43 Contorno de fracción másica del CO_2

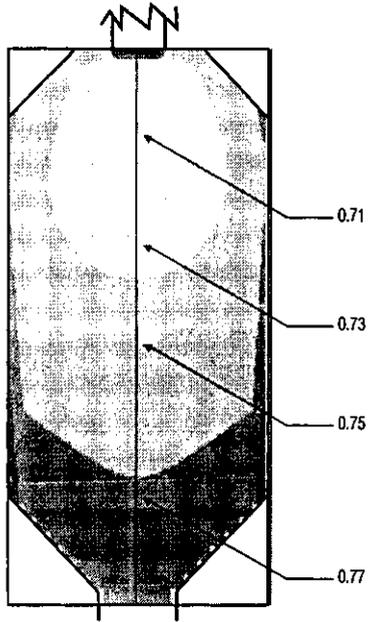


Fig 5.44 Contorno de fracción másica del CO

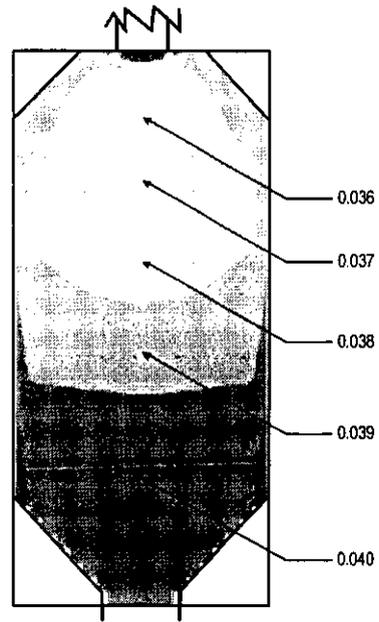


Fig. 5.45 Contorno de fracción másica del H₂

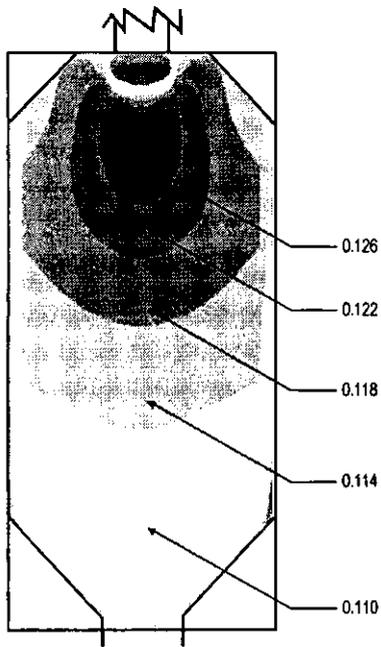


Fig 5.46 Contorno de fracción másica del H₂O

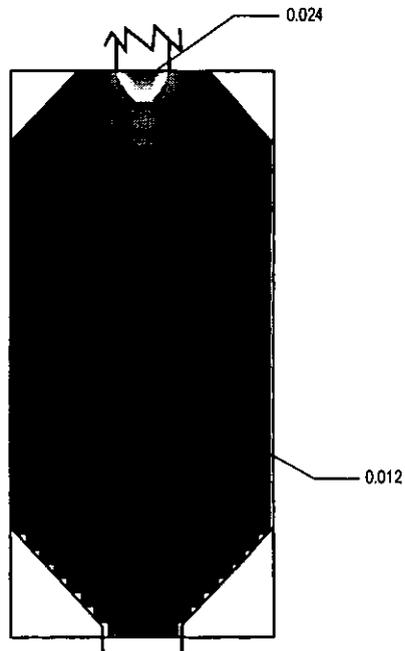


Fig. 5.47 Contorno de fracción másica del CH_x

ESTA TESIS NO SALE
DE LA BIBLIOTECA



Fig 5.48 Contorno de fracción másica del O₂

5.4.3 Especies de la fase gaseosa. Comparaciones con datos experimentales.

Las fracciones volumétricas obtenidas de la simulación, se comparan con medidas experimentales y las obtenidas por Govind & Shah [1984]. En el cuadro 5.6 se muestran estas comparaciones.

Cuadro 5.6 Comparación de los tres principales componentes del gas de síntesis para un carbón *Illinois # 6* (% vol base seca).

Fuente	CO	H ₂	CO ₂
Mediciones experimentales	57.57	39.13	2.95
Predicciones de Govind & Shah [1984]	55.46	39.99	3.95
Modelo de esta tesis	55.05	40.04	4.37

Como se puede observar en el cuadro, las concentraciones obtenidas por este modelo se pueden considerar adecuadas. Govind & Shah [1984] simularon este flujo como unidimensional, con lo cual el modelo de esta tesis tiene la ventaja adicional de representar la evolución espacial de las concentraciones de las especies para ambas fases.

5.7 Simulación del gasificador tipo Texaco (caso “D”)

5.7.1 Condiciones de operación

La configuración empleada en este caso es la misma que la usada en la sección anterior (figuras 5.39 y 5.40). Las condiciones de operación para el modelo se muestran en el cuadro 5.6. La composición del coque de petróleo, así como su poder calorífico, son los considerados típicamente por PEMEX [Martínez, 2000].

Cuadro 5.6 Parámetros y condiciones de operación para el modelo del gasificador tipo Texaco

Combustible (residuos de la licuefacción de un carbón Illinois #6)	Flujo	0.07666 kg s ⁻¹		
	Temperatura	505.22 K		
	Composición	<i>Análisis inmediato (% masa):</i> Humedad: 8.0 Ceniza: 15.53 Carbón: 82.32 Volátiles: 9.20		<i>Análisis último (% masa):</i> Carbón: 88.39 Hidrógeno: 3.12 Oxígeno: 0.49 Nitrógeno: 0.96 Azufre: 6.7
	Tamaño medio de la partícula a la entrada	35.8 x 10 ⁻⁶ m		
	Poder Calorífico Superior	31298 kJ kg ⁻¹		
	Datos para cinética química	Factor Pre-exponencial (kg Pa ^{-0.5} s ⁻¹ m ⁻²)	C – H ₂ O	0.0782
			C – CO ₂	0.0732
Energía de activación (kJ mol ⁻¹)		C – O ₂	0.000697	
		C – H ₂ O	115	
Oxidante	Flujo	<i>Relación vapor combustible</i>	0.241	Flujo total = 0.0849 kg s ⁻¹
		<i>Relación Oxígeno combustible</i>	0.866	
	Temperatura	385 K		
	Presión	2.735 Mpa		
Modelo de radiación	Temperatura en la pared: 1000 K Coeficiente de absorción: 0.3 Coeficiente de dispersión: 0.14			

Como se puede apreciar en el cuadro, los datos para los mecanismos de cinética química se consideraron iguales a los utilizados con carbón, excepto para la reacción *char-O₂* que son de Smith [1984] para coque de petróleo con un orden aparente de 0.5.

De igual manera que en el caso anterior, se consideró únicamente la sección en la que toma lugar la gasificación, sin incluir el apagado de cenizas o el intercambiador de calor.

5.7.2 Resultados y discusión

- Campos de velocidades

La figura 5.49 muestra los vectores de velocidad media dentro del equipo. El fluido entra a una velocidad de alrededor de 0.6 m/s, tendiendo a disminuir hasta aproximadamente 0.2 m/s. Posteriormente tiende a acelerarse conforme se aproxima a la salida. Se percibe ligeramente que la condición de “no-deslizamiento” impuesta en las paredes laterales afecta al campo de vectores. En general, la aerodinámica del equipo no se ve modificada al usar coque de petróleo.

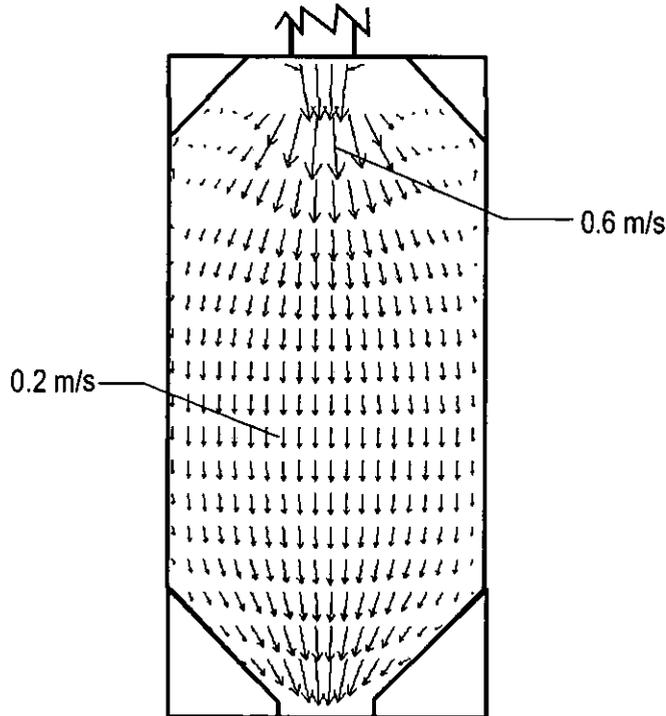


Figura 5.49 Representación del campo de velocidad en el gasificador Texaco (empleando coque de petróleo)

- Contornos de temperatura y fracciones másicas de la fase gaseosa

En las figuras 5.50 a 5.56 se muestran los contornos de temperatura y de fracción másica del CO_2 , CO , H_2 , H_2O y CH_x obtenidas de la simulación de este gasificador. En general, las distribuciones simuladas presentan simetría axial, cambiando su valor muy rápidamente cerca de la entrada, debido a las bajas velocidades que se tienen en el equipo.

En la figura 5.50 se aprecia como la temperatura del gas se incrementa rápidamente de las condiciones a la entrada (385 K) hasta 1980 K debido a las reacciones exotérmicas, y posteriormente disminuye hasta 1800 K a la salida. Esta temperatura puede emplearse para producir vapor de agua mediante un intercambiador de calor (configuración de la figura 5.39b). La zona de alta temperatura coincide con la mayor concentración de CO_2 y H_2O (figuras 5.51 y 5.54), y contrariamente, con las menores concentraciones de CO y H_2 (figuras 5.52 y 5.53). A medida que la temperatura va disminuyendo, principalmente por las reacciones endotérmicas, las concentraciones de CO_2 y H_2 van siendo menores, mientras que las de CO y H_2 aumentando.

En este gasificador, a diferencia del presentado en las secciones anteriores, se emplea como agente oxidante una mezcla de oxígeno (O_2) y vapor de agua (H_2O). Este último elemento, al actuar como moderador de la temperatura, puede ser el causante de que esta variable no rebase los 2000 K. Otra diferencia substancial al emplear una mezcla de oxígeno y vapor de agua en lugar de aire, es la mayor cantidad de O_2 y H_2O en el equipo, lo que se traduce en mayores concentraciones de CO y de H_2 .

El incremento inicial en la temperatura, coincide con el rápido consumo del oxígeno (figura 5.56), lo que implica que hasta ese punto, las reacciones $char-O_2$, $CHx-O_2$, $CO-O_2$ y H_2-O_2 dejan de efectuarse, y el resto del equipo, solo predominan las reacciones $char-CO_2$ y $char-H_2O$. Esto explica los picos en CO_2 y H_2O y su posterior disminución a lo largo del equipo; y por otro lado, el aumento en CO y H_2O a medida que los gases se aproximan a la salida. En lo que respecta a los volátiles (CHx), una vez que se termina el O_2 , su concentración permanece constante (figura 5.55).

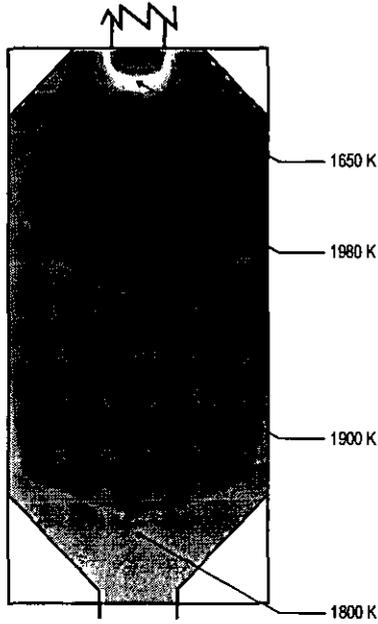


Fig 5.50 Contorno de temperatura

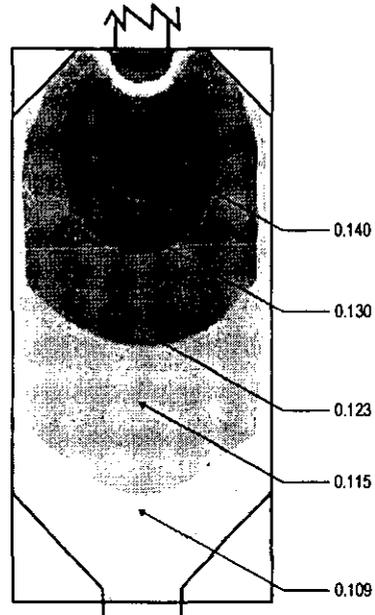


Fig. 5.51 Contorno de fracción másica del CO_2

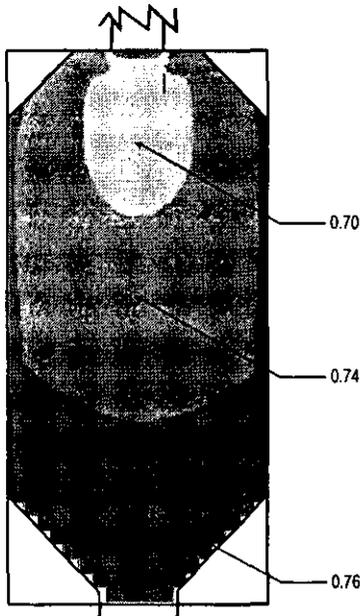


Fig 5.52 Contorno de fracción másica del CO

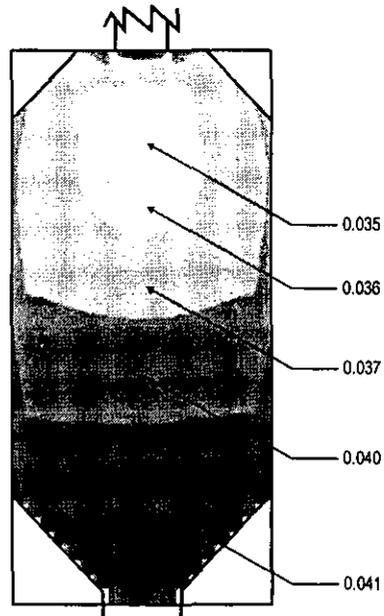


Fig. 5.53 Contorno de fracción másica del H_2

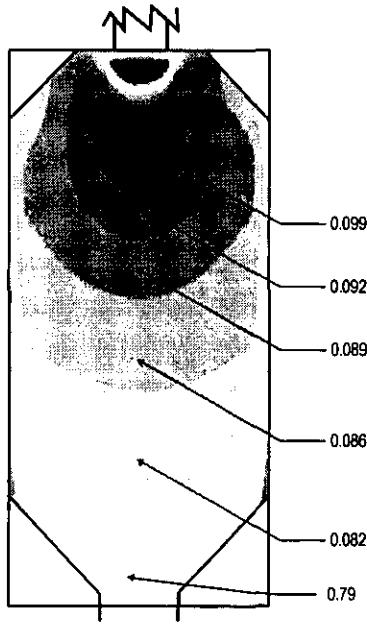


Fig 5.54 Contorno de fracción másica del H₂O



Fig. 5.55 Contorno de fracción másica del CH_x

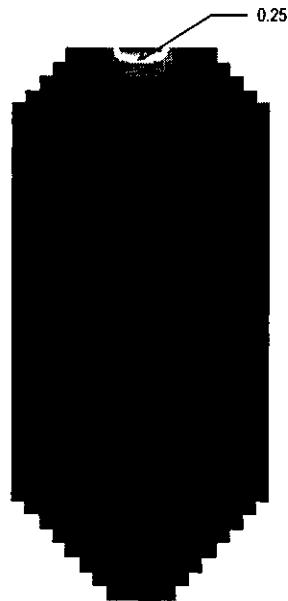


Fig 5.56 Contorno de fracción másica del O₂

5.8 Conclusiones

En este capítulo se han presentado los resultados de la simulación aplicando el modelo a tres configuraciones distintas. La primera, considera un quemador unidimensional el cual opera bajo condiciones de combustión. La segunda, representa un gasificador de flujo por arrastre, equipo que actualmente se encuentra en operación en una planta IGCC. . La tercera configuración

representa un gasificador tipo Texaco.. Para estas últimas, se empleó primeramente carbón como combustible y posteriormente coque de petróleo

De los datos resultados obtenidos, se puede concluir que el modelo propuesto puede emplearse en la simulación de fenómenos de combustión y gasificación. Los resultados obtenidos para carbón se compararon con los datos experimentales disponibles en la literatura, así como los obtenidos numéricamente en otros trabajos. La principal conclusión es que el modelo predice satisfactoriamente las concentraciones de CO, CO₂, H₂, H₂O, O₂, CH_x y N₂ en un proceso de gasificación con diferentes formas geométricas.

Conclusiones y recomendaciones para investigaciones futuras

El estudio desarrolla un modelo numérico para el proceso de gasificación del carbón o coque de petróleo. El modelo fue empleado para simular tres configuraciones distintas de equipos térmicos. La primera corresponde a un quemador, discretizado en una dimensión, el cual, permitió evaluar la funcionalidad del modelo e ilustrar los múltiples procesos que toman lugar en la partícula de carbón, además de compararlos con un trabajo similar. La segunda configuración representa un equipo a escala industrial que utiliza carbón, actualmente en operación en la central IGCC de Nakoso, Japón. La tercera corresponde a un gasificador de tipo comercial Texaco. Para ambas configuraciones de gasificadores se cuenta con medidas experimentales y simulaciones numéricas de diversos autores que permitieron la validación del modelo. Adicionalmente, estos equipos se simularon empleando una composición típica de un coque de petróleo mexicano.

Para simular el flujo reactivo se elaboró un modelo bifásico-euleriano. Las ecuaciones de transporte que describen el flujo bifásico y reactivo, se resolvieron mediante la técnica de volúmenes finitos. Para simular las reacciones químicas se emplearon modelos de difusión y cinética química para las reacciones heterogéneas; y de Eddy Break Up y cinética química para las reacciones homogéneas.

Las principales conclusiones obtenidas a partir de la comparación con datos experimentales de la literatura son las siguientes:

- Se ha desarrollado un modelo que sirve para simular los fenómenos más representativos de la combustión y gasificación de partículas de carbón o coque de petróleo.
- Los procesos físicos y químicos más relevantes que toman lugar tanto en la fase sólida como en la gaseosa se representan adecuadamente y los resultados tienen una buena aproximación con datos reportados en la literatura.
- El modelo predice adecuadamente las fracciones de concentración mayoritarias del gas de síntesis y su temperatura.
- El modelo se acopla bien al uso de aire o una mezcla de oxígeno/vapor como oxidante.
- La versatilidad del modelo permite aplicarlo a múltiples geometrías y condiciones de operación.
- El modelo ayudará en el diseño, adquisición o modificación de este tipo de equipos, con lo que se convierte en una herramienta útil en el análisis de la tecnología de gasificación.

De lo anterior, se deriva que el objetivo planteado en esta tesis (*elaborar un modelo numérico para la simulación de las principales reacciones de gasificación para la utilización del carbón o coque de petróleo*) se ha cumplido.

A continuación se presentan los aspectos más relevantes de las simulaciones para dar al lector un panorama general de los resultados obtenidos.

1) Quemador unidimensional

El quemador unidimensional considera la inyección de una corriente de aire y carbón a alta temperatura (773 K). Las condiciones en este caso, están dadas para la combustión del carbón. La relación aire combustible es de 9.66 kg de aire por cada kg de carbón. El carbón es del tipo bituminoso con un poder calorífico inferior de 2193 kJ kg^{-1} .

La alta temperatura causa la rápida pirolisis del carbón "crudo", el cual desaparece produciendo el carbonizado o *char* en la fase sólida, y los volátiles en la fase gaseosa. Los volátiles son consumidos rápidamente reaccionando con el aire (combustión homogénea), mientras que el carbonizado va desapareciendo también al reaccionar con el aire (reacción heterogénea exotérmica) y con el dióxido de carbono (reacción heterogénea endotérmica). Las reacciones homogéneas son generalmente más rápidas que las heterogéneas.

La cantidad de ceniza permanece constante a través de los procesos, pero su fracción másica se incrementa a uno ya que las partículas son totalmente quemadas y todos los otros componentes desaparecen.

En el modelo empleado, el monóxido de carbono es el resultado inmediato, tanto de las reacciones heterogéneas como de las homogéneas. Dado que existe suficiente cantidad de oxígeno, el CO es posteriormente oxidado a CO_2 . La temperatura de la fase gaseosa se incrementa conforme se van dando los procesos.

Comparaciones con datos obtenidos por otros autores para la misma configuración, muestran comportamientos similares tanto para la fase sólida como la gaseosa. En el caso del CO, las diferencias presentadas se pueden deber a que el modelo de esta tesis incluye tres reacciones más (dos heterogéneas y una homogénea) que en el citado artículo.

2) Gasificador de flujo por arrastre

El gasificador considerado en esta sección es del tipo de flujo por arrastre. La capacidad de gasificación del sistema es de 200 toneladas de carbón por día usando aire como oxidante. El gasificador es un reactor que posee tres secciones: combustor, difusor y reductor. Los flujos de gas y las partículas de carbón o coque de petróleo entran por los quemadores dispuestos en tres distintos niveles en la dirección axial. En la parte baja se localiza la cámara de combustión, a la cual, se introducen combustible y aire mediante los dos primeros niveles de quemadores. Enseguida viene la garganta y el difusor en donde se localiza el tercer nivel de quemadores. Las relaciones aire/combustible son distintas en cada nivel. Se realizó primeramente la simulación empleando carbón como combustible y los resultados se compararon con datos experimentales, y los obtenidos por otros autores (mediante un modelo de ecuaciones lagrangianas para la fase sólida). De esta comparación se deduce que el modelo predice bien las concentraciones de CO , CO_2 , H_2 , H_2O , O_2 , CH_x y N_2 . Posteriormente, se empleó el modelo para una composición de coque de petróleo. El comportamiento es similar en ambos casos.

La aerodinámica muestra que el fluido se acelera al pasar el sistema garganta-difusor y tiende a uniformizarse antes de la salida. La condición de "no-deslizamiento" impuesta en las paredes laterales afecta al campo de vectores.

La temperatura disminuye a lo largo de la altura del gasificador, y está ligada a la composición de los gases. Esto significa que altas concentraciones de CO_2 y H_2O en la cámara de combustión son debidas a las temperaturas altas; mientras que por otro lado, las concentraciones mayores de CO y H_2 se presentan en el reductor, acompañadas de temperaturas más bajas. Las diferencias en temperatura entre el combustor y el reductor se deben a las condiciones de alimentación del combustible; ya que los quemadores de los niveles 1 y 2 operan bajo una relación

más rica en oxidante que los del nivel 3. Por esta misma razón, las mayores temperaturas se presentan dentro de la cámara de combustión donde CO_2 y H_2O se producen debido a la combustión del carbón y los volátiles producidos.

Saliendo de la cámara de combustión, la temperatura del gas disminuye gradualmente hasta los quemadores del nivel 3, en donde sufre un cambio brusco debido a la entrada de carbón y oxidante. La temperatura alcanza los niveles más bajos en la zona de reducción, coincidiendo con bajas concentraciones de CO_2 y H_2O , y con altas concentraciones de CO y H_2 .

Contrario al comportamiento del CO_2 , el CO se incrementa a lo largo de la altura del gasificador, y el incremento es mayor después de los quemadores del nivel 3 donde alcanza su máximo valor, posteriormente disminuye una vez que se mezclan los gases.

Ya que se considera como agente oxidante al aire seco, el H_2O producido proviene de la humedad del combustible y como producto de la combustión de los volátiles. Este vapor de agua, formado principalmente en la zona de combustión, es posiblemente el responsable de la producción de H_2 en la zona reductora.

A la salida del gasificador prácticamente todas las composiciones alcanzan un valor uniforme.

3) Gasificador tipo Texaco

Este equipo también entra en la clasificación de gasificadores de flujo por arrastre. A diferencia de la configuración anterior, el agente oxidante en este caso es una mezcla de oxígeno (O_2) con vapor de agua (H_2O), el cual entra, junto con el combustible, por la parte superior. El gas de síntesis producido es desalojado por la parte inferior. En la simulación no se considera el mecanismo de recuperación de calor del gas de síntesis o el proceso de apagado de las cenizas.

Se realizó primeramente la simulación empleando carbón como combustible y los resultados se compararon con datos experimentales, y los obtenidos por otros autores. De esta comparación se deduce que el modelo predice bien las concentraciones de las especies mayoritarias CO , CO_2 , y H_2 . Posteriormente, se empleó el modelo para una composición de coque de petróleo. El comportamiento es similar en ambos casos.

La aerodinámica en este caso presenta velocidades medias en el equipo menores a un metro por segundo, lo que puede ser una de las principales causas del rápido incremento en la temperatura, debido a las reacciones exotérmicas y los respectivos fenómenos de transferencia de masa. Una vez alcanzado valor máximo de la temperatura, ésta va disminuyendo más lentamente.

La zona de alta temperatura coincide con la mayor concentración de CO_2 y H_2O y contrariamente, con las menores concentraciones de CO y H_2 . A medida que la temperatura va disminuyendo, principalmente por las reacciones endotérmicas, las concentraciones de CO_2 y H_2 van siendo menores, mientras que las de CO y H_2 van aumentando.

El vapor de agua (H_2O) en el agente oxidante actúa como moderador de la temperatura, y puede ser el causante de que esta variable no rebase los 2000 K. Asimismo, al emplear una mezcla de oxígeno y vapor de agua en lugar de aire, es la mayor cantidad de O_2 y H_2O en el equipo, lo que se traduce en mayores concentraciones de CO y de H_2 , y la prácticamente nula presencia de nitrógeno en los gases.

El incremento inicial en la temperatura, coincide con el rápido consumo del oxígeno, lo que implica que hasta ese punto, las reacciones char-O_2 , CHx-O_2 , CO-O_2 y $\text{H}_2\text{-O}_2$ dejan de efectuarse, y el resto del equipo, solo predominan las reacciones char-CO_2 y $\text{char-H}_2\text{O}$. Esto explica los picos en CO_2 y H_2O y su posterior disminución a lo largo del equipo; y por otro lado, el aumento en CO y H_2O a medida que los gases se aproximan a la salida. En lo que respecta a los volátiles (CHx), una vez que se termina el O_2 , su concentración permanece constante.

Comparaciones con datos experimentales y los obtenidos por otros autores muestran que el modelo predice bien las concentraciones de las especies mayoritarias como el H_2 , CO y CO_2

Recomendaciones para trabajos futuros

En esta sección se muestran algunas recomendaciones para trabajos futuros que podrían complementar, extender o mejorar los resultados de la presente tesis.

En primer lugar, se recomienda la simulación del flujo reactivo en tres dimensiones, ya que en los patrones del flujo real, existe una componente angular para la velocidad que podría afectar la aerodinámica en el sistema.

Por otra parte, sería conveniente contar con un equipo "de laboratorio", que permita tener medidas más detalladas para una mejor evaluación de los modelos utilizados.

Se recomienda la integración de reacciones que consideren el azufre en el combustible, ya que la fracción másica de este elemento en el caso del coque de petróleo y algunos carbones, puede producir cantidades considerables de elementos tales como el H_2S y el COS en el gas de síntesis.

De igual manera, sería conveniente integrar al modelo, mecanismos de formación de Oxidos de Nitrógeno (NOx 's) para estudiar la formación y emisiones de este contaminante en los gasificadores.

Para representar la interacción entre la cinética química y la turbulencia se recomienda hacer uso de otros modelos de combustión como por ejemplo los basados en la Función de Densidad de Probabilidad. Estos permiten estudiar mejor la evolución de los componentes de la fase gaseosa.

Dada la versatilidad del modelo numérico, se recomienda su uso en otras configuraciones de gasificadores comerciales del mismo tipo, por ejemplo los de *Shell*, y extenderlo a gasificadores de lecho fijo y fluidizado. Asimismo, el estudio del comportamiento del flujo con la variación de los parámetros de operación merece ser examinado con más detalle.

Se planea en un futuro, en conjunto con el grupo de exergia del IMP, establecer una plataforma de interacción entre el presente modelo y el simulador de procesos *Aspen*. De esta manera, alimentar el modelo en "tiempo real" con los datos generados por *Aspen* y analizar globalmente todo un sistema de gasificación (con sistemas auxiliares), un proceso de refinación de crudo, o un sistema para la generación de potencia. Con lo anterior se pretende obtener las eficiencias exérgicas e incidir mejor en la planeación, diseño o implantación de este tipo de tecnologías.

En otros aspectos, la no estacionariedad asociada a todo flujo turbulento puede tener una importante influencia en la termoquímica. Dichos fenómenos no estacionarios pueden dar lugar a la interrupción de los procesos de reacción en ciertas zonas del gasificador, que serían imposibles reproducir con modelos aerodinámicos estacionarios que utilizan ecuaciones promediadas en el tiempo. Se sugiere, por tanto como una tarea a futuro, representar el flujo reactivo mediante modelos de tipo Simulación de las Grandes Escalas (LES), que mediante el filtrado de las ecuaciones, separan las grandes y pequeñas escalas y resuelven de forma no estacionaria las escalas del movimiento por encima de la malla. El costo computacional de dichos modelos es considerable, pero la creciente potencia y la disminución del precio de las computadoras empiezan hacerlos viables.

Anexo 1

Resultados obtenidos por Fueyo y Gambon [1997]

(fracciones másicas vs. longitud del quemador en metros)

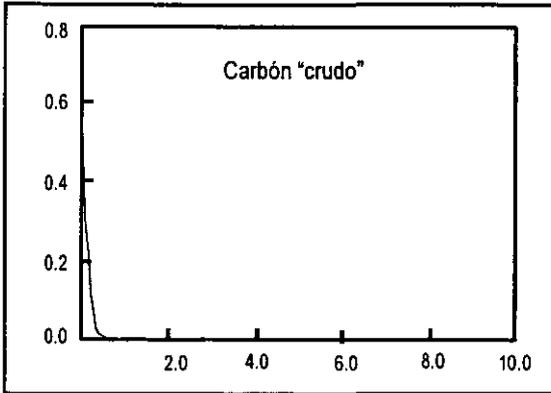


Figura 1 Evolución del carbón "crudo"

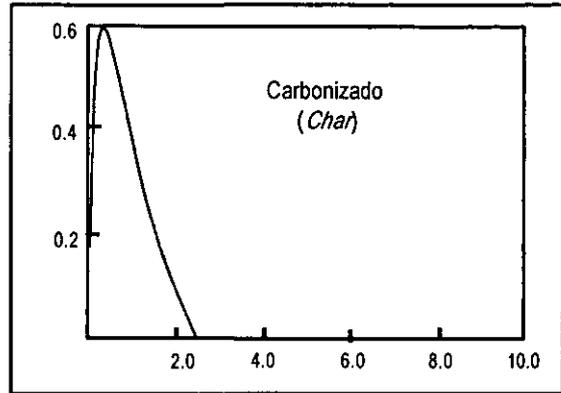


Figura 2 Evolución del char

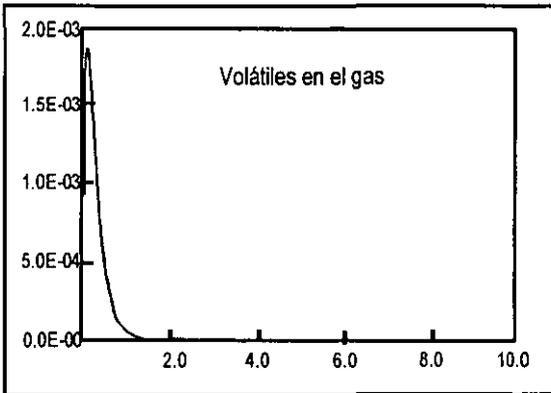


Figura 3 Evolución de los volátiles

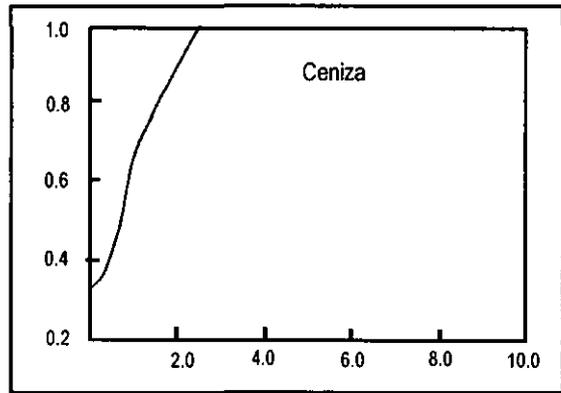


Figura 4 Evolución de la ceniza

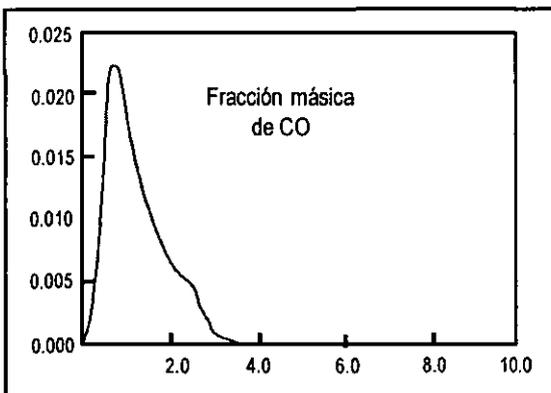


Figura 5 Evolución del CO

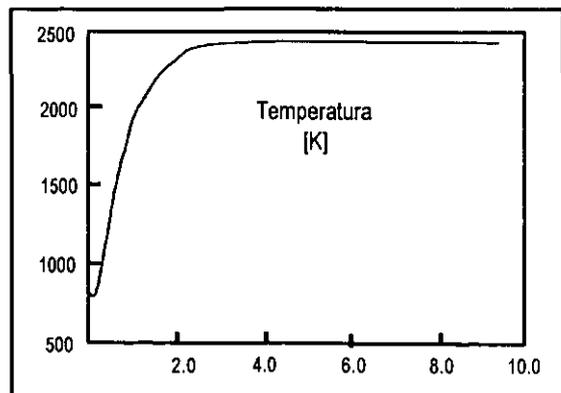


Figura 6 Evolución de la temperatura

Anexo 2

Parámetros para la cinética química de distintos combustibles sólidos

- **Fuente: Smith, 1982**
Reacción heterogénea $char-O_2$

Combustible	Factor pre-exponencial ($g\ cm^{-2}\ s^{-1}\ atm^{-n}$)	Energía de activación ($kJ\ mol^{-1}$)	Orden aparente de reacción (n)
Coque de petróleo	7.0	82.46	0.5
Antracitas y semiantracitas de UK y oeste de Europa	20.4	79.5	1.0
Carbón Bituminoso Pittsburg, USA	4187.0	142.3	0.17
Carbón bituminoso Illinois No.6, USA	6337.0	142.7	0.17

- **Fuente: Mann & Kent, 1994**
Reacciones: 1) $char-O_2$
2) $char-CO_2$
3) $char-H_2O$

Combustible		Factor pre-exponencial ($kg\ m^{-2}\ s^{-1}\ Pa^{-n}$)	Energía de activación ($kJ\ mol^{-1}$)	Orden aparente de reacción (n)
Carbón bituminoso	1)	0.052	61	0.5
	2)	0.0732	115	0.5
	3)	0.0782	112.5	0.5

- **Fuente: Ryback & Zembrzuski, 1986**
Reacción heterogénea $char-O_2$

Combustible	Factor pre-exponencial ($Kg\ cm^{-2}\ s^{-1} / kg\ m^{-3}$) $\times 10^{2.5}$	Energía de activación ($kJ\ mol^{-1}$)	Orden aparente de reacción (n)
Coque de petróleo	0.73	82.0	0.5

- **Fuente: Fletcher et al , 2000**
Reacciones: 1) $char-O_2$
2) $char-CO_2$
3) $char-H_2O$

Combustible		Factor pre-exponencial (s^{-1})	Energía de activación ($kJ\ mol^{-1}$)	Orden aparente de reacción (n)
Biomasa	1)	1.4×10^8	82.8	1.0
	2)	3.4×10^7	179.5	1.0
	3)	9.35×10^4	179.5	1.0

Anexo 3

Archivo de comandos en PHOENICS

```
TALK=F;RUN( 1, 1);VDU=X11-TERM
*****
Group 1. Run Title
*****   Coordinacion de Procesos   *****
*****   Industriales y Ambientales *****
*****   Instituto de Ingenieria     *****
*****           Y                   *****
*****   Grupo de Exergia            *****
*****   Instituto Mexicano del Petroleo *****
*****
TEXT (GASIFICADOR DE FLUJO POR ARRASTRE: )
*****
** definicion de variables
REAL (PI,AINBOQ)
REAL (ROGIN1,ROGIN2,ROGIN3)
REAL (DIAM,DIAMBOQ, DIN2)
REAL (FGIN1,FGIN2 , FGIN3, VEL1, VEL2, VEL3)
REAL (FMC1, FCA1, FMC2, FCA2, FMC3, FCA3)
REAL (ROMEAN)
REAL (TGIN1,TGIN2,TGIN3)
REAL (HSIN,HGIN1,HGIN2,HGIN3)
REAL (TKEIN1,TKEIN2,TKEIN3,EPIN1,EPIN2,EPIN3,DIST)
** dimensiones (SI)
PI=3.14159
    diametro gasificador
DIAM=1.2
    diametros boquillas
DIAMBOQ=0.10
    Area boquillas
AINBOQ=(PI*DIAMBOQ*DIAMBOQ)/4
** flujos masicos aire - kg/s
    flujo por boquilla y por m**2
    primer nivel
FGIN1=1.117/AINBOQ
    Segundo nivel
FGIN2=1.117/AINBOQ
    Tercer nivel
FGIN3=0.458/4/AINBOQ
** flujos masicos carbon - FMC ->kg/s
    FCA ->kg/s m**2
    flujo por boquilla
    Primer nivel
FMC1=FGIN1*0.100254885
FCA1=FMC1
    Segundo nivel
FMC2=FGIN2*0.236193712
FCA2=FMC2
    tercer nivel
FMC3=FGIN3
FCA3=FMC3*1.2
** temperaturas a la entrada - K
    carbon=aire
TGIN1= 600.0
TGIN2= 600.0
TGIN3= 600.0
** Presión de operación - Pa
PRESS0=2.7e+6
** Temperatura de referencia - K
TEMPO=0.
** Densidades del aire a la entrada - kg/m**3
ROGIN1=PRESS0/(287.41*TGIN1)
    ROGIN1=FGIN1/VEL1
```

```

ROGIN2=PRESS0/(287.41*TGIN2)
  ROGIN2=FGIN2/VEL2
ROGIN3=PRESS0/(287.41*TGIN3)
  ROGIN3=FGIN3/VEL3
  ** Densidad del Carbon kg/m**3
REAL(ROCOAL); ROCOAL=1300.
  ** Velocidades de entrada - m/s
VEL1=FGIN1/ROGIN1
VEL2=FGIN2/ROGIN2
VEL3=FGIN3/ROGIN3
  ** Condiciones de turbulencia a la entrada
TKEIN1=0.0025*VEL1*VEL1;TKEIN2=0.0025*VEL2*VEL2
TKEIN3=0.0025*VEL3*VEL3
EPIN1=0.1643*TKEIN1**1.5/DIST; EPIN2=0.1643*TKEIN2**1.5/DIST
EPIN3=0.1643*TKEIN3**1.5/DIST

  ** Definiciones para el ground
BOOLEAN(BURN,INERT,NOXCAL,RADCAL,SIZECH)
  ** Activa Combustion
+ BURN=T
SPEDAT(SET,MODELO,BURN,L,BURN)
  ** Activa Radiacion
+ RADCAL=T
  SPEDAT(SET,MODELO,RADCAL,L,RADCAL)
  ** Activa modelo de reduccion de particulas
+ SIZECH=T
  ** Composicion del Combustible
  ** Análisis inmediato (fracciones masicas, base humeda)
  YAGUA = humedad; YCENI = Ceniza
  YVOLA = volatiles; YCHAR= Carbón fijo
REAL(YAGUA,YCENI,YVOLA,YCHAR)
YAGUA =5.3/100 ;YCENI = 12.1/100
YVOLA = 46.7/100 ;YCHAR = 35.8/100
SPEDAT(SET,MODELO,YAGUA,R,YAGUA);SPEDAT(SET,MODELO,YCENI,R,YCENI)
SPEDAT(SET,MODELO,YVOLA,R,YVOLA);SPEDAT(SET,MODELO,YCHAR,R,YCHAR)
ENDIF
  ** Análisis ultimo (fracciones masicas, base seca) -----
  YCDRY =carbon; YODRY = oxigeno; YSDRY = azufre
  YHDRY = HET3ogeno; YNDRY = nitrogeno
REAL(YHDRY,YCDRY,YODRY,YNDRY,YSDRY)
YCDRY = 76.6/100;YHDRY = 6.5/100
YODRY = 13.9/100;YNDRY = 1.13/100
YSDRY=0.22/100
SPEDAT(SET,MODELO,YCDRY,R,YCDRY);SPEDAT(SET,MODELO,YODRY,R,YODRY)
SPEDAT(SET,MODELO,YSDRY,R,YSDRY);SPEDAT(SET,MODELO,YHDRY,R,YHDRY)
SPEDAT(SET,MODELO,YNDRY,R,YNDRY)
  ** Comienzan grupos
  *****
CPVNAM=VDI;SPPNAM=MODELO
  *****
  IRUNN = 1 ;LIBREF = 3
Group 2. Transience
  STEADY = T
  *****
CARTES=t
  GROUP 3. X-direction grid specification
NREGx=1
IREGx=1; GRDPWR(x,12,1.2,1.0)
  GROUP 4. Y-direction grid specification
NREGy=3
IREGy=1; GRDPWR(y,10,1.2,1.0)
IREGy=2; GRDPWR(y,20,2.4,1.0)
IREGy=3; GRDPWR(y,40,9.7,1.5)
  GROUP 5. Z-direction grid specification
GRDPWR(z,1,AINBOQ/DIAMBOQ,1.0)
  Group 6. Body-Fitted coordinates

  Group 7. Variables: STOREd,SOLVEd,NAMED
  -----
  ** Especifica flujo multifásico
ONEPHS=f

```

```

** Almacenamiento y especificacion de variables
SOLVE(P1,U1,V1)
SOLUTN(P1,Y,Y,Y,P,P,P)
SOLUTN(U2,Y,Y,N,N,N,Y);SOLUTN(V2,Y,Y,N,N,N,Y)
SOLUTN(W2,Y,Y,N,N,N,Y)
SOLUTN(R1,Y,Y,N,N,N,Y);SOLUTN(R2,Y,Y,N,N,N,Y)
SOLUTN(H1,Y,Y,N,P,P,P);SOLUTN(H2,Y,Y,N,N,N,Y)
STORE(TMP1)
STORE(TMP2)
** Modelo de turbulencia
TURMOD(KEMODL)
KELIN=3
STORE(PRPS)
STORE(VPOR)
** Componentes en el gas
SOLVE(YCHX,YCO2,YCO,YH2O,YH2,YO2);STORE(YN2)
** Componentes de la partícula
SOLVE(COAL,CHAR,HUME);STORE(ASH2)
** Datos para modelo de reduccion de particula
-----
** Diámetro inicial - 1e-6 m
REAL(SMDIAM);SMDIAM=39.8*1.E-6
** Variable tipo shadow
SOLVE(PHIS)
FIINIT(PHIS)=1.0
TERMS(PHIS,P,P,P,P,N,P)
** Almacenamiento del tamaño de partícula
STORE(SIZE)
FIINIT(SIZE)=SMDIAM
** Radiacion térmica
Especificación de datos
-----
INTEGER(IHRADL)
IF(RADCAL) THEN
REAL(RADW,ABSORB,SCAT,SIGMA,EMIW,ED2ME,TWALL1,TWALL2,TWALL3)
** SIGMA -> Constante de estefan Boltzman
** EMIW -> Emisibilidad
** ABSOR -> Coeficiente de absorción
** TWALL1,2,3 -> Temperaturas en las paredes
SIGMA=5.6697E-8/1e6;EMIW=0.7
TWALL1=1897.
TWALL2=1073.
TWALL3=873
** RADW -> Dato para fuente
RADW=SIGMA*TWALL**4;ABSORB=0.3;SCAT=0.14
** Activación modelo
RADIAT(FLUX,ABSORB,SCAT,H1)
FIINIT(RADY)=RADW;FIINIT(RADX)=RADW
ED2ME=EMIW/(2.0-EMIW)
RELAX(RADY,FALSDT,1.0)
RELAX(RADX,FALSDT,1.0)
ENDIF
Group 8. Terms & Devices
-----
TERMS(H1,N,P,P,P,P,P)
TERMS(H2,N,P,P,P,P,P)
** Componentes del gas (asignación de variables a fase 1)
TERMS(YO2,P,P,P,P,Y,P);TERMS(YCHX,P,P,P,P,Y,N)
TERMS(YCO,P,P,P,P,Y,P);TERMS(YCO2,P,P,P,P,Y,P)
TERMS(YH2O,P,P,P,P,Y,P);TERMS(YH2,P,P,P,P,Y,P)
** Componentes de la partícula (asignación de variables a fase 2)
TERMS(COAL,P,P,P,P,N,P);TERMS(CHAR,P,P,P,P,N,P)
TERMS(HUME,P,P,P,P,N,P)
Group 9. Properties
-----
ENUL=1.8E-5
** Densidad de la fase 2
RHO2=ROCCAL
PRNDTL(H2)=1.E10
** Densidad de la fase uno
STORE(RHO1)

```

```

RH01=GRND
  ** Parámetros para formula de entalpia
REAL (RG1, RG2)
TMP1=GRND; RG1=GRND; RG2=2.0
SPEDAT (SET, MODELO, RG1, R, RG1); SPEDAT (SET, MODELO, RG2, R, RG2)
  ** Cp'S de ambas fases -> MJ/kg K
CP1=1.005/1e3
CP2=1.8/1e3
TMP2B=1.0/CP2
TMP2=GRND
PRNDTL (10) =GRND
STORE (LMPW)
PRT (R2) =1. e20
PRNDTL (HUME) =1. E10; PRNDTL (COAL) =1. E10; PRNDTL (CHAR) =1. E10
  Group 10. Inter-Phase Transfer Processes
-----
STORE (CFIP); SPEDAT (SET, MODELO, SMDIAM, R, SMDIAM)
  ** Poder calorífico
SPEDAT (SET, MODELO, PCIM, R, 2.70171E+01)
  ** Arrastre en la interfase
RLOLIM=1.E-5; CFIPS=GRND; ; STORE (SLIP, REYN)
  ** Datos transferencia de masa
CINT (YCHX) =0.0; CINT (YO2) =0.0; CINT (YH2O) =0.0; CINT (YCO) =0.0
CINT (YH2) =0.0
CINT (YCO2) =0.0; CINT (HUME) =0.0; CINT (CHAR) =0.0; CINT (COAL) =0.0
CINT (H1) =0.0; CINT (H2) =0.0
  ** Almacenamiento de transferencia de calor interfase
STORE (QDOT); FIINIT (QDOT) =0.0
  ** Conductividad del gas
+ REAL (THCON); THCON=0.0458; SPEDAT (SET, MODELO, GASCON, R, THCON)
PRNDTL (10) =grnd
PRT (R2) =1. e20
  Group 11. Initialise Var/Porosity Fields
-----
REAL (HINI, TREFE, TINI)
FIINIT (R2) =1.E-5; FIINIT (R1) =1.0-FIINIT (R2)
FIINIT (YCHX) =0.; FIINIT (YCO) =0.1
+ FIINIT (YO2) =.232; FIINIT (YH2O) =0.
FIINIT (YH2) =0.0
+ FIINIT (YN2) =.768; FIINIT (YCO2) =0.0
FIINIT (ASH2) =0.0; FIINIT (CHAR) =0.0
FIINIT (HUME) =0.0; FIINIT (COAL) =0.0
TREFE=273.0
TINI=1000.
  * compute the enthalpy of the air stream
  solo para valor inicial
RG2=2.0
HINI=0.77*(0.97035+1.493E-4*TINI/RG2)*TINI
HINI=HINI+0.23*(1.0802+3.265E-5*TINI/RG2)*TINI
  ** Conversion de HCALC a J/kg
HINI=HINI/1000
hini
FIINIT (H1) =HINI; FIINIT (H2) =CP2*TINI
FIINIT (TEMP1) =TINI; FIINIT (TEMP2) =TINI
FIINIT (RH01) =PRESSO/ (FIINIT (TEMP1)) /287.398
FIINIT (V1) =1
FIINIT (V2) =1
fiinit (vpor) =1.0
conpor (b1, 0.0, cell, 1, 4, 1, 1, 1, 1)
conpor (b2, 0.0, cell, 9, 12, 1, 1, 1, 1)
conpor (b3, 0.0, cell, 1, 2, 2, 2, 1, 1)
conpor (b4, 0.0, cell, 11, 12, 2, 2, 1, 1)
conpor (b5, 0.0, cell, 1, 1, 3, 3, 1, 1)
conpor (b6, 0.0, cell, 12, 12, 3, 3, 1, 1)

  ** garganta
conpor (g1, 0.0, cell, 1, 1, 14, 24, 1, 1)
conpor (g2, 0.0, cell, 12, 12, 14, 24, 1, 1)
conpor (g3, 0.0, cell, 2, 2, 15, 24, 1, 1)
conpor (g4, 0.0, cell, 11, 11, 15, 24, 1, 1)
conpor (g5, 0.0, cell, 3, 3, 16, 21, 1, 1)

```

```
conpor(g6,0.0,cell,10,10,16,21,1,1)
conpor(g7,0.0,cell,4,4,17,18,19,1)
conpor(g8,0.0,cell,9,9,17,18,19,1)
```

```
conpor(g9,0.0,cell,1,1,25,30,1,1)
conpor(g10,0.0,cell,nx,nx,25,30,1,1)
conpor(g11,0.0,cell,2,2,26,27,1,1)
conpor(g12,0.0,cell,11,11,26,27,1,1)
```

* friccion

```
WALL(WALL1,WEST,1,1,5,6,1,1,1,1)
WALL(WALL2,EAST,NX,NX,5,6,1,1,1,1)
WALL(WALL3,WEST,1,1,8,24,1,1,1,1)
WALL(WALL4,EAST,NX,NX,8,24,1,1,1,1)
WALL(WALL5,WEST,1,1,26,NY,1,1,1,1)
WALL(WALL6,EAST,NX,NX,26,NY,1,1,1,1)
```

* Calculo de las entalpias del aire de entrada

```
REAL(HCALC1,HCALC2,HCALC3,TCALC1,TCALC2,TCALC3)
TCALC1=TGIN1
TCALC2=TGIN2
TCALC3=TGIN3
```

RG2=2.0

```
HCALC1=0.77*(0.97035+1.493E-4*TCALC1/RG2)*TCALC1
HCALC1=HCALC1+0.23*(1.0802+3.265E-5*TCALC1/RG2)*TCALC1
```

```
HCALC2=0.77*(0.97035+1.493E-4*TCALC2/RG2)*TCALC2
HCALC2=HCALC2+0.23*(1.0802+3.265E-5*TCALC2/RG2)*TCALC2
```

```
HCALC3=0.77*(0.97035+1.493E-4*TCALC3/RG2)*TCALC3
HCALC3=HCALC3+0.23*(1.0802+3.265E-5*TCALC3/RG2)*TCALC3
```

** Conversion de HCALC a J/Kg

```
HCALC1=HCALC1/1000
HCALC2=HCALC2/1000
HCALC3=HCALC3/1000
```

Group 13. Boundary conditions and special sources

** Fuentes KE-EP

```
PATCH(KESOURCE,PHASEM,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
COVAL(KESOURCE,KE,GRND4,GRND4)
COVAL(KESOURCE,EP,GRND4,GRND4)
```

** Gravedad

```
PATCH(BUOYANCY,PHASEM,1,NX,1,NY,1,1,1,1)
COVAL(BUOYANCY,v1,FIXFLU,GRND1)
COVAL(BUOYANCY,v2,FIXFLU,GRND1)
BUOYA = ONLYMS ; BUOYC = -9.810E+00 ; BUOYB = ONLYMS
```

** Modulacion de la turbulencia debido a la presencia de particulas

```
PATCH(TURMODUL,FREEVL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
COVAL(TURMODUL,KE,GRND,0.0)
COVAL(TURMODUL,EP,GRND,0.0)
```

** Transferencia de calor entre fases

```
PATCH(LHEATRA,FREEVL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
COVAL(LHEATRA,H1,GRND3,GRND3)
COVAL(LHEATRA,H2,GRND3,GRND3)
```

**PROCESO DE SECADO

```
PATCH(PSECADO0,FREEVL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
COVAL(PSECADO0,P1,FIXFLU,GRND5)
COVAL(PSECADO0,P2,FIXFLU,GRND5)
COVAL(PSECADO0,YH2O,ONLYMS,1.0); COVAL(PSECADO0,H1,ONLYMS,GRND5)
PATCH(PSECADO2,FREEVL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
COVAL(PSECADO2,H2,FIXFLU,GRND5); COVAL(PSECADO2,HUME,FIXFLU,GRND5)
PATCH(PSECADO5,FREEVL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
COVAL(PSECADO5,COAL,GRND9,GRND9); COVAL(PSECADO5,CHAR,GRND9,GRND9)
```

Anexo 3 Archivo de comandos en PHOENICS

```

COVAL(PSECADO5,HUME,GRND9,GRND9)
COVAL(PSECADO5,PHIS,GRND9,GRND9)
STORE(SECA);FIINIT(SECA)=0.0;RELAX(SECA,LINRLX,1.0)
** Datos cinetica
REAL(ADEVOL,EDEVOL,RG55,C1EBU,C2EBU)
INTEGER(IG14,ICOA,MODHET,IORDEN,IKDMEA)

VOLATILIZATION Carbon Crudo -> Y Volatiles + (1-Y) Char
-----
PATCH(VOLATIL0,FREEVL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
COVAL(VOLATIL0,P1,FIXFLU,GRND1)
COVAL(VOLATIL0,P2,FIXFLU,GRND1)
COVAL(VOLATIL0,YCHX,ONLYMS,GRND1);COVAL(VOLATIL0,YO2,ONLYMS,GRND1)
COVAL(VOLATIL0,H1,ONLYMS,GRND1)
PATCH(VOLATIL2,FREEVL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
COVAL(VOLATIL2,CHAR,FIXFLU,GRND1)
COVAL(VOLATIL2,COAL,GRND1,0.0)
PATCH(VOLATIL5,FREEVL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
COVAL(VOLATIL5,COAL,GRND9,GRND9)
COVAL(VOLATIL5,CHAR,GRND9,GRND9)
COVAL(VOLATIL5,HUME,GRND9,GRND9)
COVAL(VOLATIL5,PHIS,GRND9,GRND9)
** datos cinética
ADEVOL=2000.0;EDEVOL=2.3E4/8.130
SPEDAT(SET,MODELO,ADEVOL,R,ADEVOL)
SPEDAT(SET,MODELO,EDEVOL,R,EDEVOL)
* Almacenamiento y relajación
STORE(VOLA);FIINIT(VOLA)=0.0;RELAX(VOLA,LINRLX,1.0)
* ICOA = 1 indica CO como producto
          =2 indica CO2
ICOA=1
SPEDAT(SET,MODELO,ICOA,I,ICOA)

COMBUSTION DE VOLATILES (YCHX)
-----
** Almacenamiento de tasas de reacción
Liter=1 selecciona modelo Eddy Break Up
          =2 Arrhenius;
          =3 EDC
          =4 Promedio armonico
STORE(COM1);FIINIT(COM1)=0.0;LITER(COM1)=1;RELAX(COM1,LINRLX,0.7)
STORE(COM2);FIINIT(COM2)=0.0;LITER(COM2)=1;RELAX(COM2,LINRLX,0.7)
STORE(COM3);FIINIT(COM3)=0.0;LITER(COM3)=1;RELAX(COM3,LINRLX,0.7)
** C1EBU y C2EBU = Constantes del EBU
C1EBU=4.0;C2EBU=0.0
SPEDAT(SET,MODELO,C1EBU,R,C1EBU)
SPEDAT(SET,MODELO,C2EBU,R,C2EBU)
** Reaccion
Chx + O2 -> CO + H2O seguida por CO + O2 -> CO2
PATCH(REACHOMA,PHASEM,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
COVAL(REACHOMA,YCHX,FIXFLU,GRND2);COVAL(REACHOMA,YO2,FIXFLU,GRND2)
COVAL(REACHOMA,YH2O,FIXFLU,GRND2);COVAL(REACHOMA,YCO,FIXFLU,GRND2)
COVAL(REACHOMA,H1,FIXFLU,GRND2)
PATCH(REACHOMB,PHASEM,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
COVAL(REACHOMB,YO2,FIXFLU,GRND2);COVAL(REACHOMB,YCO2,FIXFLU,GRND2)
COVAL(REACHOMB,YCO,FIXFLU,GRND2);COVAL(REACHOMB,H1,FIXFLU,GRND2)
* Reaccion H2 + 0.5O2 -> H2O
PATCH(REACHOME,PHASEM,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
COVAL(REACHOME,YO2,FIXFLU,GRND2);COVAL(REACHOME,YH2O,FIXFLU,GRND2)
COVAL(REACHOME,YH2,FIXFLU,GRND2);COVAL(REACHOME,H1,FIXFLU,GRND2)

REACCIONES HETEROGENEAS

** MODHET = selecciona la cinetica química
** IORDEN = selecciona orden de reaction
** IKDMEA = selecciona minimo entre difusión y cinetica
MODHET=1;IORDEN=1;IKDMEA=1
SPEDAT(SET,MODELO,IG14 ,I,IG14 )
SPEDAT(SET,MODELO,MODHET,I,MODHET)
SPEDAT(SET,MODELO,IORDEN,I,IORDEN)
SPEDAT(SET,MODELO,IKDMEA,I,IKDMEA)

```

```

Reaccion C(S) + O2 > CO2
PATCH (REACHET0, FREEVL, 1, NX, 1, NY, 1, NZ, 1, LSTEP)
COVAL (REACHET0, P1, FIXFLU, GRND5)
COVAL (REACHET0, P2, FIXFLU, GRND5)
COVAL (REACHET0, H1, ONLYMS, GRND1)
PATCH (REACHET2, FREEVL, 1, NX, 1, NY, 1, NZ, 1, LSTEP)
COVAL (REACHET2, H1, FIXFLU, GRND5)
COVAL (REACHET2, YO2, FIXFLU, GRND5)
COVAL (REACHET2, CHAR, FIXFLU, GRND5)
COVAL (REACHET2, YCO, GRND9, 1.0)
PATCH (REACHET5, FREEVL, 1, NX, 1, NY, 1, NZ, 1, LSTEP)
COVAL (REACHET5, COAL, GRND9, GRND9); COVAL (REACHET5, CHAR, GRND9, GRND9)
COVAL (REACHET5, HUME, GRND9, GRND9)
STORE (HET1); FIINIT (HET1)=0.0
RELAX (HET1, LINRLX, 0.6)

```

```

Reaccion C + CO2 -> 2CO
PATCH (REACGAS0, FREEVL, 1, NX, 1, NY, 1, NZ, 1, LSTEP)
COVAL (REACGAS0, P1, FIXFLU, GRND5)
COVAL (REACGAS0, P2, FIXFLU, GRND5)
PATCH (REACGAS2, FREEVL, 1, NX, 1, NY, 1, NZ, 1, LSTEP)
COVAL (REACGAS2, H1, FIXFLU, GRND5)
COVAL (REACGAS2, YCO2, FIXFLU, GRND5)
COVAL (REACGAS2, CHAR, FIXFLU, GRND5)
COVAL (REACGAS2, YCO, GRND9, 1.0)

PATCH (REACGAS5, FREEVL, 1, NX, 1, NY, 1, NZ, 1, LSTEP)
COVAL (REACGAS5, COAL, GRND9, GRND9); COVAL (REACGAS5, CHAR, GRND9, GRND9)
COVAL (REACGAS5, HUME, GRND9, GRND9)
STORE (HET2); FIINIT (HET2)=0.0
RELAX (HET2, LINRLX, 0.6)

```

```

** Reaccion heterogenea
C + H2O -> H2 + CO
PATCH (REACHID0, FREEVL, 1, NX, 1, NY, 1, NZ, 1, LSTEP)
COVAL (REACHID0, P1, FIXFLU, GRND5)
COVAL (REACHID0, P2, FIXFLU, GRND5)
PATCH (REACHID2, FREEVL, 1, NX, 1, NY, 1, NZ, 1, LSTEP)
COVAL (REACHID2, H1, FIXFLU, GRND5)
COVAL (REACHID2, YH2O, FIXFLU, GRND5)
COVAL (REACHID2, CHAR, FIXFLU, GRND5)
COVAL (REACHID2, YCO, GRND9, 1.0)
COVAL (REACHID2, YH2, GRND9, 1.0)
PATCH (REACHID5, FREEVL, 1, NX, 1, NY, 1, NZ, 1, LSTEP)
COVAL (REACHID5, COAL, GRND9, GRND9); COVAL (REACHID5, CHAR, GRND9, GRND9)
COVAL (REACHID5, HUME, GRND9, GRND9)
STORE (HET3); FIINIT (HET3)=0.0
RELAX (HET3, LINRLX, 0.6)

```

```

** Boquillas en GASIFICADOR
PRIMER NIVEL
PATCH (BOQ1A, west, 1, 1, 4, 4, 1, 1, 1, 1)
*Aire*
COVAL (BOQ1A, P1, FIXFLU, FGIN1)
COVAL (BOQ1A, U1, ONLYMS, VEL1)
COVAL (BOQ1A, H1, ONLYMS, HCALC1); COVAL (BOQ1A, KE, ONLYMS, TKEIN1)
COVAL (BOQ1A, EP, ONLYMS, EPIN1)
*Carbon*
COVAL (BOQ1A, P2, FIXFLU, FCA1)
COVAL (BOQ1A, U2, ONLYMS, VEL1)
COVAL (BOQ1A, H2, ONLYMS, CP2*TCALC1)
COVAL (BOQ1A, PHIS, ONLYMS, 1.)
COVAL (BOQ1A, HUME, ONLYMS, YAGUA)
COVAL (BOQ1A, CHAR, ONLYMS, 0.000)
COVAL (BOQ1A, COAL, ONLYMS, 1-YCENI-YAGUA)
COVAL (BOQ1A, YO2, ONLYMS, 2.320E-01)
COVAL (BOQ1A, YH2O, ONLYMS, 0.0)
COVAL (BOQ1A, YH2, ONLYMS, 0.0)
COVAL (BOQ1A, YCO, ONLYMS, 0.0)
COVAL (BOQ1A, YCO2, ONLYMS, 0.0)

```

COVAL (BOQ1A, YCHX, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (BOQ1A, RADY, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (BOQ1A, RADX, ONLYMS, 0.0)

PATCH (BOQ1B, east, nx, nx, 4, 4, 1, 1, 1, 1)

Aire

COVAL (BOQ1B, P1, FIXFLU, FGIN1)
 COVAL (BOQ1B, U1, ONLYMS, -VEL1)
 COVAL (BOQ1B, H1, ONLYMS, HCALC1); COVAL (BOQ1B, KE, ONLYMS, TKEIN1)
 COVAL (BOQ1B, EP, ONLYMS, EPIN1)

Carbon

COVAL (BOQ1B, P2, FIXFLU, FCA1)
 COVAL (BOQ1B, U2, ONLYMS, -VEL1)
 COVAL (BOQ1B, H2, ONLYMS, CP2*TCALC1)
 COVAL (BOQ1B, PHIS, ONLYMS, 1.)
 COVAL (BOQ1B, HUME, ONLYMS, YAGUA)
 COVAL (BOQ1B, CHAR, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (BOQ1B, COAL, ONLYMS, 1-YCENI-YAGUA)
 COVAL (BOQ1A, YO2, ONLYMS, 2.320E-01)
 COVAL (BOQ1A, YH2O, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (BOQ1A, YH2, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (BOQ1A, YCO, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (BOQ1A, YCO2, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (BOQ1A, YCHX, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (BOQ1A, RADY, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (BOQ1A, RADX, ONLYMS, 0.0)

SEGUNDO NIVEL

PATCH (BOQ2A, west, 1, 1, 7, 7, 1, 1, 1, 1)

Aire

COVAL (BOQ2A, P1, FIXFLU, FGIN2)
 COVAL (BOQ2A, U1, ONLYMS, VEL2)
 COVAL (BOQ2A, H1, ONLYMS, HCALC2); COVAL (BOQ2A, KE, ONLYMS, TKEIN2)
 COVAL (BOQ2A, EP, ONLYMS, EPIN2)

Carbon

COVAL (BOQ2A, P2, FIXFLU, FCA2)
 COVAL (BOQ2A, U2, ONLYMS, VEL2)
 COVAL (BOQ2A, H2, ONLYMS, CP2*TCALC2)
 COVAL (BOQ2A, PHIS, ONLYMS, 1.)
 COVAL (BOQ2A, HUME, ONLYMS, YAGUA)
 COVAL (BOQ2A, CHAR, ONLYMS, 0.00)
 COVAL (BOQ2A, COAL, ONLYMS, 1-YCENI-YAGUA)
 COVAL (BOQ1A, YO2, ONLYMS, 2.320E-01)
 COVAL (BOQ1A, YH2O, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (BOQ1A, YH2, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (BOQ1A, YCO, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (BOQ1A, YCO2, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (BOQ1A, YCHX, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (BOQ1A, RADY, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (BOQ1A, RADX, ONLYMS, 0.0)

PATCH (BOQ2B, east, nx, nx, 7, 7, 1, 1, 1, 1)

Aire

COVAL (BOQ2B, P1, FIXFLU, FGIN2)
 COVAL (BOQ2B, U1, ONLYMS, -VEL2)
 COVAL (BOQ2B, H1, ONLYMS, HCALC2); COVAL (BOQ2B, KE, ONLYMS, TKEIN2)
 COVAL (BOQ2B, EP, ONLYMS, EPIN2)

Carbon

COVAL (BOQ2B, P2, FIXFLU, FCA2)
 COVAL (BOQ2B, U2, ONLYMS, -VEL2)
 COVAL (BOQ2B, H2, ONLYMS, CP2*TCALC2)
 COVAL (BOQ2B, PHIS, ONLYMS, 1.)
 COVAL (BOQ2B, HUME, ONLYMS, YAGUA)
 COVAL (BOQ2B, CHAR, ONLYMS, 0.00)
 COVAL (BOQ2B, COAL, ONLYMS, 1-YCENI-YAGUA)
 COVAL (BOQ1A, YO2, ONLYMS, 2.320E-01)
 COVAL (BOQ1A, YH2O, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (BOQ1A, YH2, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (BOQ1A, YCO, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (BOQ1A, YCO2, ONLYMS, 0.0)

COVAL (BOQ1A, YCHX, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (BOQ1A, RADY, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (BOQ1A, RADX, ONLYMS, 0.0)

TERCER NIVEL

** Boquillas en REACHOMor

PATCH (BOQ3A, west, 3, 3, 25, 25, 1, 1, 1, 1)

Aire

COVAL (BOQ3A, P1, FIXFLU, FGIN3)
 COVAL (BOQ3A, U1, ONLYMS, VEL3)
 COVAL (BOQ3A, H1, ONLYMS, HCALC3); COVAL (BOQ3A, KE, ONLYMS, TKEIN3)
 COVAL (BOQ3A, EP, ONLYMS, EPIN3)

Carbon

COVAL (BOQ3A, P2, FIXFLU, FCA3)
 COVAL (BOQ3A, U2, ONLYMS, VEL3)
 COVAL (BOQ3A, H2, ONLYMS, CP2*TCALC3)
 COVAL (BOQ3A, PHIS, ONLYMS, 1.)
 COVAL (BOQ3A, HUME, ONLYMS, YAGUA)
 COVAL (BOQ3A, CHAR, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (BOQ3A, COAL, ONLYMS, 1-YCENI-YAGUA)
 COVAL (BOQ1A, YO2, ONLYMS, 2.320E-01)
 COVAL (BOQ1A, YH2O, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (BOQ1A, YH2, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (BOQ1A, YCO, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (BOQ1A, YCO2, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (BOQ1A, YCHX, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (BOQ1A, RADY, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (BOQ1A, RADX, ONLYMS, 0.0)

PATCH (BOQ3B, east, 10, 10, 25, 25, 1, 1, 1, 1)

Aire

COVAL (BOQ3B, P1, FIXFLU, FGIN3)
 COVAL (BOQ3B, U1, ONLYMS, -VEL3)
 COVAL (BOQ3B, H1, ONLYMS, HCALC3); COVAL (BOQ3B, KE, ONLYMS, TKEIN3)
 COVAL (BOQ3B, EP, ONLYMS, EPIN3)

Carbon

COVAL (BOQ3B, P2, FIXFLU, FCA3)
 COVAL (BOQ3B, U2, ONLYMS, -VEL3)
 COVAL (BOQ3B, H2, ONLYMS, CP2*TCALC3)
 COVAL (BOQ3B, PHIS, ONLYMS, 1.)
 COVAL (BOQ3B, HUME, ONLYMS, YAGUA)
 COVAL (BOQ3B, CHAR, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (BOQ3B, COAL, ONLYMS, 1-YCENI-YAGUA)
 COVAL (BOQ1A, YO2, ONLYMS, 2.320E-01)
 COVAL (BOQ1A, YH2O, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (BOQ1A, YH2, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (BOQ1A, YCO, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (BOQ1A, YCO2, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (BOQ1A, YCHX, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (BOQ1A, RADY, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (BOQ1A, RADX, ONLYMS, 0.0)

PATCH (OUT, NORTH, 1, NX, ny, NY, 1, 1, 1, 1)

COVAL (OUT, U1, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (OUT, U2, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (OUT, V1, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (OUT, V2, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (OUT, P1, 1.000E+02, ONLYMS)
 COVAL (OUT, P2, (RHO2/RHO1)*1.e+3, 0.0)
 COVAL (OUT, H1, ONLYMS, SAME)
 COVAL (OUT, H2, ONLYMS, SAME)
 COVAL (OUT, RADY, ONLYMS, SAME)
 COVAL (OUT, RADX, ONLYMS, SAME)

** RADIACION EN LAS PAREDES

PATCH (WALLR1, WEST, 1, 1, 5, 6, 1, 1, 1, 1)
 COVAL (WALLR1, RADX, ED2ME, RADW)

PATCH (WALLR2, EAST, NX, NX, 5, 6, 1, 1, 1, 1)
 COVAL (WALLR2, RADX, ED2ME, RADW)

PATCH (WALLR3, WEST, 1, 1, 8, 24, 1, 1, 1, 1)
 COVAL (WALLR3, RADX, ED2ME, RADW)

PATCH (WALLR4, EAST, NX, NX, 8, 24, 1, 1, 1, 1)
 COVAL (WALLR4, RADX, ED2ME, RADW)

PATCH (WALLR5, WEST, 1, 1, 30, NY, 1, 1, 1, 1)
 COVAL (WALLR5, RADX, ED2ME, RADW)

PATCH (WALLR6, EAST, NX, NX, 30, NY, 1, 1, 1, 1)
 COVAL (WALLR6, RADX, ED2ME, RADW)

Group 15. Terminate Sweeps
 LSWEEP = 5000
 RESFAC = 1.000000E-03

Group 16. Termination of iterations

Group 17. Under-relaxation devices

REAL (RELAJA)
 RELAJA=0.01
 RELAX (CFIP, LINRLX, 0.3); RELAX (RHO1, LINRLX, 0.3)
 RELAX (YCHX, LINRLX, RELAJA); RELAX (YO2, LINRLX, RELAJA)
 RELAX (YH2O, LINRLX, RELAJA); RELAX (YCO, LINRLX, RELAJA)
 RELAX (YH2, LINRLX, RELAJA)
 RELAX (YCO2, LINRLX, RELAJA); RELAX (COAL, LINRLX, RELAJA)
 RELAX (CHAR, LINRLX, RELAJA); RELAX (HUME, LINRLX, RELAJA)

Group 18. Limits on variables or increments to them

VARMIN (H1) = .000010; VARMIN (H2) = .00001
 VARMIN (R2) = 1.E-9
 VARMIN (PHIS) = 1.E-6; VARMAX (PHIS) = 1.0E+8
 VARMAX (SIZE) = SMDIAM; VARMIN (SIZE) = 1.E-10
 VARMAX (YCHX) = 1.0; VARMIN (YCHX) = 1.E-6
 VARMAX (YCO) = 1.0; VARMIN (YCO) = 1.E-6
 VARMAX (YO2) = 1.0; VARMIN (YO2) = 1.E-6
 VARMAX (YH2O) = 1.0; VARMIN (YH2O) = 1.E-6
 VARMAX (YH2) = 1.0; VARMIN (YH2) = 1.E-6
 VARMAX (YCO2) = 1.0; VARMIN (YCO2) = 1.E-6
 VARMAX (YN2) = 1.0; VARMIN (YN2) = 1.E-6
 VARMAX (CHAR) = 1.0; VARMIN (CHAR) = 1.E-6
 VARMAX (COAL) = 1.0; VARMIN (COAL) = 1.E-6
 VARMAX (HUME) = 1.0; VARMIN (HUME) = 1.E-8
 VARMAX (ASH2) = 1.0; VARMIN (ASH2) = 1.E-10
 VARMAX (TMP2) = 1.0E+4; VARMIN (TMP2) = 273.0
 VARMAX (TMP1) = 1.0E+4; VARMIN (TMP1) = 273.0
 VARMAX (U1) = 5.0+01; VARMIN (U1) = -5.0E+01
 VARMAX (U2) = 5.0E+01; VARMIN (U2) = -5.0E+01
 VARMAX (V1) = 5.0E+01; VARMIN (V1) = -5.0E+01
 VARMAX (V2) = 5.0E+01; VARMIN (V2) = -5.0E+01
 VARMAX (P1) = 1.0E+04; VARMIN (P1) = 1.Ee-4

** Relajaciones

RELAX (P1, LINRLX, 8.000E-01)
 RELAX (U1, FALSDT, 1.000E-02)
 RELAX (U2, FALSDT, 1.000E-02)
 RELAX (V1, FALSDT, 1.000E-02)
 RELAX (V2, FALSDT, 1.000E-02)
 RELAX (R1, LINRLX, 4.000E-01)
 RELAX (R2, LINRLX, 4.000E-01)
 RELAX (KE, FALSDT, 5.000E-03)
 RELAX (EP, FALSDT, 5.000E-03)
 RELAX (PHIS, LINRLX, 1.000E-01)
 RELAX (H1, LINRLX, 4.000E-01)
 RELAX (H2, LINRLX, 4.000E-01)
 RELAX (rho1, LINRLX, 2.000E-01)

Group 19. Data communicated by satellite to GROUND

```
      Group 20. Preliminary Printout
ECHO   =   T
*****
      Group 21. Print-out of Variables
OUTPUT(H1 ,N,N,Y,Y,N,N)
*****
      Group 22. Monitor Print-Out
IXMON  =   6 ;IYMON =   NY ;IZMON =   1
NPRMON = 100000
NPRMNT =   1
TSTSWP=50
*****
      Group 23. Field Print-Out & Plot Control
NPRINT = 100000
ISWPRF =   1 ;ISWPRL = 100000
      No PATCHes used for this Group
*****
      Group 24. Dumps For Restarts
NOWIPE =   T
STOP
```

Referencias y bibliografía

- Basu P. and Fraser S., (1991). *Circulating Fluidized Bed Boilers: Design and operations*. Butterworth Heinemann, a division of Reed Publishing (USA)
- Beenackers A.A.C.M., (1999). Biomass gasification in moving beds, a review of European technologies. *Renewable Energy* Vol. 16 pp. 1180-1186.
- Brewster B.S., Hill S.C., Radulovic T.P. and Smoot L.D., (1993). Comprehensive Modeling, in Smoot L.D. (Editor), *Fundamentals of Coal Combustion for Clean and Efficient Use*. Coal Science and technology 20. Elsevier.
- Carabotta R.A., H.F. Chambers and W.R. Owens. (1987). "Status of the DOE Open Cycle, Coal Fired , MHD Power Generation Program". *IEEE Transactions on Energy Conversion*, USA.
- Chen C., H. Masayuki, Kojima T., (2000). Numerical simulation of entrained flow coal gasifiers. Part I: modeling of coal gasification in an entrained flow gasifier. *Chemical Engineering Science*, Vol. 55 (2000) pp. 3861-3874. Pergamon. USA
- Cooper J. and W.L.H. Wallet. (2000). A numerical model for packed-bed combustion of char particles. *Chemical Engineering Science* Vol. 55 pp 4451-4460.
- De Graaf J.D. and Q. Chen, (2000). Gasification and Hydrogen Manufacturing. 2000 Gasification Technologies Conference. Shell Global Solutions International B.V., USA
- De Souza-Santos M.L., (1989). Comprehensive modelling and simulation of fluidized bed boilers and gasifiers. *Fuel*, Vol. 68 pp 1507-1521.
- Diario Oficial de la Federación, (1994). Norma Oficial Mexicana NOM-085-ECOL-1994. Publicada el 2 de diciembre de 1994, pp 1-14
- Dochery P. and M. Fairweather, (1992). Radiactive heat transfer in Combustion system, in W Kollman, Ed. *Modelling of Combustion and turbulence*. Lecture Series 1992-3. Von Karman Institute for Fluid Dynamics. Rhode Saint Genese Belgium.
- DOE, USA, (2000). Department of Energy of the United States of America. <http://www.doe.gov>. June, 2000
- DTI, (1998). Gasification of solid and liquid fuels for power generation. Technology status report TSR 008. Department of Trade and Industry, UK
- Ergun S., (1952). *Chem. Eng. Prog.*, 48, 89.
- Favre A., (1969). *Problems of hydrodynamics and continuum Mechanics*. SIAM.
- Ferziger H.H. and M. Peric, (1996). *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer-Verlag
- Figueiredo J.L. & J. A. Moulijn, (1986). *Carbon and coal gasification*. Martinus Nijhoff Publishers. Boston USA.

- Fletcher D.F., B.S. Haynes, F.C. Christo and S.D. Joseph, (2000). A CFD based combustion model of an entrained flow biomass gasifier. *Applied Mathematical Modeling*, Vol. 24 (2000) pp 165-182. Elsevier. USA
- Fueyo N. (1996). *Mecánica de fluidos computacional para Ingeniería*. Área de Mecánica de Fluidos, Centro Politécnico Superior, Universidad de Zaragoza.
- Fueyo N. And V. Gambon, (1997). An eulerian-eulerian model of coal combustion for the simulation of utility Boilers. *Phoenics Journal* Vol. 10 No. 2. U.K.
- Fueyo N., Ballester J. and C. Dopazo, (1996). The computation of particle size in eulerian-eulerian models of coal combustion. *International Journal of Multiphase Flow* Vol. 23, No. 3, pp. 607-612.
- Govind R. and J. Shah, (1984). Modeling and simulation of and entrained flow coal gasifier. *AIChE Journal* Vol.30 No. 1 pp 79-92.
- Hargrave G., M. Pourkashanian and A. Williams, (1986). The combustion and gasification of coke and coal chars. 21th Symposium (International) on Combustion. The Combustion Institute, pp 221-230.
- Hobbs M.L., P.T. Radulovic and L.D. Smoot, (1992). Modeling fixed bed coal Gasifiers. *AIChE Journal*, Vol. 38 No. 5, pp. 681-700.
- Hobbs M.L., P.T. Radulovic and L.D. Smoot, (1993). Combustion and gasification of coals in fixed bed. *Progress in Energy Combustion Science*, Vol. 19 pp. 505-586.
- Jiménez C., (1998). Modelización de flujos reactivos: el método de la función de densidad de probabilidad en simulaciones de grandes escalas. Tesis de doctorado, Universidad de Zaragoza, España.
- Jones W.P. and B.E. Launder, (1972). The prediction of laminarisation with a two-equation model of turbulence. *International Journal of Heat and Mass Transfer* Vol. 15 pp. 301-314.
- Jones W.P. and R.P. Lindstedt, (1988). Global reaction Schemes for hydrocarbon combustion. *Combustion and Flame*, Vol. 73, pp. 233-249.
- Jones W.P., (1979). Models for turbulent flows with variable density and combustion. In Kollmann W., Editor, *Predictions methods for turbulent flows: Lecture series 1979-2*. Von Karman Institute for Fluids Dynamics. Rhode Saint Genese Belgium.
- Jones W.P., (1994). Turbulence modeling and numerical solutions methods for variable density and combustion flows, pp. 306-374. Academic Press.
- Lee J.M., Y.J. Kim, W.J. Lee and S.D. Kim, (1998). Coal-gasification kinetics derived from pirólisis in a fluidized-bed reactor. *Energy*, Vol. 23 No. 6, pp. 475-488. Elsevier Science Ltd.
- Ludwing J.C., H.Q. Qin, and D.B. Spalding, (1989). The PHOENICS reference manual. Technical report CHAM TR/200. CHAM Ltd., London
- Mann A.P. and J.H. Kent, (1994). A computacional study of heterogeneous reactions in a full-scale furnace. *Combustion and Flame* Vol. 99 pp. 147-156.

- Martínez E., (2000). Estudio de tecnologías potencialmente utilizables para la combustión de coque de la refinería de Cadereyta. Tesis de maestría, Facultad de Ingeniería, UNAM
- Moin P. and K. Mahesh, (1998). Direct Numerical Simulation: a tool in turbulence research. Annual Review in Fluids Mechanics, Vol. 30 pp. 539-578.
- Nowacki P., (1981). Coal Gasification Processes, Energy Technology Review No. 70, Noyes Data Corporation, USA
- OLADE, (1997). Manual de gasificación, Organización Latinoamericana de Energía (UNESCO)
- Olness D. and D.W. Gregg, (1977). "The historical development of underground coal gasification". U.S. Energy Research and Development Administration Report, University of California, USA
- Ong'iro A.O., V.I. Ugursal, A. and M. Al Tawel, (1995). Simulation of combined cycle power plants using The Aspen Plus Shell. Heat Recovery System & CHP Vol. 15 No. 2, pp 105-113. Elsevier Science Ltd.
- Ortiz J.A y J.R. Hidalgo, (1994). Evaluación tecnológica para el tratamiento de crudos pesados y su integración con los procesos de gasificación. Programa Universitario de Energía, UNAM, México.
- Parekh R.D. (1982). Handbook of gasifiers and gas treatment systems. U.S. Department of Energy Report, USA.
- Patankar S.V. and Spalding D.B., (1972). A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three dimensional parabolic flows. International Journal in Heat and Mass Transfer Vol. 15 pp 1787-1806.
- Patankar S.V., (1980). Numerical heat transfer and fluid flow. Series in computational methods in mechanics and thermal science. Hemisphere Publishing Corporation.
- PEMEX, (1997). "Alternativas para la utilización de coque". Ponencia presentada en VI Taller de Planeación tecnológica. PEMEX Refinación, México.
- Perry R.H., (1984). Chemical Engineer's Handbook. McGraw-Hill. Inc. USA.
- Radulovic T.P. and L.D. Smoot, (1993). Coal Processes and technologies, in Smoot L.D. (Editor), Fundamentals of Coal Combustion for Clean and Efficient Use. Coal Science and technology 20. Elsevier.
- Rivero, R., (1997). Opciones tecnológicas para el coque producido por una unidad de coquización de residuo de vacío. Boletín Monitec, Vol. 4, No. 5 (agosto, 1997), pp. 6-7, México
- Rizk M.A. and Elgobashi S.E., (1989). A two equation model for disperse dilute confined two-phase flows. International Journal of Multiphase flows Vol. 15 No. 1, pp. 119-133.
- Rodarte A., (1998). "Tecnología de gasificación: ¿hay posibilidades de aplicación en México?". Ponencia presentada en Power Mex' 98. Texaco Gas y Fuerza Internacional. México.

Rodi, (1984). Turbulence Models and their application in hydraulics. International Association for Hydraulics Research, ISBN 902127002-1. Delf, Holland.

Ryback W. and M. Zembruski, (1986). Kinetics of combustion of petroleum coke and sub-bituminous coal char: results of ignition and steady state techniques. 21th Symposium (International) on Combustion. The Combustion Institute, pp. 231-237.

Sanchez H. and M.A Chouciño, (1995). A pulverized coal combustion global model with NOx formation. PHOENICS Journal, Vol. 8 No. 3 pp 311-337.

Sennoun M.H., A. Charette and V. Potocnick, (1998). New turbulent combustion models in PHOENICS. The PHENICS Journal Vol. 11 No. 1 pp 25-50.

Simbeck D.R., R.L. Dickenson and E.D. Oliver, (1983). "Coal gasification systems: A guide to status, applications and economics". Final Report, Electric Power Research Institute and Synthetic Fuels Associates. CA, USA

Smith L.D., Smith P.J., Brewster B.S. and Baxter L.L. Eds., (1988) Revised User's Manual, Pulverized Coal Gasification or Combustion --2-Dimensional (87-PCGC-2), Brigham Young University, Provo, UT.

Smith P.J., (1983). The combustion rates of coal: a review. 19th Symposium (International) on Combustion. The Combustion Institute, pp 1045-1065.

Smith P.J., Fletcher T.H. and Smoot L.D., (1981). "Model for Pulverized Coal-Fired Reactors" 18th Symposium (International) on Combustion. The Combustion Institute, pp. 1285-1293.

Smoot L.D. and P.J. Smith, (1985). Coal combustion and gasification. Plenum Press, USA

Spalding D.B., (1972). A novel finite-difference Formulation for differential expressions involving both first and second derivatives. Int. Journal of Num. Methods Engineering, 4:551.

Spalding D.B., (1976). Mathematical models of turbulent flames: a review. Combustion Science and technology, Vol. 13, pp. 13-25.

Spalding D.B., (1981). "IPSA 1981: New developments and computed results". Imperial College CFDU Report HTS/81/2, UK

Spalding D.B., (1982). The "shadow" method of particle-size calculation in two-phase combustion. 19th Symposium (International) on Combustion. The Combustion Institute, pp. 941-951.

TEPCO, (2001). Coal Technology Group, Japan. <http://www.tepco.co.jp/rd/energy/ecoal/ecoal-e.html>

Texaco Power & Gasification (2001). <http://www.texaco.com/>

Versteeg H.K. and Malalasekera W., (1995). An introduction to Computational Fluid Dynamics, The Finite Volume Method. Longman Scientific & Technical.

Vicente W. (2000). Simulación numérica de la combustión y formación de contaminantes en llamas turbulentas premezcladas pobres. Tesis doctoral. Universidad de Zaragoza, Centro Politécnico Superior. Departamento de Ciencia y Tecnología de Materiales y Fluidos. España.