



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

Universidad Nacional Autónoma de México

**PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO
EN INGENIERÍA
FACULTAD DE INGENIERÍA**

**Estudio de la producción de gas de síntesis en un
gasificador que opera con residuos sólidos.**

T E S I S

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:

MAESTRO EN INGENIERÍA

ENERGÍA – PROCESOS Y USO EFICIENTE DE LA ENERGÍA

P R E S E N T A:

Daniel de la Rosa Urbalejo

TUTOR:

Dr. Javier Eduardo Aguillón Martínez



México D.F. 2010

Jurado Asignado:

Presidente: Dr. José Luis Fernández Zayas.

Secretario: Dr. Javier Eduardo Aguillón Martínez.

Vocal: Dr. Francisco Javier Solorio Ordaz.

1er. Suplente: Dr. William Vicente y Rodríguez.

2do. Suplente: Ing. Augusto Sánchez Cifuentes.

Lugar o lugares donde se realizó la tesis:

Instituto de Ingeniería de la UNAM

TUTOR DE TESIS:

Dr. Javier Eduardo Aguillón Martínez

FIRMA

Agradecimientos

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) por el apoyo recibido con el programa de becas, la cual fue otorgada durante la estancia en la maestría. Porque el consejo asume además el compromiso con el país para que cuente con gente preparada para el futuro de México.

A mi queridísima mamá, que en paz descance. Porque siempre creíste en mí y me brindaste todo tu amor y apoyo no importando la situación o el momento, nunca dudaste en entregarte y darme lo mejor de ti. Te amo y siempre estás presente en mi corazón.

A mi papá y a mi hermano, con quienes he vivido viajes, conciertos, fiestas, vacaciones, momentos inolvidables y quienes me han apoyado en todo momento a lo largo de nuestra vida juntos. En los momentos difíciles siempre hemos salido adelante y nos hemos mantenido unidos. Este trabajo también es suyo, yo solo no habría podido lograrlo, gracias.

A mi director de tesis Dr. Javier E. Aguillón Martínez quien me brindó la oportunidad de trabajar bajo su tutoría, así como de su amistad y conocimientos.

Al Dr. José Luis Fernández Zayas a quien agradezco todo el apoyo recibido a lo largo del tiempo que tenemos de conocernos, lo cual aprecio con gran cariño.

Al Dr. William Vicente y Rodríguez por compartir sus conocimientos de CFD sin los cuales esta tesis no habría alcanzado su objetivo, además de ser una gran persona.

A los lectores de esta tesis, Dr. José Luis Fernández Zayas, Dr. Javier E. Aguillón Martínez, Dr. Francisco Solorio Ordaz, Dr. William Vicente y Rodríguez y al Ing. Augusto Sánchez Cifuentes), por su crítica y comentarios que enriquecieron este trabajo.

A toda mi familia con la cual tengo recuerdos inolvidables, a mis tías (Laura, Tita, Silvia, Martha), a mis tíos (Sergio, Hugo, Nacho, Luciano, Gustavo), a todos mis primos (Octavio, Israel, Moni, Enrique, Paulina, Beto, Carolina, Itzel, Christian), a mis abuelos que en paz descansen (Tacho, Chayo, Ina, Jesús); en fin, son tantos que no quiero omitir a alguien.

A Karlita y a su familia. Porque en gran medida me impulsaste a creer en mí, a no conformarme y a nunca dudar ni a temer al éxito, gracias por tu amor que lo cambió absolutamente todo.

A mis amigos de toda la vida y a sus familias, con los cuales he crecido y he compartido tantos momentos tan gratos, César, Víctor y Pancho.

A todos mis amigos y amigas que he conocido en distintos momentos de la vida, Moni, Alan, Sarah, mi tocayo Daniel, Isma, Chivis, Iker, Alex, Evelyn, Toño, Alita, Pao, Chris, Jerry, Gloria, Agus, Gris, Marthita, Jaz, Fausto, Andrei, Marcelo, Marquito, Ily, Jorge, Eric, Omar, Gustavo, Daniel, Rodrigo, Pablo, Max, Sabino, Luis, Regina, Andrés, Iris, cada uno de ustedes me han enseñado algo, les agradezco mucho por compartirlo.

Adiós mamá

*Lo vivo, lo pienso, lo sufro y lo veo,
Y a mi mente le repito, "no lo creo",
Como si no soplara el viento,
Ni se escuchara y pasara muy lento,*

*El vacío me conoce, y yo a él,
Mi nuevo amigo, entrando bajo el dintel,
Me muestra su inmensidad,
¡Qué honda es su profundidad!*

*Muy pronto se acabó la inocencia,
Fue muy poca, sin antes llegar a la adolescencia,
Te quisiera aquí,
Junto a mí,*

*Entender que no se puede remediar,
Es tan duro y es más si con ello se debe lidiar,
Veo tu retrato,
Así te quiero recordar, todo intacto,*

*Veo mis manos, manos que tocan,
Que sienten y acarician,
Les falta tu piel,
Tu cabello color maple miel,*

*Ahora yo me quedo, ya no podré volverte a ver,
Dondequiera que te encuentres ya no debes temer,
Todo debe estar lo bastante bien,
Como para que no puedas regresar,
No te preocupes así lo quiero yo también,*

*El dolor que poco a poco se va a marchar,
Me ayuda a sanar,
Me consuela haberte conocido,
Compartir contigo hasta lo desconocido,*

*Me materializaste,
Y eso es el mejor regalo que me dejaste,
Nunca te olvidaré,
Y menos tu inmenso amor que por siempre guardaré,*

*Soy yo gracias a ti,
Te prometo hacer lo mejor que esté en mí,
¡Qué divertido fue tenerte!,
Te extraño y te amo, ¡Vive por siempre, venciste a la
muerte!*

Índice

	Página
Resumen	7
Objetivo e Hipótesis	8
Introducción: Transición energética	9
I.I. Importancia del cambio climático y la seguridad energética	9
I.II. Concepto de transición energética	10
I.III. Experiencia internacional	10
I.IV. Situación actual del sector energético mexicano	11
I.V. Estructura de la demanda en México	12
I.VI. Pronóstico para la situación energética en México	13
I.VII. La gasificación como una alternativa	16
Capítulo I: Biomasa, gasificación y método de volúmenes finitos	17
1.1. Biomasa	17
1.2. Tipos de biomasa	17
1.3. Transformación de biomasa	17
1.4. Transformación de biomasa residual húmeda	18
1.5. Conversión termoquímica	18
1.6. Pirolisis y producción de carbón vegetal	19
1.7. Gasificación	20
1.8. Gasificadores (algunos tipos y características)	20
1.9. Proceso general del gasificador de corriente descendente (downdraft)	21
1.10. Método de volúmenes finitos	22
Capítulo II: Planta piloto de gasificación de biomasa del II de la UNAM y análisis de residuos	28
2.1. Objeto, ubicación y algunas características	28
2.2. Especificaciones para la alimentación del proceso	28
2.3. Descripción del proceso	28
2.4. Gasificador de biomasa	30
2.5. Análisis de lodos de aguas residuales, excretas y carbón	31
2.5.1. Características generales	31
2.5.2. Características físicas	32
2.5.3. Análisis aproximado (% en peso)	33
2.5.4. Análisis último (% en peso)	33
2.5.5. Principales contaminantes y sustancias peligrosas que pudieran estar presentes en lodos de aguas residuales y excretas.	34
Capítulo III: Modelo numérico	37
3.1. Modelo	37
3.2. Ecuaciones de las fracciones volumétricas	37
3.3. Ecuaciones de fase variable	37
3.4. Componentes de la partícula de biomasa	38
3.5. Secado de la partícula	39
3.6. Volatilización	39

3.7. Reacción heterogénea	40
3.8. Tamaño de la partícula	40
3.9. Componentes del gas	41
3.10. Transferencia de calor entre la fase sólida y la fase gaseosa	42
3.11. Fuerza de arrastre entre la partícula y el gas	43
3.12. Modelo turbulento	43
3.13. Dispersión turbulenta de las partículas	44
3.14. El uso de otras ecuaciones	44
Capítulo IV: Resultados	46
4.1. Mezcla estándar	46
4.2. H ₂ , excretas y lodos [%]	51
4.3. N ₂ , excretas y lodos [%]	52
4.4. CH ₄ , excretas y lodos [%]	53
4.5. CO, excretas y lodos [%]	54
4.6. CO ₂ , excretas y lodos [%]	55
4.7. Mezcla estándar VS Combustibles	56
4.8. Tamaño de partícula, excretas y lodos	57
4.9. Temperatura del gas, excretas y lodos	57
4.10. Velocidad del gas, excretas y lodos	58
4.11. Análisis de sensibilidad	58
Conclusiones y recomendaciones	69
5. Conclusiones y recomendaciones	69
Apéndice A: Modelos de turbulencia	71
6.1. Introducción	71
6.2. Cierres de segundo orden	71
6.3. Modelos de viscosidad turbulenta	74
6.4. Modelo $k - \epsilon$	75
Apéndice B: Esquemas de discretización	77
7.1. Introducción	77
7.2. Esquemas lineales	77
7.3. Diferencias desplazadas de primer orden	77
7.4. Diferencias centradas	78
7.5. Híbrido	78
Bibliografía	80

Introducción

Resumen

Se hace una exposición de lo que es la transición energética y se exponen sus características; siguiendo con una breve descripción y pronóstico de la situación del sector eléctrico mexicano. A continuación se analiza el proceso de gasificación así como su propuesta como una alternativa para el tratamiento de residuos, específicamente lodos de aguas residuales y excretas para su transformación en energía eléctrica en la planta piloto de gasificación del Instituto de Ingeniería de la UNAM.

Un método CFD (Phoenics) es usado para modelar numéricamente las principales reacciones químicas y así obtener las características del gas de síntesis producido a partir de la gasificación de los residuos anteriormente mencionados; continuando con la comparación de estos resultados con una mezcla estándar obtenida mediante cromatografía, para finalmente concluir si es conveniente el uso de estos dos combustibles en la planta piloto de gasificación.

Introducción

Objetivo:

Demostrar que mediante la simulación numérica de la gasificación de lodos de aguas residuales y excretas, es posible obtener una composición aceptable de gas de síntesis; comparable además con una mezcla estándar cuya composición es la ideal para el funcionamiento de motores de combustión interna; siendo lo anterior, una contribución a la estrategia para enfrentar la transición energética.

Hipótesis:

Es posible usar lodos de aguas residuales provenientes de plantas de tratamiento y excretas de ganado en el gasificador de biomasa del Instituto de Ingeniería de la UNAM, dejando fuera del alcance de esta tesis la inclusión del estudio de alquitranes, sustancias peligrosas y contaminantes que pudieran contener estos residuos.

Introducción:

Transición energética

I.I. Importancia del cambio climático y la seguridad energética

Las implicaciones económicas y sociales que la energía tiene en el desarrollo de un país, la convierten en un factor primordial a considerar por los gobiernos. Por ello, es importante salvaguardar la seguridad energética en todos los países del mundo.

A lo largo de la historia, los combustibles fósiles han sido la principal fuente primaria de energía. Si esta tendencia se mantiene, estimaciones de la OCDE proyectan que para el año 2050 la demanda total de combustibles fósiles aumentará de 80% en 2005 a aproximadamente 84%¹.

Dado que los combustibles fósiles seguirán siendo los principales insumos dentro de la oferta, los países deben estar conscientes que se necesita asegurar, tanto el suministro de estas fuentes, como instrumentar medidas para disminuir las emisiones de CO₂².

Se calcula que la demanda mundial de energía crecerá en un 44% en los próximos 25 años, lo que impactará significativamente el crecimiento de las emisiones de gases de efecto invernadero asociados al cambio climático³.

Los factores determinantes de los patrones de emisiones de estos gases por generación y uso de energía son principalmente el crecimiento de la población, el crecimiento económico, la intensidad energética y las mezclas de combustibles fósiles que se utilizan.

Si se sigue con esta tendencia, se estima que en los próximos 30 años, el mundo emitirá casi tres cuartas partes de lo que ha emitido durante los últimos 250 años, por lo que el reto consiste en desacoplar el incremento de las emisiones de gases de efecto invernadero del crecimiento económico⁴.

En otras palabras, los efectos negativos que este tipo de combustible ha ocasionado en el medio ambiente, han hecho que diversos países, así como los organismos internacionales, no sólo analicen las medidas para atender la producción y la demanda por las fuentes primarias como se había hecho en el pasado, sino que se preocupen por incorporar el eje de la sustentabilidad en sus políticas energéticas.

De tal forma, como un problema global, es deber de todos los países realizar un esfuerzo conjunto para asegurar el bienestar de la sociedad, para atender las necesidades energéticas de la humanidad, conservando simultáneamente la riqueza de los ecosistemas.

¹ "Energy Technology Perspective 2008"; Agencia Internacional de Energía; IEA. Pág. 113.

² Idem. Pág. 113.

³ "Energy Information Administration"; International Energy Outlook 2009; E.U.A.; Mayo de 2009.

⁴ "Taller de Cambio Climático para los Estados Fronterizos"; Julia Martínez; Instituto Nacional de Ecología; Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales; Monterrey, Abril de 2009.

I.II. Concepto de transición energética

La transición energética consiste en un cambio de enfoque en el sector energético, un proceso a través del cual se genere un mejor aprovechamiento de los combustibles fósiles y se desarrolle y fomente el uso de energías renovables. Se busca así diversificar las fuentes primarias de energía y aminorar el impacto al medio ambiente al disminuir las emisiones de gases de efecto invernadero originadas por el uso de combustibles fósiles, los cuales representan actualmente la principal fuente de energía a nivel internacional⁵.

De esta manera, la transición energética se enfoca en:

- Diversificar las fuentes primarias de energía.
- Fortalecer a los organismos públicos del sector energético en lo referente a prácticas operativas y estándares tanto de calidad como de confiabilidad en los servicios que ofrecen.
- Promover el uso eficiente de la energía.
- Fomentar el aprovechamiento de fuentes renovables de energía y biocombustibles técnica, económica, ambiental y socialmente viables.
- Mitigar el incremento en las emisiones de gases efecto invernadero (GEI).

I.III. Experiencia internacional

Globalmente, la capacidad de generación eléctrica a través de la energía hidráulica es de 170,000 MW; la mayor parte de esta capacidad está instalada en países asiáticos, como China, India y Vietnam⁶.

Parques eólicos como los que se han desarrollado en Alemania, India, China, Estados Unidos y España han contribuido a la generación de energía eléctrica tanto en el sector público como en el privado. La capacidad de generación en este rubro es de aproximadamente 121,000 MW⁷.

La evolución de la energía solar también ha tenido un impacto importante en la generación de energía. Mundialmente, la capacidad de generación a través de celdas fotovoltaicas es de alrededor 6,000 MW, instalada principalmente en Alemania, Japón y Estados Unidos de América⁸.

La biomasa a nivel mundial ocupa el cuarto lugar como fuente de energía, proveyendo aproximadamente el 14% de las necesidades energéticas del mundo. La biomasa es la fuente energética más importante en las naciones en vías de desarrollo, proveyendo 35% de su energía⁹.

⁵ "Estrategia Nacional para la transición energética y el aprovechamiento sustentable de la energía"; SENER; México 2009; Pág. 5.

⁶ "Renewable Energy Outlook 2008"; Agencia Internacional de energía; Disponible en: <http://www.iea.org/textbase/nppdf/free/2008/weo2008.pdf>; Pág. 165.

⁷ "World Wind Report"; World Wind Energy Association; Disponible en: http://www.wwindea.org/home/images/stories/worldwindenergyreport2008_s.pdf; Pág. 4.

⁸ "Renewable Energy Outlook 2008"; Agencia Internacional de energía; Disponible en: <http://www.iea.org/textbase/nppdf/free/2008/weo2008.pdf>; Pág. 158.

⁹ "Combustion characteristics of different biomass fuels"; Ayhan Demirbas; Department of Chemical Engineering, Selcuk University, Konya, Turkey; Progress in Energy and Combustion Science; 2003; Pág. 1-2

Introducción

Una muy importante estrategia para enfrentar la transición energética es el ahorro y uso eficiente de la energía, para lo que se desarrollan diversos programas y tecnologías avanzadas en iluminación, control de motores eléctricos y sistemas electrónicos automáticos. Adicionalmente, también se encuentran vehículos de nueva generación que son más limpios y eficientes; el desarrollo de edificios “verdes” que utilizan energías renovables y aparatos más eficientes energéticamente.

Asimismo, muchos países se han planteado el objetivo de que gradualmente las construcciones tanto residenciales como oficiales tengan tecnologías eficientes energéticamente. En este sentido, se pueden mencionar desde el uso de paneles solares y techos térmicos, hasta sensores y controladores inteligentes, e impermeabilizantes.

Además de las acciones que cada país realiza en lo particular, los países se han planteado objetivos comunes que beneficien a las generaciones actuales y futuras en el mundo. Por ello, es necesario fijar las bases, criterios, herramientas, mecanismos e instrumentos de regulación y de financiamiento tanto de la eficiencia energética como de las energías renovables que permitan establecer un punto de partida común para todos.

A la fecha, el acuerdo internacional más importante en materia ambiental es el Protocolo de Kyoto realizado en 1997. En él, diversos países desarrollados se comprometieron a reducir en un 5% las emisiones de gases de efecto invernadero globales sobre los niveles de 1990 para el periodo 2008-2012.

Este instrumento se encuentra dentro del contexto de la Convención Marco de las Naciones Unidas sobre el Cambio Climático (CMNUCC), suscrita en 1992 durante la cumbre de la Tierra de Río de Janeiro.

En este protocolo se estableció el Mecanismo para un Desarrollo Limpio (MDL), el cual permite a los gobiernos de los países industrializados, y a las empresas, suscribir acuerdos para cumplir con metas de disminución de gases de efecto invernadero al intervenir en proyectos de reducción de emisiones en países en vías de desarrollo. Esto como una alternativa para adquirir certificados de reducción de emisiones a menores costos que en sus mercados, los cuales son mejor conocidos como bonos de carbono. Se trata de esta manera de convertir la emergencia ante el cambio climático en una acción económicamente factible.

I.IV. Situación actual del sector energético mexicano

El petróleo y sus derivados no sólo han permitido impulsar la industria, sino que, con los recursos obtenidos a través de su explotación, ha sido posible financiar una parte importante del desarrollo económico y social de nuestro país. Sin embargo, una alta dependencia hacia los hidrocarburos, aunada a la volatilidad en el precio de éstos, puede poner en riesgo la seguridad energética, por lo que es importante avanzar hacia una mayor diversificación en el consumo de los mismos.

Introducción

La seguridad energética es un objetivo central para México y la transición energética se perfila como una vía para lograrlo. Por ello el gobierno mexicano debe trabajar en dos vertientes principales que permitirán contribuir a la seguridad energética y a la transición¹⁰:

- La diversificación de las fuentes primarias de energía; y,
- La eficiencia en el uso de los energéticos.

Por medio de la utilización de fuentes renovables de energía se puede reducir parcialmente la presión sobre los recursos naturales, causada particularmente por los combustibles fósiles y así disminuir las emisiones de gases de efecto invernadero que éstos ocasionan.

Adicionalmente, las fuentes renovables pueden contribuir a equilibrar el portafolio energético y reducir los riesgos asociados a la volatilidad de los precios de los combustibles fósiles.

México, al igual que muchos países en el mundo, es un país consumidor de combustibles fósiles. Actualmente, el consumo de estos se encuentra por arriba de la media respecto al consumo de los países miembros de la OCDE y respecto a la media de los países incluidos en el World Energy Outlook 2008 como se ilustra en la *figura I.I.*

Energético	México	OCDE	Mundo
Fósiles	88.4%	82.3%	80.9%
Carbón	5.5%	20.6%	26.0%
Crudo	45.2%	39.9%	34.3%
Gas	37.7%	21.9%	20.5%
No Fósiles	11.6%	17.7%	19.1%
Nuclear	1.7%	11.1%	6.2%
Hidráulica	4.2%	2.0%	2.2%
Biomasa	4.8%	3.8%	10.1%
Otros Renovables	0.9%	0.8%	0.6%

Figura I.I. Consumo primario de energía por tipo de fuente 2006.

I.V. Estructura de la demanda en México.

En México, se ha observado un consumo creciente de energéticos durante los últimos años. Además, los hidrocarburos han incrementado su tasa de participación como fuente principal del consumo, pasando de 80.9% en 2001 a 83.7% en 2007¹¹ (*figura I.II.*).

¹⁰ "Estrategia Nacional para la transición energética y el aprovechamiento sustentable de la energía"; SENER; México 2009; Pág. 11.

¹¹ "Estrategia Nacional para la transición energética y el aprovechamiento sustentable de la energía"; SENER; México 2009; Pág. 11.

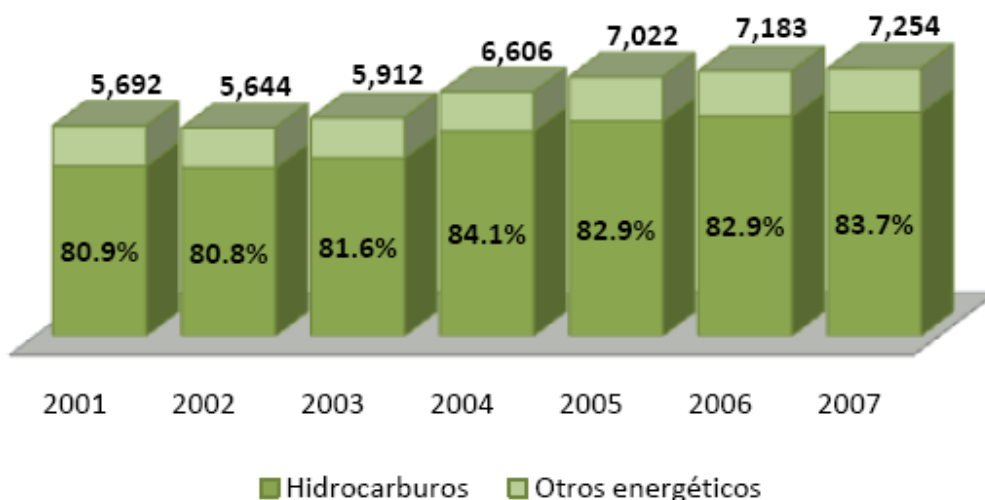


Figura I.II. Consumo interno de energéticos (Petajoules).

En la gráfica anterior se muestra el comportamiento del consumo interno durante los últimos años y el porcentaje que los hidrocarburos representan respecto a éste. Si bien se espera que el consumo de energéticos continúe creciendo en los próximos años, se debe trabajar para incrementar la eficiencia en el uso de la energía y la participación de otras fuentes de energía para reducir la dependencia de los hidrocarburos.

I.VI. Pronósticos para la situación energética en México

La posible situación futura de nuestro país puede ser ilustrada mediante un documento expedido por la SENER¹² sobre el análisis de prospectiva para el sector energético, el cual se esquematiza mediante dos escenarios posibles: el alto y el bajo.

Escenario alto (*figuras I.III y I.IV.*):

- Periodo de modelación: 2013 – 2030.
- No existen cambios radicales en la canasta de combustibles.
- La expansión del sector eléctrico incluye diferentes fuentes de generación como son la hidroeléctrica, ciclo combinado, turbo gas, combustión interna y carboeléctrica.
- El PIB es el factor de crecimiento que marca la pauta para el desarrollo del mercado energético.
- En este escenario el PIB crece a una tasa del 4.5% anual, en promedio a lo largo del periodo. De igual forma la población crece a una tasa anual del 1% durante el periodo 2013 – 2030.

¹² “Prospectiva energética para el periodo 2014-2030 del sector energía de México”; Gerardo Bazán, Esperanza Nava; Universidad Nacional Autónoma de México, Programa Universitario de Energía, SENER; Julio 2005; Anexo 14.

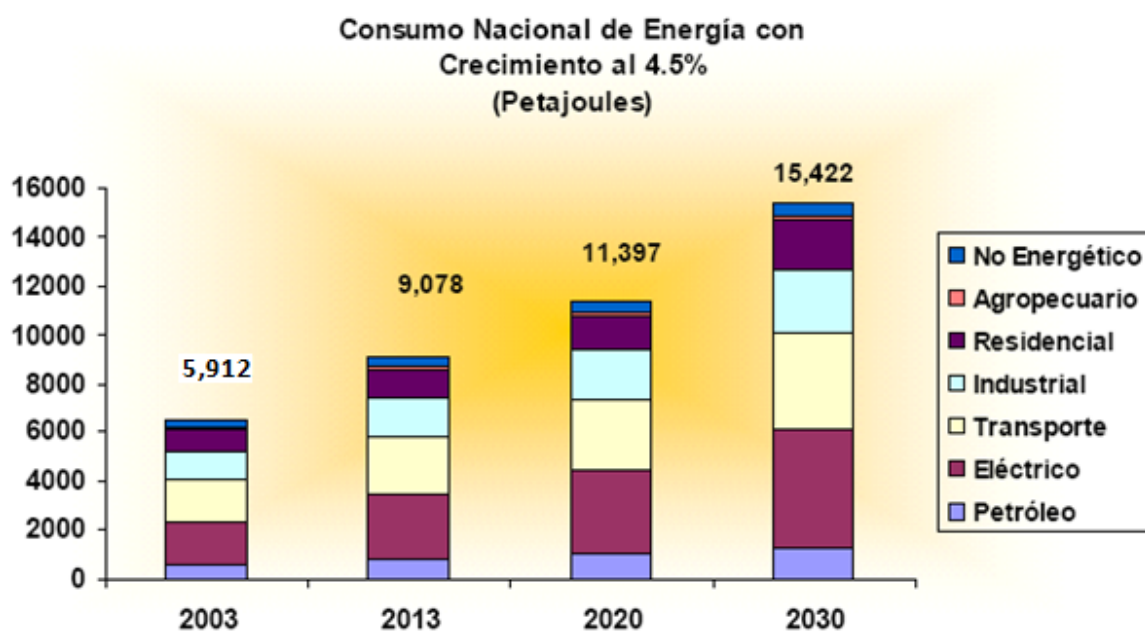


Figura I.III. Consumo nacional de energía con crecimiento al 4.5% (Petajoules).

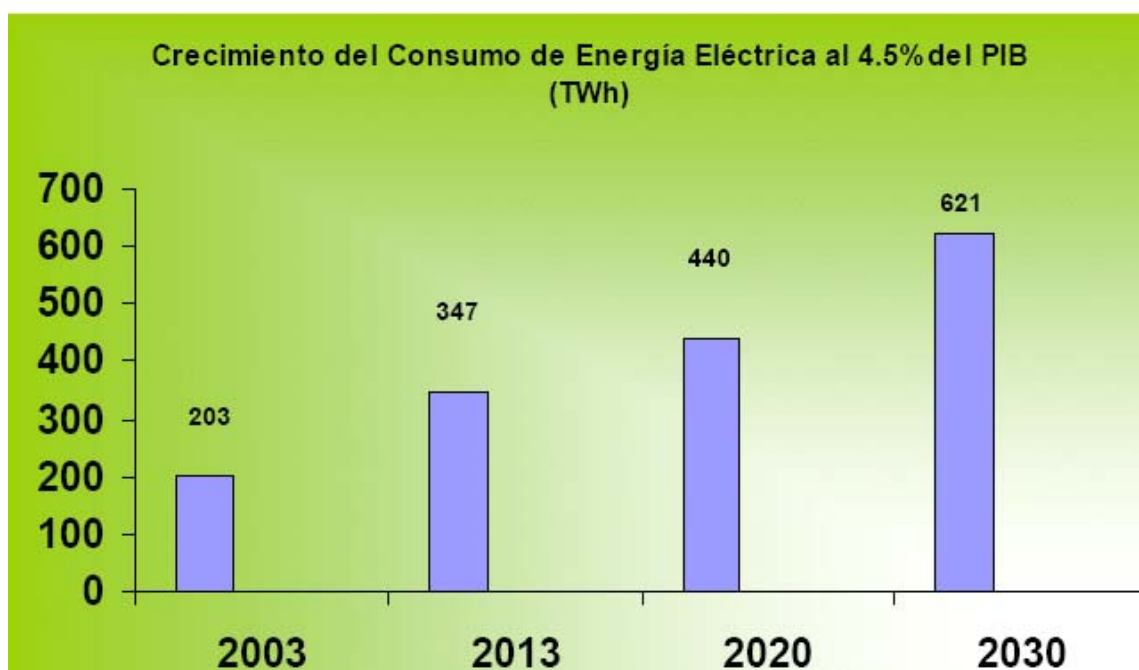


Figura I.IV. Crecimiento del consumo de energía eléctrica al 4.5% del PIB (TWh).

Escenario bajo (figuras I.V. y I.VI.):

- Periodo de modelación: 2013 – 2030
- No existen cambios radicales en la canasta de combustibles

Introducción

- La expansión del sector eléctrico incluye diferentes fuentes de generación como son la hidroeléctrica, ciclo combinado, turbo gas, combustión interna y carboeléctrica.
- El PIB es el factor de crecimiento que marca la pauta para el desarrollo del mercado energético.
- En este escenario el PIB crece a una tasa del 2.5% anual, en promedio a lo largo del periodo. De igual forma la población crece a una tasa anual del 1% durante el periodo 2013 – 2030.

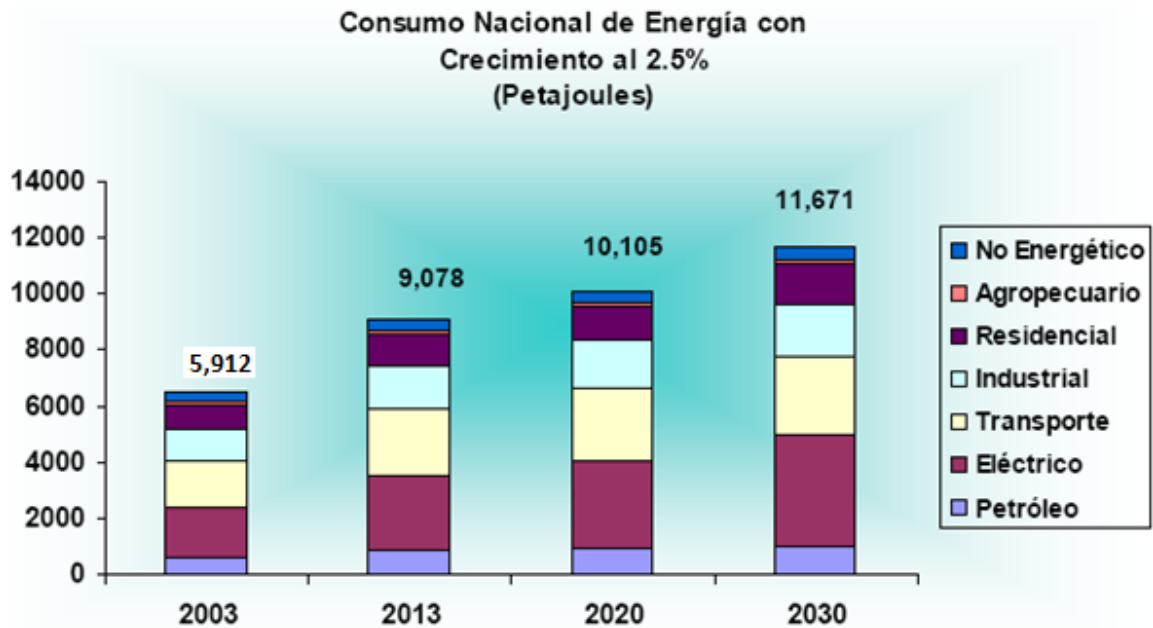


Figura I.V. Consumo nacional de energía con crecimiento al 2.5% (Petajoules).

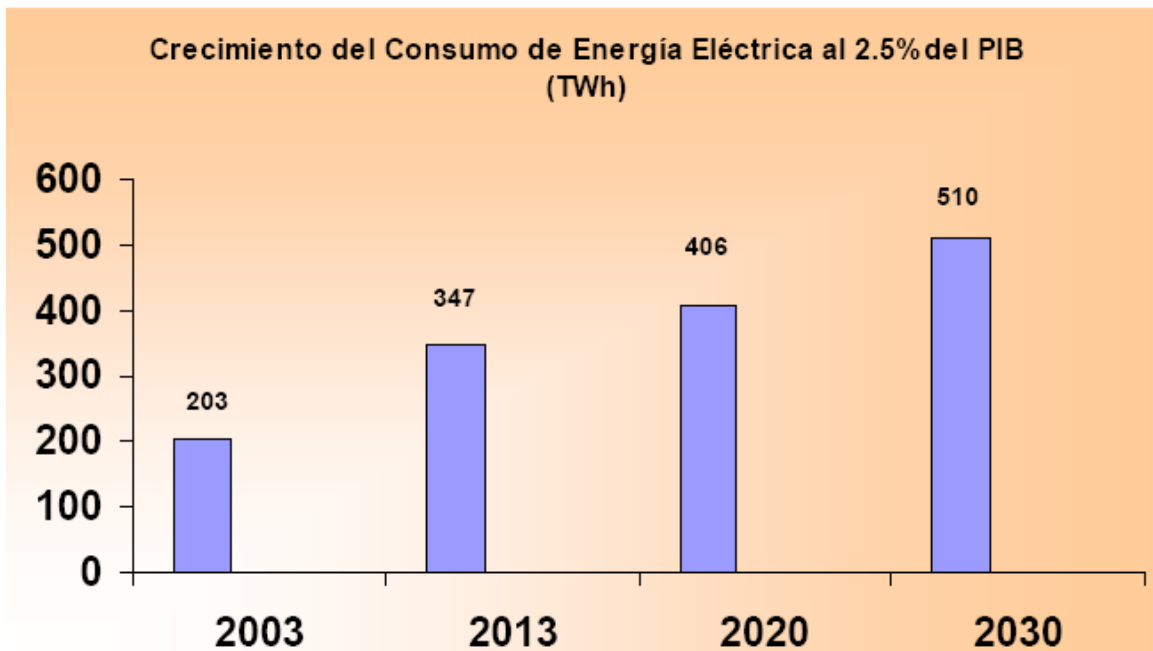


Figura I.VI. Crecimiento del consumo de energía eléctrica al 2.5% del PIB (TWh).

I.VII. La gasificación como una alternativa

En relación con lo anteriormente expuesto, el aumento en la demanda energética y la necesidad de estrategias políticas dirigidas hacia un desarrollo sustentable han provocado que se desarrollen tecnologías alternativas como la gasificación de combustibles sólidos.

Esta tecnología ha estado recibiendo mayor interés por parte de la industria de generación de energía debido a su gran versatilidad en el uso de distintos combustibles. Por ejemplo, los gasificadores pueden procesar carbón, coque de petróleo, biomasa o residuos municipales. Esta tecnología permite transformar sólidos o líquidos que contengan carbono en un gas combustible llamado gas de síntesis. Este gas es sobretodo rico en monóxido de carbono (CO) e hidrógeno (H₂), entre otros gases hidrocarburos.

Entre los beneficios que pueden ser obtenidos mediante la tecnología de gasificación se encuentran¹³:

- Transformación de energía con bajas emisiones de contaminantes y una alta eficiencia usando residuos como el coque de petróleo.
- La posibilidad de interactuar con algunas actividades de refinería, como por ejemplo, suministrar hidrógeno y energía a los diferentes procesos.
- Una disposición benigna de los residuos que no afecte al medio ambiente, y
- El uso de la biomasa para transformar energía y mitigar el impacto de los gases de efecto invernadero (reducción en el consumo de combustible).

La biomasa es considerada una de las principales fuentes de energía renovable del futuro, debido a su gran potencial, viabilidad económica y varios beneficios sociales y ambientales. Se estima que para el año 2050, la biomasa podría proveer cerca del 38% del uso directo de combustible a nivel mundial, y 17% de electricidad también a nivel mundial¹⁴. De esta manera, este trabajo se orienta principalmente a abordar algunos temas de carácter científico y tecnológico que son relevantes a la explotación de la biomasa en general como energético primario.

¹³ "An Eulerian model for the simulation of an entrained flow coal gasifier"; William Vicente, Salvador Ochoa, Javier Aguillón, Esteban Barrios; Instituto de Ingeniería, Facultad de Ingeniería, UNAM; Applied Thermal Engineering ; Abril 2003; Pág. 1-2

¹⁴ "Combustion characteristics of different biomass fuels"; Ayhan Demirbas; Department of Chemical Engineering, Selcuk University, Konya, Turkey; Progress in Energy and Combustion Science; 2003; Pág. 1-2

Capítulo I:

Biomasa, gasificación y método de volúmenes finitos

1.1. Biomasa

La biomasa, en este contexto, es un recurso renovable de energía proveniente de los residuos de la materia orgánica de tierra y mar que, por cualquier causa, no son útiles para alimentación humana, ni de los animales que viven en los ecosistemas naturales; es decir, toda la materia orgánica de origen vegetal, animal o artificial, que es producida naturalmente (como en el caso de las dos primeras), o que son resultado de una actividad realizada por el hombre en la que son obtenidos como residuos o desechos¹. En este trabajo, la biomasa útil para la cadena alimentaria (del hombre y de otros seres vivos) no es considerada.

Los materiales biológicos se producen a partir de la energía transportada en la radiación solar que es captada y transformada en energía del enlace químico mediante la fotosíntesis que llevan a cabo las plantas verdes y diversos microorganismos con pigmentos fotosintéticos. La energía contenida en los enlaces químicos de los tejidos que forman los organismos fotosintéticos es luego transferida a los animales a través de las cadenas tróficas y se libera al medio ambiente en procesos de oxidación, como los que tienen lugar durante la descomposición de los materiales biológicos residuales o muertos, o bien, de una forma mucho más rápida en el tiempo, en los procesos de combustión².

En cualquier caso, la oxidación de la materia orgánica, al ser un proceso exotérmico, conlleva una liberación de energía que, en el caso de la combustión, puede ser utilizada por el hombre como fuente energética.

1.2. Tipos de biomasa

- *Biomasa natural*: se produce espontáneamente en la naturaleza sin la intervención humana.
- *Biomasa residual seca*: subproductos sólidos no utilizados en las actividades agrícolas, forestales y en los procesos de la industria agroalimentaria. Presenta mayor interés en aprovechamiento industrial.
- *Biomasa residual húmeda*: son los vertidos llamados biodegradables; es decir, las aguas residuales urbanas e industriales y los residuos ganaderos.
- *Cultivos energéticos*: se generan con la única finalidad de producir biomasa transformable en combustible.

1.3. Transformación de biomasa

Antes que la biomasa pueda ser usada para fines energéticos, es convertida en una forma más conveniente para su transporte y utilización. A menudo, la biomasa es convertida en formas derivadas tales como carbón vegetal, briquetas, gas, etanol o electricidad.

¹ "Instrumentación de una planta piloto de gasificación de residuos biomásicos de 250 kWe"; Mario Alberto, Barrera Galván; Facultad de Estudios Superiores Zaragoza, UNAM; Tesis; Septiembre 2008; Pág. 10.

² Idem.

Estos procesos de conversión transforman la biomasa en un producto de más alto valor y poder calorífico, lo cual hace más conveniente su aprovechamiento como fuente energética.

En adelante nos referiremos como “biomasa” exclusivamente a la *biomasa residual húmeda*, ya que el interés del presente trabajo recae exclusivamente en la transformación de este tipo de residuos.

1.4. Transformación de biomasa residual húmeda

El uso de este tipo de biomasa como materia prima para el proceso de conversión a bioenergía, permite resolver problemas de olores desagradables, disminución del volumen, recuperación de nutrientes, mitigación del potencial de contaminación, eliminación a alta temperatura de agentes patógenos y compuestos farmacéuticos activos; así como recuperar energía³.

Existen dos procesos básicos (*figura 1.1.*) para realizar esta conversión:

- El proceso bioquímico (biológico).
- El proceso termoquímico.

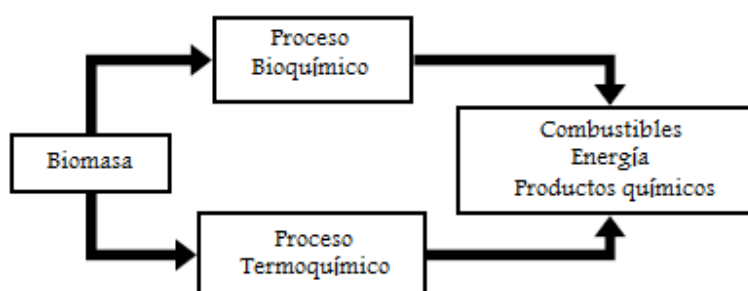


Figura 1.1. Procesos de conversión de biomasa

Mientras que el proceso bioquímico (biológico) de conversión requiere una gran cantidad de tiempo de reacción (días, semanas o inclusive meses), el proceso termoquímico puede rápidamente (segundos o minutos) obtener múltiples productos finales (Bridgwater, 2006). El proceso de conversión termoquímico abarca la combustión, la pirólisis, la gasificación y la licuefacción. La combustión convierte la energía que posee la biomasa en calor; sin embargo, este método no provee un modo de almacenarla hasta que se le necesite. Además, a las cenizas producto de la combustión, se les tiene que encontrar un modo adecuado de reciclaje. Es por esto que la pirólisis y la gasificación han recibido mayor atención debido a que son más versátiles⁴.

1.5. Conversión termoquímica

Es un proceso químico a alta temperatura que rompe los enlaces de la materia orgánica y los restablece con diferentes características, produciendo carbón vegetal, gas de síntesis y aceite vegetal rico en oxígeno. Después de la conversión, el proceso termoquímico arroja una cantidad menor de residuos, lo que resulta en una reducción de costos asociados con combustible, depósito y transporte.

³ “Livestock waste-to-bioenergy generation opportunities”; Keri B. Cantrell, Thomas Ducey, Kyoung S. Ro, Patrick G. Hunt; US Department of Agriculture; Bioresource Technology; Mayo 2008; Pág. 1-2.

⁴ Idem.

Hay tres procesos termoquímicos principales identificados para convertir la biomasa en energía renovable con un valor agregado: la pirolisis, la gasificación y la licuefacción directa (Cantrell et al., 2007; Priyadarsan et al., 2004).

Para cada proceso, el producto final es dependiente de la temperatura de operación, presión, transferencia de calor y tiempo de residencia, obteniendo gases volátiles, aceite vegetal y sólidos (Bridgwater y Peacocke, 2000). Los gases volátiles son una mezcla de H₂, CO, CO₂, N₂, vapor de agua, hidrocarburos y alquitranes. Una porción de estos gases volátiles, en especial los alquitranes, se condensan para formar un aceite vegetal, el cual puede ser un combustible. El sólido residual que no ha reaccionado, es una combinación de minerales y carbón fijo, comúnmente conocida como cenizas, como se muestra en la *figura 1.2*.

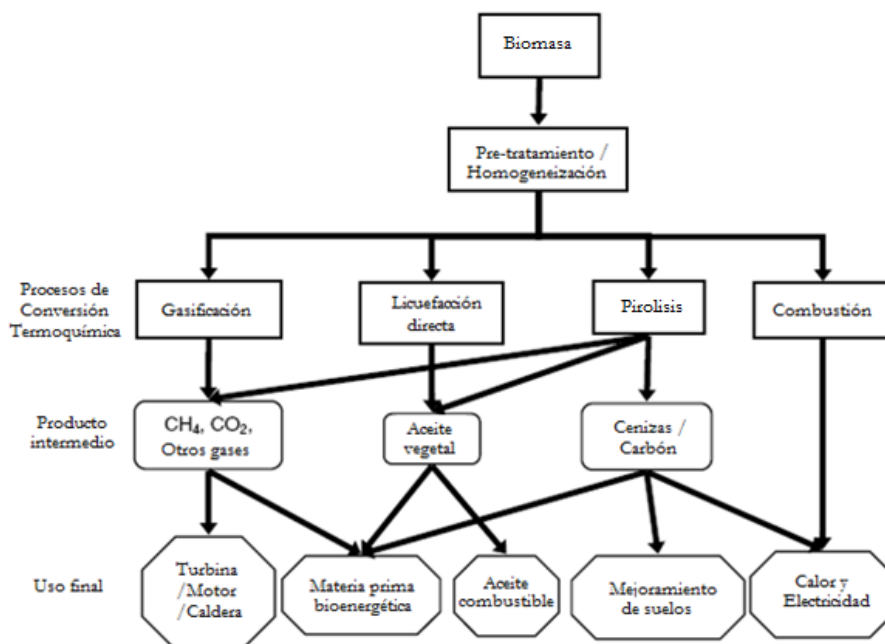


Figura 1.2. Principales procesos de conversión termoquímica, sus productos intermedios y usos finales sugeridos⁵.

Todos estos productos intermedios tienen múltiples usos finales. Una vez limpios de polvo, cenizas, metales, agua y ácidos orgánicos, el gas de síntesis proveniente de la gasificación y pirolisis, puede usarse como gas combustible o materia prima bioenergética. El aceite vegetal también posee cualidades que le permiten que se utilice como una fuente de combustible o materia prima bioenergética.

1.6. Pirolisis y producción de carbón vegetal

La pirolisis se define como la destrucción térmica de los materiales orgánicos en ausencia de oxígeno. La pirolisis usa calor y una atmósfera libre de oxígeno para convertir la porción orgánica

⁵ "Livestock waste-to-bioenergy generation opportunities"; Keri B. Cantrell, Thomas Ducey, Kyoung S. Ro, Patrick G. Hunt; US Department of Agriculture; Bioresource Technology; Mayo 2008; Pág. 7.

de cierta materia prima en una mezcla de cenizas y gases volátiles, conteniendo ambos, vapores no condensables y alquitranes condensables (hidrocarburos oxigenados), formando un aceite combustible pirolítico o aceite vegetal (Bridgewater y Peacocke; Mohan et al.,2006). A pesar que han sido publicados numerosos artículos y evaluaciones sobre el aceite pirolítico proveniente de la biomasa (Boateng et al., 2007a,b; Bridgewater y Peacocke, 2000; Mohan et al., 2006; Yaman,2004), poco se ha avanzado hasta la fecha en investigación sobre la producción de aceite vegetal a partir de los residuos de origen animal.

1.7. Gasificación

Es un tipo de pirolisis en la que se utiliza una mayor proporción de oxígeno a mayores temperaturas, con el objetivo de optimizar la producción del llamado gas de síntesis o gas pobre, constituido por una mezcla de CO, H₂, hidrocarburos, CO₂ y N₂. Éste puede utilizarse para generar calor y electricidad, mediante equipos convencionales como los motores diesel.

La gasificación posee ciertas ventajas con respecto a la biomasa original:

- El gas producido es más versátil y se puede usar para los mismos propósitos que tiene el gas natural.
- Puede quemarse para producir calor y puede alimentarse a motores de combustión interna y a turbinas de gas para generar electricidad.
- Produce un combustible relativamente libre de impurezas y causa menores problemas de contaminación al quemarse.

1.8. Gasificadores (algunos tipos y características).

En principio, los gasificadores empleados para carbón pueden también ser usados para biomasa, pero existen diferencias significativas entre los dos combustibles. La pirolisis del carbón produce 60-80% de char (carbón vegetal) una vez hecho el balance proveniente de los gases y alquitranes. Los gasificadores en contracorriente de aire ascendente (updraft) están bien adaptados para la conversión de char poco reactivo en gas; alrededor del 90% del carbón gasificado en el mundo se hace mediante esta configuración (Hobbs, Radulovic & Smoot, 1993). Cuando la biomasa se somete a pirolisis, los gases y alquitranes representan el 70-90% del total de la masa alimentada, mientras que sólo 30-10% es char altamente reactivo. En este tipo de gasificadores, el oxígeno es consumido en el hogar, esencialmente a través de la combustión parcial del char. Los gases calientes resultantes causan la gasificación del char y la pirolisis de la biomasa. Las temperaturas relativamente bajas y la ausencia de oxígeno dan como resultado grandes cantidades de alquitranes en el gas producido⁶.

Los gasificadores de corriente descendente (downdraft) se caracterizan por flujos concurrentes del combustible sólido y del gas, y muestra poca flexibilidad con respecto al contenido de humedad en el combustible y su tamaño. Sin embargo, este tipo de gasificadores se usa preferentemente para procesos en pequeña escala (por debajo de 500 kWe) ya que producen un gas más limpio, resultando en un proceso de limpieza menos complicado. En el diseño clásico, el lecho de relleno

⁶ "Dynamic behavior of stratified downdraft gasifiers "; Colomba Di Blasi; Dipartimento di Ingegneria Chimica; Università degli Studi di Napoli "Federico II"; Chemical Engineering Science; Noviembre 2008; Pág. 1-2.

es soportado a través de una constricción (garganta), en donde la mayor parte de la gasificación se lleva a cabo. El aire es alimentado sobre esta zona y, debido a la restricción, el flujo es altamente turbulento, favoreciendo así la mezcla. Una versión posterior es la estratificada (o de núcleo abierto), en el cual no existe restricción y el lecho es soportado sobre el hogar. Este diseño ha mostrado un buen comportamiento al hacer frente a los problemas derivados de la pérdida de materiales en la gasificación, que es, una distribución pobre de oxígeno dando como consecuencias inestabilidades y fusión de cenizas (Buekens, Bridgwater, Ferrero & Maniatis, 1990)⁷.

Las diferencias entre la gasificación a contracorriente y flujo concurrente se deben también a los procesos, los cuales determinan la composición del gas producido. En el primer caso, la calidad del gas depende en gran medida de la presencia de los productos de la volatilización. Por otra parte, el poder calorífico del gas producido en los gasificadores de flujo concurrente es determinado por la cantidad de CO e H₂ presentes. Ambas especies son formadas por el craqueo de alquitranes y la lenta gasificación heterogénea del carbón vegetal, de modo que el tamaño de la zona de reducción y el tiempo de residencia de los agentes gasificadores juegan un papel fundamental en el desempeño del gasificador. Estos son, por otra parte, dependientes no sólo del tamaño del gasificador sino además en la posición en la cual la zona de reacción se estabiliza (Reed & Markson, 1985)⁸.

1.9. Proceso general del gasificador de corriente descendente (downdraft)

Los procesos que ocurren en una partícula de combustible sólido 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 combustible sólido se puede considerar básicamente de cuatro partes: a) carbón crudo, 2) agua o humedad, 3) char y 4) cenizas. Cuando la partícula se inyecta al gasificador (*figura 9*) se calienta por medio del 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 (procesos 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 char que permanece en la partícula⁹.

Este último dará origen a reacciones heterogéneas de superficie con los componentes de la fase gaseosa, lo que provocará una disminución de la partícula de combustible sólido. La ceniza es el contenido de materia inerte de la partícula y durante los procesos de gasificación se considera que no reacciona. Los cuatro componentes de la partícula están dados por medio del análisis aproximado de la partícula 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 gaseosa¹⁰.

Dicho lo anterior podemos dividir en las siguientes etapas generales al proceso de gasificación:

⁷ Idem.

⁸ Idem.

⁹ "Instrumentación de una planta piloto de gasificación de residuos biomásicos de 250 kWe"; Mario Alberto, Barrera Galván; Facultad de Estudios Superiores Zaragoza, UNAM; Tesis; Septiembre 2008; Pág. 28.

¹⁰ Idem.

- Secado del combustible sólido (biomasa).
- Pírolisis.
- Oxidación.
- Reducción.

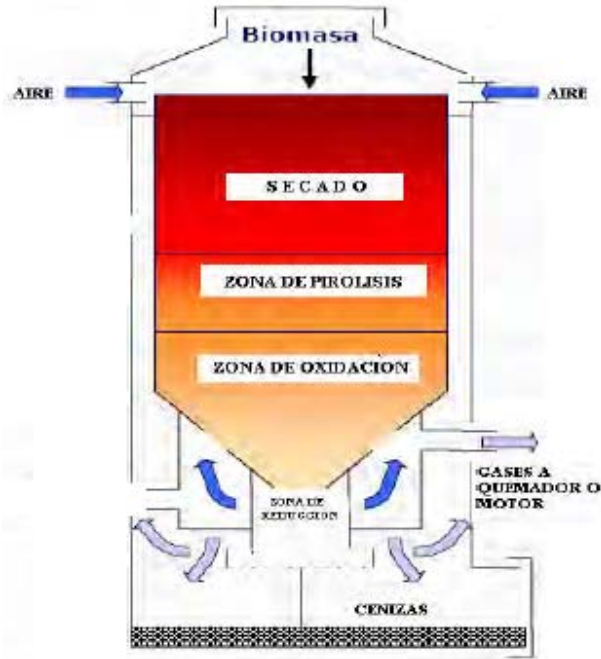


Figura 1.3. Gasificador downdraft mostrando las etapas del gasificador.

1.10. Método de volúmenes finitos

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

$$\frac{\partial}{\partial x} (\bar{\rho} \tilde{\phi}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{\phi}) - \nabla \cdot (\Gamma_\phi \nabla \phi) = \bar{S}_\phi \quad (1)$$

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

La ecuación (1) se puede discretizar con el método de volúmenes finitos. Con este método, el dominio se divide en pequeños volúmenes de control (figura 1.4.), asociando a cada uno de ellos un punto nodal. De forma similar se discretiza el tiempo en intervalos temporales.

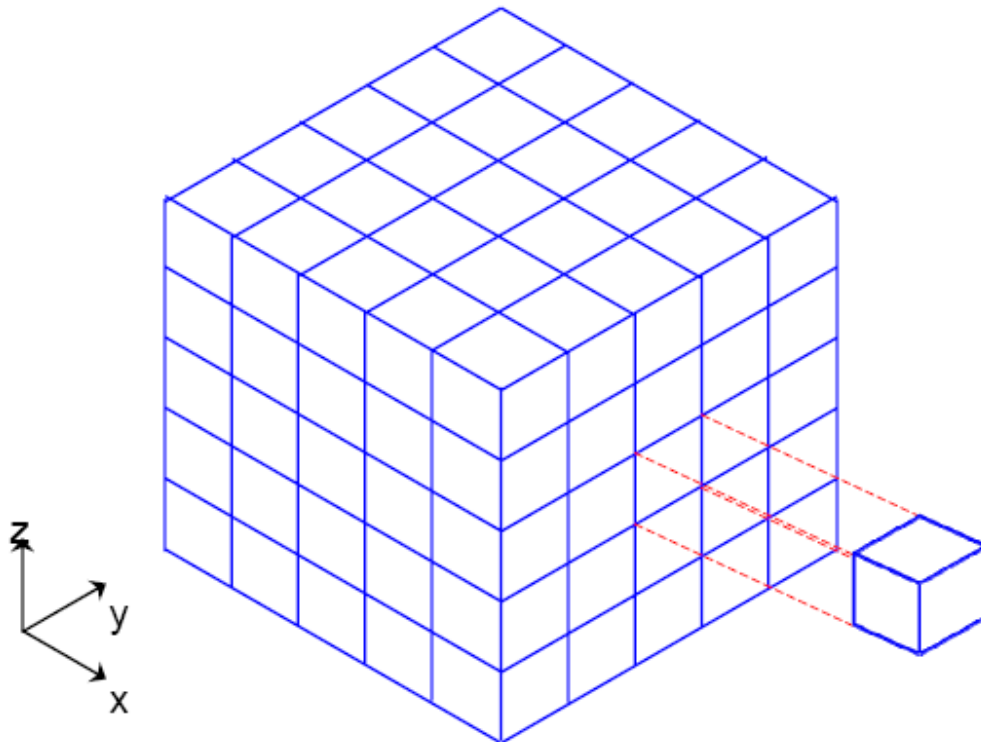


Figura 1.4. Representación del sistema discretizado en volúmenes finitos.

La ecuación diferencial se integra en cada volumen de control y en cada intervalo temporal, y el resultado es una ecuación discretizada que relaciona los valores de $\tilde{\phi}$ para un determinado grupo de puntos nodales. Esta ecuación algebraica expresa el principio de conservación de $\tilde{\phi}$ en el volumen finito, de la misma manera que la ecuación diferencial lo expresa para un volumen infinitesimal. La ecuación algebraica para un nodo P puede expresarse en forma general como:

$$a_P \tilde{\phi}_P = \sum_{i, I = E, W, N, S, H, L} a_i \tilde{\phi}_I + a_T \tilde{\phi}_T + B \quad (2)$$

Donde el subíndice i e I representan las celdas vecinas, P la celda bajo análisis, T el valor correspondiente en el intervalo temporal anterior de la celda P, y B el término fuente. La deducción detallada de la ecuación (2) puede consultarse en numerosos textos de dinámica de fluidos computacional, por ejemplo en Pantakar¹¹ y Ferziger-Peric¹².

En el caso de una malla cartesiana, escalonada ("staggered") y uniforme (celdas de iguales dimensiones espaciales), un volumen de control bidimensional (por sencillez) es como el que se muestra en la *figura 1.5*. (el espesor de la celda en dirección z puede considerarse la unidad). En una malla escalonada, las variaciones se encuentran definidas en el centro de la celda, mientras

¹¹ "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. Series in Computational Methods in Mechanics and Thermal Science"; S.V. Pantakar; Hemisphere Publishing Corporation; 1980.

¹² "Problems of Hydrodynamics and Continuum Mechanics"; H. H. Ferziger, M. Peric; Springer-Verlag; 1996.

que las componentes de velocidad correspondientes a la celda se encuentran desplazadas en cada dirección a las caras de la celda.

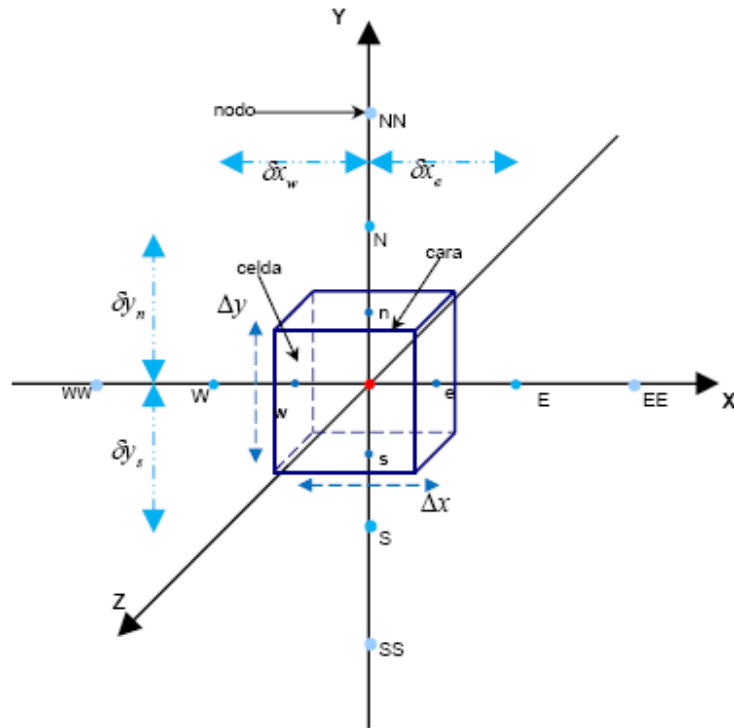


Figura 1.5. Diagrama esquemático de un volumen de control tridimensional.

En la figura 2 se muestra la notación de la celda y de sus vecinas. Dada una celda P , sus vecinas se notarán según las iniciales de los puntos cardinales (en inglés) en las direcciones “x” e “y”, y como “Low” y “High” en la dirección z. Las caras de la celda se notan con la misma nomenclatura, pero con letras minúsculas.

El tiempo también se discretiza. Las celdas en la dirección temporal se llaman intervalos temporales. La celda P en el paso temporal se nota como T .

A continuación, se presentan los términos de la ecuación discretizada (2).

Definiendo los símbolos F , D y Pe como:

$$F = \bar{\rho} \vec{v}_i, \quad D = \frac{\Gamma}{\delta_i}, \quad Pe = \frac{F}{D} \quad (3)$$

Donde \vec{v}_i es la velocidad en la cara i , δ_i es la distancia entre los nodos que incluyen la cara i y Pe es el número de Peclet, que es una relación entre la convección y la difusión, \vec{v} es la velocidad en la cara i y x_i . Las expresiones F y D representan el efecto de los términos convectivo y difusivo de la ecuación de transporte (1) respectivamente.

Los coeficientes a_i de la ecuación (2) son:

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

Capítulo I

(4)

Los valores F y D en la cara de la celda de la ecuación (4) son:

$$F_i = (\bar{\rho}\tilde{v})_i\Delta_i \quad D_i = \frac{\Gamma_i\Delta_i}{(\delta_i)}, i = n, s, e, w \quad (5)$$

Donde Δ_i es la longitud de la cara i.

Para determinar F_i se necesita conocer $\bar{\rho}$ y \tilde{u}_i en la cara de la celda. El cálculo del término convectivo de la ecuación de transporte (1) requiere también el conocimiento de la variable escalar $\tilde{\phi}$ en la cara de la celda. La velocidad \tilde{v}_i está calculada en la cara de la malla escalonada; pero $\bar{\rho}$ y $\tilde{\phi}$ están calculados en el nodo y necesitan ser interpolados a la cara para calcular los coeficientes a_i de la ecuación discretizada (2).

La obtención de estas variables en la cara de la celda es importante en precisión y convergencia de la solución. El cálculo de $\bar{\rho}$ y $\tilde{\phi}_i$ da lugar a los llamados esquemas de discretización. La función $f(|Pe|)$ de la ecuación (4) depende del esquema de interpolación. Por ejemplo, en el esquema de diferencias desplazadas $f(|Pe|)=1$, y para el sistema híbrido¹³:

$$f(|Pe|) = \max(0.1 - 0.5|Pe|) \quad (6)$$

En el apéndice B se presentan estos esquemas de discretización lineales con más detalle y que son los que se utilizan en esta tesis en la discretización del término convectivo de las ecuaciones de cantidad de movimiento, energía, especies químicas y modelo de turbulencia.

El coeficiente para el término transitorio es:

$$a_T = \frac{\bar{\rho}_T\Delta x\Delta y}{\Delta t} \quad (7)$$

Para el cálculo del término D_i en (5), 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 en la cara. Esta interpolación puede ser aritmética o armónica. Para la cara e, por ejemplo, estas interpolaciones son:

$$\Gamma_e = \frac{\Delta x(\Gamma_P + \Gamma_E)}{2\delta x_e} \quad \Gamma_e = \frac{2\delta x_e}{\Delta x\left(\frac{1}{\Gamma_P} + \frac{1}{\Gamma_E}\right)} \quad (8)$$

El término fuente de la ecuación general (1) \bar{S}_ϕ , se linealiza como:

¹³ "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. Series in Computational Methods in Mechanics and Thermal Science"; S.V. Pantakar; Hemisphere Publishing Corporation; 1980.

Capítulo I

$$\bar{S}_\phi = \bar{S}_{\phi,c} + \bar{S}_{\phi,v}\tilde{\phi}_P \quad (9)$$

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

Con esta suposición, los términos B y a_p de la ecuación (2) son:

$$B = \bar{S}_{\phi,c}\Delta x\Delta y + a_T\tilde{\phi}_T \quad (10)$$

$$a_p = a_e + a_w + a_n + a_s + a_T - \bar{S}_{\phi,v}\Delta x\Delta y \quad (11)$$

La ecuación (2) se aplica en cada celda del dominio, para cada $\tilde{\phi}$ y para cada paso temporal Δt , por lo que se tiene un sistema de ecuaciones lineales (los coeficientes a pueden depender, directa o indirectamente de $\tilde{\phi}$, 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.

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

Entre los algoritmos iterativos que se basan en este procedimiento están los de la familia SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations)^{14 15 16}. El algoritmo utilizado en esta tesis para resolver el problema de acoplamiento velocidad-presión pertenece a esta familia.

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

Para procurar acelerar esta convergencia se utiliza un método de relajación de algunas de las variables dependientes y propiedades. Se emplean dos tipos de relajación: la inercial y la lineal. La relajación inercial se emplea para las velocidades y los parámetros de turbulencia, y aumenta la

¹⁴ "A Calculation Procedure for Heat, Mass and Momentum Transfer in Three Dimensional Parabolic Flows"; S.V. Pantakar, D.B. Spalding; Int. J. Heat and Mass Transfer, 15. Pp. 1787-1806; 1972.

¹⁵ "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. Series in Computational Methods in Mechanics and Thermal Science"; S.V. Pantakar; Hemisphere Publishing Corporation; 1980.

¹⁶ "Mathematical Modeling of Fluid Dynamics, Heat Transfer and Mass Transfer Process"; D.B. Spalding; Technical report HTS/8011, Imperial College of Science Technology and Medicine; 1980.

Capítulo I

diagonal de la matriz de coeficientes al agregar a la ecuación de cualquier variable $\tilde{\phi}$ el término fuente:

$$\bar{S}_{\phi,r} = \frac{\bar{\rho}V_P}{\Delta t_f} (\tilde{\phi}_P^{(n-1)} - \tilde{\phi}_P^{(n)}) \quad (12)$$

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.

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

$$\tilde{\phi}_P^{(n)} = \alpha \tilde{\phi}_P^{sol} + (1 - \alpha) \tilde{\phi}_P^{(n-1)} \quad (13)$$

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

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

En esta tesis se usa el código de fluido-dinámica computacional PHOENICS¹⁷ para resolver las ecuaciones que describen la aerodinámica del flujo: continuidad, cantidad de movimiento, energía, especies químicas y turbulencia.

¹⁷ “The PHOENICS Reference Manual”; J.C. Ludwing, D.B. Spalding; Technical Report CHAM TR/200, CHAM Ltd; London 1989.

Capítulo II:

Planta piloto de gasificación de biomasa del Instituto de Ingeniería UNAM y análisis de residuos

2.1. Objeto, ubicación y algunas características.

Esta planta está destinada a la transformación de energía para la obtención de electricidad, útil para el alumbrado de algunas calles de Ciudad Universitaria; por medio de un proceso termoquímico, en este caso la gasificación de residuos sólidos biomásicos.

El laboratorio de gasificación de biomasa del Instituto de Ingeniería de la UNAM está ubicado en el Jardín Botánico de Ciudad Universitaria.

Debido a las altas temperaturas alcanzadas durante la gasificación y a las características térmicas del gasificador se pretende manejar un factor de planta de 0.9 (328 días/año).

La planta tiene una capacidad de diseño y normal de 256 kWe dada por el generador acoplado al motor de combustión y una capacidad mínima de 200 kWe.

2.2. Especificaciones para la alimentación del proceso.

- La biomasa deberá almacenarse de modo que se encuentre en todo momento protegida del agua.
- La mayoría de los procesos de conversión de biomasa en energía requieren que el contenido de humedad no sea superior al 30%, por lo que generalmente el combustible (biomasa) tiene que ser previamente acondicionado para su uso.
- El contenido de cenizas recomendado no debe exceder el 5%.
- La biomasa generalmente tiene un poder calorífico entre 15 y 20 MJ/kg.
- La biomasa entra con un flujo de 10 a 40 kg/h con un tamaño de partícula no mayor a 5 cm.

2.3. Descripción del proceso (figura 2.1.)

Comienza con la alimentación de 10 - 40 kg/h de biomasa a la tolva de alimentación (2), a las condiciones de tamaño de partícula (< 5 cm) y humedad (12 – 15% HR) requeridas, el tamaño es obtenido mediante el uso de un molino de cuchillas (1) y la deshumidificación de la biomasa es alcanzada mediante la introducción de aire seco y caliente proveniente del intercambiador de calor (5). Para medir la humedad se utilizará el sensor de humedad FH A696 MF ALMEMO™ conectado al registrador de datos 2290-8 ALMEMO™.

La tolva, galvanizada para evitar corrosión, se encuentra acondicionada con un tornillo sinfín de acero inoxidable, el cual se encarga de transportar la biomasa triturada a la boquilla de alimentación del gasificador (3), en donde mediante gravedad se introduce la carga de alimentación a control de flujo. Una vez introducida la carga comienza a llevarse a cabo las reacciones de reducción, pirolisis, combustión y volatilización; utilizando aire a control de flujo

Capítulo II

como agente gasificante, alimentado mediante un compresor en un rango de 101 - 300 kPa, igualmente sometido a control de flujo.

En el gasificador de tipo flujo descendente o "downdraft", la temperatura es monitoreada constantemente mediante termopares tipo K (Ni-Cr), los cuales poseen un rango de medición que va desde -200 a 1,370 °C. Dichos termopares se encuentran instalados a lo largo del gasificador y los datos son almacenados en una computadora conectada al registrador 2290-8 ALMEMO™.

Se retiran constantemente las cenizas acumuladas en la parte inferior del gasificador como subproducto de la reacción de combustión de la biomasa. Los gases producto de la gasificación están conformados principalmente de CO, CO₂, H₂, CH₄, N₂, cenizas y alquitranes. Este gas de síntesis abandona el gasificador a una temperatura de 500 - 600 °C. La limpieza del gas se lleva a cabo inicialmente en un colector de polvos CP-101 en donde se eliminan las partículas de cenizas arrastradas en la mezcla gaseosa, para posteriormente retirar las partículas más pequeñas con la ayuda del filtro (4 y 6).

El gas de síntesis libre de partículas es enfriado al pasar por el intercambiador de calor (5), el cual cuenta con un ventilador que le alimenta aire a contracorriente, obteniendo un gas a la salida del equipo con temperaturas menores a los 200 °C, del cual se analiza su composición con un cromatógrafo de gases BUCK 910™ con detector DCT (Detector de Conductividad Térmica) y que utiliza gas He como gas portador. La composición del gas obtenido es comparada con una mezcla estándar cuya composición es la ideal para el funcionamiento de los motores de combustión interna (7 y 9). Los motores están conectados al generador eléctrico el cual entrega entre 200 y 300 kWe. El gas que no llega a los motores entra a un quemador (8).

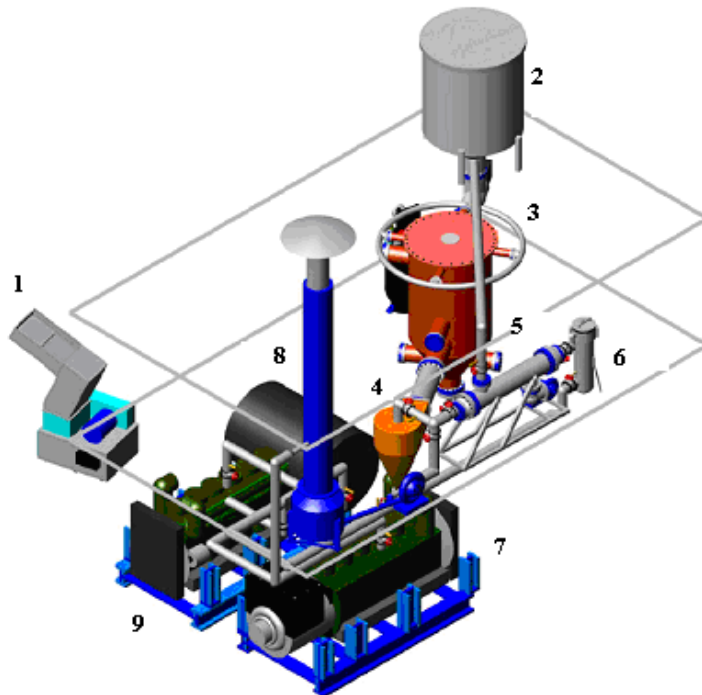


Figura 2.1. Vista frontal de la planta piloto (Mario A. Barrera Galván, 2008)



Figura 2.2. Vista frontal de la planta y gasificador de biomasa de la planta del Instituto de Ingeniería de la UNAM

2.4. Gasificador de biomasa (figura 2.3.)

Construido de acero A-516-70, cuenta con:

- Cuatro entradas de aire en la parte superior.
- Una entrada de alimentación de biomasa conectada a la carcasa del tornillo sinfín.
- Una salida de gas conectada hacia el limpiador de gases.
- 15 orificios para la instalación de termopares justo debajo de la alimentación.

El gasificador tiene un diámetro de 30'' y está recubierto de material refractario de alta alúmina DIDURIT 18 en su parte interior, reduciendo el diámetro a 20''. El lecho de biomasa está soportado por una rejilla de 14'', con perforaciones de 1'' a través de la cual salen las cenizas.

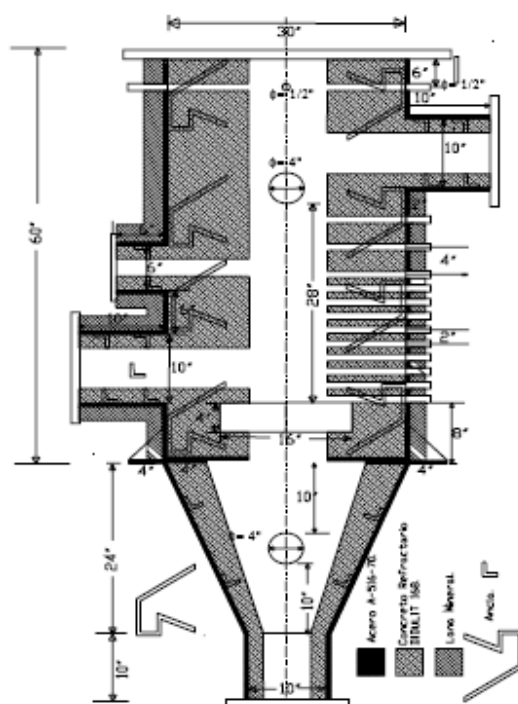


Figura 2.3. Gasificador de biomasa de flujo descendente "downdraft"

2.5. Análisis de lodos de aguas residuales, excretas y carbón

2.5.1. Características generales

Los lodos de aguas residuales son un producto residual proveniente de las plantas de tratamiento de aguas residuales. Contienen una cantidad importante de metales pesados, toxinas orgánicas y microorganismos patógenos¹, los cuales son considerados dañinos para el medioambiente y todos los organismos vivos.

A pesar de que los lodos de aguas residuales han sido ampliamente utilizados como fertilizantes alrededor del mundo, cosa que en algunos países está siendo prohibido por cuestiones ambientales², pueden también contribuir a resolver problemas de abasto energético al representar una fuente potencial de energía renovable.

Es evidente que existe un creciente cambio en la percepción de los lodos de aguas residuales, vistos como un residuo indeseable a un recurso benéfico e importante para desarrollar una tecnología adecuada o hacer uso de una ya existente, de modo que se reduzcan los problemas ambientales y los costos asociados al tratamiento de estos lodos. Es por ello que la gasificación puede ser aplicada a estos residuos para ser transformada en energía útil y reducir su volumen.

¹ "Gasification of sewage sludge using a throated downdraft gasifier and uncertainty analysis"; Murat Dogru, Adnan Midilli, Colin R. Howarth; Fuel Processing Technology; Septiembre 2001; Pág. 1.

² "Experimental investigation and modeling of gasification of sewage sludge in the circulating fluidized bed"; I. Petersen, J. Werther; Chemical Engineering and Processing; Octubre 2004; Pág. 1.

Además, previene posibles problemas provenientes de compuestos orgánicos y fija los metales pesados en las cenizas resultantes³.

La eliminación de excretas, por ejemplo de ganado, se está convirtiendo en un problema debido a su creciente producción y con ello la generación de diversos problemas como la posible contaminación del aire, suelo y de las fuentes de agua superficial a través de su escurrimiento en diversos sitios. El reutilizar la fracción de materia orgánica de estas excretas conlleva el beneficio de evitar los problemas ambientales antes mencionados que derivan de su acumulación.

Tradicionalmente a las excretas se les da un tratamiento mediante digestión anaerobia. Mediante esta digestión se obtiene un combustible como lo es el biogás así como residuos sólidos digeridos. Estos residuos pueden ser usados para compostaje aeróbico llamado “humus”. El “humus” puede utilizarse como complemento a los abonos en la agronomía y la horticultura. Sin embargo, esta aplicación tiene sus limitaciones como las condiciones climáticas y la inversión inicial.

Como una opción alternativa para el tratamiento de excretas, en esta tesis se presenta la gasificación de las mismas, de modo que se puedan convertir en gas de síntesis en un menor tiempo y evitar también problemas ambientales. Así, la transformación de las excretas en un combustible renovable (char y volátiles) podría contribuir a aumentar la rentabilidad de la gestión de estas⁴.

Cabe hacer mención que se hicieron pruebas de calorimetría en el laboratorio de la planta de gasificación de la UNAM para determinar el PCS (Poder Calorífico Superior) de excretas humanas y lodos de aguas residuales provenientes de la planta de tratamiento de Ciudad Universitaria con el objetivo de comparar estos resultados con los encontrados en la literatura. Las mediciones de las excretas humas se encuentran en un rango de 20.79 - 28.53 MJ/kg . Las mediciones de los lodos de aguas residuales se encuentran en un rango de 26 – 29.59 MJ/kg.

2.5.2. Características físicas

Tamaño (m)	0.001
Densidad (kg/m ³)	207.5

Tabla 2.1. Características físicas empleadas en la simulación numérica de los lodos de aguas residuales (Dogru et al., 2001)⁵

Tamaño (m)	0.001
Densidad (kg/m ³)	1002

Tabla 2.2. Características físicas empleadas en la simulación numérica de las excretas (Comino et al., 2009)⁶

³ “Gasification of sewage sludge using a throated downdraft gasifier and uncertainty analysis”; Murat Dogru, Adnan Midilli, Colin R. Howarth; Fuel Processing Technology; Septiembre 2001; Pág. 3.

⁴ “Influence of manure types and pyrolysis conditions on the oxidation behavior of manure char”; Shou-Yu Zhang, Ruo-Yu Hong, Jing-Pei Cao, Takayuki Takarada; Bioresource Technology; Mayo 2009; Pág. 1.

⁵ “Gasification of sewage sludge using a throated downdraft gasifier and uncertainty analysis”; Murat Dogru, Adnan Midilli, Colin R. Howarth; Fuel Processing Technology; Septiembre 2001; Pág. 9.

2.5.3. Análisis aproximado (% en peso)

Materia volátil (%)	53.48
Carbono fijo (%)	11.27
Humedad (%)	11.75
Cenizas (%)	23.51
PCS (MJ/kg)	17.14

Tabla 2.3. Análisis aproximado empleado en la simulación numérica de lodos de aguas residuales (Dogru et al., 2009)⁷

Materia volátil (%)	60.52
Carbono fijo (%)	11.93
Humedad (%)	13.88
Cenizas (%)	13.67
PCS (MJ/kg)	14.950

Tabla 2.4. Análisis aproximado empleado en la simulación numérica de las excretas (Sweeten et al., 1985)⁸

2.5.4. Análisis último (% en peso)

C (%)	39.48
H (%)	6.19
O (%)	25.46
S (%)	1.45
N (%)	3.93
Cenizas (%)	23.51

Tabla 2.5. Análisis último empleado en la simulación numérica de los lodos de aguas residuales (Dogru et al., 2001)⁹

C (%)	39.09
H (%)	4.61
O (%)	26.67
S (%)	0.25
N (%)	2.31
Cenizas (%)	13.67

Tabla 2.6. Análisis último empleado en la simulación numérica de las excretas (Sweeten et al., 1985)¹⁰

⁶ "Investigation of increasing organic loading rate in the co-digestion of energy crops and cow manure mix"; Elena Comino, Maurizio Rosso, Vincenzo Riggio; Bioresource Technology; Enero 2009; Pág. 3.

⁷ "Gasification of sewage sludge using a throated downdraft gasifier and uncertainty analysis"; Murat Dogru, Adnan Midilli, Colin R. Howarth; Fuel Processing Technology; Septiembre 2001; Pág. 9.

⁸ "Combustion of cattle feedlot manure for energy production"; John M. Sweeten, Jacob Korenberg, Wayne A. LePori, K. Annamalai, Calvin B. Parnell; Energy in Agriculture; Agosto 1985; Pág. 5.

⁹ "Gasification of sewage sludge using a throated downdraft gasifier and uncertainty analysis"; Murat Dogru, Adnan Midilli, Colin R. Howarth; Fuel Processing Technology; Septiembre 2001; Pág. 9.

2.5.5. Principales contaminantes y sustancias peligrosas que pudieran estar presentes en lodos de aguas residuales y excretas.

Contaminantes	[µg/kg]	
Compuestos farmacéuticos	Carbamazepina	4.7 - 12.8
	Diclofenac	10.4 - 23.1
	Trimethoprim	13 - 133
	Claritomicina	1.6 - 63
	Ciprofloxacino	0.9 - 778
	Ofloxacina	0.1 - 510
	Triclosan	10 - 1508
	Sulfapiridina	24 - 197
	Sulfametoxazol	18 - 113
Estrógenos	E1	2 - 200
	E2	1 - 250
	αE2	< 250
	E3	272 - 406
	E1-3S	0.64 - 7
	E2-3S	0.64 - 7
	EE2	1 - 250
	E2-17A	< 375
	DES	184
Drogas ilícitas	Anfetaminas	5 - 300
	Meta-anfetaminas	4
Filtros UV	4-MBC	150 - 4980
	OMC	10 - 390
	OC	320 - 18740
	OT	27700
Retardantes de llama	PBDEs	197 - 58800
	595959PBDEs	142 - 2491
	deca-BDE	3.4 - 19000
	deBDeano	0.2 - 220
	HBCD	39 - 9120
	TBBPA	4.5 - 600
	HexaBBz	4.5 - 2468
	PentaBP	< 870

¹⁰ "Combustion of cattle feedlot manure for energy production"; John M. Sweeten, Jacob Korenberg, Wayne A. LePori, K. Annamalai, Calvin B. Parnell; Energy in Agriculture; Agosto 1985; Pág. 5.

Compuestos perfluorados	ΣPFAS	68 - 3370
	ΣPFOS	63 - 2900
	ΣPFCA	9 - 152
	ΣPFC	78 - 3390
	PFOA	0.7 - 19.7
	PFOS	4.8 - 100
	PFDS	20 - 130
	FOSA	< 20
	PFNA	0.4 - 10
	PFOSA	0.5 - 3.6
	PFDA	1.2 - 32
Tensioactivos	LAS	50 - 1507 mg/kg
	NPEO	12.8 - 233 mg/kg
	NP	1 - 215.5 mg/kg
	NPEC	27 - 113 mg/kg

Tabla 2.7. Análisis de contaminantes destacados presentes en lodos de aguas residuales (Díaz-Cruz et al., 2009)¹¹

Contaminantes		[mg/kg]
Metales	Cd	50
	Cr	1000
	Cu	800 - 1000
	Ni	100 - 200
	Pb	1000
	Zn	2000 - 2500

Tabla 2.8. Concentraciones máximas permitidas de metales pesados en lodos de aguas residuales para uso en agricultura propuesto por los EUA (Ortiz.Hernández, 1995)¹²

¹¹ "Analysis of selected emerging contaminants in sewage sludge"; M.S. Díaz-Cruz, M.J. García-Galán, P. Guerra, A. Jelic, C.Postigo, E. Eljarrat, M. Farré, M.J. López de Alda, M. Petrovic, D. Barceló; Trends in Analytical Chemistry; 2009; Pág. 4 y 5.

¹² "Propuesta de manejo de los lodos residuales de la planta de tratamiento de la ciudad industrial del valle de Cuernavaca"; M.L. Ortiz-Hernández, M.E. Gutiérrez-Ruiz, E. Sánchez-Salinas; Rev. Int. Contam. Ambient.; 1995; Pág. 9.

Contaminantes		[mg/kg]
Antibióticos	Sulfadimidina	20
	Clortetraciclina	0.1
	Ciprofloxacina	0.01
	Enrofloxacina	0.01

Tabla 2.9. Análisis de contaminantes destacados presentes en las excretas de ganado (Venglovsky et al., 2009)¹³

Cabe aclarar que para el caso de las excretas se pueden presentar además agentes patógenos como *Escherichia coli*, *Campylobacter jejuni*, *Yersinia enterocolitica* y *Clostridium perfringens*; sin embargo, estos permanecen en las excretas sólo en condiciones muy específicas de bajas temperaturas y en sitios confinados¹⁴, situaciones que se pueden eliminar al llevar a cabo una buena gestión en el manejo del ganado.

¹³ "Pathogens and antibiotic residues in animal manures and hygienic and ecological risks related to subsequent land application"; J. Venglovsky, N. Sasakova, I. Placha; Bioresource Technology; 2009; Pág. 4.

¹⁴ "Pathogens and antibiotic residues in animal manures and hygienic and ecological risks related to subsequent land application"; J. Venglovsky, N. Sasakova, I. Placha; Bioresource Technology; 2009; Pág. 2.

Capítulo III:

Modelo numérico

3.1. Modelo

El modelo numérico usado para simular la gasificación de biomasa se describe a continuación. El modelo numérico es resuelto usando un método CFD (Dinámica de Fluidos Computacional, por sus siglas en inglés). El comportamiento de las partículas de biomasa y gas en un flujo multi-fásico es descrito mediante un modelo Euleriano, el cual usa ecuaciones de conservación Eulerianas para ambas fases.

Los submodelos más importantes de química, aerodinámica, turbulencia, y detalles numéricos se presentan más adelante¹.

3.2. Ecuaciones de las fracciones volumétricas

Las fases sólida y gaseosa están representadas a través de su fracción volumétrica. Esta fracción volumétrica de cada fase r_i es obtenida a partir de la ecuación de conservación:

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

En donde $i = 1$ es para gas; $i = 2$ es para la partícula de los biomasa; ρ_i es la densidad de la fase; V_i es el vector de velocidad de la fase; Γ_{r_i} es un coeficiente de difusión; y $m_{j \rightarrow i}$ representa la transferencia de masa de la fase sólida hacia la fase gaseosa (por ejemplo, secado, volatilización y reacciones heterogéneas) por unidad de tiempo y por unidad de volumen. El último término en el lado izquierdo de la ecuación (1) contabiliza el efecto de la turbulencia en la dispersión de la partícula. Este se modela como se muestra más adelante.

Las fracciones volumétricas de cada fase se relacionan de acuerdo a la siguiente condición:

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

3.3. Ecuaciones de fase variable

La ecuación de conservación Euleriana para cualquier otra propiedad de la partícula o de gas (ϕ_i) es:

¹ "An Eulerian model for the simulation of an entrained flow coal gasifier"; William Vicente, Salvador Ochoa, Javier Aguillón, Esteban Barrios; Instituto de Ingeniería, Facultad de Ingeniería, UNAM; Applied Thermal Engineering ; Abril 2003; Pág. 3-10.

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho_i r_i \phi_i)}{\partial t} + \nabla(\rho_i r_i \phi_i V_i) - \nabla(\Gamma_{r_i} \phi_i \nabla r_i) - \nabla(\Gamma_{\phi_i} r_i \nabla \phi_i) \\ = S_{\phi_i} + \|m_{j \rightarrow i}\| \phi_+ - \|m_{i \rightarrow j}\| \phi_- + f_{j \rightarrow i}(\phi_j - \phi_i) \end{aligned} \quad (3)$$

Para la fase gaseosa, ecuaciones como (3), se resuelven para: las componentes de la velocidad, entalpía específica de la fase, fracciones másicas de todas las especies químicas de la fase gaseosa excepto una (la cual se obtiene de la diferencia entre la unidad y la suma resultante de todas las demás), energía cinética turbulenta y su tasa de disipación.

Ecuaciones como (3) son resueltas para las siguientes variables de la fase sólida de la biomasa: las componentes de velocidad, entalpía específica y fracciones másicas de todos los componentes de la fase sólida (carbono fijo, char y agua; la fracción másica de las cenizas se obtiene de la diferencia con la unidad) El tamaño promedio de la partícula local se calcula de una ecuación de transporte, como se describe después.

En la ecuación (3), ϕ_+ representa el valor de ϕ en la fracción másica ($m_{j \rightarrow i}$) proveniente de la fase j hacia la fase i ; ϕ_- tiene un significado similar. La doble barra ($\| \|$) es un operador, el cual toma el valor máximo entre cero y la cantidad que se encuentra dentro de la doble barra, y $f_{i \rightarrow j}$ representa un coeficiente de fricción para el transporte difusivo de ϕ entre fases. Para ecuaciones de momento, $f_{i \rightarrow j}$ representa el arrastre en la partícula; y para las ecuaciones de entalpía, la transferencia de calor entre fases. Finalmente, S_{ϕ_i} representa otras (sin inter-fases) fuentes, por ejemplo los gradientes de presión en las ecuaciones de momento.

Aparecen dos términos difusivos en (3); el primer término $\nabla(\Gamma_{r_i} \phi_i \nabla r_i)$ es el transporte de ϕ_i debido a la difusión turbulenta de r_i en la ecuación (1). El segundo término $\nabla(\Gamma_{\phi_i} r_i \nabla \phi_i)$, es la fase turbulenta de difusión inherente de ϕ_i , y se encuentra presente sólo en la fase gaseosa. Este término es modelado de la misma manera como en los casos de fase sencilla, por ejemplo, del modelado de la correlación $\overline{V' \phi'}$ (entre velocidad fluctuante y las propiedades fluctuantes)².

3.4. Componentes de la partícula de biomasa

Se considera que las partículas de biomasa están compuestas por cuatro componentes: carbono fijo, agua, char y cenizas. Las composiciones de las partículas se encuentran mediante la solución de las ecuaciones como (3), las cuales son calculadas en cualquier momento para fracciones másicas de los componentes de la partícula (y_p^{char} , $y_p^{carbón\ crudo}$, y_p^{agua}). La fracción másica de las cenizas se calcula del siguiente modo:

$$y^{cenizas} = 1 - y_p^{char} - y_p^{carbón\ fijo} - y_p^{agua} \quad (4)$$

² "An Eulerian model for the simulation of an entrained flow coal gasifier"; William Vicente, Salvador Ochoa, Javier Aguillón, Esteban Barrios; Instituto de Ingeniería, Facultad de Ingeniería, UNAM; Applied Thermal Engineering ; Abril 2003; Pág. 3-10.

Los procesos relacionados con la fase sólida son generalmente: secado, volatilización del carbono fijo y reacciones heterogéneas del char. Los procesos de la fase sólida son modelados más adelante.

3.5. Secado de la partícula

Para el secado de la partícula se asume que, cuando la partícula contiene agua, toda la transferencia de calor proveniente de la fase gaseosa es usada como calor latente de vaporización. La transferencia de masa asociada a este proceso es:

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

En donde L es el calor latente de vaporización del agua, y $q_{1 \rightarrow 2}$ representa la transferencia de calor de la fase gaseosa a la fase sólida.

3.6. Volatilización

En el proceso de volatilización del carbono fijo, se considera que éste es consumido para formar char en la fase sólida y materia volátil en la fase gaseosa. Este proceso es modelado por la siguiente reacción:

$$1 \text{ kg}_{\text{carbono fijo}} = Y \text{ kg}_{\text{volátiles}} + (1 - Y) \text{ kg}_{\text{carbón vegetal}} \quad (6)$$

La materia volátil se considera que es un hidrocarburo general (CH_x). En CH_x , el coeficiente “ x ” representa el índice carbono/hidrógeno en el volátil, y es calculado a partir del análisis físico-químico de la biomasa (análisis aproximado y último). El análisis aproximado da como resultado la separación entre el carbón vegetal y los volátiles dentro de la partícula, y el análisis último da como resultado la composición elemental de la partícula de biomasa. La tasa de reacción de (6) se modela de la siguiente manera:

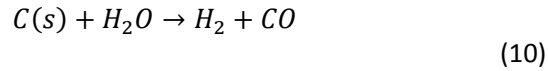
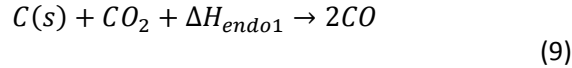
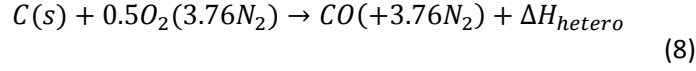
$$\dot{m}_{\text{volatilización}} = -A_v Y r_1 \rho_2 y_2^{\text{biomasa}} e^{-\frac{E_v}{RT_2}} \quad (7)$$

En donde A_v es un factor pre-exponencial, E_v es la energía de activación; y R es la constante universal de los gases. Las constantes A_v y E_v son constantes cinéticas, dependiendo de cada tipo de biomasa. Los valores de estas constantes pueden ser obtenidos de la literatura³.

³ “Experimental investigation and modeling of gasification of sewage sludge in the circulating fluidized bed”; I. Petersen, J. Werther; Technical University Hamburg-Harburg, Germany; Chemical Engineering and Processing; Octubre 2004.

3.7. Reacción heterogénea

El carbón vegetal producido a través del proceso de volatilización es consumido por las reacciones heterogéneas de combustión y gasificación. Las reacciones heterogéneas son modeladas de acuerdo a las siguientes ecuaciones:



El CO e H₂ resultantes de las reacciones (8) – (10) son incorporados a la fase gaseosa, y si las condiciones estequiométricas lo permiten, estos son oxidados a CO₂ y H₂O respectivamente, por medio de reacciones homogéneas.

El orden aparente de las reacciones (8) – (10) es 0.5 y es calculado como sigue:

$$\dot{m}_{hetero} = \frac{6r_2k_c}{2Dk_d} \left[-k_c + (k_c^2 + 4k_d^2 p_i)^{\frac{1}{2}} \right] \quad (11)$$

En donde D es el diámetro de la partícula, p_i es la presión parcial de O₂, CO₂ y H₂O, y k_c y k_d son las tasas cinética y de difusión respectivamente. Los valores de k_c y k_d son calculados con las siguientes expresiones:

$$k_c = A_h e^{-\frac{E_h}{RT_2}} \quad (12)$$

$$k_d = \frac{ShD_k M_c}{RT_1 D} \quad (13)$$

En donde Sh es el número de Sherwood, D_i el coeficiente de difusión para O₂, CO₂ y H₂O, y M_c es el peso molecular del carbón. Los coeficientes en las reacciones (8) – (10) son tomados de Smoot y Smith, Smith, y Mann y Kent.

3.8. Tamaño de la partícula

A lo largo de los procesos de combustión/gasificación, el tamaño de la partícula cambia. El tamaño de la partícula es resuelto mediante el uso de un método desarrollado por Fueyo et al., el cual es una extensión del método de sombra desarrollado por Spalding. Un escalar adicional de la fase sólida ϕ_s es usado en el presente método, el cual representa el inverso de la fracción del sólido que desaparece debido a la transferencia de masa. A diferencia del método original, el presente

Capítulo III

método permite la selección del proceso de transferencia de masa lo cual contribuye a los cambios de tamaño de la partícula. La variable ϕ_s es calculada a partir de la ecuación de transporte:

$$\frac{\partial(\rho_2 r_2 \phi_s)}{\partial t} + \nabla(\rho_2 r_2 \phi_s V_2) - \nabla(\Gamma_{r_2} \phi_i \nabla r_2) = S_{\phi_s} \quad (14)$$

La ecuación (11) incluye cada fuente asociada a la fase de partícula, en todos los procesos en los cuales no se favorece el cambio en el tamaño. En este trabajo, sólo las reacciones heterogéneas son consideradas para procesos de transferencia de masa, a favor de la disminución en el tamaño de la partícula.

Una vez calculada la variable ϕ_s , el diámetro promedio local se determina mediante:

$$D = D_i \phi_s^{-\frac{1}{3}} \quad (15)$$

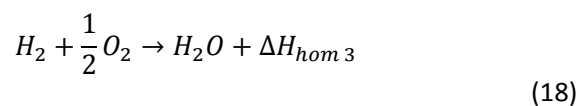
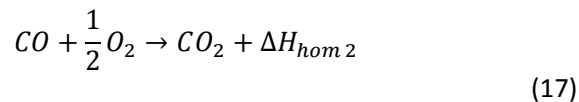
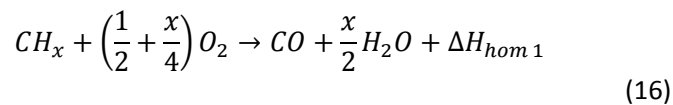
En donde D_i es el diámetro promedio de entrada.

3.9. Componentes del gas

La fase gaseosa es modelada como una mezcla de siete especies químicas, representadas por sus fracciones másicas como sigue: 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 ($y_1^{N_2}$). Las ecuaciones de transporte como (3), son resueltas para todas las especies excepto para el nitrógeno ($y_1^{N_2}$), el cual es calculado partiendo del hecho que la suma de todas las fracciones másicas es igual a uno.

Cabe hacer mención que en el presente modelo, las reacciones con azufre no son tomadas en cuenta. Este elemento se considera como químicamente inerte, y pasa directamente a formar parte de las cenizas.

La combustión de los volátiles, producto del proceso de volatilización, se asume que sigue las siguientes reacciones:



En donde ΔH_{hom2} es 23.59 MJ/kg, ΔH_{hom3} es 120.9 MJ/kg y ΔH_{hom1} se calcula como:

Capítulo III

$$\Delta H_{hom1} = \frac{PCI}{[(1 - y_2^{agua}) - (y_c^{carbón\ vegetal}) (\Delta H_{hetero} + \Delta H_{hom2})] (y_c^{volátiles})} \quad (19)$$

En donde PCI es el poder calorífico inferior del carbón, y_1^{agua} es la fracción másica correspondiente al agua en la partícula de carbón, $y_1^{carbón\ vegetal}$ es la fracción másica de carbono (C) en la reacción carbón a carbón vegetal, y $y_1^{volátiles}$ es la fracción másica de carbono que se convierte en volátiles. Las tasas de reacción química de (16) – (18) son calculadas de:

$$\dot{k} = \min(k_{Ar}, \dot{k}_{EBU}) \quad (20)$$

En donde k_{Ar} y k_{EBU} son las tasas cinética y turbulenta de mezclado, y k_{EBU} se calcula con el modelo EBU (Eddy Break-up, por sus siglas en inglés):

$$k_{EBU} = C_{EBU} \frac{\varepsilon}{k} \min\left(\frac{y_1^i}{S_i}, \frac{y_1^j}{S_j}\right) \quad (21)$$

En donde y_1^i y y_1^j son las dos fracciones másicas de las especies que participan en la reacción de paso, S_i y S_j son los coeficientes estequiométricos asociados, k y ε son la energía cinética turbulenta y la tasa de disipación respectivamente. El término k_{Ar} se determina de la siguiente manera:

$$k_{Ar} = A\rho_1 e^{-\frac{E}{RT_1}} \quad (22)$$

Los procesos entre partícula y gas son modelados a continuación:

3.10. Transferencia de calor entre la fase sólida y la fase gaseosa

La tasa de flujo de calor en la inter-fase sólido-gas se modela:

$$q_{j \rightarrow i} = 6 \frac{r_2}{D^2} \rho_1 Nu k_1 (T_j - T_i) \quad (23)$$

En donde k_1 es la conductividad térmica del gas, y Nu es el número de Nusselt, el cual es calculado como⁴:

$$Nu = 2.0 + 0.65 Re^{\frac{1}{2}} Pr^{\frac{1}{3}} \quad (24)$$

⁴ "An Eulerian model for the simulation of an entrained flow coal gasifier"; William Vicente, Salvador Ochoa, Javier Aguillón, Esteban Barrios; Instituto de Ingeniería, Facultad de Ingeniería, UNAM; Applied Thermal Engineering ; Abril 2003; Pág. 3-10.

En donde Re y Pr son los números de Reynolds y Prandtl para la fase gaseosa, respectivamente.

3.11. Fuerza de arrastre entre la partícula y el gas

La fuerza de arrastre en la inter-fase sólido-gas es modelada como sigue:

$$f_{i \rightarrow j} = f_{j \rightarrow i} = \frac{3r_2}{4D} \rho_1 C_d |V_r| \quad (25)$$

En donde $|V_r|$ es la velocidad relativa entre el gas y la partícula, y C_d es el coeficiente de arrastre, calculado de la siguiente manera:

$$C_d = \frac{24(1 + 0.15Re^{0.687})}{Re} \quad (26)$$

3.12. Modelo turbulento

El flujo turbulento es modelado usando el modelo estándar $k - \varepsilon$ (en el apéndice A se presentan este y otros modelos de turbulencia con más detalle). La viscosidad turbulenta v_T es calculada en este modelo como sigue⁵:

$$v_T = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (27)$$

En donde C_μ es una constante, k y ε son la energía cinética turbulenta y la tasa de disipación respectivamente. Los valores de k y ε son calculados de las ecuaciones de transporte. Las ecuaciones de momento turbulento resultan como se muestra a continuación:

$$\frac{\partial k}{\partial t} + u_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = (P_k - \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial j} \left(\frac{v_T}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) \quad (28)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + u_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} = \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial j} \left(\frac{v_T}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) \quad (29)$$

En donde:

⁵ "An Eulerian model for the simulation of an entrained flow coal gasifier"; William Vicente, Salvador Ochoa, Javier Aguillón, Esteban Barrios; Instituto de Ingeniería, Facultad de Ingeniería, UNAM; Applied Thermal Engineering ; Abril 2003; Pág. 3-10.

Capítulo III

$$P_k = v_T \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \left(k + v_T \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \quad (30)$$

Las constantes de las ecuaciones (28) – (30) se muestran en la *tabla 1*. Las variables k y ε son para fases de gas y son calculadas con el uso de los gradientes de velocidad. El efecto de turbulencia en las partículas se muestra en la siguiente sección.

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

Tabla 12. Constantes del modelo $k - \varepsilon$ estándar

3.13. Dispersión turbulenta de las partículas

Las partículas son dispersadas por fluctuaciones turbulentas en el campo de flujo. Desde un punto de vista matemático, esta dispersión es el resultado de la correlación $\overline{r_2'V_2'}$. En este modelo, el modelo de gradiente-difusión es usado de la siguiente manera:

$$\overline{r_2'V_2'} = \frac{v_t}{\sigma_{r_2}} \nabla r_2 \quad (31)$$

En donde σ_{r_2} se calcula de acuerdo con Rizk y Elgobashi.

$$\sigma_{r_2} = \left[1 + \frac{3}{2} 0.85 \frac{|V_r|^2}{k} \right]^{0.5} \quad (32)$$

3.14. El uso de otras ecuaciones

Muchas de las ecuaciones previas deben ser completadas con ecuaciones de estado, presión relativa, densidad, temperatura y capacidades térmicas específicas. Para la densidad de la fase gaseosa, se asume una mezcla de gas ideal:

$$\rho = \frac{p}{RT \sum_{k=1}^n \frac{y_k}{W_k}} \quad (33)$$

En donde p se refiere a la presión del gas, T es la temperatura promedio de la mezcla, y_k y W_k son las fracciones másicas y el peso molecular para cada especie en la fase gaseosa respectivamente.

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

$$h = \int_{T_0}^T C p_k dT + \Delta h_{f,k}$$

(34)

En donde T^0 es la temperatura de referencia, Cp_k es el calor específico a presión constante para la k-ésima especie, y $\Delta h_{f,k}$ es la entalpía de formación para la k-ésima especie, definida como el calor liberado cuando un kmol de sustancia es alcanzado proveniente de sus elementos originales en el estado estándar. Ambos, la densidad y el calor específico se asumen como constantes; y la temperatura se determina a partir de su entalpía⁶.

⁶ "An Eulerian model for the simulation of an entrained flow coal gasifier"; William Vicente, Salvador Ochoa, Javier Aguillón, Esteban Barrios; Instituto de Ingeniería, Facultad de Ingeniería, UNAM; Applied Thermal Engineering ; Abril 2003; Pág. 3-10.

Capítulo IV:

Resultados

En este capítulo se muestran los resultados obtenidos mediante la simulación numérica y se comparan con los resultados obtenidos en el laboratorio mediante la cromatografía de un gas de síntesis estándar, y posteriormente realizar un análisis de sensibilidad para encontrar posibles rangos de operación.

4.1. Mezcla estándar

Con el fin de estudiar el comportamiento de la muestra patrón del gas de síntesis en el cromatógrafo de gases, se solicitó antes a una empresa especialista en gases realizar la composición de una mezcla que representará la composición del gas de síntesis obtenido cuando se diseñó el gasificador (Certificado expedido el 24/07/2007 con No. de folio 5204, INFRA, S.A. de C.V.). A continuación se transcriben los datos en fracciones volumétricas de dicho certificado

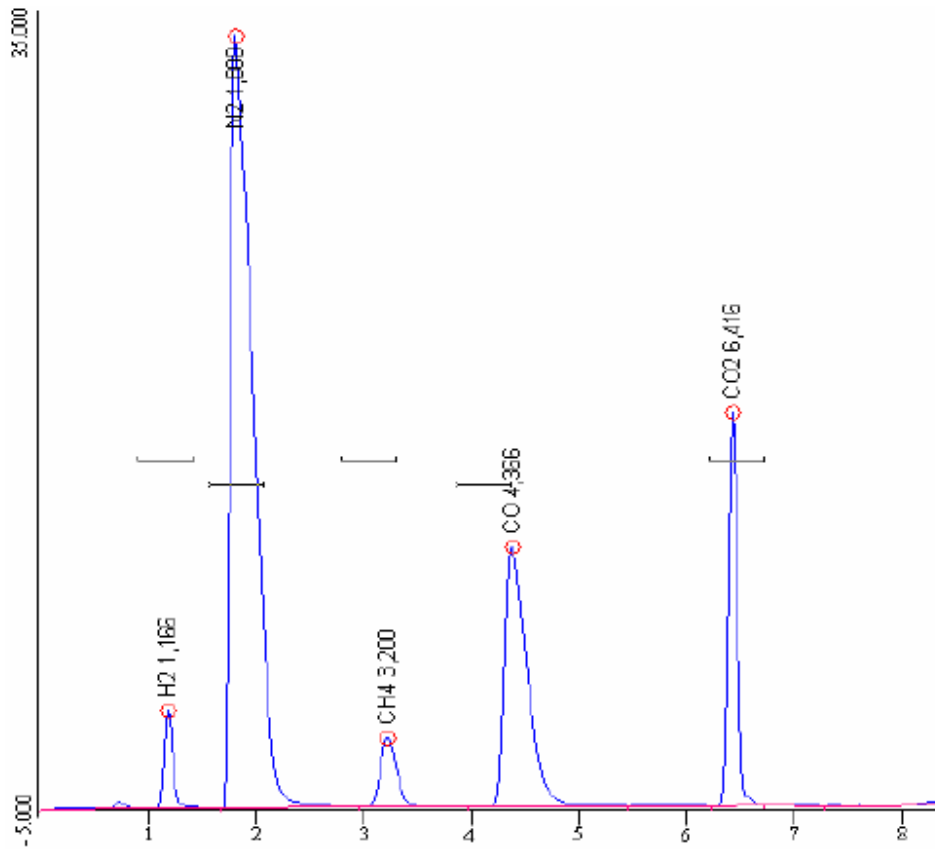
Componentes (mensurado)	Especificación	Incertidumbre
Monóxido de carbono (CO)	20.0 cmol/mol	±1.0 %
Dióxido de carbono (CO ₂)	11.1 cmol/mol	±1.0 %
Metano (CH ₄)	4.9 cmol/mol	±0.5 %
Hidrógeno (H ₂)	12.0 cmol/mol	±1.0 %
Nitrógeno (N ₂)	Balance	

Tabla 4.1. Datos transcritos del certificado expedido por la empresa INFRA, en fracciones volumétricas.

Cabe aclarar que el valor mostrado en la especificación del H₂ en la tabla anterior difiere con los mostrados a continuación en la *figura 4.1* debido a que el cromatógrafo de gases BUCK 910™ no es capaz de detectar en su totalidad la concentración de esta especie debido a que el H₂ para ser detectado debe encontrarse a baja temperatura (cercana a los 5°C). Es por ello que los datos arrojados al realizar la lectura de H₂ por el cromatógrafo de gases, deben ser multiplicados por un factor (aproximadamente de 4) para obtener el resultado final.

Las comparaciones mostradas en esta tesis entre el cromatograma base de la mezcla estándar y los obtenidos por la simulación no son multiplicados por el factor antes mencionado.

Los resultados del cromatograma base se muestran a continuación en la *figura 4.1*:



Rampa 6				
Componente	Tiempo de Retención (°C)	Área (mV)	% Área	Temperatura (°C)
H2	1,166	23,082	2,9632	25
N2	1,8	461,416	59,236	25
CH4	3,2	31,2935	4,0174	44
CO	4,366	165,866	21,2937	63
CO2	6,416	97,288	12,4897	90

Figura 4.1. Cromatograma base y composición de la muestra patrón del gas de síntesis, en fracciones volumétricas.

En la *tabla 4.2* se presentan las principales condiciones iniciales que se emplearon en la simulación, para así obtener las figuras que se muestran durante el desarrollo del presente capítulo:

P_i	1.7 [atm]
$\dot{m}_{biomasa}$	30 [kg/h]
$\phi_{particula\ inicial}$	0.001 [m]
T_i	400 [K]
Relación aire combustible	0.65

Tabla 4.2. Principales condiciones iniciales empleadas en la simulación

Antes de mostrar las distribuciones de las especies presentes en el gas de síntesis, es conveniente también mostrar la distribución de los vectores de velocidad arrojado por la simulación, de modo que se pueda ilustra la dirección que sigue el flujo:

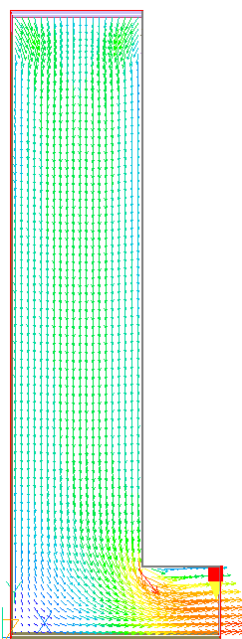


Figura 4.2. Distribución de los vectores de velocidad

Como se puede observar en la *figura 4.2*, el flujo de la biomasa y el aire es concurrente desde la parte superior hacia la inferior. El aire entra por las paredes laterales, cerca de la entrada.

Es importante aclarar antes que las fracciones arrojadas por la simulación numérica son másicas; por lo que para poder compararlas con el cromatograma de la mezcla estándar, cuyos valores están en fracciones volumétricas, es necesario homologarlas en fracciones volumétricas, en temperatura y sin humedad (H₂O).

Capítulo IV

A continuación se detalla la manera en que se homologaron los datos, primero en fracciones volumétricas después quitando la humedad (H₂O) y finalmente en temperatura, de modo que se pueda realizar una comparación entre ellos. La tabla 4.3 muestra sólo los datos de las excretas; sin embargo, de manera paralela se realizaron estos mismos cálculos para los lodos.

Primero se calculó la densidad del gas mediante la ecuación general del gas ideal, debido a que a estas temperaturas y presiones la variación no es significativa. Los resultados se muestran a continuación:

Temperatura del gas en la salida del gasificador		°C	900				
Presión manométrica del gas		bar	1.70				
Componente		Fracción	Peso molecular (kg/kmol)	Densidad (kg/m ³)	m _i (kg/h)	N _i (kmol/h)	
1	CO ₂	0.1909	44	1.234	0.9563	0.0217	
2	CO	0.2449	28	0.785	1.2268	0.0438	
3	H ₂	0.0102	2	0.056	0.0511	0.0255	
4	CH ₄	0.1496	16	0.449	0.7494	0.0468	
5	N ₂	0.29	28	0.785	1.4552	0.0520	
6	H ₂ O	0.1139	18	0.505	0.5706	0.0317	
Mezcla		Gas	1.00	27.855	0.634	5.0094	0.2216

Tabla 4.3. Cálculo de la densidad del gas de síntesis.

La masa de la mezcla se calculó mediante el flujo másico arrojado por la simulación numérica, el cual para estas condiciones es de 7.9 [m³/h] (lodos 9.7 [m³/h]), que al multiplicarlo por la densidad de la mezcla 0.634 [kg/m³] (lodos 0.604 [kg/m³]) se obtiene 5.0094 [kg/h] (lodos 5.8392 [kg/h]). Con este valor es posible obtener las fracciones de masa de cada especie m_i , que al multiplicarlas por el peso molecular de cada especie obtenemos la fracción molar de cada especie N_i . Finalmente al dividir la masa de la mezcla m_m entre el número de moles de la mezcla N_m se obtiene la masa molar de la mezcla M_m que para el caso de las excretas es 22.61 [kg/kmol]. Para los lodos es 21.53 [kg/kmol].

Las masa molar de cada especie M_i se divide entre M_m para obtener la tabla 4.4:

	H ₂	N ₂	CH ₄	CO	CO ₂	H ₂ O
Excretas M_i/M_m	0.09	1.24	0.71	1.24	1.95	0.80
Lodos M_i/M_m	0.09	1.30	0.74	1.30	2.04	0.84

Tabla 4.4. Cálculo de M_i/M_m para excretas y lodos

Los valores de la tabla 4.5, que son los valores de las fracciones másicas de cada especie arrojados por la simulación numéricas,

	H ₂ (fm _i)	N ₂ (fm _i)	CH ₄ (fm _i)	CO (fm _i)	CO ₂ (fm _i)	H ₂ O (fm _i)
Excretas	1.02	29.05	14.96	24.49	19.09	11.39
Lodos	1.28	32.80	17.37	28.00	11.98	8.57

Tabla 4.5. Fracciones másicas arrojadas por la simulación numérica.

Capítulo IV

Se dividen entre los valores de la tabla 4.4. como lo establecen las ecuaciones (1) y (2) ¹ para obtener las fracciones volumétricas $\frac{V_i}{V_m}$:

$$\frac{V_i}{V_m} = y_i \quad (1)$$

$$fm_i = y_i \frac{M_i}{M_m} \quad (2)$$

De modo que se obtiene la tabla 4.6,

	H ₂ (y _i)	N ₂ (y _i)	CH ₄ (y _i)	CO (y _i)	CO ₂ (y _i)	H ₂ O (y _i)
Excretas	11.48	23.45	21.14	19.77	9.81	14.31
Lodos	13.78	25.22	23.37	21.53	5.86	10.25

Tabla 4.6. Fracciones volumétricas sin correcciones por temperatura y humedad.

Como se mencionó antes, es necesario homologar por humedad y temperatura los resultados obtenidos para poder compararlos con los datos del cromatograma base. Por lo anterior, la humedad se elimina al dividir los valores de excretas y lodos de la tabla 4.6 entre 0.8569 y 0.8975, respectivamente, que son las fracciones de agua de cada combustible. La corrección por temperatura se obtiene al multiplicar por 0.3856 que es la relación entre la temperatura ambiente y la temperatura de salida del gas de síntesis.

Dicho lo anterior, se obtienen dichas correcciones en la tabla 4.7:

	H ₂ (y _i)	N ₂ (y _i)	CH ₄ (y _i)	CO (y _i)	CO ₂ (y _i)	H ₂ O (y _i)
Excretas H ₂ O	13.40	27.37	24.67	23.07	11.45	0.00
Excretas T	5.17	10.55	9.51	8.90	4.41	0.00
Lodos H ₂ O	15.35	28.10	26.04	23.98	6.53	0.00
Lodos T	5.92	10.83	10.04	9.25	2.52	0.00

Tabla 4.7. Fracciones volumétricas con correcciones por humedad y temperatura.

Una vez hechas dichas correcciones, se muestra a continuación la distribución, arrojada por la simulación numérica, de cada una de las especies presentes en el gas de síntesis y se comparan con la mezcla estándar.

¹ "Termodinámica"; Yunus A. Çengel, Michael A. Boles; Julio 2007; Pág. 682 y 685.

4.2. H₂, excretas y lodos [%].

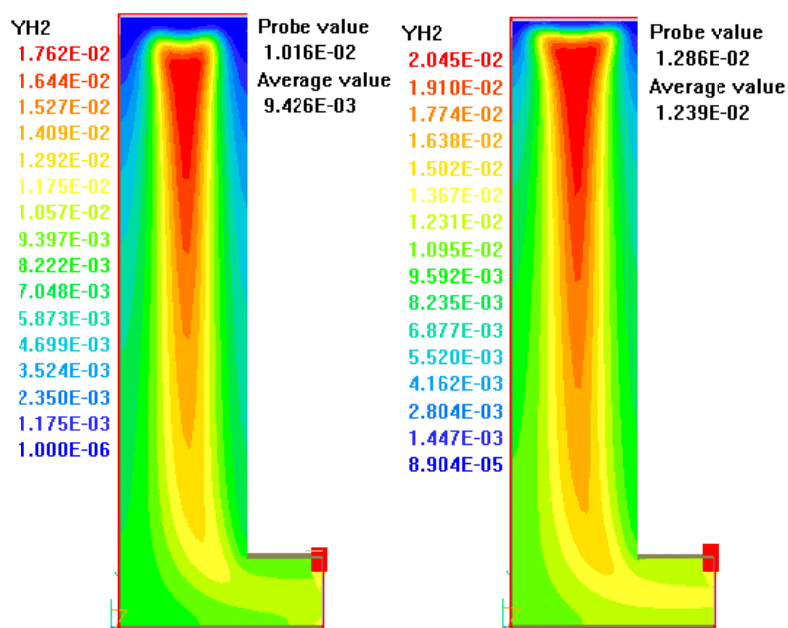


Figura 4.3. Distribución de H₂ a partir de excretas (izquierda) y lodos (derecha), en fracción másica.

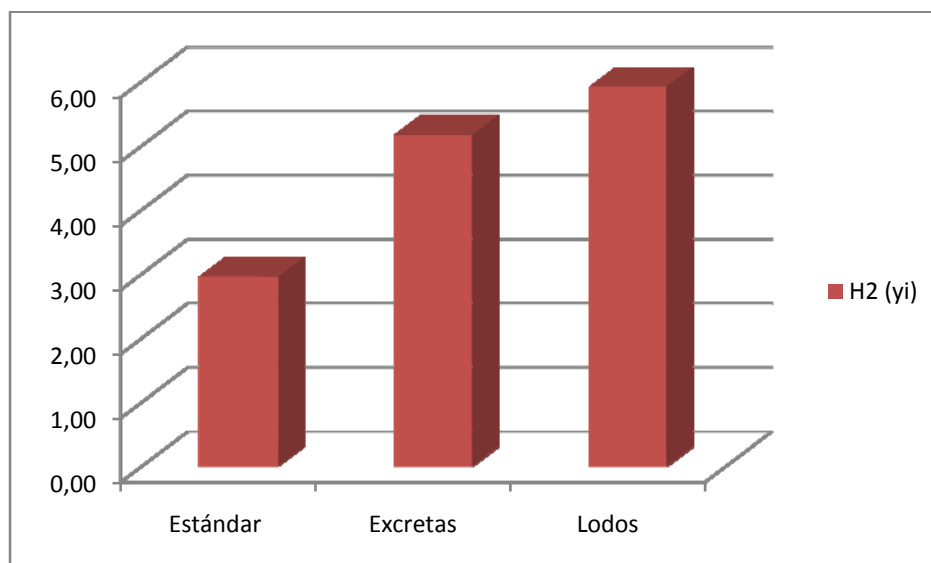


Figura 4.4. Comparación del H₂ con la mezcla estándar, en fracción volumétrica.

La cantidad de H₂ presente a partir de las excretas y lodos, es entre ellas similar, y ambas son casi el doble de lo que en la cromatografía se obtuvo, cuestión que es bastante satisfactoria ya que el H₂ es junto con el CO y CH₄ las principales especies que proporcionan al gas de síntesis su calidad energética.

4.3. N₂, excretas y lodos [%].

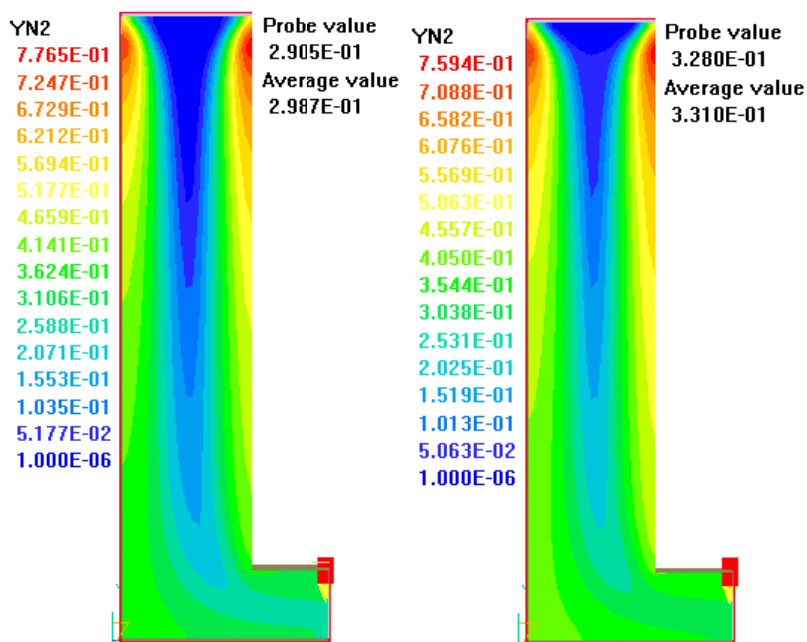


Figura 4.5. Distribución de N₂ a partir de excretas (izquierda) y lodos (derecha), en fracción másica.

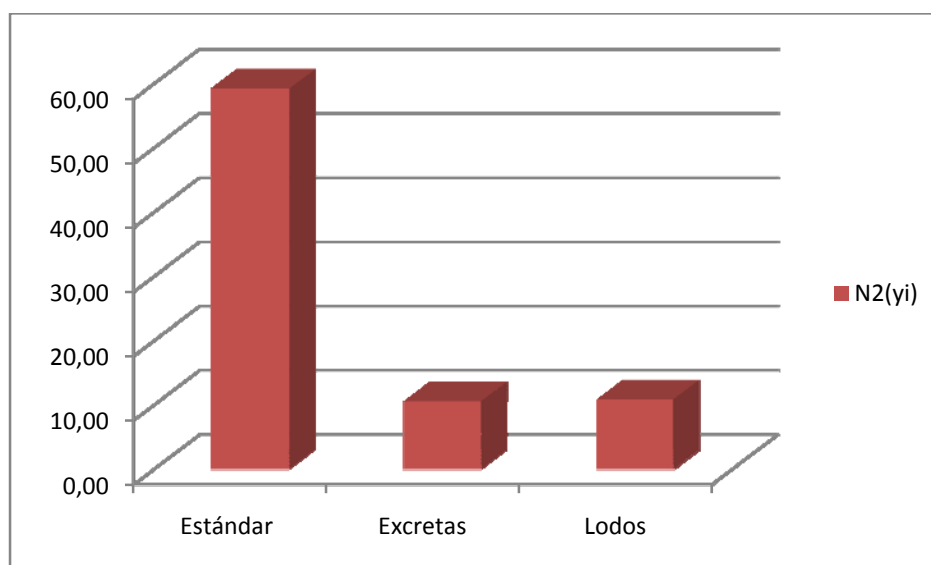


Figura 4.6. Comparación del N₂ con la mezcla estándar, en fracción volumétrica.

La cantidad de N₂ presente a partir de las excretas y lodos, es entre ellas similar, y ambas son casi 5.5 veces menor que la mezcla estándar. Este comportamiento en parte es debido a la producción de NO_x; sin embargo, principalmente se puede deber a las limitaciones del modelo numérico al alimentarlo con constantes encontradas en la literatura y al número bajo de reacciones. Es por ello que este modelo deberá ser alimentado en un futuro con datos obtenidos de la experimentación.

4.4. CH₄, excretas y lodos [%].

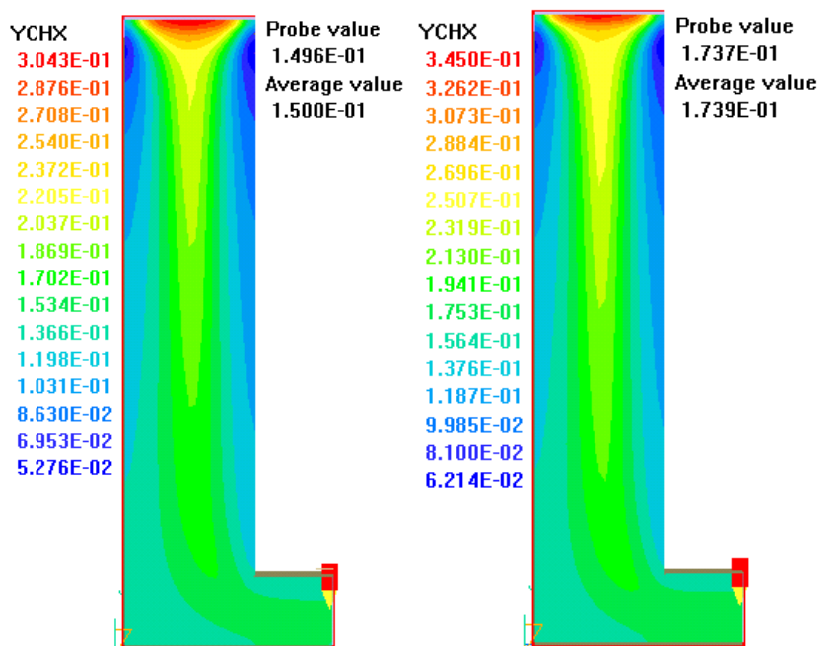


Figura 4.7. Distribución de CH₄ a partir de excretas (izquierda) y lodos (derecha), en fracción másica.

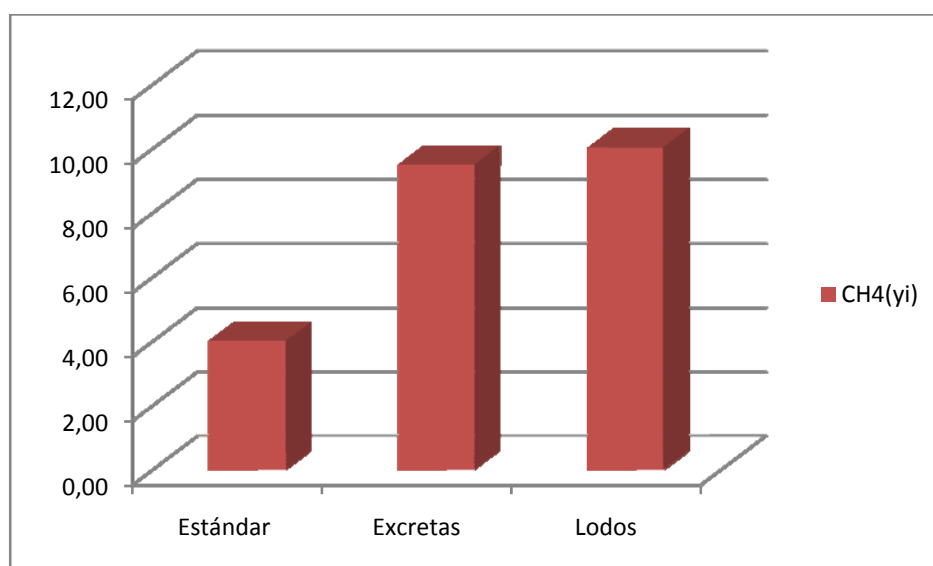


Figura 4.8. Comparación del CH₄ con la mezcla estándar, en fracción volumétrica.

La presencia de CH₄ obtenida a partir tanto de excretas como en lodos es muy similar entre ellas y aproximadamente 2 veces superior a la mezcla estándar. De manera similar al comportamiento del H₂, la cantidad de CH₄ a partir tanto de lodos como de excretas es muy satisfactoria ya que como se mencionó antes, esta especie proporciona al gas de síntesis sus cualidades energéticas para poderse usar como combustible.

4.5. CO, excretas y lodos [%].

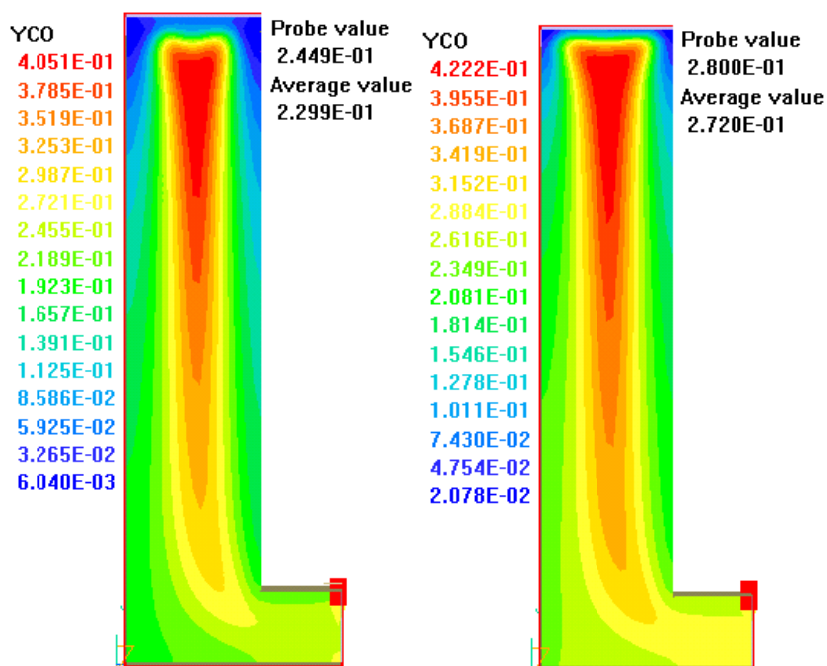


Figura 4.9. Distribución de CO a partir de excretas (izquierda) y lodos (derecha), en fracción másica.

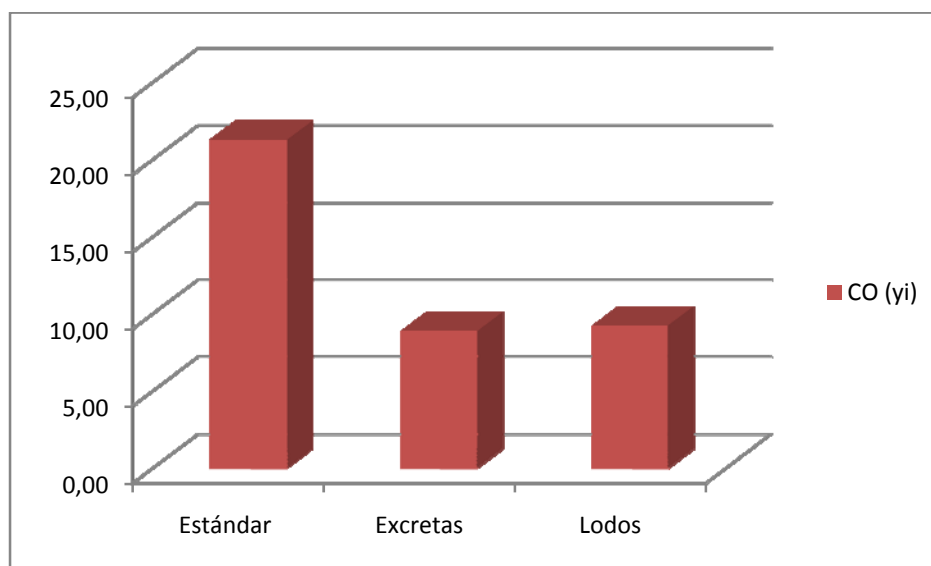


Figura 4.10. Comparación del CO con la mezcla estándar, en fracción volumétrica.

La cantidad de CO presente a partir de las excretas y lodos, es entre ellas similar, y ambas son casi 2.3 veces menor que la mezcla estándar. Este comportamiento se puede deber, al igual que en el N₂, a las limitaciones del modelo numérico al alimentarlo con constantes encontradas en la literatura y al número bajo de reacciones. Es por ello que este modelo deberá ser alimentado en un futuro con datos obtenidos de la experimentación.

4.6. CO₂, excretas y lodos [%].

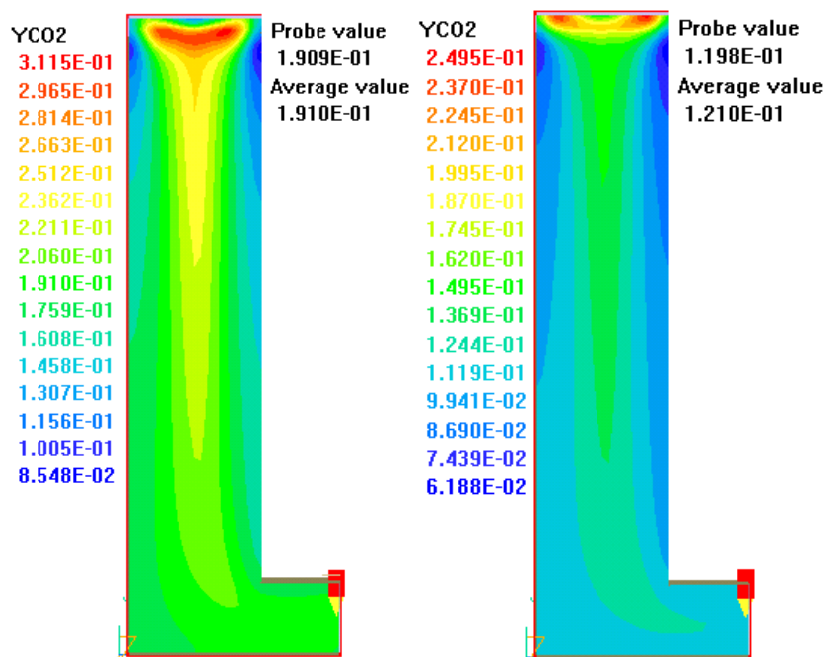


Figura 4.11. Distribución de CO₂ a partir de excretas (izquierda) y lodos (derecha), fracción másica.

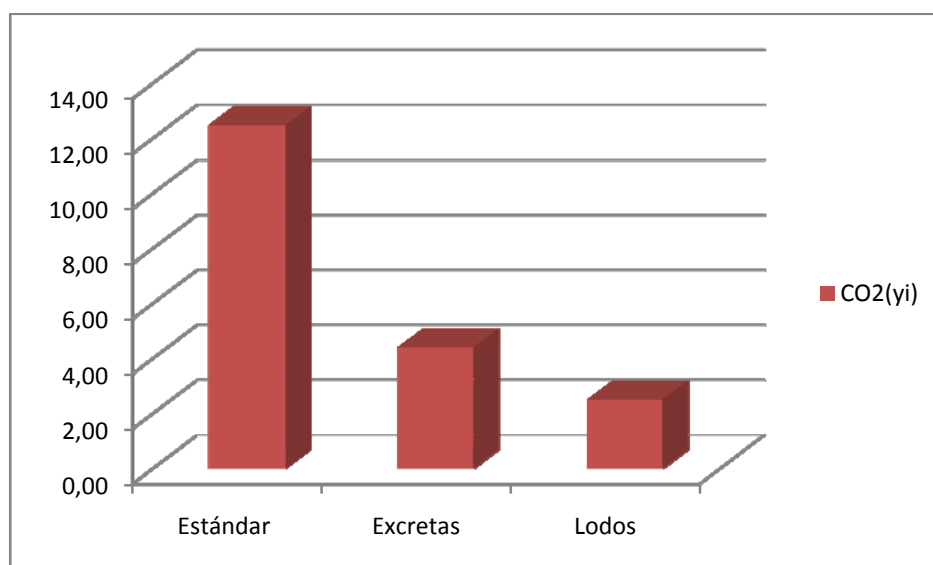


Figura 4.12. Comparación del CO₂ con la mezcla estándar, fracción volumétrica.

La cantidad de CO₂ presente a partir de las excretas y lodos, es casi 2.8 y 4.9 veces, respectivamente, menor que la mezcla estándar. Este comportamiento se puede deber, al igual que en el N₂, a las limitaciones del modelo numérico al alimentarlo con constantes encontradas en la literatura y al número bajo de reacciones. Es por ello que este modelo deberá ser alimentado en un futuro con datos obtenidos de la experimentación.

4.7. Mezcla estándar VS Combustibles

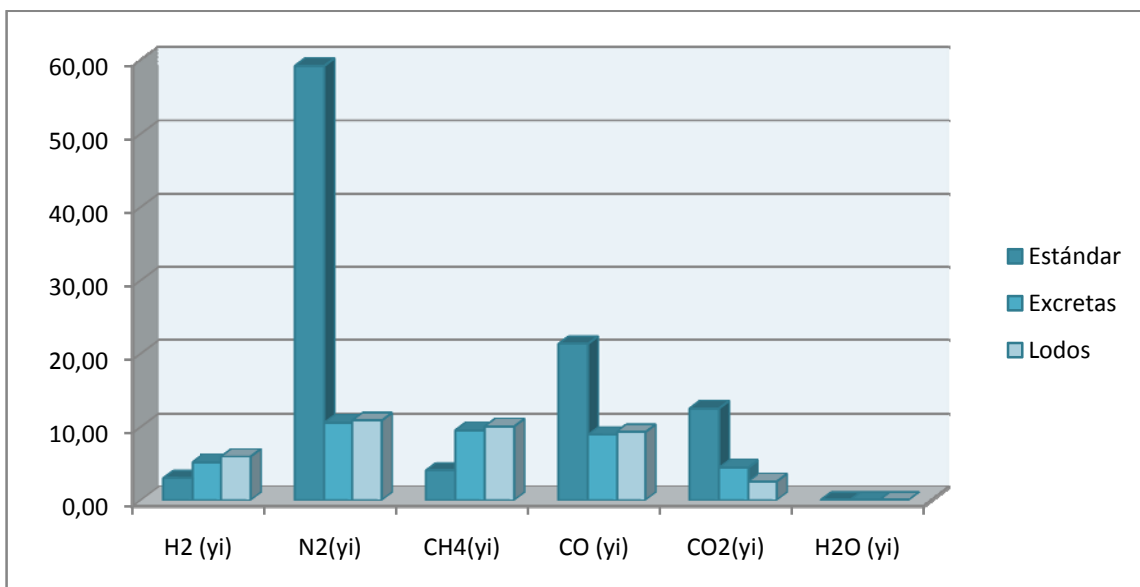


Figura 4.13. Comparación de las especies químicas con las de la mezcla estándar, en fracciones volumétricas.

	H ₂ (y _i)	N ₂ (y _i)	CH ₄ (y _i)	CO (y _i)	CO ₂ (y _i)	H ₂ O (y _i)
Estándar	2.96	59.24	4.02	21.29	12.49	0.00
Excretas	5.17	10.55	9.51	8.90	4.41	0.00
Lodos	5.92	10.83	10.04	9.25	2.52	0.00

Tabla 4.8. Comparación de las especies químicas con las de la mezcla estándar.

A continuación se muestran las distribuciones de tamaño de partícula, temperatura y velocidad del gas durante la simulación. Estos resultados nos indican que el fenómeno de gasificación se está llevando a cabo correctamente como se explica en las figuras 4.14, 4.15 y 4.16:

4.8. Tamaño de partícula, excretas y lodos [m]

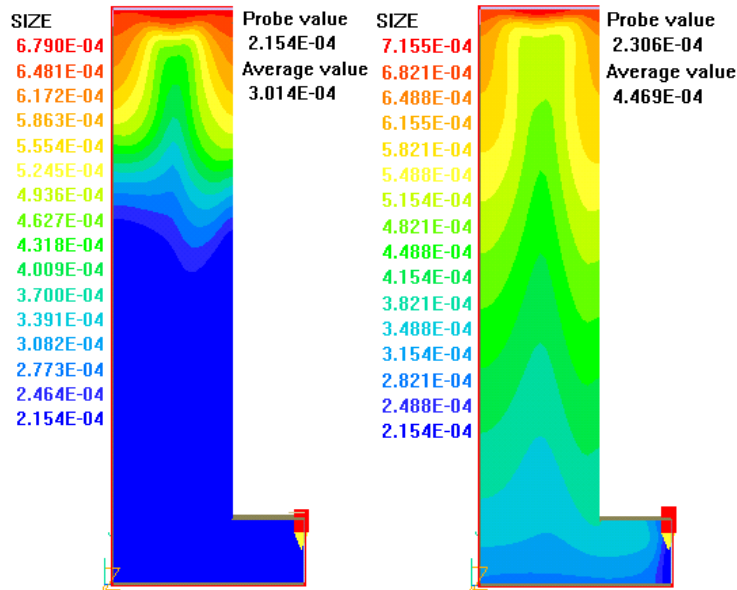


Figura 4.14. Distribución del tamaño de la partícula a partir de excretas (izquierda) y lodos (derecha).

Se puede observar en la figura 4.14 cómo la distribución de la partícula presenta un comportamiento de reducción en su tamaño conforme se acerca a la salida, lo cual ilustra que la partícula va reaccionando conforme se somete a los distintos fenómenos que engloba la gasificación.

4.9. Temperatura del gas, excretas y lodos [K]

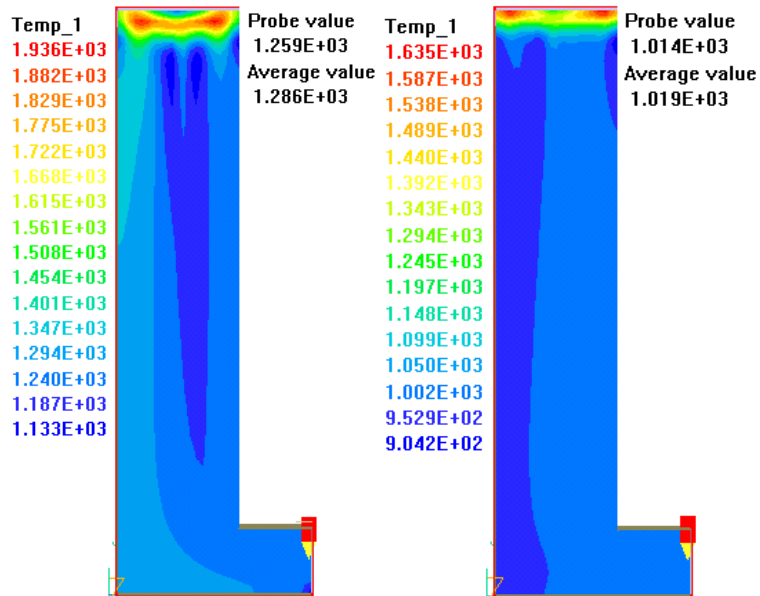


Figura 4.15. Distribución de la temperatura a partir de excretas (izquierda) y lodos (derecha).

Este aumento importante de temperatura confirma que se están llevando a cabo las reacciones de gasificación, es decir que la partícula reacciona, de modo que se está alcanzando un estado termodinámico (energético) mayor en la salida y transformar así el combustible en un gas de síntesis útil.

4.10. Velocidad del gas, excretas y lodos [m/s]

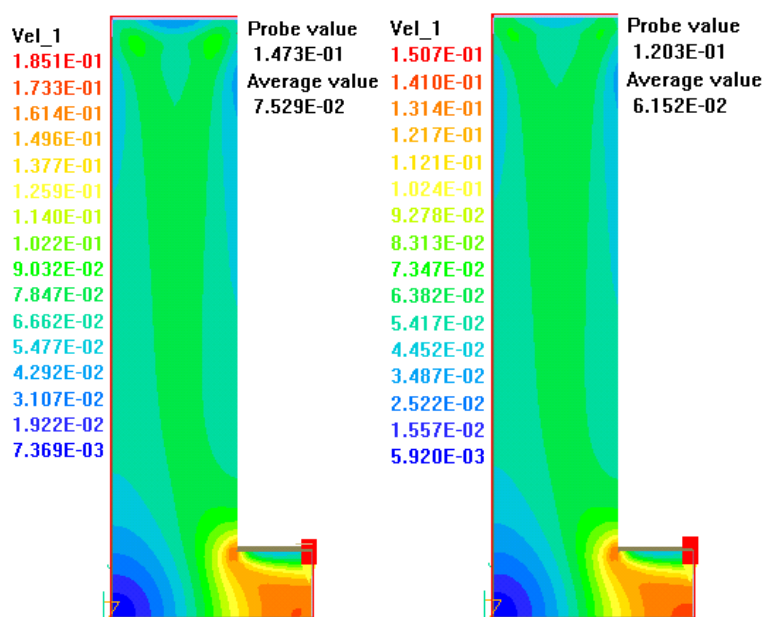


Figura 4.16. Distribución de velocidad del gas a partir de excretas (izquierda) y lodos (derecha).

La distribución de la velocidad del gas de síntesis muestra un comportamiento acorde con lo esperado. Conforme se acerca a la salida esta aumenta.

4.11. Análisis de sensibilidad

La información desarrollada a continuación tiene el propósito de estudiar el comportamiento del modelo al alimentarlo con distintos valores, y con ello encontrar posibles límites de operación.

Se graficará el flujo alimentado de biomasa contra el flujo de gas de síntesis variando primero el diámetro de partícula inicial, después la temperatura inicial y finalmente la relación aire combustible.

Cabe hacer mención que los datos de las especies que alimentaron a dicho análisis están en fracciones másicas.

Las figuras 4.17 y 4.18 muestran el comportamiento del modelo cuando se varía el diámetro inicial de la partícula entre 0.0001 y 0.01 [m], tanto en lodos como en excretas.

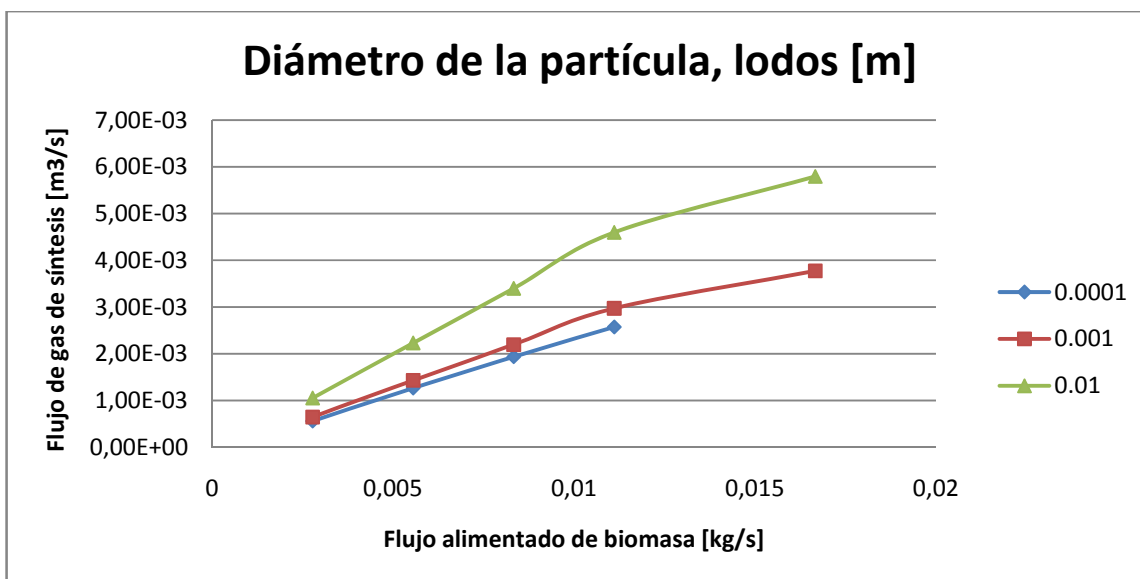


Figura 4.17. Comportamiento del modelo al variar el diámetro de la partícula inicial, para lodos.

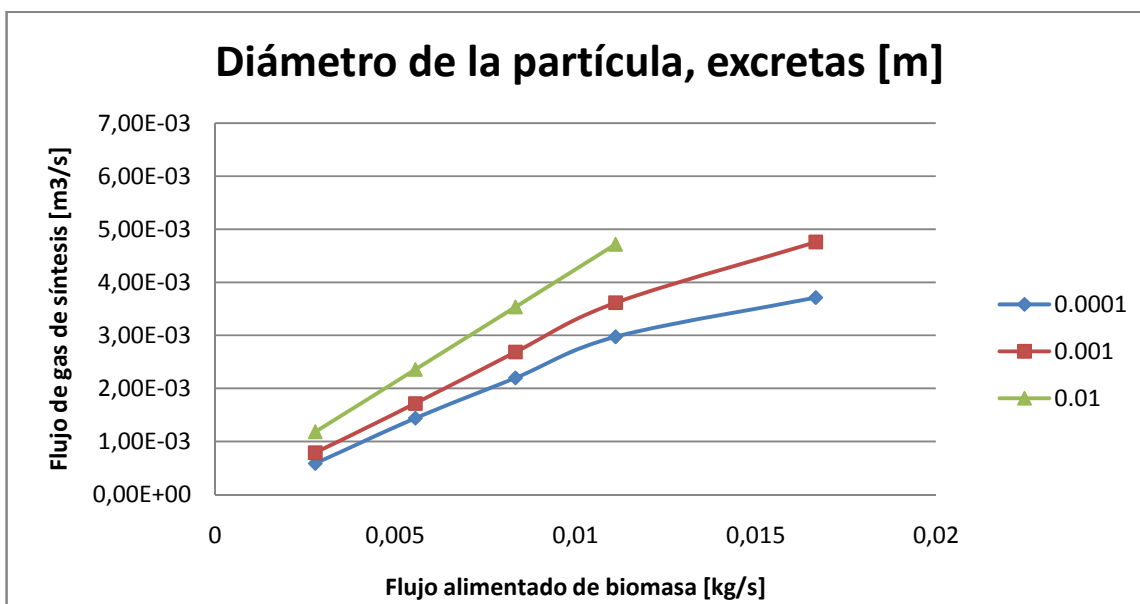


Figura 4.18. Comportamiento del modelo al variar el diámetro de la partícula inicial, para excretas.

Lo que se observa en las figuras anteriores es que al aumentar el diámetro inicial de las partículas que alimentan al gasificador se obtiene un mayor flujo de gas de síntesis; sin embargo, como se muestra en las figuras 4.19 y 4.20, la calidad del gas de síntesis producido a partir de un diámetro de partícula mayor decae. Aunado a lo anterior, la temperatura de salida arrojada por la simulación numérica alcanza valores muy altos, lo que podría poner en riesgo al equipo y la seguridad de la planta (figuras 4.21 y 4.22).

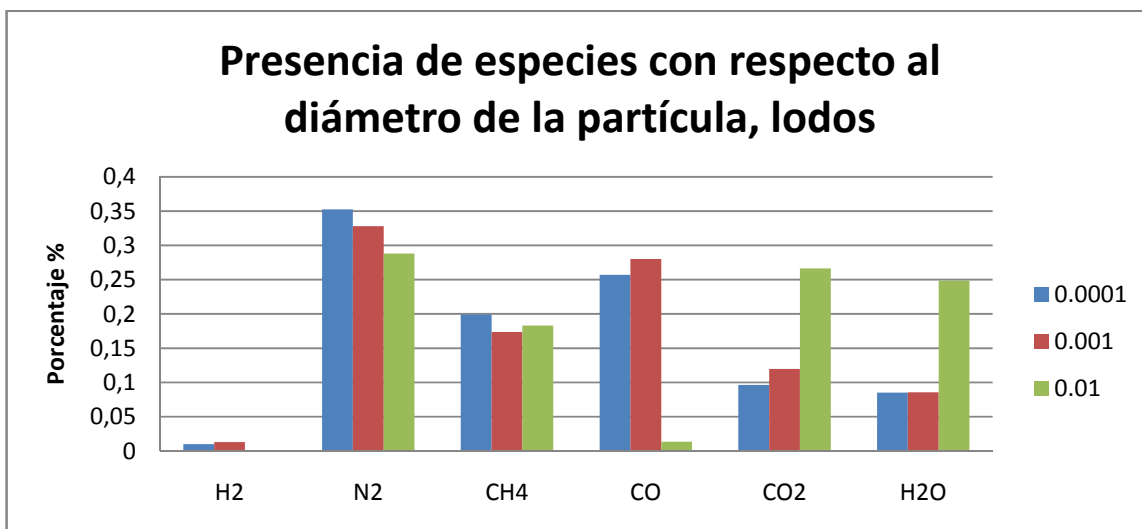


Figura 4.19. Distribución de especies al variar el diámetro de partícula inicial, para lodos.

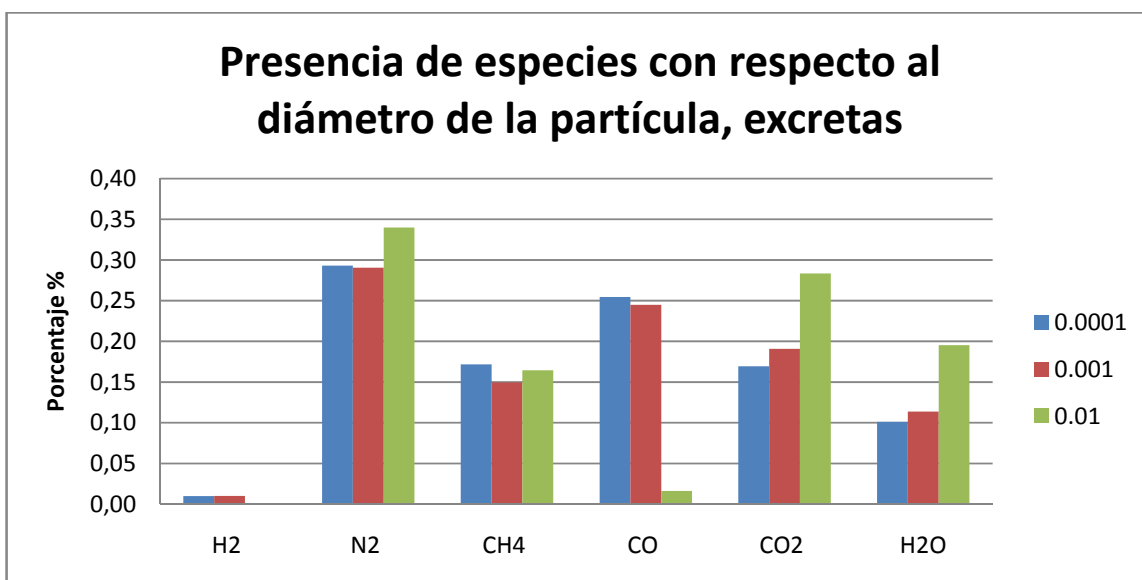


Figura 4.20. Distribución de especies al variar el diámetro de partícula inicial, para excretas.

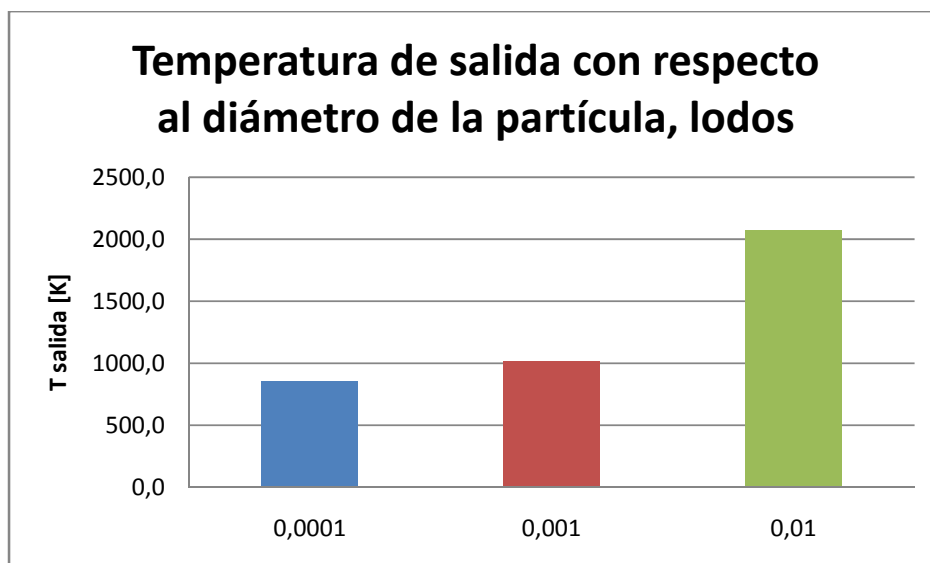


Figura 4.21. Temperaturas de salida al variar el diámetro de partícula inicial, para lodos.

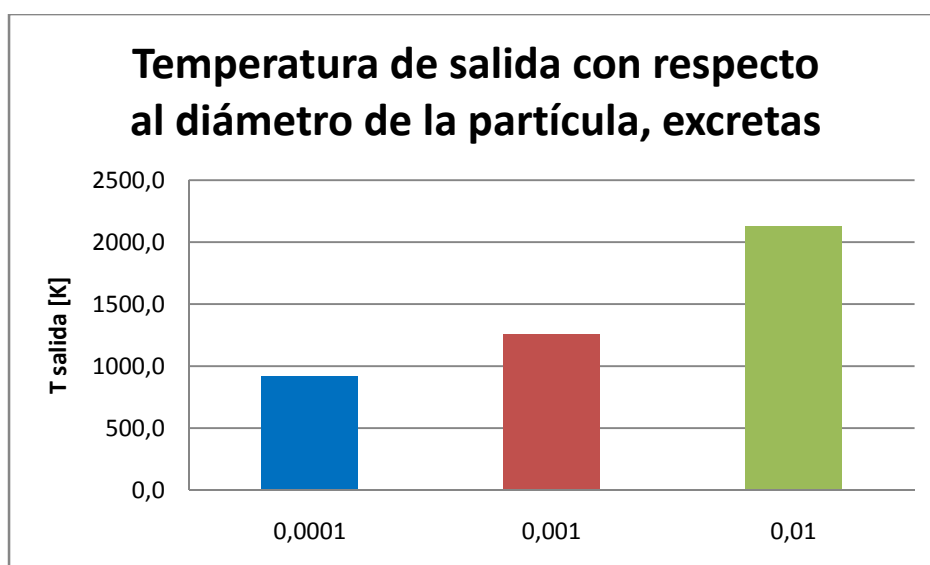


Figura 4.22. Temperaturas de salida al variar el diámetro de partícula inicial, para excretas.

A partir de estas seis figuras se puede afirmar que el rango de operación para los lodos se encuentra comprendido entre un diámetro de 0.0001 [m] con un flujo de biomasa que va de 10 a 40 [kg/h] y un diámetro de 0.001 [m] con un flujo que va de 10 a 50 kg/h, mientras que el rango de operación de las excretas se encuentra entre 0.0001 [m] y 0.001 [m] de diámetro con un flujo de biomasa entre 10 y 50 [kg/h]. Se descarta para ambos tipos de biomasa el diámetro de 0.01 [m] ya que la distribución del gas de síntesis para CO es muy baja, mientras que para CO₂ y H₂O es muy alta. Además la temperatura de salida, como ya se mencionó, es muy alta, lo cual no es factible.

Al variar en el modelo la temperatura inicial se obtienen las *figuras 4.23 y 4.24* que se muestra a continuación:

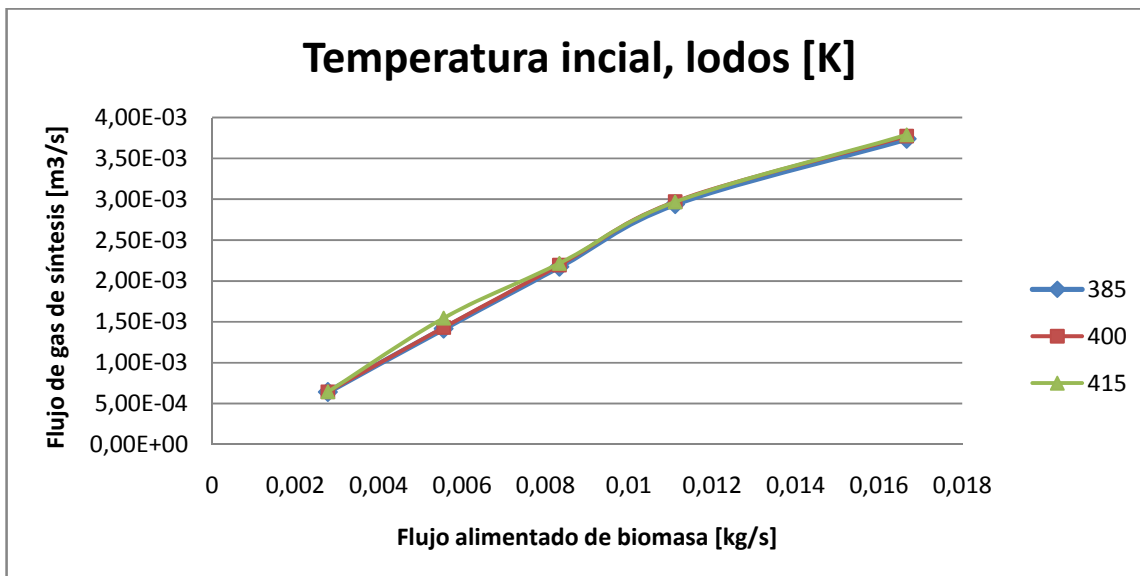


Figura 4.23. Comportamiento del modelo al variar la temperatura inicial, para lodos.

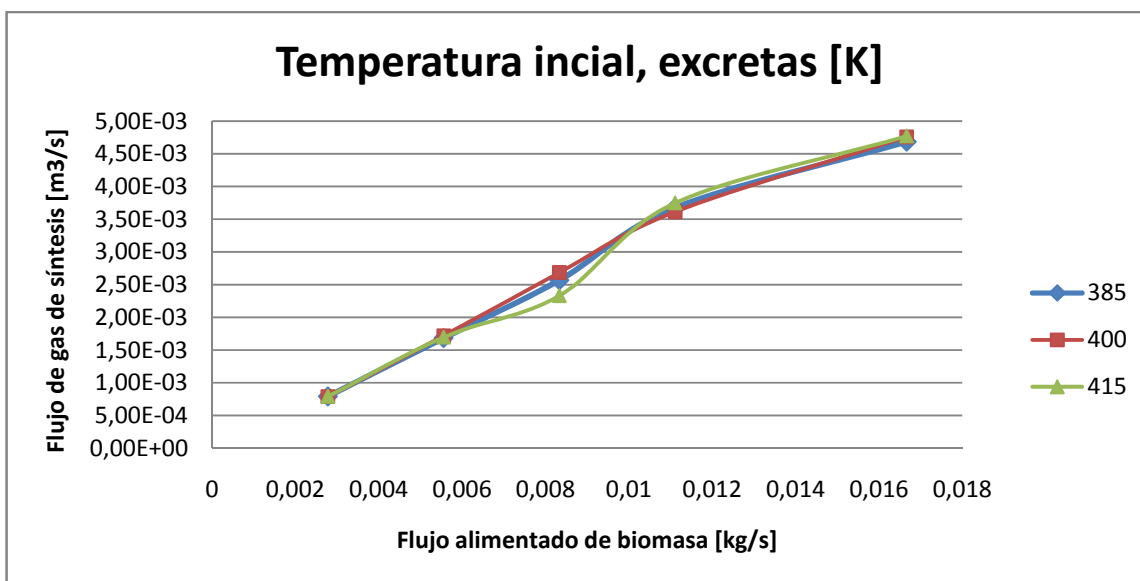


Figura 4.24. Comportamiento del modelo al variar la temperatura inicial, para excretas.

Como puede observarse, al usar valores de temperatura entre 385 y 415 K en ambos combustibles, no se obtiene una diferencia significativa en el flujo de gas de síntesis. Cabe aclarar que se comenzó con 385 K ya que a partir de esta temperatura la solución de la simulación numérica converge; con una temperatura menor ya no es posible obtener una solución. Lo anterior se debe también a que físicamente sería una temperatura relativamente baja si tomamos en cuenta que en la tolva de alimentación de la planta de gasificación se ha diseñado para alcanzar hasta 200 °C y de este modo obtener un secado de partícula adecuado.

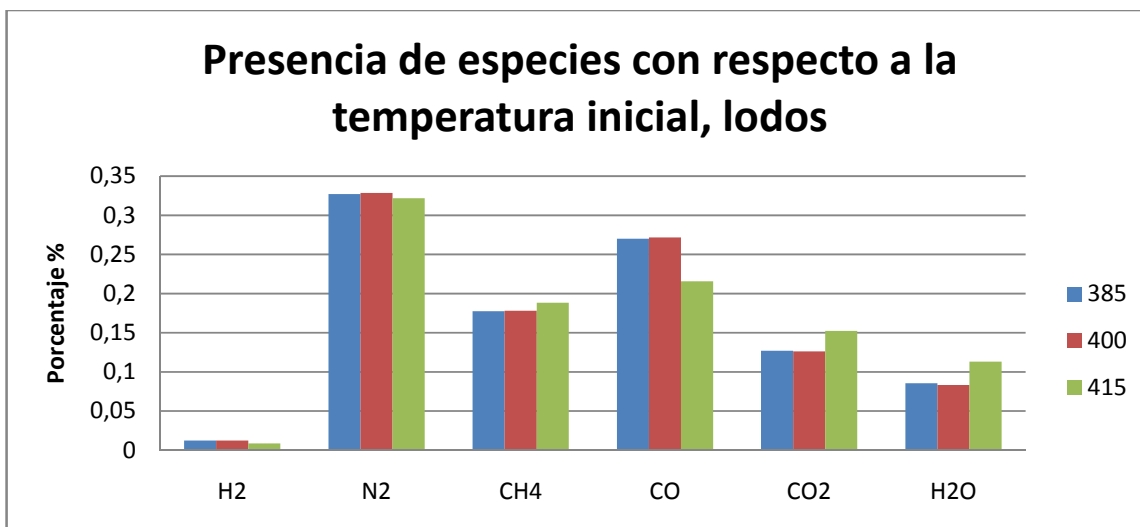


Figura 4.25. Distribución de especies al variar la temperatura inicial, para lodos.

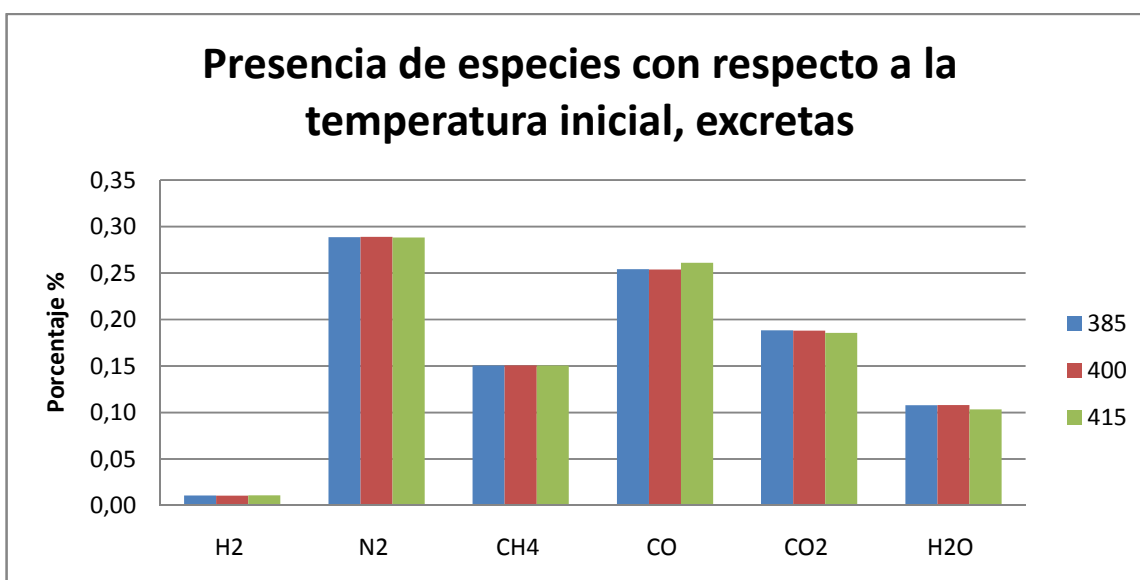


Figura 4.26. Distribución de especies al variar la temperatura inicial, para excretas.

Complementando el comentario anterior, en las *figuras 4.25 y 4.26* se observa que la distribución del gas comienza a modificarse a partir de los 415 K; sin embargo, esto no es suficiente como para dejar fuera del rango de operación esta variación, incluso se puede aumentar la temperatura, ya que como puede verse en las *figuras 4.27 y 4.28*, la temperatura de salida de las tres variaciones es muy similar y mantiene un valores aceptables.

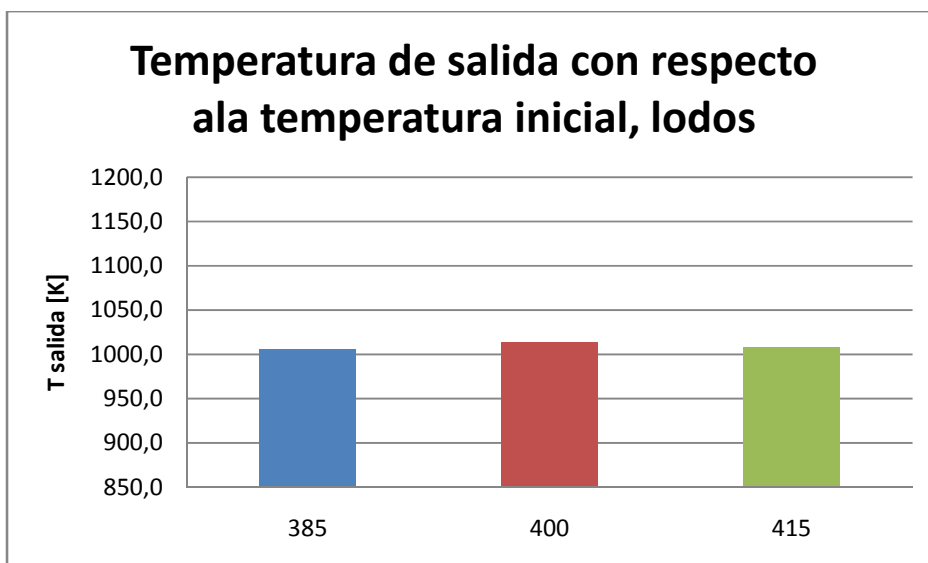


Figura 4.27. Temperaturas de salida al variar la temperatura inicial, para lodos.

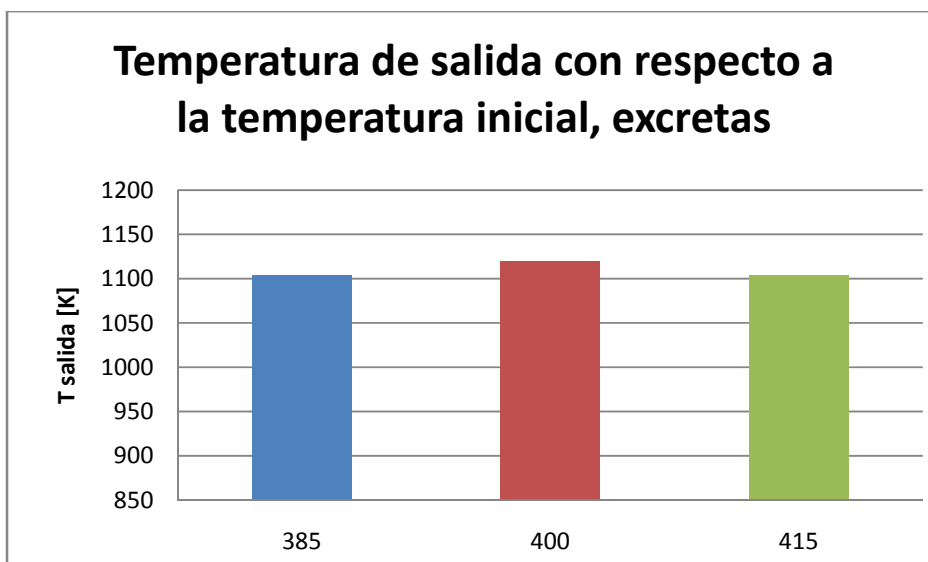


Figura 4.28. Temperaturas de salida al variar la temperatura inicial, para excretas.

Las graficas que a continuación se presentan son las variaciones en la relación aire combustible que van de 0.6 a 0.7, esto significa que por ejemplo, para una relación 0.6, esta se refiere a que el aire representa el 60% de la masa del combustible. Recordemos que para que se lleve a cabo la gasificación de la partícula, debe existir un déficit de aire debido a que lo que favorece la transformación de la partícula sólida en gas es principalmente el aumento de temperatura dentro del gasificador.

De manera similar a los dos casos anteriores se presentan los resultados de esta variación en las figuras 4.29 y 4.30:

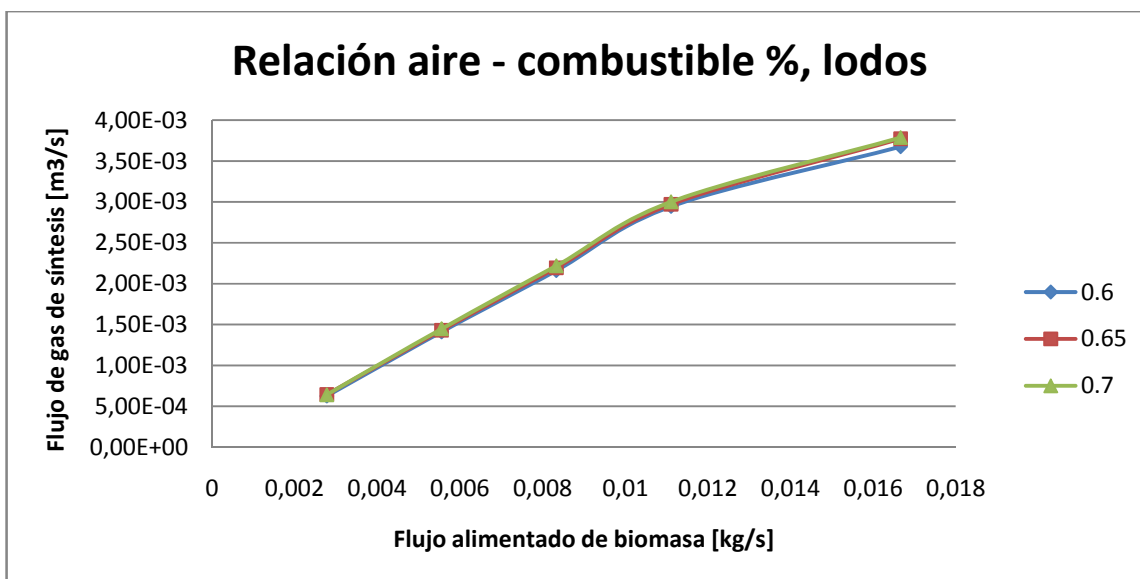


Figura 4.29. Comportamiento del modelo al variar la relación aire-combustible, para lodos.

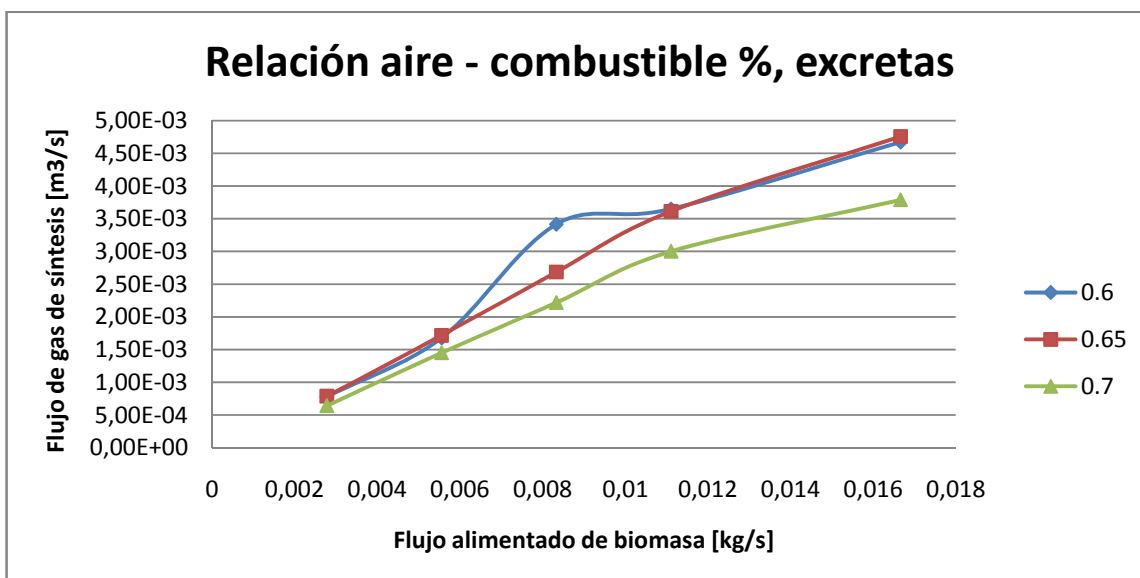


Figura 4.30. Comportamiento del modelo al variar la relación aire-combustible, para excretas.

Como se puede observar las variaciones en el flujo de gas de síntesis para los lodos no son significativas dentro de este rango de variaciones; mientras que para las excretas a pesar de ser diferencias muy pequeñas, se puede observar que se obtiene un menor flujo de gas con 0.7 comparado con 0.6 y 0.65, las cuales guardan cierta similitud. Aunado a esto en las figura 4.31, 4.32, 4.33 y 4.34, la distribución de las especies químicas y la temperatura de salida guardan un comportamiento muy parecido entre sí.

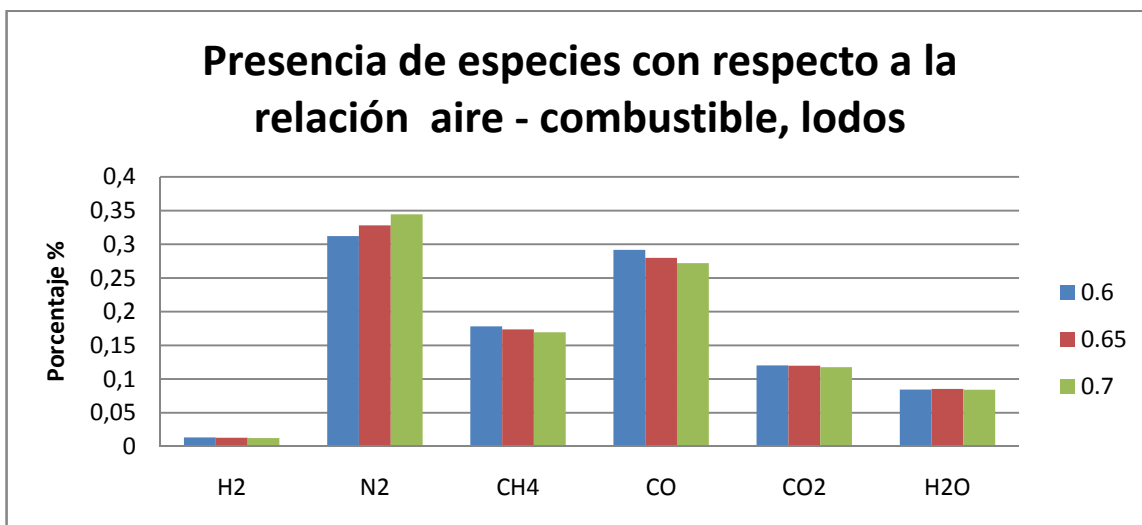


Figura 4.31. Distribución de especies al variar la relación aire-combustible, para lodos.

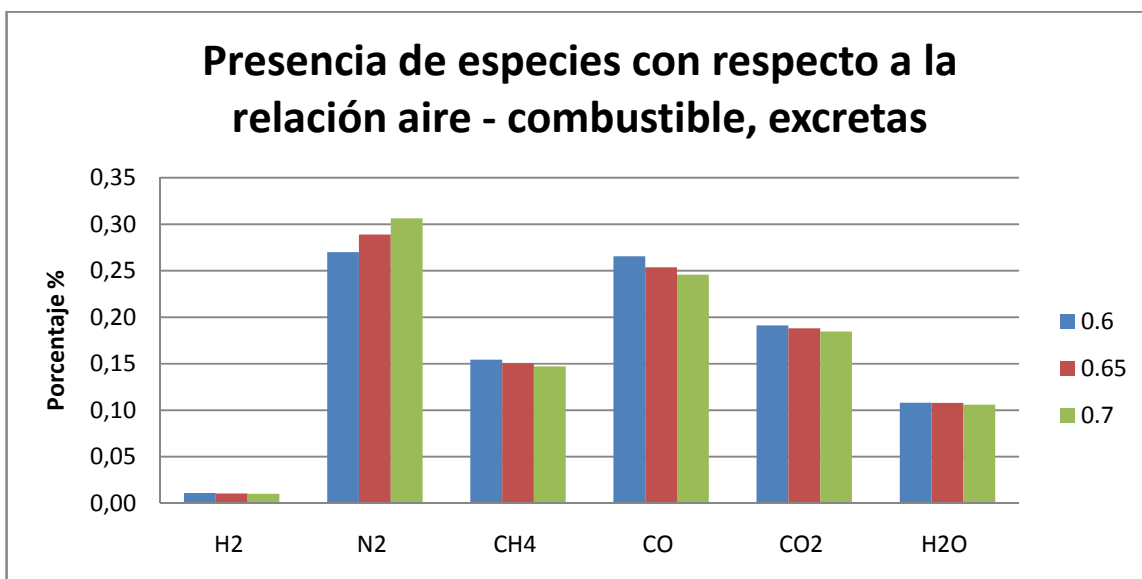


Figura 4.32. Distribución de especies al variar la relación aire-combustible, para excretas.

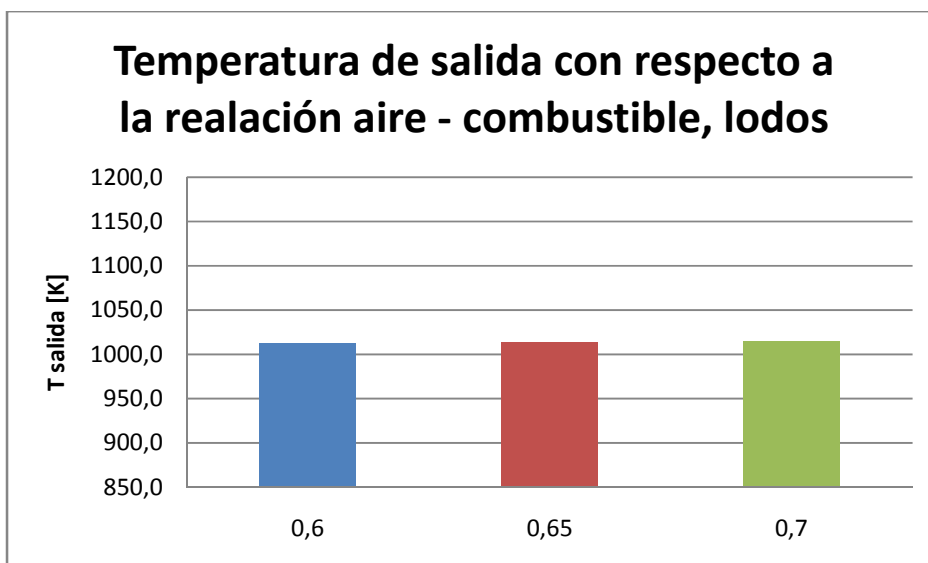


Figura 4.33. Temperaturas de salida al variar la relación aire-combustible, para lodos.

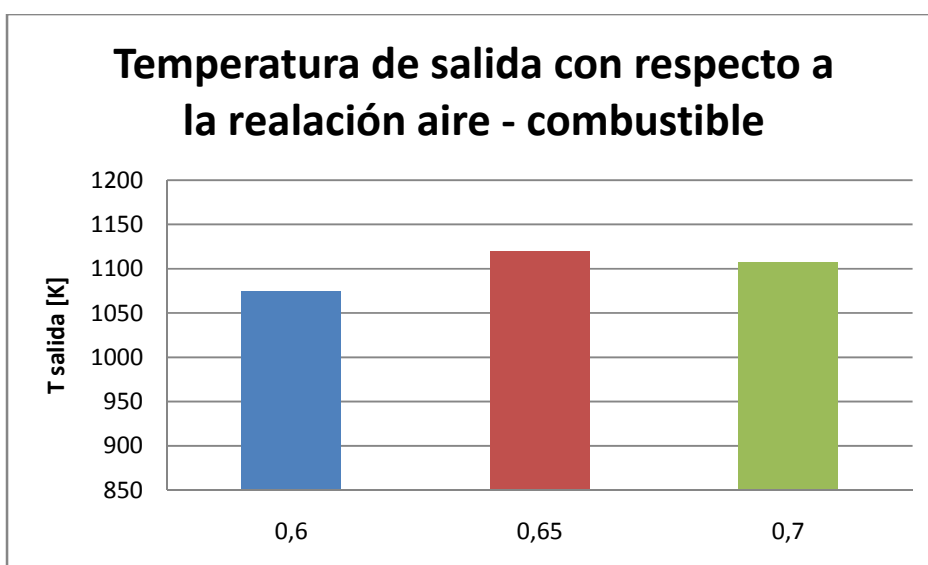


Figura 4.34. Temperaturas de salida al variar la relación aire-combustible, para excretas.

De acuerdo a lo anteriormente expuesto, este rango de variación entre 0.6 y 0.7 pertenece al rango de operación.

Cabe hacer mención sobre los valores encontrados en la literatura de la distribución de las especies en el gas de síntesis a partir de lodos de aguas residuales (tabla 4.9) y de excretas (tabla 4.10), obtenida mediante otros modelos numéricos y experimentalmente.

Capítulo IV

Especie	%
H ₂	21.8 – 40.9
CO	15.55 – 44.05
CO ₂	18.4 – 41.0
CH ₄	5.9 – 14.5

Tabla 4.9. Distribución de especies para gas de síntesis a partir de lodos obtenida mediante otros modelos numéricos encontrados en la literatura (Petersen et al. 2004)

Especie	%
CO	10.9 – 11.9
CO ₂	16.1 – 15.4
CH ₄	1.0 – 1.6
H ₂	15 – 18.6
N ₂	51.3 – 57.3

Tabla 4.10. Distribución de especies para gas de síntesis a partir de excretas obtenida mediante otros modelos numéricos encontrados en la literatura (Gordillo et al. 2009)

9. Conclusiones y recomendaciones

Como ha sido el enfoque de este trabajo al plantear su objetivo, se pudo demostrar que a pesar de las limitaciones del modelo numérico de gasificación de lodos de aguas residuales y excretas, es posible obtener una composición aceptable de gas de síntesis; destacando las cantidades de H_2 y CH_4 obtenidas hasta el momento. Este es un primer paso en la investigación de la gasificación de lodos de aguas residuales y excretas de ganado, la cual quedará completada una vez se ponga en marcha la Planta piloto de gasificación del Instituto de Ingeniería de la UNAM.

Con base en los resultados mostrados en el análisis de sensibilidad expuesto en el Capítulo IV de la presente tesis, se observa que de acuerdo con los datos arrojados hasta el momento por la simulación numérica, los rangos de operación del gasificador para obtener un gas de síntesis son los siguientes: el diámetro de partícula inicial en lodos que alimentará al gasificador debe encontrarse entre 0.0001 y 0.001 [m] con un flujo de 10 a 40 [kg/h] y de 10 a 50 [kg/h], respectivamente, mientras que para las excretas se encuentra entre 0.0001 y 0.001 [m] con un flujo de 10 a 50 [kg/h]. Con respecto a la temperatura inicial, el límite inferior es de 350 K y la relación aire combustible debe estar próxima al rango de 0.6 – 0.7, para ambos combustibles.

Cabe recordar que ha quedado fuera del alcance de este estudio la inclusión de alquitranes, contaminantes y sustancias peligrosas, por lo que se recomienda un estudio posterior en el cual se incluyan estos compuestos, a fin de investigar los efectos que pudieran causar dichos componentes en la producción de gas de síntesis a partir de estos residuos y su impacto al medio ambiente.

También se recomienda como se mencionó anteriormente que una vez lista la puesta en marcha de la Planta de gasificación del Instituto de Ingeniería de la UNAM, alimentar el modelo numérico presentado en esta tesis con las constantes que pudieran mejorar los resultados arrojados y así obtener una mejor aproximación a la realidad, ya que dicho modelo está alimentado con constantes encontradas en la literatura.

Si bien las concentraciones de algunas especies químicas no son totalmente satisfactorias, también es cierto que su distribución guarda cierta proporción acorde con lo esperado. Esto prueba además que el método numérico utilizado tiene, hasta el momento, un alcance adecuado y satisfactorio para el cumplimiento del objetivo de esta tesis.

Con el desarrollo de este trabajo se trata de mostrar un cambio en la percepción de los lodos de aguas residuales, vistos como un residuo indeseable a un recurso benéfico e importante para desarrollar una tecnología adecuada o hacer uso de una ya existente, de modo que se reduzcan los problemas ambientales y los costos asociados al tratamiento de estos lodos. Es por ello que la gasificación puede ser aplicada a estos residuos para ser transformada en energía útil y reducir su volumen. Además, previene posibles problemas a partir de compuestos orgánicos, agentes patógenos, compuestos farmacéuticos activos y fija los metales pesados en las cenizas resultantes.

Conclusiones y recomendaciones

Por otra parte, la eliminación de excretas, por ejemplo de ganado, debido a su creciente producción y con ello la generación de diversos problemas como la posible contaminación del aire, suelo y de las fuentes de agua superficial a través de su escurrimiento en diversos sitios, puede ser resuelta mediante su gasificación. El reutilizar la fracción de materia orgánica de estas excretas conlleva el beneficio de evitar los problemas ambientales antes mencionados que derivan de su acumulación.

Los resultados obtenidos muestran que el uso de estos residuos húmedos para producir gas de síntesis en un gasificador, también es una opción muy atractiva para el manejo de estos residuos orgánicos. Además, el uso de este gas de síntesis como combustible, es desde un punto de vista ambiental, una opción viable, ya que fomenta el uso de energías renovables y mitiga el efecto nocivo producido por las emisiones de gases de efecto invernadero; así también, visto con un enfoque económico, lo que para los gobiernos representa un pasivo, puede ser transformado en un capital.

También es importante señalar que este trabajo tiene dentro de sus objetivos el que la tecnología de gasificación sea tomada en cuenta como una aportación hacia el aprovechamiento de residuos para la transformación a energía eléctrica y así contribuir con la diversificación de energéticos primarios; así también es relevante agregar que este tipo de acciones deben ir acompañadas de un uso más eficiente de la energía y de una reducción en el consumo de la misma, ya que no debe entenderse que las tendencias de crecimiento en la demanda eléctrica expuestas en capítulos pertenecientes a esta tesis, signifique que debemos forzosamente transformar una mayor cantidad de energía. Lo anterior debe dejar claro que lo que se busca es equilibrar la estrecha relación existente entre “Desarrollo-Economía-Energía-Medio Ambiente”, lo cual implica también cambiar nuestra consciencia colectiva acerca de nuestros hábitos y usos que le damos a la energía.

Por otro lado es necesario señalar que para el actual sistema energético es necesario tomar una dirección hacia el desarrollo de un uso cada vez más grande de bioenergía como una alternativa al uso predominante y dependiente de los combustibles de origen fósil y con ello contribuir hacia una transición energética real. Por lo tanto, si los recursos bioenergéticos nacionales no son desarrollados en un tiempo adecuado, México podría perder la oportunidad de diversificar el sistema energético del país. Al mismo tiempo, no se crearán fuentes de empleo y permanecerán por mucho tiempo más los problemas asociados con el subdesarrollo de las áreas vulnerables de la sociedad y los de naturaleza social asociados con la pobreza.

Apéndice A

Modelos de turbulencia

6.1. Introducción

A continuación se introducen algunos de los modelos que se pueden utilizar para representar el efecto de la turbulencia en el flujo dentro del gasificador simulado en esta tesis. Los modelos se clasifican en dos categorías:

- Modelos de tipo “difusividad turbulenta”, esencialmente variantes del método conocido como $k - \varepsilon$.
- Cierres de segundo orden, en la forma de modelos de transporte de los esfuerzos de Reynolds.

En primer lugar se presentará la ecuación exacta para los esfuerzos de Reynolds, seguida por los cierres de segundo orden, que constituyen el transporte de esfuerzos de Reynolds. Posteriormente, se presenta el modelo utilizado en esta tesis, el modelo de turbulencia $k - \varepsilon$ estándar.

6.2. Cierres de segundo orden

La ecuación de transporte exacta para los esfuerzos de Reynolds ($u_i''u_j''$) es¹:

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} u_i'' u_j'') + \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} u_k u_i'' u_j'') \\
 & = - \underbrace{\left(u_i'' \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} u_j'' \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} \right)}_{(a)} - \underbrace{\left(u_i'' \frac{\partial p'}{\partial x_j} + u_j'' \frac{\partial p'}{\partial x_i} \right)}_{(b)} - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} u_i'' u_j'' u_k'')}_{(c)} \\
 & \quad - \underbrace{\bar{\rho} \left(u_i'' u_k'' \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_k} + u_j'' u_k'' \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k} \right)}_{(d)} - \underbrace{\left(\tau_{ik} \frac{\partial u_j''}{\partial x_k} + \tau_{ik} \frac{\partial u_i''}{\partial x_k} \right)}_{(e)}
 \end{aligned} \tag{1}$$

Los términos del lado derecho de la ecuación (1) representan, el efecto del gradiente de presión media (a), la correlación entre gradientes de presión fluctuante y fluctuaciones de velocidad (b), el transporte turbulento de los esfuerzos de Reynolds (c), la producción de los esfuerzos de Reynolds por velocidad de deformación media (d), y la disipación viscosa (e). De los términos anteriores, en (a), (b), (c) y (e) están presentes correlaciones desconocidas, y por tanto requieren modelización.

El término que expresa el efecto del gradiente de presión media (a), se puede escribir como:

¹ “Plume Rise and Buoyancy Effects”; G. A. Briggs; Atmospheric Science and Power Production; pp. 327-366; 1984.

Apéndice A

$$-\left(\bar{u}_i'' \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} \bar{u}_j'' \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i}\right) = \frac{\overline{\rho' u_j''}}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\overline{\rho' u_i''}}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} \quad (2)$$

La correlación $\overline{\rho' u_j''}$ se puede modelar de una ecuación de conservación truncada como²:

$$\overline{\rho' u_j''} = -\frac{1}{4.3} \frac{\tilde{k}}{\tilde{\epsilon}} u_i'' u_j'' \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} \quad (3)$$

Donde $k = \frac{1}{2} u_i'' u_i''$ es la energía cinética turbulenta y $\tilde{\epsilon}$ es su tasa de disipación. La contribución de este término es muy pequeña y frecuentemente se desprecia^{3 4}.

Con fines de modelización, la correlación entre gradientes de presión fluctuante y fluctuaciones de velocidad (b), frecuentemente se divide en una parte re-distributiva y una parte isótropa⁵:

$$\overline{u_i'' \frac{\partial p'}{\partial x_j}} + \overline{u_j'' \frac{\partial p'}{\partial x_i}} = -\left(\overline{u_i'' \frac{\partial p'}{\partial x_j}} + \overline{u_j'' \frac{\partial p'}{\partial x_i}} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{u_k'' \frac{\partial p'}{\partial x_k}}\right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{u_k'' \frac{\partial p'}{\partial x_k}} \quad (4)$$

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

$$-\frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{u_k'' \frac{\partial p'}{\partial x_k}} = -\frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{\frac{\partial p' u_k''}{\partial x_k}} + -\frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{p' \frac{\partial u_k''}{\partial x_k}} \quad (5)$$

En flujos de baja velocidad $Ma \ll 1$, el segundo término del lado derecho de la ecuación (5) generalmente se desprecia⁶. El primer término del lado derecho de la ecuación se suma al término de transporte turbulento de los esfuerzos de Reynolds (c) para formar el término:

$$\frac{\partial}{\partial x_k} (C_{ijk}) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\bar{\rho} u_i'' u_j'' u_k'' + \frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{p' u_k''} \right) \quad (6)$$

² "Plume Rise and Buoyancy Effects"; G. A. Briggs; Atmospheric Science and Power Production; pp. 327-366; 1984.

³ "A Novel Finite-Difference Formulation for Differential Expressions Involving Both First and Second Derivates"; D. B. Spalding; Int. Journal Num. Methods Engineering 4; pp. 551; 1972.

⁴ "Mathematical Modeling of Fluid Dynamics, Heat Transfer and Math Transfer Process"; D. B. Spalding; Technical Report HTS/8011, Imperial College of Science Technology and Medicine; 1980.

⁵ "Comparison Between Presumed and Monte Carlo PDF Transport Methods for turbulent Combustion Modeling"; F. Biagioli; AIAA-Journal of Propulsion and Power 13(1); pp. 109-116; 1997.

⁶ "Progress in the development of a Reynolds stress turbulence closure"; B. E. Launder, G. J. Reece, W. Rodi; Journal of Fluid Mechanics; pp. 65-537; 1975.

Apéndice A

El término C_{ijk} se modela mediante un cierre de tipo gradiente⁷:

$$C_{ijk} = -C_s \frac{\tilde{k}}{\tilde{\varepsilon}} u_k'' u_l'' \frac{\partial u_i'' u_j''}{\partial x_l} \quad (7)$$

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

$$\overline{\tau_{ik} \frac{\partial u_j''}{\partial x_k}} + \tau_{ik}'' \frac{\partial u_l''}{\partial x_k} = \bar{\rho} \varepsilon_{ij} \quad (8)$$

Si se supone isotropía local, el término ε_{ij} se puede escribir en función de la disipación de energía cinética turbulenta, ε como⁸:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{2}{3} \tilde{\varepsilon} \delta_{ij} \quad (9)$$

La tasa de disipación de la energía cinética turbulenta, $\tilde{\varepsilon}$ se calcula de la siguiente ecuación de transporte, deducida por procedimientos similares a los utilizados en el caso de densidad constante⁹:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{\varepsilon}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{\varepsilon} u_j) \\ = - \underbrace{C_{\varepsilon 1} \bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} u_k'' u_j'' \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_j}}_{(A)} - \underbrace{C_{\varepsilon 2} \bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}^2}{\tilde{k}}}_{(B)} + \underbrace{C_{\varepsilon 3} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} \frac{\overline{\rho' u_j''}}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j}}_{(C)} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} \left(C_{\varepsilon} \bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} u_j'' u_k'' \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial x_j} \right)}_{(D)} \end{aligned} \quad (10)$$

Donde, de acuerdo con lo expuesto anteriormente, el término (C) se desprecia.

La parte re-distributiva de la correlación entre gradientes de presión fluctuante y fluctuaciones de velocidad, expresión (4), usualmente se divide en dos grandes partes: una que incluye cantidades turbulentas y otra que incluye la tasa de deformación media.

Modelos para este término han sido propuestos, por ejemplo por Launder et al¹⁰ (modelo ML), Gibson y Younis¹¹ (modelo MG) y Musonge¹² (Modelo MJ). Denotando al término redistributivo como Π_{ij} , los modelos se escriben como:

⁷ "Transport Equations in Turbulence. Physics of Fluids"; B. J. Daly, F. H. Harlow; 3(11):2634-2649; 1970.

⁸ "Plume Rise and Buoyancy Effects"; G. A. Briggs; Atmospheric Science and Power Production; pp. 327-366; 1984.

⁹ "Plume Rise and Buoyancy Effects"; G. A. Briggs; Atmospheric Science and Power Production; pp. 327-366; 1984.

¹⁰ "Size and Trajectory of a Flare in a Cross Flow"; A. J. Majeski, D. J. Wilson, L. W. Kostiuk"; Canada, Alberta; 1999.

¹¹ "Transport Equations in Turbulence. Physics of Fluids"; B. J. Daly, F. H. Harlow; 3(11):2634-2649; 1970.

Apéndice A

$$\begin{aligned} \Pi_{ij} = & -C_1 \bar{\rho} \bar{\epsilon} \left(\frac{u_i''}{\bar{k}} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \right) + C_2 \delta_{ij} \bar{\rho} u_l'' u_m'' \frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_m} - C_3 \bar{\rho} P_{ij} + C_4 \bar{\rho} \bar{k} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \\ & - \frac{2}{3} C_4 \bar{\rho} \bar{k} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} - \left(\frac{2}{3} C_2 + C_3 \right) (\bar{\rho} u_l'' u_j'' + \bar{\rho} u_l'' u_i'') \end{aligned} \quad (11)$$

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

Las constantes de las ecuaciones (7), (10) y (11) se presentan en la *tabla A.1*.

Modelo	MG	ML	MJ
$C_{\epsilon 1}$	1.4	1.44	1.40
$C_{\epsilon 2}$	1.8	1.90	1.90
$C_{\epsilon 3}$	0.15	0.15	0.18
$C_{\epsilon 4}$	0.22	0.21	0.22
C_1	3.00	1.50	3.00
C_2	0.30	-0.582	-0.44
C_3	-	0.764	0.45
C_4	-	-0.182	-0.23

Tabla A.1. Constantes de las ecuaciones (7), (10) y (11).

Sustituyendo las ecuaciones (6), (9) y (11) en la ecuación de los esfuerzos de Reynolds (1) se tiene:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} u_i'' u_j'') + \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho} \tilde{u}_k u_i'' u_j'') \\ = \frac{\partial}{\partial x_k} (C_{ijk}) - \bar{\rho} \left(u_i'' u_k'' \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_k} + u_j'' u_k'' \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k} \right) - \frac{2}{3} \bar{\rho} \bar{\epsilon} \delta_{ij} + \Pi_{ij} \end{aligned} \quad (12)$$

6.3. Modelos de viscosidad turbulenta

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

$$\bar{\rho} u_i'' u_j'' = -\bar{\rho} \nu_T \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \left(\bar{\rho} \bar{k} + \bar{\rho} \nu_T \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \quad (13)$$

¹² "Combustion and Mass transfer"; D. B. Spalding; Pergamon; 1979.

Apéndice A

Donde $\nu_T = \frac{\mu_T}{\bar{\rho}}$ es la viscosidad turbulenta. A diferencia de la viscosidad molecular $\nu = \frac{\mu}{\rho}$, ν_T no es una propiedad del fluido, sino una característica del estado del flujo, y puede variar significativamente de un punto a otro dentro del mismo flujo.

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

$$\bar{\rho} u_i'' u_\alpha'' = -\bar{\rho} \frac{\nu_T}{S_{CT}} \frac{\partial \tilde{\phi}_\alpha}{\partial x_i} \quad (14)$$

Donde S_{CT} es el número de Schmidt/Prandtl turbulento.

La viscosidad turbulenta ν_T , puede calcularse de diferentes formas, dando lugar a una variedad de modelos con un número variable de ecuaciones diferenciales. Los más populares de estos modelos son, probablemente, los de la familia del modelo $k - \varepsilon$. Las variantes utilizadas en este trabajo se presentan a continuación.

6.4. Modelo $k - \varepsilon$

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

$$\nu_T = C_\mu \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\varepsilon}} \quad (15)$$

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

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

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{k}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{k}) + \bar{\rho} u_i'' u_j'' \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial}{\partial x_j} \underbrace{\left(\frac{1}{2} \rho u_j'' u_i'' u_i'' \right)}_{(a)} - \bar{\rho} \tilde{\varepsilon} \quad (16)$$

Los esfuerzos de Reynolds $u_i'' u_j''$ se expresan de acuerdo con la ecuación (13).

El término (a) se aproxima como:

$$-\left(\frac{1}{2} \rho u_j'' u_i'' u_i'' \right) \approx \frac{\mu_T}{\sigma_k} \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_j} \quad (17)$$

Apéndice A

Sustituyendo las expresiones (13) y (17) en la siguiente ecuación (16), se obtiene:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{k}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{k}) = \bar{\rho}(P_k - \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\bar{\rho}\frac{\nu_T}{\sigma_k}\frac{\partial\tilde{k}}{\partial x_j}\right) \quad (18)$$

Donde:

$$P_k = \nu_T\left(\frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial\tilde{u}_j}{\partial x_i}\right)\frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{2}{3}\left(\tilde{k} + \nu_T\frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_i}\right)\frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_i} \quad (19)$$

Aplicando hipótesis similares a las utilizadas para la ecuación de \tilde{k} (18), la ecuación para la disipación de la energía cinética turbulenta, $\tilde{\varepsilon}$ se obtiene a partir de la ecuación (10):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{\varepsilon}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{\varepsilon}) = \bar{\rho}\frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}}(C_{\varepsilon 1}P_k - C_{\varepsilon 2}\tilde{\varepsilon}) + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\bar{\rho}\frac{\nu_T}{\sigma_k}\frac{\partial\tilde{\varepsilon}}{\partial x_j}\right) \quad (20)$$

Las constantes de las ecuaciones (18) y (20) se muestran en la tabla A.2.

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

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

El modelo $k - \varepsilon$, tal y como ha sido presentado, se comporta satisfactoriamente en flujos sencillos, normalmente flujos parabólicos, para los cuales el modelo fue desarrollado en los años 70's. En flujos más complejos, incluidos aquellos con rotación o con curvatura apreciable en las líneas de corriente, como los investigados en esta tesis, las hipótesis de isotropía en las que se basa el modelo no son aplicables, y las predicciones proporcionadas por el modelo son, en general, menos satisfactorias. La popularidad de este tipo de modelos, en la que su sencillez y economía juega un papel importante, ha dado lugar a una serie de modificaciones o variantes, que intentan compensar estas diferencias, sin tener que abandonar la hipótesis de viscosidad turbulenta a favor de cierres de segundo orden.

Apéndice B

Esquemas de discretización.

7.1. Introducción

A continuación se presentan los esquemas lineales que se usan en la discretización del término convectivo de la ecuación general (1), en el Capítulo IV.

En la formulación de la ecuación discretizada (2), se requiere conocer la densidad ρ y la variable escalar ϕ en la cara de la celda. Estas variables se calculan en el nodo de la celda, por lo que es necesario interpolar entre celdas para conocer su valor en la cara. De tal modo que el cálculo de ρ y ϕ en la cara de la celda da lugar a los llamados esquemas de discretización. La determinación de los valores de estas variables en la cara es importante para la precisión y convergencia de la solución numérica.

Enseguida se presentan los esquemas de discretización lineales y no lineales empleados en esta tesis. Estos esquemas se describirán con bases al sistema de celdas que se ilustra en la *figura 1*.

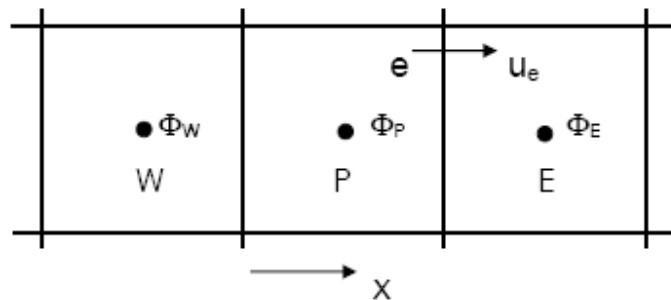


Figura B.1. Diagrama esquemático de celdas.

Como ejemplo, se obtendrá el valor de ϕ en la cara e de la celda P. La velocidad en la cara e se considerará, sin pérdida de generalidad, positiva ($u_e > 0$).

7.2. Esquemas lineales

7.3. Diferencias desplazadas de primer orden

Con este esquema se supone que el valor de la variable ϕ en la cara e es igual al nodo adyacente aguas arriba, es decir, para $u_e > 0$ ¹:

$$\phi_e = \phi_P \tag{1}$$

Esta alternativa es de implementación sencilla, acotada y altamente estable casi bajo cualquier situación pero tiene como inconvenientes, su precisión, ser de primer orden y presentar

¹ "Pressure-Strain Correlation. Physics of Fluids"; J. L. Lumey; 18(6):750; 1975.

problemas de difusión numérica. Esta falsa difusión es mayor si en el flujo hay un desalineamiento en la dirección del flujo y las líneas de malla como por ejemplo, en flujos de recirculación.

7.4. Diferencias centradas

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

$$\phi_e = \frac{\phi_E + \phi_P}{2} \quad (2)$$

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

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

7.5. Híbrido

Este esquema fue introducido por Spalding² y consiste en combinar los esquemas de diferencias finitas y centradas para calcular el valor de la propiedad ϕ en la cara del volumen de control. La selección del esquema se hace en función del número de Peclet de la celda:

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

$$\phi_e = \frac{\phi_E + \phi_P}{2} \quad (3)$$

- Si $Pe > 2$, se usan diferencias desplazadas:

$$\phi_e = \phi_P, \quad Pe > 2 \quad (4)$$

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

Los esquemas lineales de alto orden presentan una buena precisión, pero no están acotados, por lo que pueden presentar oscilaciones numéricas. Su uso no es recomendado en el cálculo de cantidades que no aceptan valores negativos, o en general de cantidades acotadas, tales como

² "Coal Combustion and Gasification"; L. D. Smoot, P. J. Smith; Plenum Press; New York 1972.

Apéndice B

concentraciones, pues las oscilaciones introducidas por el modelo pueden sacar al escalar de su dominio de definición.

Bibliografía

- “Energy Technology Perspective 2008”; Agencia Internacional de Energía; IEA. Pág. 113.
- “Energy Information Administration”; International Energy Outlook 2009; E.U.A.; Mayo de 2009.
- “Taller de Cambio Climático para los Estados Fronterizos”; Julia Martínez; Instituto Nacional de Ecología; Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales; Monterrey, Abril de 2009.
- “Estrategia Nacional para la transición energética y el aprovechamiento sustentable de la energía”; SENER; México 2009; Pág. 5.
- “Renewable Energy Outlook 2008”; Agencia Internacional de energía; Disponible en: <http://www.iea.org/textbase/nppdf/free/2008/weo2008.pdf>; Pág. 165.
- “World Wind Report”; World Wind Energy Association; Disponible en: http://www.wwindea.org/home/images/stories/worldwindenergyreport2008_s.pdf; Pág. 4.
- “Combustion characteristics of different biomass fuels”; Ayhan Demirbas; Department of Chemical Engineering, Selcuk University, Konya, Turkey; Progress in Energy and Combustion Science; 2003; Pág. 1-2
- “Estrategia Nacional para la transición energética y el aprovechamiento sustentable de la energía”; SENER; México 2009; Pág. 11 y 12.
- “Prospectiva energética para el periodo 2014-2030 del sector energía de México”; Gerardo Bazán, Esperanza Nava; Universidad Nacional Autónoma de México, Programa Universitario de Energía, SENER; Julio 2005; Anexo 14.
- “An Eulerian model for the simulation of an entrained flow coal gasifier”; William Vicente, Salvador Ochoa, Javier Aguillón, Esteban Barrios; Instituto de Ingeniería, Facultad de Ingeniería, UNAM; Applied Thermal Engineering ; Abril 2003; Pág. 1-2
- “Combustion characteristics of different biomass fuels”; Ayhan Demirbas; Department of Chemical Engineering, Selcuk University, Konya, Turkey; Progress in Energy and Combustion Science; 2003; Pág. 1-2
- “Instrumentación de una planta piloto de gasificación de residuos biomásicos de 250 kWe”; Mario Alberto, Barrera Galván; Facultad de Estudios Superiores Zaragoza, UNAM; Tesis; Septiembre 2008; Pág. 10.
- “Livestock waste-to-bioenergy generation opportunities”; Keri B. Cantrell, Thomas Ducey, Kyoung S. Ro, Patrick G. Hunt; US Department of Agriculture; Bioresource Technology; Mayo 2008; Pág. 1-2.
- “Dynamic behavior of stratified downdraft gasifiers ”; Colomba Di Blasi; Dipartimento di Ingegneria Chimica; Università degli Studi di Napoli “Federico II”; Chemical Engineering Science; Noviembre 2008; Pág. 1-2.

Bibliografía

“Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. Series in Computational Methods in Mechanics and Thermal Science”; S.V. Pantakar; Hemisphere Publishing Corporation; 1980.

“Problems of Hydrodynamics and Continuum Mechanics”; H. H. Ferziger, M. Peric; Springer-Verlag; 1996.

“A Calculation Procedure for Heat, Mass and Momentum Transfer in Three Dimensional Parabolic Flows”;

S.V. Pantakar, D.B. Spalding; Int. J. Heat and Mass Transfer, 15. Pp. 1787-1806; 1972.

“Mathematical Modeling of Fluid Dynamics, Heat Transfer and Mass Transfer Process”; D.B. Spalding; Technical report HTS/8011, Imperial College of Science Technology and Medicine; 1980.

“The PHOENICS Reference Manual”; J.C. Ludwing, D.B. Spalding; Technical Report CHAM TR/200, CHAM Ltd; London 1989.

“Gasification of sewage sludge using a throated downdraft gasifier and uncertainty analysis”; Murat Dogru, Adnan Midilli, Colin R. Howarth; Fuel Processing Technology; Septiembre 2001; Pág. 1.

“Experimental investigation and modeling of gasification of sewage sludge in the circulating fluidized bed”; I. Petersen, J. Werther; Chemical Engineering and Processing; Octubre 2004; Pág. 1.

“Influence of manure types and pyrolysis conditions on the oxidation behavior of manure char”; Shou-Yu Zhang, Ruo-Yu Hong, Jing-Pei Cao, Takayuki Takarada; Bioresource Technology; Mayo 2009; Pág. 1.

“Investigation of increasing organic loading rate in the co-digestion of energy crops and cow manure mix”; Elena Comino, Maurizio Rosso, Vincenzo Riggio; Bioresource Technology; Enero 2009; Pág. 3.

“Combustion of cattle feedlot manure for energy production”; John M. Sweeten, Jacob Korenberg, Wayne A. LePori, K. Annamalai, Calvin B. Parnell; Energy in Agriculture; Agosto 1985; Pág. 5.

“Analysis of selected emerging contaminants in sewage sludge”; M.S. Díaz-Cruz, M.J. García-Galán, P. Guerra, A. Jelic, C. Postigo, E. Eljarrat, M. Farré, M.J. López de Alda, M. Petrovic, D. Barceló; Trends in Analytical Chemistry; 2009; Pág. 4 y 5.

“Propuesta de manejo de los lodos residuales de la planta de tratamiento de la ciudad industrial del valle de Cuernavaca”; M.L. Ortiz-Hernández, M.E. Gutiérrez-Ruiz, E. Sánchez-Salinas; Rev. Int. Contam. Ambient.; 1995; Pág. 9.

“Pathogens and antibiotic residues in animal manures and hygienic and ecological risks related to subsequent land application”; J. Venglobsky, N. Sasakova, I. Placha; Bioresource Technology; 2009; Pág. 4.

“Termodinámica”; Yunus A. Çengel, Michael A. Boles; Julio 2007; Pág. 682 y 685.

```

TALK=f;RUN( 1, 1);VDU=X11-TERM

** definition of variables
REAL (PI,AINBOQ,print)
REAL (ROGIN1)
REAL (DIAM,DIAMBOQ, DIN2)
REAL (FGIN1,VEL1)
REAL (FMC1, FCA1)
REAL (ROMEAN)
REAL (TGIN1)
REAL (HSIN,HGIN1,HGIN2,HGIN3)
REAL (TKEIN1,EPIN1,DIST)
** dimensiones (SI)
PI=3.14159
diametro gasificador
DIAM=0.40
PI=DIAM

diametros boquillas
DIAMBOQ=0.03
Area boquillas
AINBOQ=(PI*DIAMBOQ*DIAMBOQ)/4
ainboq
** flujos masicos aire - kg/s
Primer nivel, flujo por boquilla y por m**2
FGIN1=(0.209/2)/AINBOQ
fgin1
** length scale for inlet epsilon
DIST=(DIAMBOQ)/10.0
** flujos masicos carbon - kg/s
-Primer nivel, flujo por boquilla
FMC1=FGIN1*1.66666667
FCA1=FMC1
fca1
** inlet temperatures - K
lodos
air
TGIN1= 400.0
evaluate inlet densities - currently only used for fiinit(rho1)
PRESS0=1.7e+5
TEMPO=0.
ROGIN1=PRESS0/(287.41*TGIN1)
ROGIN1=FGIN1/VEL1
rogin1
*Densidad de la biomasa
REAL(ROCOAL); ROCOAL=207.5
* Velocidades
VEL1=2.5
VEL1=FGIN1/ROGIN1
vel1
REAL(FVA1)
REAL(FVC1,S1,S11)
REAL(UNO1)
FVA1=FGIN1*AINBOQ/(ROGIN1)
FVC1=FCA1*AINBOQ/(ROCOAL)
FVA1
FVC1
S1=FVA1/(FVA1+FVC1);S11=FVC1/(FVA1+FVC1)
S1
S11
UNO1=S1+S11
UNO1
TKEIN1=0.0025*VEL1*VEL1

```

```

EPIN1=0.1643*TKEIN1**1.5/DIST
TKEIN1=0.3
EPIN1=3.0
** Definiciones para el COFFUS
BOOLEAN(BURN,INERT,NOXCAL,RADCAL,SIZECH)
** Activa combustion
+ BURN=T

** Desactiva Radiacion
+ RADCAL=f

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

ELSE
ANA=2
** Analisis aproximado (en fracciones masicas)
YWATM = Humedad YASHM = ceniza
YRAWC=Carbon fijo (char)
YCHAM = volatiles
REAL(YWATM,YASHM,YCHAM,YRAWC)
YWATM =11.75/100 ;YASHM = 23.51/100
YCHAM = 53.48/100 ;YRAWC = 11.27/100

ENDIF
** Dry coal ultimate analysis (mass fractions) ----
YCDRY =carbon1 YODRY = oxygen YSDRY = sulphur
YHDRY = hydrogen YNDRY = nitrogen
REAL(YHDRY,YCDRY,YODRY,YNDRY,YSDRY)
YCDRY = 39.48/100;YHDRY = 6.19/100
YODRY = 25.46/100;YNDRY = 3.93/100
YSDRY = 1.-YASHM-YHDRY-YCDRY-YODRY-YNDRY
YSDRY=1.45/100

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

*****
IRUNN = 1;LIBREF = 3
*****

Group 1. Run Title
TEXT(BIOGAS )
*****

Group 2. Transience
STEADY = T
*****

CARTES=T
NX=19
NREGX=2
IREGX=1;GRDPWR(X,12,0.25,1.0)
IREGX=2;GRDPWR(X,7,0.15,1.0)

```

```

NY=45
NREGY=3
IREGY=1;GRDPWR(Y,10,0.1524,1.0)
IREGY=2;GRDPWR(Y,20,0.5238,1.0)
IREGY=3;GRDPWR(Y,15,0.5238,1.0)
NZ=1
NREGZ=1
IREGZ=1;GRDPWR(Z,1,0.05,1.0)
Group 6. Body-Fitted coordinates

```

Group 7. Variables: STOREd,SOLVEd,NAMED

```

-----
+ STORE(TMP1)
ONEPHS=f
SOLVE(P1,U1,V1)
SOLUTN(P1,Y,Y,Y,P,P,P)
  STORE(P2)
+ SOLUTN(U2,Y,Y,N,N,N,Y);SOLUTN(V2,Y,Y,N,N,N,Y)
+ SOLUTN(W2,Y,Y,N,N,N,Y)
+ SOLUTN(R1,Y,Y,N,N,N,Y);SOLUTN(R2,Y,Y,N,N,N,Y)
+ SOLUTN(H1,Y,Y,N,P,P,P);SOLUTN(H2,Y,Y,N,N,N,Y)
+ STORE(TMP2)
TURMOD(KEMODL)
KELIN=3
STORE(PRPS)
STORE(VPOR)
  * Gas-phase mass-fractions
+ SOLVE(YCHX,YCO2,YCO,YH2O,YH2,YO2);STORE(YN2)
  * Particle-phase mass-fractions
+ SOLVE(COL2,CHA2,WAT2);STORE(ASH2)
  Particle Size Change

```

```

-----
REAL(SMDIAM);SMDIAM=0.001
SMDIAM
+ SOLVE(PHIS)
STORE(SIZE)
FIINIT(PHIS)=.5
+ TERMS(PHIS,P,P,P,N,P)
FIINIT(SIZE)=SMDIAM
  Thermal Radiation

```

```

-----
INTEGER(IHRADL)
IF(RADCAL) THEN
REAL(RADW,ABSORB,SCAT,SIGMA,EMIW,ED2ME,TWALL)
SIGMA=5.6697E-8/1e6;EMIW=0.7
TWALL=400.
RADW=SIGMA*TWALL**4;ABSORB=0.3;SCAT=0.14
RADW
RADIAT(FLUX,ABSORB,SCAT,H1)
FIINIT(RADY)=RADW;FIINIT(RADX)=RADW
ED2ME=EMIW/(2.0-EMIW)
RELAX(RADY,FALSDT,1.0)
RELAX(RADX,FALSDT,1.0)
ENDIF

```

Group 8. Terms & Devices

```

-----
TERMS(H1,N,P,P,P,P,P)
TERMS(H2,N,P,P,P,P,P)
  * Gas-phase mass-fractions (assign variables to phases)
TERMS(YO2,P,P,P,P,Y,P);TERMS(YCHX,P,P,P,P,Y,N)
TERMS(YCO,P,P,P,P,Y,P);TERMS(YCO2,P,P,P,P,Y,P)
TERMS(YH2O,P,P,P,P,Y,P);TERMS(YH2,P,P,P,P,Y,P)

```

```

* Particle-phase mass-fractions (assign variables to phases)
TERMS(COL2,P,P,P,P,N,P);TERMS(CHA2,P,P,P,P,N,P)
TERMS(WAT2,P,P,P,P,N,P)
CSG3=CNGR
  Group 9. Properties
  -----
STORE(RHO1)
TEMP0=0.0
REAL(RG56,RG57)
ENUL=1.8E-5
RHO2=ROCOAL
PRNDTL(H2)=1.E10
RHO1=GRND;TMP1=GRND;RG56=GRND;RG57=2.0

CP1=1.005/1e3
CP2=1.8/1e3
TMP2B=1.0/CP2
TMP2=GRND
PRNDTL(10)=GRND
STORE(LMPW)
PRT(R2)=1.e20
  * Enthalpies solved in MJ/kg
PRNDTL(WAT2)=1.E10;PRNDTL(COL2)=1.E10;PRNDTL(CHA2)=1.E10
  Group 10. Inter-Phase Transfer Processes
  -----
STORE(CFIP)

+ RLOLIM=1.E-5;CFIPS=GRND;;STORE(SLIP,REYN)
+ CINT(YCHX)=0.0;CINT(YO2)=0.0;CINT(YH2O)=0.0;CINT(YCO)=0.0
CINT(YH2)=0.0
+ CINT(YCO2)=0.0;CINT(WAT2)=0.0;CINT(CHA2)=0.0;CINT(COL2)=0.0
+ CINT(H1)=0.0;CINT(H2)=0.0
  * storage for relaxation of heat source
+ STORE(QDOT);FIINIT(QDOT)=0.0
  * special relaxation factors for heat source
+ RELAX(QDOT,LINRLX,1.0)
+ RESREF(QDOT)=0.3;ENDIT(QDOT)=0.3;PRT(QDOT)=1.0;PRNDTL(QDOT)=1.0
+ REAL(THCON);THCON=0.0458
PRNDTL(10)=grnd
PRT(R2)=1.e20
  Group 11. Initialise Var/Porosity Fields
  -----
REAL(HINI,TREFE,TINI)
FIINIT(R2)=1.E-5;FIINIT(R1)=1.0-FIINIT(R2)
FIINIT(YCHX)=0.;FIINIT(YCO)=0.1
+ FIINIT(YO2) =.232 ;FIINIT(YH2O)=0.
FIINIT(YH2)=0.0
+ FIINIT(YN2) =.768;FIINIT(YCO2)=0.0
FIINIT(ASH2)=YASHM;FIINIT(CHA2)=YRAWC
FIINIT(WAT2)=YWATM;FIINIT(COL2)=0.0
TREFE=273.0
TINI=1000.
  * compute the enthalpy of the air stream
  solo para valor inicial
RG57=2.0
HINI=0.77*(0.97035+1.493E-4*TINI/RG57)*TINI
HINI=HINI+0.23*(1.0802+3.265E-5*TINI/RG57)*TINI
  ** Conversion de HCALC a J/kg
HINI=HINI/1000
hini
FIINIT(H1)=HINI;FIINIT(H2)=CP2*TINI
FIINIT(TEMP1)=TINI;FIINIT(TEMP2)=TINI
FIINIT(RHO1)=PRESS0/(FIINIT(TEMP1))/287.398

```

FIINIT(V1)=1
FIINIT(V2)=1
fiinit(vpor)=1.0

* friccion

WALL(PAREDW, WEST, 1, 1, 1, 40, 1, 1, 1, 1)
WALL(PAREDW1, WEST, 1, 1, 41, 45, 1, 1, 1, 1)
WALL(PAREDS, SOUTH, 1, 19, 1, 1, 1, 1, 1, 1)
WALL(PAREDS1, SOUTH, 13, 19, 10, 10, 1, 1, 1, 1)
WALL(PAREDE, EAST, 12, 12, 10, 40, 1, 1, 1, 1)
WALL(PAREDE1, EAST, 12, 12, 41, 45, 1, 1, 1, 1)

* Calculo de las entalpias del aire de entrada

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

RG57=2.0

HCALC1=0.77*(0.97035+1.493E-4*TCALC1/RG57)*TCALC1
HCALC1=HCALC1+0.23*(1.0802+3.265E-5*TCALC1/RG57)*TCALC1

** Conversion de HCALC a J/kg

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

Group 13. Boundary conditions and special sources

PATCH(KESOURCE, PHASEM, 1, NX, 1, NY, 1, NZ, 1, LSTEP)
COVAL(KESOURCE, KE, GRND4, GRND4)
COVAL(KESOURCE, EP, GRND4, GRND4)
PATCH(BUOYANCY, PHASEM, 1, NX, 1, NY, 1, 1, 1, 1)
COVAL(BUOYANCY, v1, FIXFLU, GRND1)
COVAL(BUOYANCY, v2, FIXFLU, GRND1)
BUOYA = .000E+00 ; BUOYC = -9.810E+00 ; BUOYB = .000E+00
* 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)

* Gas-particles heat transfer
Checado en gxcoal

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

COAL DRYING

Si esta en gxcoal

PATCH(VAPORIS0, FREEVL, 1, NX, 1, NY, 1, NZ, 1, LSTEP)
COVAL(VAPORIS0, P1, FIXFLU, GRND5)
COVAL(VAPORIS0, P2, FIXFLU, GRND5)
COVAL(VAPORIS0, YH2O, ONLYMS, 1.0); COVAL(VAPORIS0, H1, ONLYMS, GRND5)

PATCH(VAPORIS2, FREEVL, 1, NX, 1, NY, 1, NZ, 1, LSTEP)
COVAL(VAPORIS2, H2, FIXFLU, GRND5); COVAL(VAPORIS2, WAT2, FIXFLU, GRND5)

* Patch to counter the transfer of species due to mass transfer

Si esta en gxcoal

PATCH(VAPORIS5, FREEVL, 1, NX, 1, NY, 1, NZ, 1, LSTEP)
COVAL(VAPORIS5, COL2, GRND9, GRND9); COVAL(VAPORIS5, CHA2, GRND9, GRND9)
COVAL(VAPORIS5, WAT2, GRND9, GRND9)

```
COVAL(VAPORIS5,PHIS,GRND9,GRND9)
COVAL(VAPORIS5,PHIS,FIXFLU,GRND5)
```

```
STORE(VAPO);FIINIT(VAPO)=0.0;RELAX(VAPO,LINRLX,1.0)
RESREF(VAPO)=0.3;ENDIT(VAPO)=0.3;PRT(VAPO)=1.0;PRNDTL(VAPO)=1.0
REAL(ADEVOL,EDEVOL,RG55,C1EBU,C2EBU)
INTEGER(IG14,IG16,MODHET,IORDER,IKDMEA)
```

RAW COAL VOLATILISATION: Raw coal > Y Volatiles + (1-Y) Char

```
-----
Si esta en gxcoal
+ PATCH(DEVOLAT0,FREEVL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
+ COVAL(DEVOLAT0,P1,FIXFLU,GRND1)
+ COVAL(DEVOLAT0,P2,FIXFLU,GRND1)
+ COVAL(DEVOLAT0,YCHX,ONLYMS,GRND1);COVAL(DEVOLAT0,YO2,ONLYMS,GRND1)
+ COVAL(DEVOLAT0,H1,ONLYMS,GRND1)
Si esta en gxcoal
* Patch for volatile phase-2 species
+ PATCH(DEVOLAT2,FREEVL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
+ COVAL(DEVOLAT2,CHA2,FIXFLU,GRND1)
+ COVAL(DEVOLAT2,COL2,GRND1,0.0)
* ADEVOL = constant A * EDEVOL = constant E/R in volat. model
+ ADEVOL=2000.0;EDEVOL=2.3E4/8.130
```

```
* store volatilization rate & special relaxation
+ STORE(VRAT);FIINIT(VRAT)=0.0;RELAX(VRAT,LINRLX,4.0)
+ RESREF(VRAT)=0.3;ENDIT(VRAT)=0.3;PRT(VRAT)=1.0;PRNDTL(VRAT)=1.0
```

* Use this line to de-activate: devolat=skip;rg(21)=0.0

```
Patch to counter the transfer of non-volatile species
Si esta en gxcoal
+ PATCH(DEVOLAT5,FREEVL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
+ COVAL(DEVOLAT5,COL2,GRND9,GRND9)
+ COVAL(DEVOLAT5,CHA2,GRND9,GRND9)
+ COVAL(DEVOLAT5,WAT2,GRND9,GRND9)
+ COVAL(DEVOLAT5,PHIS,GRND9,GRND9)
COVAL(DEVOLAT5,PHIS,FIXFLU,GRND1)
```

```
* Ask litec what this is; suggest better name than IG16
* IG16 = 1 indicates CO as product, =2 indicates CO2
+ IG16=1
```

TWO-STEP HOMOGENEOUS COMBUSTION OF VOLATILES (YCHX)

```
-----
* Ask litec what these are:
Store combustion rate for relaxation and products for printout
* LITER=1 selects mixing rate (ep/k) as combustion rate
=2 Kinetic; 3 minimun; 4 harmonic
+ STORE(COM1);FIINIT(COM1)=0.0;LITER(COM1)=1;RELAX(COM1,LINRLX,1.0)
+ RESREF(COM1)=0.3;ENDIT(COM1)=0.3;PRT(COM1)=1.0;PRNDTL(COM1)=1.0
+ STORE(COM2);FIINIT(COM2)=0.0;RELAX(COM2,LINRLX,1.0)
+ RESREF(COM2)=0.3;ENDIT(COM2)=0.3;PRT(COM2)=1.0;PRNDTL(COM2)=1.0
+ LITER(COM2)=1
+ STORE(COM3);FIINIT(COM3)=0.0
RELAX(COM3,LINRLX,0.5)
* C1EBU & C2EBU = EBU constants in combustion model
+ C1EBU=4.0;C2EBU=0.0
```

```
*Reaccion
CHx + O2 -> CO + H2O seguida por CO + O2 -> CO2
Checado en gxcoal
```

```

+ PATCH(COMBUSTA,PHASEM,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
+ COVAL(COMBUSTA,YCHX,FIXFLU,GRND2);COVAL(COMBUSTA,YO2,FIXFLU,GRND2)
+ COVAL(COMBUSTA,YH2O,FIXFLU,GRND2);COVAL(COMBUSTA,YCO,FIXFLU,GRND2)
+ COVAL(COMBUSTA,H1,FIXFLU,GRND2)
  checado en gxcoal
+ PATCH(COMBUSTB,PHASEM,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
+ COVAL(COMBUSTB,YO2,FIXFLU,GRND2);COVAL(COMBUSTB,YCO2,FIXFLU,GRND2)
+ COVAL(COMBUSTB,YCO,FIXFLU,GRND2);COVAL(COMBUSTB,H1,FIXFLU,GRND2)
  * Reaccion H2 + 0.5O2 -> H2O
+ PATCH(COMBUSTE,PHASEM,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
+ COVAL(COMBUSTE,YO2,FIXFLU,GRND2);COVAL(COMBUSTE,YH2O,FIXFLU,GRND2)
+ COVAL(COMBUSTE,YH2,FIXFLU,GRND2);COVAL(COMBUSTE,H1,FIXFLU,GRND2)

```

HETEROGENEOUS COMBUSTION OF CHAR C(S) + O2 > CO2

 * Reaccion C(particula) + b/2 --> COb + hCtCO o hCtCO2 (por kg C)
 ShetO2 kg O2/kg C

```

+ PATCH(BURNOUT0,FREEVL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
+ COVAL(BURNOUT0,P1,FIXFLU,GRND5)
+ COVAL(BURNOUT0,P2,FIXFLU,GRND5)
+ COVAL(BURNOUT0,H1,ONLYMS,GRND1)

```

```

+ PATCH(BURNOUT2,FREEVL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
+ COVAL(BURNOUT2,H1 ,FIXFLU,GRND5)
+ COVAL(BURNOUT2,YO2 ,FIXFLU,GRND5)
+ COVAL(BURNOUT2,CHA2,FIXFLU,GRND5)
+ COVAL(BURNOUT2,YCO,GRND9,1.0)

```

* Ask litec what this is:

coval(burnout2,yco2,grnd9,1.0);ig14=1

* Ask litec for clarification of these:

* IG14 = 1 indicates CO as product, =2 indicates CO2

* MODHET = selects kinetic law for heterog. reaction

* IORDER = selects order of heterog. reaction

* IKDMEA = selects kinetic/diffusion weighting

*****Voy a modificar MODHET, en gxcoal vienen algunos modelos

MODHET=1 Modelo de IW Smith, 19th. Symp on Comb.

IORDER=1 y IKDMEA=1 selecciona en gxcoal GKT=AMIN1(GKC,GKD)

```

+ IG14=1;MODHET=1;IORDER=1;IKDMEA=1

```

* storage of rate triggers calculation

```

+ STORE(BOUT);FIINIT(BOUT)=0.0
+ STORE(BOUG);FIINIT(BOUG)=0.0
+ STORE(HIDR);FIINIT(HIDR)=0.0
+ RELAX(BOUT,LINRLX,0.6)
+ RELAX(BOUG,LINRLX,0.6)
+ RELAX(HIDR,LINRLX,0.6)

```

```

+ ENDIT(BOUT)=1.E-20;PRT(BOUT)=0.1;PRNDTL(BOUT)=1.E+20
+ RELAX(BOUG,LINRLX,4.0);RESREF(BOUG)=0.3;RESREF(BOUT)=0.3
+ ENDIT(BOUG)=1.E-20;PRT(BOUG)=1.;PRNDTL(BOUG)=1.E+0
+ RELAX(HIDR,LINRLX,4.0);RESREF(HIDR)=0.3;RESREF(BOUT)=0.3
+ ENDIT(HIDR)=1.E-20;PRT(HIDR)=1.;PRNDTL(HIDR)=1.E+0
  * RG55 = ask litec what this is
+ RG55=0.0

```

* Patch to counter the transfer of non-combusting species

Si esta en gxcoal

```

+ PATCH(BURNOUT5,FREEVL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
+ COVAL(BURNOUT5,COL2,GRND9,GRND9);COVAL(BURNOUT5,CHA2,GRND9,GRND9)
+ COVAL(BURNOUT5,WAT2,GRND9,GRND9)

```



```

* quito el siguiente renglon, porque la combustion heterogenea
si contribuye a la disminucion de la particula.
+ COVAL(BURNOUT5,PHIS,GRND9,GRND9)
** Reaccion heterogenea
C + CO2 -> 2CO
+ PATCH(BURNGAS0,FREEVL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
+ COVAL(BURNGAS0,P1,FIXFLU,GRND5)
+ COVAL(BURNGAS0,P2,FIXFLU,GRND5)

+ PATCH(BURNGAS2,FREEVL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
+ COVAL(BURNGAS2,H1 ,FIXFLU,GRND5)
+ COVAL(BURNGAS2,YCO2 ,FIXFLU,GRND5)
+ COVAL(BURNGAS2,CHA2,FIXFLU,GRND5)
+ COVAL(BURNGAS2,YCO,GRND9,1.0)

+ PATCH(BURNGAS5,FREEVL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
+ COVAL(BURNGAS5,COL2,GRND9,GRND9);COVAL(BURNGAS5,CHA2,GRND9,GRND9)
+ COVAL(BURNGAS5,WAT2,GRND9,GRND9)
+ COVAL(BURNGAS5,PHIS,GRND9,GRND9)

** Reaccion heterogenea
C + H2O -> H2 + CO
+ PATCH(BURNHID0,FREEVL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
+ COVAL(BURNHID0,P1,FIXFLU,GRND5)
+ COVAL(BURNHID0,P2,FIXFLU,GRND5)

+ PATCH(BURNHID2,FREEVL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
+ COVAL(BURNHID2,H1 ,FIXFLU,GRND5)
+ COVAL(BURNHID2,YH2O ,FIXFLU,GRND5)
+ COVAL(BURNHID2,CHA2,FIXFLU,GRND5)
+ COVAL(BURNHID2,YCO,GRND9,1.0)
+ COVAL(BURNHID2,YH2,GRND9,1.0)

+ PATCH(BURNHID5,FREEVL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
+ COVAL(BURNHID5,COL2,GRND9,GRND9);COVAL(BURNHID5,CHA2,GRND9,GRND9)
+ COVAL(BURNHID5,WAT2,GRND9,GRND9)
+ COVAL(BURNHID5,PHIS,GRND9,GRND9)

PATCH(SIZECHAN,VOLUME,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
COVAL(SIZECHAN,PHIS,FIXFLU,GRND7)
* CONDICIONES DE FRONTERA GASIFICADOR
** Boquillas en combustor
PRIMER NIVEL

PATCH (ENTRADA ,NORTH ,1,12,45,45,1,1,1)
*Lodos y aire*

COVAL (ENTRADA,P2,FIXFLU,0.06631456*(1-0.7))
COVAL (ENTRADA,U2,ONLYMS,0.0)
COVAL (ENTRADA,V2,ONLYMS,-0.00031959)
COVAL (ENTRADA,H2,ONLYMS,CP2*TCALC1)
COVAL (ENTRADA,PHIS,ONLYMS,1.)
COVAL (ENTRADA,WAT2, .000E+00, YWATM)
COVAL (ENTRADA,CHA2, .000E+00, YCHAM)
COVAL (ENTRADA,COL2,0.000E+00, 1-YASHM-YWATM)
COVAL (ENTRADA,YO2 ,0.000E+00, 2.320E-01)
COVAL (ENTRADA,YH2O,0.000E+00, .000E+00)
COVAL (ENTRADA,YH2,0.000E+00, .000E+00)
COVAL (ENTRADA,YCO,0.000E+00, .000E+00)
COVAL (ENTRADA,YCO2,0.000E+00, .000E+00)
COVAL (ENTRADA,YCHX,0.000E+00, .000E+00)
COVAL (ENTRADA,RADY, 0.000E+00, 0.000E+00)
COVAL (ENTRADA,RADX, 0.000E+00, 0.000E+00)

```

PATCH (BOQ1A,WEST ,1,1,44,45,1,1,1,1)
Aire
COVAL (BOQ1A,P1,FIXFLU,0.04310446*0.35)
COVAL (BOQ1A,U1,ONLYMS,0.03652921)
COVAL (BOQ1A,V1,ONLYMS,0.0)
COVAL (BOQ1A,KE,ONLYMS,0.3)
COVAL (BOQ1A,EP,ONLYMS,3.0)
COVAL (BOQ1A,H1,ONLYMS,HCALC1)

PATCH (BOQ1B,EAST ,12,12,44,45,1,1,1,1)
Aire
COVAL (BOQ1B,P1,FIXFLU,0.04310446*0.35)
COVAL (BOQ1B,U1,ONLYMS,-0.03652921)
COVAL (BOQ1B,V1,ONLYMS,0.0)
COVAL (BOQ1B,KE,ONLYMS,0.3)
COVAL (BOQ1B,EP,ONLYMS,3.0)
COVAL (BOQ1B,H1,ONLYMS,HCALC1)

PATCH(OUT,EAST,19,19,1,9,1,1,1,1)
COVAL(OUT ,U1 , .000E+00, .000E+00)
COVAL(OUT ,U2 , .000E+00, .000E+00)
COVAL(OUT ,V1 , .000E+00, .000E+00)
COVAL(OUT ,V2 , .000E+00, .000E+00)
COVAL(OUT ,W1 , .000E+00, .000E+00)
COVAL(OUT ,W2 , .000E+00, .000E+00)
COVAL(OUT ,P1 , 1.000E+02, .000E+00)
COVAL(OUT ,P2 ,(RHO2/RHO1)*1.e+3,0.0)
COVAL(OUT ,KE , .000E+00, .000E+00)
COVAL(OUT ,EP , .000E+00, .000E+00)
COVAL(OUT ,H1 , .000E+00, SAME)
COVAL(OUT ,H2 , .000E+00, SAME)
COVAL(OUT ,PHIS, .000E+00, .000E+00)
COVAL(OUT ,WAT2, .000E+00, .000E+00)
COVAL(OUT ,CHA2, .000E+00, .000E+00)
COVAL(OUT ,COL2, .000E+00, .000E+00)
COVAL(OUT ,YO2 , .000E+00, .000E+00)
COVAL(OUT ,YH2O, .000E+00, .000E+00)
COVAL(OUT ,YH2, .000E+00, .000E+00)
COVAL(OUT ,YCO , .000E+00, .000E+00)
COVAL(OUT ,YCO2, .000E+00, .000E+00)
COVAL(OUT ,YCO2, .000E+00, .000E+00)
COVAL(OUT ,RADY, 0.000E+00, SAME)
COVAL(OUT ,RADX, 0.000E+00, SAME)

*****RADIATION

PATCH(PAREDW,WEST,1,1,1,44,1,1,1,1)
COVAL(PAREDW,RADX,ED2ME,RADW)

PATCH(PAREDW1,WEST,1,1,44,45,1,1,1,1)
COVAL(PAREDW1,RADX,ED2ME,RADW)

PATCH(PAREDS,SOUTH,1,19,1,1,1,1,1,1)
COVAL(PAREDS,RADX,ED2ME,RADW)

PATCH(PAREDS1,SOUTH,13,19,10,10,1,1,1,1)
COVAL(PAREDS1,RADX,ED2ME,RADW)

PATCH(PAREDE,EAST,12,12,10,44,1,1,1,1)
COVAL(PAREDE,RADX,ED2ME,RADW)

PATCH(PAREDE1,EAST,12,12,44,45,1,1,1,1)
COVAL(PAREDE1,RADX,ED2ME,RADW)

```

CONPOR(BLOQUE1,0.0,CELL,13,19,10,45,1,1)
  CONPOR(BLOQUE2,0.0,CELL,13,19,42,45,1,1)
  CONPOR(BLOQUE3,0.0,CELL,13,19,40,41,1,1)
Group 15. Terminate Sweeps
LSWEEP = 4000
RESFAC = 1.000000E-03

```

Group 16. Termination of iterations

```

-----
* Limit iterations to save cpu time
DO II=12,NPHI
+ IF(LITER(II).GT.8) THEN
+ LITER(II)=8
+ ENDIF
ENDDO

```

Group 17. Under-relaxation devices

```

-----
REAL(FACLIN,FACMIN)
+ FACLIN=0.01
  RELAX(PHIS,LINRLX,0.001)
RELAX(CFIP,LINRLX,0.3);RELAX(RHO1,LINRLX,0.3)
RELAX(YCHX,LINRLX,FACLIN);RELAX(YO2, LINRLX,FACLIN)
RELAX(YH2O,LINRLX,FACLIN);RELAX(YCO, LINRLX,FACLIN)
RELAX(YH2,LINRLX,FACLIN)
RELAX(YCO2,LINRLX,0.01);RELAX(COL2,LINRLX,0.02)
RELAX(CHA2,LINRLX,0.01);RELAX(WAT2,LINRLX,0.01)
* Special relaxation practices for sources
* FACMIN = ask litec what this is
FACMIN = 0.9

```

Group 18. Limits on variables or increments to them

```

-----
VARMIN(H1)=.000010;VARMIN(H2)=.00001
VARMAX(H1)=100.0;VARMAX(H2)=100.0
VARMIN(R2) =1.E-9
VARMIN(PHIS)=1.E-6;VARMAX(PHIS)=1.0E+2
VARMAX(SIZE)=SMDIAM;VARMIN(SIZE)=1.E-11
VARMAX(YCHX)=0.5;VARMIN(YCHX)=1.E-6
VARMAX(YCO) =0.5;VARMIN(YCO) =1.E-6
VARMAX(YO2) =1.0;VARMIN(YO2) =1.E-6
VARMAX(YH2O)=0.5;VARMIN(YH2O)=1.E-6
VARMAX(YH2)=0.5;VARMIN(YH2)=1.E-6
VARMAX(YCO2)=1.0;VARMIN(YCO2)=1.E-6
VARMAX(YN2) =1.0;VARMIN(YN2) =1.E-6
VARMAX(CHA2)=1.0;VARMIN(CHA2)=1.E-6
VARMAX(COL2)=1.0-YASHM-YWATM;VARMIN(COL2)=1.E-6
VARMAX(WAT2)=0.5;VARMIN(WAT2)=1.E-8
VARMAX(ASH2)=0.5;VARMIN(ASH2)=1.E-6
VARMAX(TMP2) = 1.000000E+4 ;VARMIN(TMP2) =273.0
VARMAX(TMP1) = 1.000000E+4 ;VARMIN(TMP1) =273.0
VARMAX(U1 ) = 5.000000E+01 ;VARMIN(U1 ) =-5.000000E+01
VARMAX(U2 ) = 5.000000E+01 ;VARMIN(U2 ) =-5.000000E+01
VARMAX(V1 ) = 5.000000E+01 ;VARMIN(V1 ) =-5.000000E+01
VARMAX(V2 ) = 5.000000E+01 ;VARMIN(V2 ) =-5.000000E+01

varmax(P1)=1.000000E+04
varmin(P1)=1.0E-4
RELAX(P1 ,LINRLX, 8.000E-2)
  RELAX(P1 ,FALSDT, 1.000E-01)
  RELAX(P2 ,LINRLX, 1.000E)
RELAX(U1 ,FALSDT, 1.000E-01)
RELAX(U2 ,FALSDT, 1.000E-01)

```

RELAX(V1 ,FALSDT, 1.000E-01)
RELAX(V2 ,FALSDT, 1.000E-01)

RELAX(R1 ,LINRLX, 4.000E-03)
RELAX(R2 ,LINRLX, 4.000E-03)
RELAX(KE ,FALSDT, 5.000E-03)
RELAX(EP ,FALSDT, 5.000E-03)
RELAX(PHIS,LINRLX, 1.000E-03)
RELAX(H1 ,LINRLX, 4.000E-01)
RELAX(H2 ,LINRLX, 4.000E-01)
RELAX(rho1,LINRLX, 2.000E-01)

Group 19. Data communicated by satellite to GROUND

BOOLEAN(SPEOUT)

* SPEOUT = T activates special output data

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

* CBETA * YVOL * STCOEF * HEATC * HEATH * HEATC2

* HITMUL * RG91 (ask litec what all these are)

CBETA=0.0;YVOL =0.0;STCOEF=0.0;HEATC=0.0

HEATH=0.0;HEATC2=0.0;HITMUL=0.0;RG42 =0.0;RG91=0.0

** Coal size-change calculation

(en grupo 13)

* PATCH(SIZECHAN,VOLUME,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)

* COVAL(SIZECHAN,PHIS,FIXFLU,GRND7)

* RG100 = minimum size = 5.E-6

* RG101 = factor for breakup during devolatilization =-100.

* RG102 = factor for slip velocity

* RG103 = factor for turbulent kinetic energy

* RG104 = particle swelling =-0.2

RG100=5.E-6;RG101=-100.0;RG102=-1.0E-3;RG103=-0.001;RG104=-0.2

RG100=5.E-6;RG101=-100.0;RG102=0.0;RG103=0.00;RG104=-0.2

RG100=0.0;RG101=0.0;RG102=0.0;RG103=0.00;RG104=0.0

** Store Nox variables in combustion run

Group 20. Preliminary Printout

ECHO = T

Group 21. Print-out of Variables

OUTPUT(H1 ,N,N,Y,Y,N,N)

Group 22. Monitor Print-Out

IXMON = 19 ;IYMON = 5 ;IZMON = 1

NPRMON = 100000

NPRMNT = 1

TSTSWP=-1

Group 23.Field Print-Out & Plot Control

NPRINT = 100000

ISWPRF = 1 ;ISWPRL = 100000

No PATCHes used for this Group

Group 24. Dumps For Restarts

NOWIPE = T

STOP