



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA  
DE MÉXICO**

---

---

**FACULTAD DE INGENIERÍA**

**DIVISIÓN DE INGENIERÍA MECÁNICA E  
INDUSTRIAL**

**TESIS**

“Simulación numérica de un gasificador de  
biomasa”

Que para obtener el Título de

**INGENIERO MECÁNICO**

**PRESENTA:**

**LUIS MANUEL CERVANTES MARCELINO**



Director: William Vicente y Rodríguez

Ciudad Universitaria, Diciembre 2010

## HOMBRES QUE LUCHAN

Hay hombres que luchan un día y  
y son buenos.

Hay otros que luchan un año  
y son mejores.

Hay quienes Luchan muchos años  
y son muy buenos

Pero hay los que luchan toda la vida:

*esos son los imprescindibles...*

Bertolt Brecht

# Índice general

<b>1. Gasificación y Biomasa</b>	<b>6</b>
1.1. Fuentes renovables de energía . . . . .	6
1.2. Biomasa . . . . .	7
1.3. Gasificación . . . . .	8
1.3.1. Fundamentos fisicoquímicos de la gasificación . . . . .	8
1.4. Tipos de gasificadores . . . . .	10
<b>2. Ecuación de Transporte</b>	<b>12</b>
2.1. Ecuación de Continuidad . . . . .	12
2.2. Ecuación de conservación de movimiento . . . . .	13
2.3. Ecuación de conservación de la energía . . . . .	15
2.4. Conservación de las especies químicas . . . . .	16
2.5. Ecuaciones de estado y flujo difusivo . . . . .	18
2.6. Promediado de las ecuaciones . . . . .	19
<b>3. Método de Solución</b>	<b>23</b>
3.1. Método de volúmenes finitos . . . . .	23
<b>4. Ecuaciones, configuración y consideraciones realizadas para la simulación</b>	<b>29</b>
4.1. Fracción masa, variables y tamaño de partícula. . . . .	29
4.2. Reacciones fisicoquímicas . . . . .	31
4.3. Configuración del gasificador y condiciones de la simulación . . . . .	34
<b>5. Resultados</b>	<b>38</b>
5.0.1. Predicciones numéricas para la fase sólida . . . . .	38
5.0.2. Predicciones numéricas para la fase gaseosa . . . . .	38
5.0.3. Propiedades de flujo . . . . .	41
<b>6. Conclusiones</b>	<b>50</b>
<b>A. Turbulencia</b>	<b>52</b>
A.1. Concepto turbulencia . . . . .	52
A.2. Niveles de modelización . . . . .	53
A.3. Modelos de Viscosidad Turbulenta . . . . .	56

A.3.1. Modelo $\kappa - \varepsilon$ . . . . .	57
<b>B. Esquemas de Discretización</b>	<b>59</b>
B.1. Esquemas lineales discretización . . . . .	59
<b>C. Ecuaciones</b>	<b>62</b>

# Índice de figuras

1.1.	Diagrama esquemático del proceso de gasificación. . . . .	9
1.2.	Clasificación de gasificadores en función del régimen de flujo. . . . .	11
2.1.	Diagrama esquemático de un volumen de control cualquiera. . . . .	13
2.2.	Diagrama esquemático de un volumen de control donde actúan diversas fuerzas . . . . .	14
2.3.	Diagrama esquemático de un volumen de control donde se representan las fuerzas y flujos de energías que se encuentran en equilibrio. . . . .	15
2.4.	Especies químicas . . . . .	17
3.1.	Diagrama esquemático de discretización del dominio en pequeños volúmenes de control. . . . .	24
3.2.	Diagrama esquemático de la notación de una celda y sus vecinas. . . . .	25
3.3.	Diagrama esquemático de una celda bidimensional . . . . .	25
4.1.	Esquema de entrada y salida de los reactivos y productos del gasificador. . . . .	34
4.2.	Mallado. . . . .	35
4.3.	Configuración del gasificador. . . . .	35
5.1.	Cambio de la humedad en la biomasa durante el proceso. . . . .	39
5.2.	Cambio del carbón crudo en el proceso. . . . .	39
5.3.	Cambio de los productos de la pirólisis en el proceso. . . . .	40
5.4.	Generación de cenizas en el proceso. . . . .	40
5.5.	Cambio del tamaño de la partícula. . . . .	41
5.6.	Generación de monóxido de carbono. . . . .	42
5.7.	Generación de dióxido de carbono. . . . .	42
5.8.	Vapor de agua generada durante el proceso de gasificación. . . . .	43
5.9.	Metano producido en el proceso. . . . .	43
5.10.	Hidrógeno generado. . . . .	44
5.11.	Cambio de la fracción másica del oxígeno. . . . .	44
5.12.	Cambio de la fracción másica del nitrógeno. . . . .	45
5.13.	Cambio de la presión. . . . .	46
5.14.	Velocidad de la fase sólida a través del gasificador. . . . .	46
5.15.	Velocidad de la fase gaseosa a través del gasificador. . . . .	47
5.16.	Composición del gas de síntesis . . . . .	48

5.17. Comparación de cada uno de los elementos del gas de síntesis de las dos simulaciones, en fracción volumétrica. . . . .	49
A.1. Variación de las fluctuaciones en un periodo de tiempo cualquiera. . . . .	55
B.1. Diagrama esquemático de unas celdas . . . . .	60

# Resumen

La demanda energética del mundo es cada vez más grande y los problemas ambientales, debido al abastecimiento de esta misma, causan grandes estragos . El desarrollo sustentable de la humanidad es un compromiso que todas las naciones tienen, por lo que el mejoramiento de tecnologías y la incorporación de otras nuevas en la generación de energía es uno de los puntos principales para lograr este objetivo.

Una opción para poder abastecer la demanda energética es la biomasa; sin embargo, el uso de esta en diversos equipos es poco factible. La gasificación es una de las tecnologías que permite diversificar el uso de la biomasa en equipos de generación, por ejemplo en una turbina de gas, al transformar el combustible sólido o líquido en gaseoso conservando gran parte de su poder calorífico inicial.

En el presente trabajo se desarrolla la simulación numérica, bidimensional y en coordenadas cartesianas del proceso de gasificación, con un gasificador de lecho arrastrado donde se introduce biomasa, específicamente madera, y aire para realizar este proceso. Esta simulación es realizada en el software de nombre Phoenics el cual usa el método de volúmenes finitos para poder resolver las ecuaciones de transporte que rigen este fenómeno.

De la simulación se analizarán la distribución de las velocidades, presión y sobre todo la composición del gas combustible resultante de la gasificación. Dicha composición de gas se compara con el trabajo realizado por Colomba Di Blasi, simulación unidimensional de este fenómeno, debido a que se usara la composición de madera utilizado en dicho trabajo, además de las condiciones en los que se efectúa la gasificación (velocidad de entrada de la fase sólida y gaseosa, presión, etc.).

Cada uno de los puntos anteriormente expuestos se explicara con más detenimiento a lo largo de cada uno de los seis capítulos y tres apéndices que componen esta Tesis.

# Capítulo 1

## Gasificación y Biomasa

En este primer capítulo se desarrollan los conceptos de fuentes renovables energía, biomasa y el proceso de gasificación así como una clasificación de gasificadores desde el punto de vista del régimen de flujo.

### 1.1. Fuentes renovables de energía

El reducir la dependencia a los combustibles fósiles, debido a los altos precios de estos y el impacto que sus usos tiene sobre el medio ambiente, es una medida necesaria para el desarrollo sustentable de México. Una opción, para poder tener un desarrollo sustentable, son las fuentes renovables de energía, también conocidas como energías renovables, que podemos definir como aquellas fuentes de energías que no se agotaran o que se encuentran disponibles en forma continua con respecto al periodo de vida de la raza humana en el planeta y se basa en los flujos y ciclos implícitos en la naturaleza.

Estas fuentes renovables de energía son:

- Energía eólica
- Energía hidráulica
- Diversas formas de biomasa
- Energía geotérmica

siendo las tres primeras fuentes, una manifestación secundaria de la energía solar.

Además de estas manifestaciones secundarias de la energía solar y la geotérmica, también se tiene como energía renovable a la radiación solar que incide sobre la superficie terrestre y que se puede aprovechar mediante las siguientes dos formas:

- Sistemas fotovoltaicos
- Sistemas solares térmicos



## 1.2. Biomasa

Biomasa es la abreviatura de masa biológica, se define como la cantidad de materia viva producida en un área determinada de la superficie terrestre, o por organismo de un tipo específico [3].

La madera, residuos agrícolas, carbón vegetal, estiércol y residuos urbanos son formas secundarias de la energía de la biomasa, mientras que los bosques se consideran como forma primaria de este tipo de energía.

La biomasa se puede producir u obtener a través de subproductos o residuos, esta se clasifica de la siguiente manera:

- Biomasa de cultivos: orujos, paja, cardo, árboles y maíz.
- Biomasa de residuos: alpechín, residuo del proceso de elaboración de aceite de oliva, cáscaras de frutos secos, restos de carpintería, Restos de podas, siegas y limpieza de montes, aserrín y otros residuos de industria alimentaria, etc.
- Biomasa de residuos de ganado: purines, excrementos del ganado.

En la actualidad la biomasa representa aproximadamente el 11 % de la energía del mundo. Se estima que 46 Exajoules de la energía primaria global son derivados de la biomasa, de los cuales un 85 % se usa de forma tradicional (leña y estiércol como combustible de uso doméstico), y un 15 % como combustible industrial, para procesos de calor, energía y generación de electricidad [4].

Para transformar la biomasa existen varios procesos, los cuales se clasifican como a continuación se muestra.

**Físicos.** Es en que se actúa físicamente sobre la biomasa como la trituración, el astillado y el secado.

**Químicos.** Son aquellos procesos que se relacionan con la digestión química, como la hidrólisis, pirólisis y gasificación.

**Biológicos.** Tienen que ver con los microorganismos o las enzimas de estos, los cuales están relacionados con la producción de ácidos orgánicos, alcoholes, cetonas y polímeros.

**Termoquímicos.** son en los cuales la transformación química de la biomasa ocurre al someterla a temperaturas elevadas.

El potencial de la bioenergía en México se estima entre 2,635 y 3,771 Petajoules al año, de los cuales de combustibles provenientes de la madera abarcan entre un 27 % y 54 % [5].

## 1.3. Gasificación

La gasificación es un proceso termoquímico por el cual un combustible sólido o líquido reacciona parcialmente con un oxidante teniendo como producto un gas combustible, gas de síntesis, el cual está compuesto principalmente de monóxido de carbono ( $CO$ ), hidrógeno ( $H_2$ ) y dióxido de carbono ( $CO_2$ ), conservando gran parte del poder calorífico inicial del sólido gasificado. Este proceso no es desconocido, debido a que a principios del siglo *XIX* era utilizado para producir el gas consumido por las ciudades, en calefacción e iluminación. Con la aparición de los combustibles fósiles, que tenían un bajo precio en el mercado, la gasificación fue desplazada de la industria energética pero siguió siendo usada ampliamente en síntesis de productos químicos.

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

El gas de síntesis, producto del proceso, puede ser usada para obtener:

- Electricidad, de forma limpia y altamente eficiente, mediante el uso del gas de síntesis, sustituyendo al gas natural en ciclos combinados, o incluso en pilas de combustible de alta temperatura.
- Producción de hidrógeno, consumido en refinerías y en el futuro, para pilas de combustible usadas en automoción y pilas de electricidad.
- Productos químicos. El gas de síntesis se usa para la obtención de amoníaco, urea, metanol, y, a través del proceso Fischer-Tropsch, para la obtención directa de gasolinas.

### 1.3.1. Fundamentos fisicoquímicos de la gasificación

En la gasificación tienen lugar una serie de eventos de naturaleza química y físicas, a diferentes temperaturas, cuyo producto final es el gas de síntesis. Podemos englobar los eventos en tres procesos principales, cuya descripción general se muestra a continuación.

**Calentado del sólido y evaporación del agua presente en este.** El combustible sólido es calentado y secado debido a la corriente de aire caliente. El agua que contiene el sólido absorbe calor sensible para llegar al punto de líquido saturado y posteriormente calor latente para poder evaporarse, la temperatura en la que ocurre esto depende de la presión de trabajo del gasificador. Este proceso resulta ser eficiente debido al corto tiempo de secado.

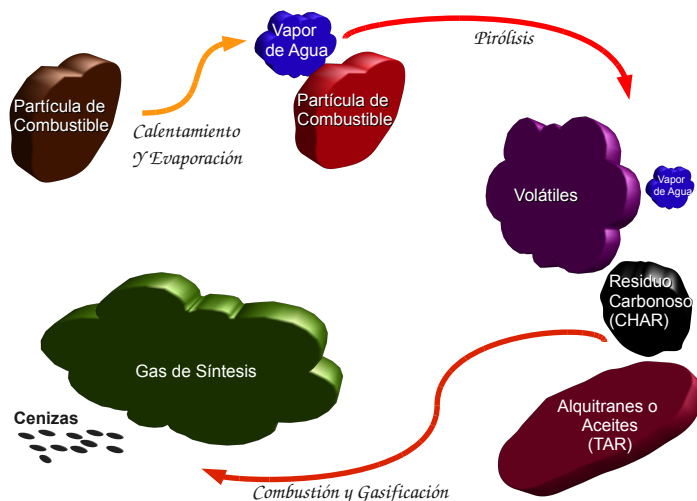


Figura 1.1: Diagrama esquemático del proceso de gasificación.

**Pirólisis.** Sucede posterior al calentamiento y secado del sólido. Este proceso consiste en la degradación térmica de la biomasa en volátiles (gases permanentes), aceites o alquitranes (TAR -la composición de estos está determinado por las temperatura a la que está sometida y al tiempo de residencia en los ambientes de reacción exotérmica-) y un residuo carbonoso (CHAR).

En la literatura ingenieril se suele simplificar la compleja red de reacciones de la pirólisis de la biomasa en dos reacciones químicas secuenciales.

1. Pirólisis del combustible sólido (Pirólisis Primaria)
2. Pirólisis de los alquitranes o aceites (Pirólisis Secundaria)

**Oxidación y Reducción.** Por último, los volátiles son quemados (proceso de oxidación), consumiendo la mayor parte de oxígeno con que se alimenta al gasificador, el carbonizado es descompuesto por medio de los mecanismos de combustión y gasificación. Durante el proceso de oxidación, combustión, se libera energía que posteriormente servirá para poder reducir el carbonizado. Las más importantes son:

- Reacciones heterogéneas de combustión del carbonizado. Se realiza la transferencia de masa de la fase sólida a la gaseosa, reduciéndose el tamaño de partícula.
- Combustión de los gases volátiles.

Entre las reacciones de reducción más relevante se encuentran las dos siguientes:

- Reacciones heterogéneas de gasificación del carbonizado. Son reacciones que se producen en la interface, de manera que la fase sólida reaccione con la gaseosa y le transfiera masa al formar gases ligeros.

- Reacción de separación de  $CO_2$  con agua.

En la *figura (1.1)* se muestra un esquema general de la gasificación. Es importante resaltar que cada uno de los anteriores procesos depende de la velocidad de las dos fases, la presión a la que se encuentran sometidas y su temperatura.

## 1.4. Tipos de gasificadores

Existe un gran número de sistemas de gasificación y diversos criterios para clasificarlos. En función del régimen de flujo, se puede hablar de tres tipos.

**Gasificador de lecho fijo.** El combustible sólido se alimenta por la parte superior del reactor, dicho combustible desciende lentamente reaccionando con los gases que fluyen en contra corriente a través del lecho. En el transcurso del descenso el combustible experimenta las reacciones sucesivas de secado, pirólisis, gasificación y combustión. Las cenizas que se generaron pueden extraerse secas o fundidas. El gas producido tiene una baja temperatura (450-650°C), tiene un bajo desempeño con las partículas finas y contiene cantidades importantes de alquitranes y aceites.

**Gasificador de lecho fluidizado.** Las partículas del combustible se introducen en un flujo ascendente, en la que se encuentran suspendidas mientras se producen las reacciones, la temperatura de salida del gas de síntesis oscila entre 800 y 1000 grados centígrados y las cenizas se pueden extraer de forma seca o aglomerada.

**Gasificador de lecho arrastrado.** El combustible sólido y el agente gasificante fluyen en la misma dirección, con velocidades muy superiores a las que se dan en los otros gasificadores. La alimentación del sólido se puede ser seca o húmeda, alimentación que se realiza a través de quemadores de oxidación parcial. La temperatura de operación es elevada (1200-1600°C) con lo que las cenizas se extraen fundidas.

Estos tres tipos de gasificadores ya se encontraban desarrollados en la década de los cincuentas. Sin embargo, entre los años 1970 y 1980 se adaptaron los diseños para poder trabajar a altas presiones, aumentando la capacidad de producción y el rango de aplicaciones posibles.

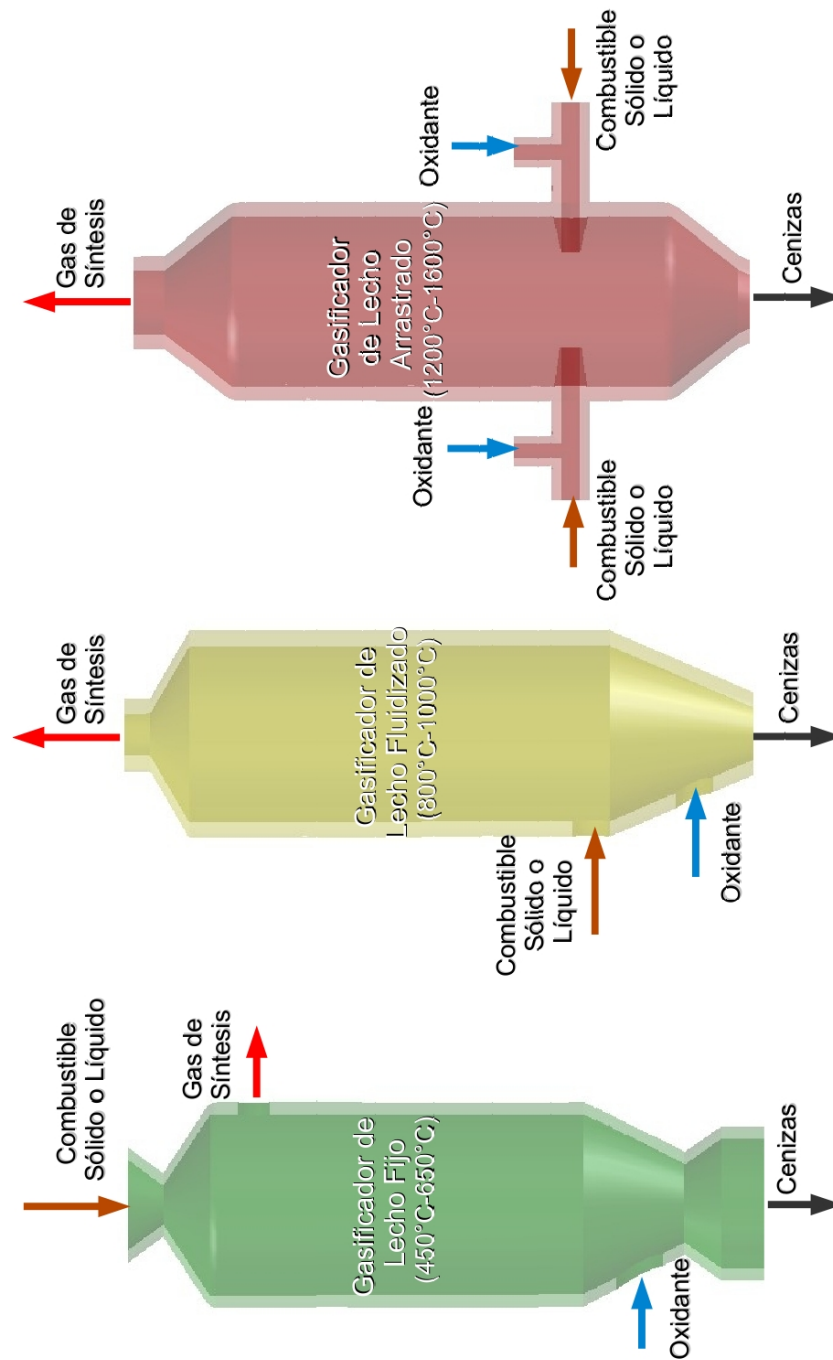


Figura 1.2: Diagrama esquemático de configuraciones sencillas de gasificadores de lecho fijo, fluidizado y lecho arrastrado [6].

# Capítulo 2

## Ecuación de Transporte

En este capítulo se presentan las ecuaciones instantáneas de transporte que rigen el fenómeno de la gasificación las cuales, nos representan el cambio de propiedades en el sistema. Estas ecuaciones son la de continuidad, cantidad de movimiento lineal, ecuación de energía y conservación de las especies químicas. Por último se presenta el método de Promediado de las Ecuaciones, el cual nos permite resolver el flujo reactivo turbulento en estudio.

### 2.1. Ecuación de Continuidad

La ecuación de continuidad representa la conservación de masa de un sistema, masa que podemos expresar como:

$$masa = \iiint_{VC} \bar{\rho} dV \quad (2.1)$$

donde  $\bar{\rho}$  y  $V$  son, respectivamente, la densidad y el volumen. El cambio de esta con respecto al tiempo esta dado por:

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_{VC} \bar{\rho} dV \quad (2.2)$$

este cambio se debe a la entrada y salida de masa del sistema. Dicho flujo de masa se da en la superficie del volumen de control, *figura (2.1)*, el intercambio se puede escribir como:

$$\iint_{SC} \bar{\rho} \vec{v} \cdot dA \quad (2.3)$$

expresando a  $dA$  como  $ndS$ , donde  $n$  es la normal de la diferencial de superficie y sustituyendo esto en la ecuación (2.3) obtenemos:

$$\iint_{SC} \bar{\rho} \vec{v} \cdot ndS \quad (2.4)$$

Igualando a cero la adición de la ecuación (2.2) y (2.4) dándonos como resultado la siguiente expresión:

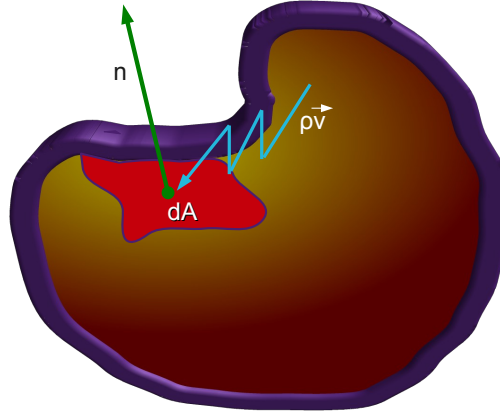


Figura 2.1: Diagrama esquemático de un volumen de control cualquiera, donde  $n$  es un vector normal a la diferencial de área  $dA$ ,  $\bar{\rho}$  presenta la densidad instantánea y  $\vec{v}$  es la velocidad.

$$\iint_{SC} \bar{\rho} \vec{v} \cdot n dS + \frac{\partial}{\partial t} \iiint_{VC} \bar{\rho} dV = 0 \quad (2.5)$$

cabe resaltar que una integral es de superficie y otra es de volumen.

Posteriormente se aplica el teorema de Gauss a la ecuación (2.5), con lo que se busca tener dos integrales de volumen.

$$\iiint_{VC} \nabla \cdot (\bar{\rho} \vec{v}) dV + \frac{\partial}{\partial t} \iiint_{VC} \bar{\rho} dV = 0 \quad (2.6)$$

Por último se integra esta última ecuación con respecto a un volumen arbitrario.

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \vec{v}) = 0 \quad (2.7)$$

Esta ecuación resultante es la ecuación diferencial general de continuidad, que es ajustada con respecto a la naturaleza del flujo en estudio.

## 2.2. Ecuación de conservación de movimiento

La ecuación de conservación de movimiento se deriva de la segunda ley de Newton, y es una relación entre la fuerza y velocidad cuya expresión integral se puede escribir como:

$$\iint_{SC} \vec{T} \cdot n dS + \iiint_{VC} B \bar{\rho} dV = \iint_{SC} \bar{\rho} \vec{v} \cdot n dS + \frac{\partial}{\partial t} \iiint_{VC} \bar{\rho} \vec{v} dV \quad (2.8)$$

donde  $\vec{T}$  es el tensor de esfuerzos,  $B$  son fuerzas de cuerpo,  $\vec{v}$  velocidad instantánea,  $\bar{\rho}$  la densidad,  $n$  es un vector normal a la diferencial de superficie  $dS$  y  $dV$  es la diferencial

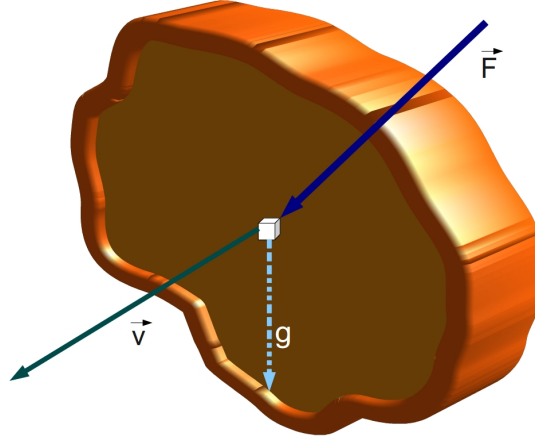


Figura 2.2: Diagrama esquemático de un volumen de control donde se representan una fuerza de superficie ( $F$ ), una de volumen ( $g$ ), y la velocidad ( $\vec{v}$ ).

de volumen.

Aplicando Teorema de Gauus a las integrales de superficie de la ecuación (2.8), de manera que todas estas integrales se puedan agrupar en una sola integral de volumen, como la que a continuación se muestra.

$$\iint_{VC} \left[ \nabla \cdot \overleftrightarrow{T} + B\bar{\rho} - \nabla \cdot (\bar{\rho}\vec{v}\vec{v}) - \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\vec{v}) \right] dV = 0 \quad (2.9)$$

Integrando con respecto a un volumen cualquiera la ecuación (2.9).

$$\nabla \cdot \overleftrightarrow{T} + B\bar{\rho} - \nabla \cdot (\bar{\rho}\vec{v}\vec{v}) - \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\vec{v}) = 0 \quad (2.10)$$

El tensor de esfuerzos,  $\overleftrightarrow{T}$ , se expresa en términos de la presión hidrostática y el esfuerzo viscoso.

$$\overleftrightarrow{T} = -P\vec{\delta} + \vec{\tau} \quad (2.11)$$

donde  $\vec{\delta}$  es un tensor identidad, delta de Kronecker. De la ley de Navier-Poisson expresamos a el tensor de esfuerzos viscosos de la siguiente manera:

$$\vec{\tau} = \mu \left( \nabla\vec{v} + (\nabla\vec{v})^T \right) + \left( \mu_\nu + \frac{2}{3}\mu \right) (\nabla \cdot \vec{v})\vec{\delta} \quad (2.12)$$

donde  $\mu$  es la viscosidad molecular del fluido y  $\mu_\nu$  es la viscosidad volumétrica. Por lo regular la viscosidad volumétrica se desprecia y al sustituir la ecuación (2.12) en (2.11) y esta en (2.10), obteniendo:

$$\frac{\partial}{\partial t}\bar{\rho}\vec{v} + \nabla \cdot \bar{\rho}\vec{v}\vec{v} = -\nabla P + \nabla \cdot \left[ \mu \left( \nabla\vec{v} + (\nabla\vec{v})^T - \frac{2}{3}(\nabla \cdot \vec{v})\vec{\delta} \right) \right] \quad (2.13)$$



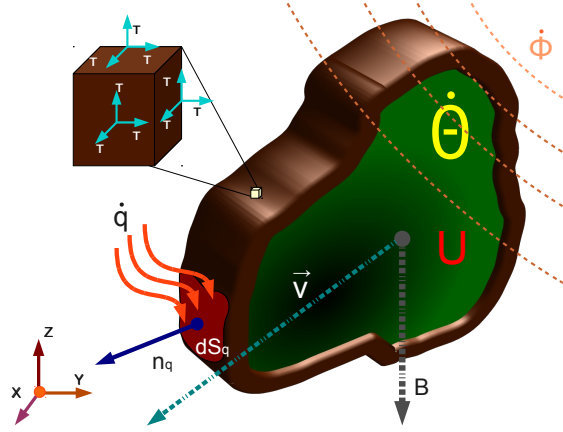


Figura 2.3: Diagrama esquemático de un volumen de control donde se representan las fuerzas y flujos de energías que se encuentran en equilibrio.

La expresión (2.13), es conocida como la ecuación de Navier-Stokes.

### 2.3. Ecuación de conservación de la energía

La conservación de la energía se encuentra expresada por la primera ley de la termodinámica, cuya forma integral se muestra a continuación:

$$\frac{D}{Dt} \iiint_{VC} \left( u + \frac{v^2}{2} \right) dV = \frac{dQ}{dt} + \iiint_{VC} B \cdot \vec{v} \bar{\rho} dV + \iint_{SC} \vec{T} \cdot \vec{v} \cdot n dS + \iiint_{VC} \dot{\Phi} dV \quad (2.14)$$

donde  $\vec{v}$  es la velocidad,  $B$  representa a las fuerzas de cuerpo,  $\vec{T}$  tensor de esfuerzos,  $u$  energía interna,  $\bar{\rho}$  la densidad,  $\dot{\Phi}$  fuerzas electromagnéticas,  $n$  normal a la superficie,  $dS$  y  $dV$  son diferenciales de superficie y de volumen respectivamente, cabe mencionar que se desprecia la energía potencial. La cantidad  $\frac{dQ}{dt}$  se expresa en función del campo del flujo de energía a través de la superficie de control (radiación o conducción de calor), más una distribución fuente dentro del volumen de control (reacciones químicas o nucleares).

$$\frac{dQ}{dt} = - \iint_{SC} \vec{q} \cdot n dS + \iiint_{VC} \dot{\Theta} \bar{\rho} dV \quad (2.15)$$

siendo  $\vec{q}$  el flujo de calor y  $\dot{\Theta}$  la tasa de producción de energía por unidad de masa. Sustituyendo la ecuación (2.15) en (2.14) y aplicando el teorema de Gauss, a la integrales de superficie, obtenemos como resultado:

$$\begin{aligned} \frac{D}{Dt} \iiint_{VC} \left( u + \frac{v^2}{2} \right) dV = & - \iiint_{CV} \nabla \cdot \dot{\vec{q}} dV + \iiint_{CV} \dot{\Theta} \bar{\rho} dV + \\ & \iiint_{CV} B \cdot \vec{v} \bar{\rho} dV + \iiint_{CV} \nabla \cdot \vec{\vec{T}} \cdot \vec{v} dV + \iiint_{CV} \dot{\Phi} dV \end{aligned} \quad (2.16)$$

En la ecuación (2.16), las integrales son de volumen con lo que podemos usar el teorema de Transporte de Reynolds para poder agrupar todas la integrales en una sola:

$$\iiint_{CV} \left[ \bar{\rho} \frac{D}{Dt} \left( u + \frac{v^2}{2} \right) + \nabla \cdot \dot{\vec{q}} - \dot{\Theta} \bar{\rho} - B \cdot \vec{v} \bar{\rho} - \nabla \cdot (\vec{\vec{T}} \cdot \vec{v}) - \dot{\Phi} \right] dV = 0 \quad (2.17)$$

Integrando a (2.17) sobre un volumen de control cualquiera tenemos:

$$\bar{\rho} \frac{D}{Dt} \left( u + \frac{v^2}{2} \right) + \nabla \cdot \dot{\vec{q}} - \dot{\Theta} \bar{\rho} - B \cdot \vec{v} \bar{\rho} - \nabla \cdot (\vec{\vec{T}} \cdot \vec{v}) - \dot{\Phi} = 0 \quad (2.18)$$

Como se puede ver, la ecuación (2.18) es muy compleja y dependiendo del fenómeno en estudiar se eliminan términos cuyos efectos se consideren insignificantes, con respecto a otros, con lo que se consigue facilitar la solución de el problema en cuestión.

## 2.4. Conservación de las especies químicas

En una mezcla constituida por  $N$  especies químicas, la fracción másica de una especie  $i$  esta dado por:

$$Y_i = \frac{m_i}{\sum_{i=1}^N m_i} = \frac{m_i}{m} \quad (2.19)$$

donde  $m_i$  es la masa de la especie y  $m$  es la masa total de la mezcla (confinada en el mismo volumen). De acuerdo con la definición, mencionada anteriormente, la suma de todas las especies químicas que contiene una mezcla es igual a uno.

$$\sum_{i=1}^N Y_i = 1 \quad (2.20)$$

La relación entre las fracción volumétrica,  $X_i$ , y fracciones másicas de una mezcla están dado por:

$$X_i = \frac{\frac{Y_i}{Mw_i}}{\sum_{j=1}^N \left( \frac{Y_j}{Mw_j} \right)} \quad (2.21)$$

siendo  $Mw_i$  y  $Mw_j$  el peso molecular de las especies químicas.

La ecuación de conservación de las especies químicas se obtiene al sustituir en la ecuación

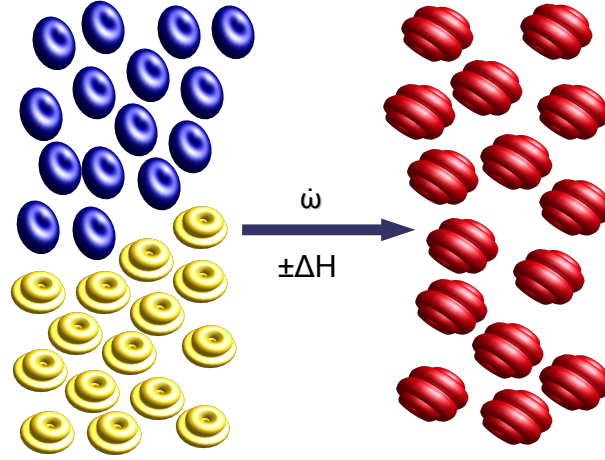


Figura 2.4: Diagrama esquemático de una reacción de dos especies donde los reactivos se encuentran en azul y amarillo y en rojo el producto, siendo  $\dot{\omega}$  la tasa de reacción.

(2.7) las relaciones, de un sistema de multicomponentes  $\bar{\rho}_i = \bar{\rho}Y_i$ , siendo  $\bar{\rho}_i$  la densidad de cada especie, y  $\vec{v} = \vec{v} + V_i$ , donde  $\vec{v}_i$  es la velocidad de la especie química,  $\vec{v}$  velocidad promedio de la masa y  $V_i$  es la velocidad de difusión másica de la especie  $i$ . Finalmente al realizar estas sustituciones se iguala a  $\dot{\omega}_i$ , tasa de formación neta de la especie  $i$ , dando como resultado la ecuación que se muestra a continuación.

$$\frac{\partial \bar{\rho}Y_i}{\partial t} + \nabla \cdot [\bar{\rho}Y_i(\vec{v} + V_i)] = \dot{\omega}_i \quad (2.22)$$

De dicha ecuación el termino de flujo difusivo,  $\nabla \cdot [\bar{\rho}Y_i(\vec{v} + V_i)]$ , se sustituirá por el termino  $\nabla \cdot \vec{J}_i$ , que es estudiado más afondo en la siguiente sección, obteniendo:

$$\frac{\partial \bar{\rho}Y_i}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{J}_i + \dot{\omega}_i \quad (2.23)$$

de la ecuación de conservación de las especies químicas se deriva de la ecuación de continuidad por lo que para poderla satisfacer se debe cumplir que:

$$\sum_{i=1}^n \dot{\omega}_i = 0 \quad ; \quad \sum_{i=1}^N \vec{J}_i = 0 \quad (2.24)$$

En un sistema químico con  $M$  reacciones y  $N$  especies, el valor de la tasa de reacción  $\dot{\omega}_i$  se puede determinar con la siguiente expresión.

$$\dot{\omega}_i = Mw_i \sum_{k=1}^M (\nu''_{i,k} - \nu'_{i,k}) B_k T^{\alpha_k} \exp\left(-\frac{E_{ak}}{R_u T}\right) \prod_{j=1}^N \left(\frac{X_j p}{R_u T}\right)^{(\nu'_{j,k})} \quad (2.25)$$

Donde  $\nu'_{i,k}$  y  $\nu''_{i,k}$  son ,respectivamente, los coeficientes estequiométricos de los reactivos y productos,  $T$  temperatura,  $E_{ak}$  la energía de activación,  $R_u$  constante universal de los gases,  $p$  presión,  $\alpha_k$  coeficiente de difusión térmica para cada una de las especies y  $B_k$

son la fuerzas de cuerpo por unidad de volumen en cada una de las direcciones.

## 2.5. Ecuaciones de estado y flujo difusivo

Para complementar las ecuaciones mostradas anteriormente, es necesario usar ecuaciones de estado en las que se relacionen la densidad, presión y temperatura por expresiones para el flujo difusivo.

La densidad de una mezcla, en términos de la densidad de las especies que la constituyen, se expresa de la siguiente manera.

$$\rho = \frac{1}{\sum_{i=1}^N \left( \frac{Y_i}{\rho_i} \right)} \quad (2.26)$$

Para un sistema multicomponentes, donde cada especie se modela como un gas ideal, la ecuación del gas ideal se puede escribir como:

$$p = \rho R_u T \sum_{i=1}^N \frac{Y_i}{M w_i} \quad (2.27)$$

La entalpía de la mezcla se define de la siguiente forma:

$$h = \sum_{i=1}^N Y_i h_i \quad (2.28)$$

donde  $h_i$  es la entalpía de cada uno de los componentes el cual es igual a la suma de las entalpías térmicas y la energía liberada o absorbida, entalpía química, en el proceso. Esta entalpía de los componentes la podemos calcular con la siguiente expresión:

$$h_i = \Delta h_{f,i}^0 + \int_{T_0}^T C_{p,p,i} dT \quad (2.29)$$

siendo  $C_{p,p,i}$  es el calor específico a presión constante de cada uno de las especies y  $\Delta h_{f,i}^0$  la energía de formación. Para poder relacionar el la entalpía y el calor específico con la temperatura es necesario usar expresión:

$$C_p = \left( \frac{\partial h}{\partial T} \right)_p \quad (2.30)$$

El flujo difusivo,  $\vec{\mathbf{J}}_A$ , es consecuencia de los gradientes de temperatura y presión. El coeficiente de difusividad binario se expresa como  $D_{AB}$  o  $D_{BA}$ . Este flujo difusivo es modelado según la ley de Fick, cuya expresión es:

$$\vec{\mathbf{J}}_A = \rho \frac{W_A}{W_M} \sum_{BA}^N D_{AB} W_B X_B \quad (2.31)$$

los subíndices  $A$  y  $B$  indican las especies químicas,  $X_B$  la fracción molar y  $W_M$  es igual a  $\sum_A^N X_A W_A$ , esta componente de flujo difusivo suele aproximarse con la expresión:

$$\vec{J}_A = -D_A^M \rho \frac{Y_A}{X_A} \nabla X_A \quad (2.32)$$

donde  $D_A^M$  es el coeficiente medio de difusión de la especie  $A$  en la mezcla, este coeficiente se puede calcular mediante el coeficiente de difusión binario  $D_{AB}$ .

$$D_A^M = \frac{1 - Y_A}{\sum_{B \neq A}^N \frac{x_B}{D_{AB}}} \quad (2.33)$$

Los números adimensionales usado en la solución del flujo difusivo son el números de Lewis, Prandtl y el número de Schmidt, estos se muestran a continuación:

$$Le = \frac{\lambda}{\rho C_p} \quad (2.34)$$

$$Pr = \frac{C_p \mu}{\lambda} \quad (2.35)$$

$$Sc = \frac{\nu}{D} \quad (2.36)$$

donde  $\lambda$  es la conductividad térmica,  $\rho$  la densidad,  $\mu$  viscosidad dinámica y  $\nu$  la viscosidad cinemática. Para flujos multicomponentes se expresa en número de Lewis en función de los números de Prandtl y Schmidt como se presenta en la siguiente ecuación.

$$Le \equiv \frac{Sc}{Pr} \quad (2.37)$$

## 2.6. Promediado de las ecuaciones

Una de las principales características de un flujo turbulento es la variación aleatoria en el espacio y tiempo de las propiedades del flujo, como se vera con más a detalle en el apéndice A.

Entre las alternativas para la simulación de los flujos turbulento reactivos, como el del presente trabajo, es el promedio de las ecuaciones instantáneas de conservación. En este método se promedian las fluctuaciones instantáneas de conservación en las escalas temporales y se resuelven ecuaciones de transporte para los valores medios de las propiedades del fluido. Dichas ecuaciones no son cerradas, por lo que se requieren modelos que cierren los términos no cerrados.

A las variables transportadas en el el flujo, como la fracción másica de una especie o la entalpía, se representaran con el símbolo  $\Phi$ . Los valores instantáneos de esta propiedades estarán descritos en términos de un promedio y una fluctuación turbulenta.

$$\Phi = \bar{\Phi} + \Phi' \quad (2.38)$$

$$\Phi = \tilde{\Phi} + \Phi'' \quad (2.39)$$

Donde los promedios de  $\bar{\Phi}$  y  $\tilde{\Phi}$  están definidos como:

$$\underbrace{\bar{\Phi} = \lim_{n_e \rightarrow \infty} \frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{n_e} \Phi^{(i)}}_{\substack{\text{Promedio} \\ \text{de} \\ \text{Reynolds}}} ; \quad \underbrace{\tilde{\Phi} = \lim_{n_e \rightarrow \infty} \frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{n_e} \rho^{(i)} \Phi^{(i)}}_{\substack{\text{Promedio} \\ \text{de} \\ \text{Favre}}} \quad (2.40)$$

Siendo  $\Phi^{(i)}$  la muestra  $i$  del conjunto de relaciones  $n_e$  de un experimento. De estas definiciones se tiene que:

$$\overline{\phi'} = 0 ; \quad \rho \overline{\Phi''} = 0 ; \quad \forall \overline{\Phi''} \neq 0 = ; \quad \overline{\rho \phi'} \quad (2.41)$$

Usando las definiciones de los promedios de Reynolds y de Favre obtenemos:

$$\bar{\Phi} = \tilde{\Phi} + \bar{\Phi}'' \neq 0 \quad (2.42)$$

$$\bar{\Phi}'' = -\frac{\overline{\rho' \Phi''}}{\bar{\rho}} \quad (2.43)$$

$$\overline{\rho' \Phi''} = \overline{\rho' \Phi'} \quad (2.44)$$

$$\overline{u'_i \phi'} = \overline{u''_i \phi''} - \frac{\overline{\rho' u''_i \phi''}}{\bar{\rho}} + \overline{u''_i \phi''} \quad (2.45)$$

Al aplicar el promediado de Favre, a las ecuaciones de transporte instantáneas, se obtienen las formas más sencillas de las ecuaciones resultantes en las que no se incluyen correlaciones de las fluctuaciones de las densidad.

Usando el promedio de Favre a las ecuaciones instantáneas de conservación de masa, cantidad de movimiento, conservación de la energía y especies químicas se escribirán:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\vec{v}}) = 0 \quad (2.46)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{\vec{v}}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\vec{v}} \tilde{\vec{v}}) = \underbrace{\nabla \cdot \left[ \mu \left( \nabla \tilde{\vec{v}} + (\nabla \tilde{\vec{v}})^T - \frac{1}{2} (\nabla \tilde{\vec{v}}) \tilde{\delta} \right) \right]}_I - \underbrace{\nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\vec{v}}'' \tilde{\vec{v}}'')}_{II} - \nabla \cdot p + \bar{\rho} \tilde{\vec{g}} \quad (2.47)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{Y}_i) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v} \tilde{Y}_i) = \underbrace{\nabla \cdot \bar{\Gamma}_i \nabla \tilde{Y}_i}_I - \underbrace{\nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v}'' Y_i'')}_{II} + \bar{\omega}_i \quad (2.48)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{h}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v} \tilde{h}) = - \underbrace{\nabla \cdot \tilde{J}_h}_I - \underbrace{\nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v}'' h'')}_{II} \quad (2.49)$$

Usando el promediado de Favre en la parte homogénea de las ecuaciones se obtiene:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{\phi}_z) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v} \tilde{\phi}_z) = \underbrace{\nabla \cdot (\bar{\Gamma} \nabla \tilde{\phi}_z)}_I - \underbrace{\nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v}'' \phi_z'')}_{II} \quad (2.50)$$

Las ecuaciones anteriormente mostradas tiene la forma de las correspondientes ecuaciones instantáneas, con la diferencia de tener un termino adicional  $\bar{u}_i'' \Phi_i''$ , que nos representa físicamente el transporte convectivo de  $\Phi$  debido al los movimientos turbulentos. En el caso que el flujo sea turbulento, el término  $I$  de las ecuaciones anteriores por lo regular es muy pequeño en comparación del término  $II$ , por lo que se considera despreciable, haciendo que las ecuaciones (2.47),(2.48),(2.49) y (2.50) se escriban como:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{v}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v} \tilde{v}) = \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v}'' \tilde{v}'') - \nabla \cdot p + \bar{\rho} \tilde{g} \quad (2.51)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{Y}_i) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v} \tilde{Y}_i) = - \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v}'' Y_i'') + \bar{\omega}_i \quad (2.52)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{h}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v} \tilde{h}) = - \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v}'' h'') \quad (2.53)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{\phi}_z) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v} \tilde{\phi}_z) = - \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v}'' \phi_z'') \quad (2.54)$$

Si el número de  $Ma$  es mucho menor a uno, flujo de baja velocidad, generalmente se supone que las fluctuaciones presentes en el régimen de flujo son despreciables. Por lo tanto los valores medios de la densidad y la tasa de reacción química pueden ser expresados en función de la presión de referencia  $P_0$ .

$$\bar{\rho} = P_0 \left( R_u T \sum_{i=1}^n \frac{Y_i}{W_i} \right)^{-1} \quad (2.55)$$

$$\bar{\omega}_i(P, \rho, \phi_i) = \omega_i(P, \bar{\rho}, \tilde{\phi}_i) \quad (2.56)$$

Donde  $\tilde{\phi}_i$ , en esta expresión, nos representa la fracción másica de la especie química y la entalpía.

Debido a que el flujo es turbulento, el término  $\overline{\rho \tilde{v}'' \Phi''}$ , de las ecuaciones (2.47),(2.48) y (2.49) son desconocidos por lo que es necesaria su modelización. El cierre del término  $\overline{\rho \tilde{v}'' \tilde{v}''}$  de la ecuación promedio de cantidad de movimiento (2.47) se trata en el apéndice B del presente trabajo. Para realizar el cierre de las ecuaciones (2.47),(2.48),(2.49) y (2.50) es necesario conocer el valor medio de la tasa de formación de la especie química ( $\bar{\omega}$ ), y la densidad media ( $\bar{\rho}$ ). Estas cantidades se encuentran en función de otras propiedades del fluido y régimen de flujo.

$$\bar{\omega} = \dot{\omega}(\tilde{T}, \bar{\rho}, \tilde{\phi}_1, \dots, \tilde{\phi}_N) \quad (2.57)$$

$$\bar{\rho} = \rho(\tilde{T}, \tilde{\phi}_1, \dots, \tilde{\phi}_N) \quad (2.58)$$

En primera instancia se puede modelar la tasa de formación de las especies químicas mediante series de Taylor en torno a los valores medios; sin embargo, este método tiene el inconveniente de que se deben de modelar un gran número de correlaciones de alto orden de la temperatura, además de que la convergencia de la serie de Taylor es mala. Otra aproximación es la evaluación de la tasa de formación media con valores medios, pero esta aproximación sólo puede ser válida para reacciones que son muy lentas comparadas con los cambios en el campo de flujo turbulento local.



# Capítulo 3

## Método de Solución

En el capítulo anterior se mostraron las ecuaciones que rigen el fenómeno estudiado, pero el sistema de ecuaciones resultante no tiene solución analítica por lo que tenemos que recurrir a un método numérico y el uso de equipo de computo para poder dar solución a este sistema. El método numérico usado se presenta a lo largo del presente capítulo.

### 3.1. Método de volúmenes finitos

Las ecuaciones de conservación de energía, conservación de especies químicas, cantidad de movimiento, y las además ecuaciones vistas en el capítulo anterior, se pueden representar por medio de la ecuación general de transporte, la cual mostramos a continuación denotando la variable independiente con  $\tilde{\phi}$ :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{\phi}) + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{\phi}) - \nabla \cdot (\Gamma_\phi\nabla\tilde{\phi}) = \bar{S}_\phi \quad (3.1)$$

donde  $\Gamma_\phi$  es el coeficiente de difusión y  $\bar{S}_\phi$  es el término fuente. Los términos de la ecuación (3.1) del lado izquierdo son el término transitorio, convectivo y el de difusión respectivamente. Los términos  $\Gamma_\phi$  y  $\bar{S}_\phi$  están especificados para cada variable  $\tilde{\phi}$ . Dicha ecuación se puede discretizar por medio del método de volúmenes finitos, método que consiste en dividir el dominio de trabajo en pequeños volúmenes de control, ver *figura (3.1)*, asociando un punto nodal a cada uno de los volúmenes. De una manera similar se discretiza el tiempo en intervalos temporales. La ecuación diferencial se integra en cada uno de los volúmenes de control e intervalos temporales, lo cual nos da como resultado una ecuación discretizada que relaciona los valores de la variable independiente  $\tilde{\phi}$  para un determinado grupo de puntos nodales. Esta ecuación representa el principio de conservación de  $\tilde{\phi}$  en un volumen finito de la misma manera que la ecuación diferencial, ecuación general de transporte, los hace para un volumen infinitesimal. La ecuación algebraica para un nodo  $P$  se puede expresar de manera general como:

$$a_P\tilde{\phi}_P = \sum_{i,I=E,W,N,S,H,L} a_i\tilde{\phi}_I + a_T\tilde{\phi}_T + B \quad (3.2)$$

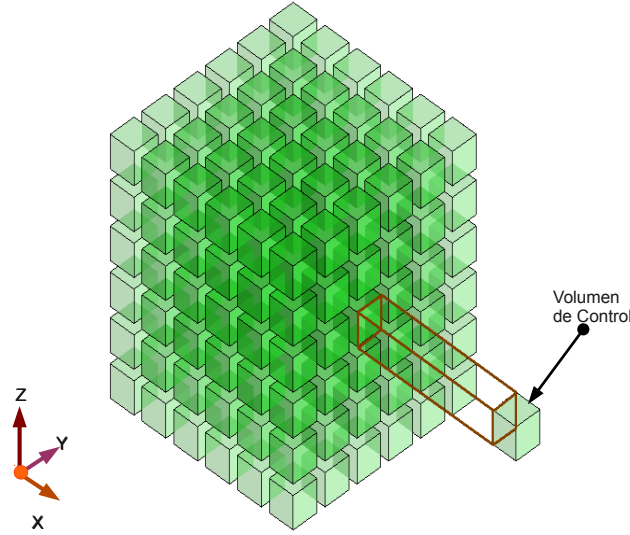


Figura 3.1: Diagrama esquemático de discretización del dominio en pequeños volúmenes de control.

dónde el subíndice  $I$  nos representa a las celdas vecinas,  $i$  las caras entre la celda  $P$  y sus vecinas,  $T$  es el valor del intervalo temporal anterior y el termino fuente se representa con  $B$ . La deducción detallada de esta ecuación se puede consultar en diversos libros de fluidos computacional ([16] y[17]).

En la *figura (3.2)*, se muestra la notación de una celda cualquiera y sus vecinas. Dada una celda  $P$ , sus vecinas se denotan con las iniciales de los puntos cardinales (en ingles) en las direcciones  $x$  y  $y$ , con *High* y *Low* en la dirección  $z$ . En el caso de la malla cartesiana, escalonada ("staggered") y uniforme (celdas de dimensiones espaciales iguales), se puede emplear por sencillez un volumen de control bidimensional, como el que se muestra en la *figura (3.3)* (el espesor de la celda en la dirección "z" se puede considerar la unidad). En una malla escalonada, los cambios en las propiedades se encuentran definidas en el centro de la celda mientras las componentes de velocidad, en cada una de las direcciones, se encuentran desplazadas en las caras de la celda. También es esta figura se denotan las caras de la celda con la misma nomenclatura pero con letras minúsculas. A su vez, el tiempo también se discretiza. Las celdas en la dirección temporal se denominan intervalos temporales. La celda  $P$  en el paso temporal se nota como  $T$ . A continuación, se presentan los términos de la ecuación (3.2). Definiendo tres expresiones mediante los símbolos  $F$ ,  $D$ ,  $Pe$  como:

$$F = \bar{\rho} \tilde{v}_i \quad ; \quad D = \frac{\Gamma}{\delta_i} \quad ; \quad Pe = \frac{F}{D} \quad (3.3)$$

donde  $\tilde{v}_i$  es la velocidad en la cara  $i$ ,  $\delta_i$  es la distancia entre los nodos que incluyen la

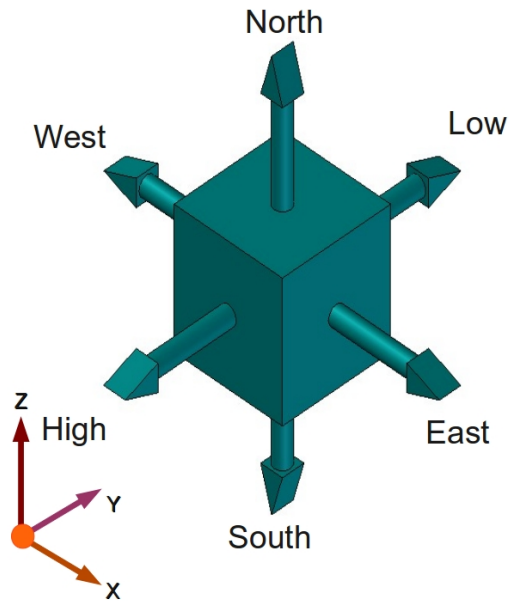


Figura 3.2: Diagrama esquemático de la notación de una celda y sus vecinas

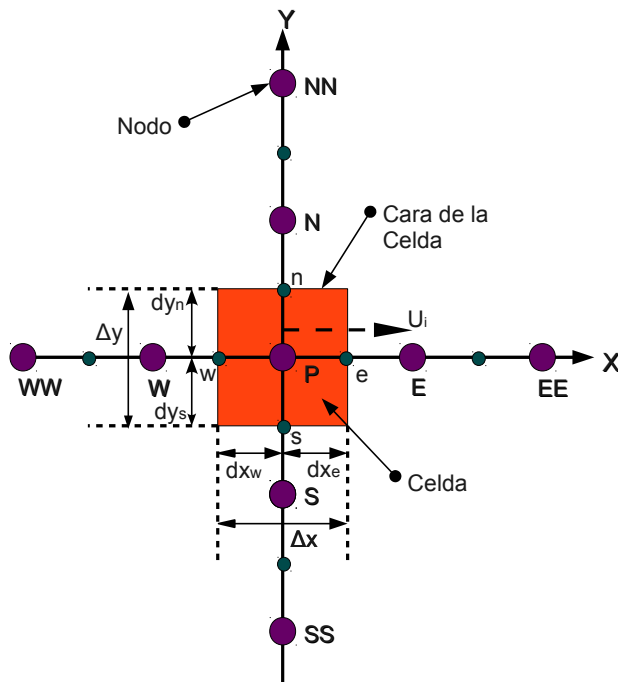


Figura 3.3: Diagrama esquemático de una celda bidimensional

cara  $i$  y  $Pe$  es el número de Peclet, el cual es una relación entre la difusión y la convección. Las expresiones para  $F$  y  $D$  representan los efectos de los términos convectivo y difusivo, respectivamente, de la ecuación de transporte (3.1).

Los coeficientes  $a_i$  de la ecuación (3.2) son:

$$a_i = Dif(|Pe|_i) + \max(-F_i, 0) \quad (3.4)$$

Los valores  $F$  y  $D$  en la cara de la celda de la ecuación (3.4) son:

$$F_i = (\bar{\rho}\tilde{v})_i\Delta_i \quad , \quad D_i = \frac{\Gamma_i\Delta_i}{\delta_i}, \quad i = n, s, e, w \quad (3.5)$$

donde  $\Delta_i$  es la longitud de la cara  $i$ .

Para poder determinar el valor de  $F_i$  es necesario conocer  $\bar{\rho}$  y  $\tilde{u}_i$  en la cara la celda. El cálculo del término convectivo de la ecuación de transporte (3.1) requiere también del conocimiento de la variable escalar  $\tilde{\phi}$ , en la cara de la celda. La velocidad  $\tilde{v}_i$  esta calculada en la cara de la malla escalonada; pero  $\bar{\rho}$  y  $\tilde{\phi}$  están calculados en el nodo y es necesario que se interpolen a la cara para calcular los coeficientes  $a_i$  de la ecuación discretizada (3.2). La obtención de estas variables en la cara de la celda es de suma importancia para la precisión y convergencia de la solución. El cálculo de  $\bar{\rho}$  y  $\tilde{\phi}$  da paso a los llamados esquemas de discretización. La función  $f(|Pe|)$  de la ecuación (3.4) es dependiente del esquema de interpolación; por ejemplo, en el esquema de diferencias desplazadas,  $f(|Pe| = 1)$ . Para el sistema híbrido (véase apéndice B):

$$f(|Pe|) = \max(0, 1 - 0,5|Pe|) \quad (3.6)$$

En el apéndice B se muestran estos sistemas de discretización lineales, con más detalle, pues estos son los se usaran en la presente tesis en la discretización del término convectivo de las ecuaciones de energía, cantidad de movimiento, conservación de especies químicas y modelo de turbulencia.

El coeficiente para el término transitorio es:

$$a_T = \frac{\bar{\rho}\Delta x\Delta y}{\Delta t} \quad (3.7)$$

para el cálculo del término  $D_i$ , expresión (3.5), se necesita obtener el coeficiente de difusión,  $\Gamma$ , en la cara de la celda. Este coeficiente no es necesariamente una constante, probablemente puede ser 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. Por ejemplo para la cara  $w$  estas interpolaciones son:

$$\Gamma_w = \frac{\Delta x(\Gamma_P + \Gamma_W)}{2\delta x_w} \quad ; \quad \Gamma_w = \frac{2\delta x_w}{\Delta x(\frac{1}{\Gamma_P} + \frac{1}{\Gamma_E})} \quad (3.8)$$

El término fuente de la ecuación general (3.1),  $\bar{S}_\phi$ , se linealiza como:

$$\bar{S}_\phi = \bar{S}_{\phi,c} + \bar{S}_{\phi,v}\tilde{\phi}_P \quad (3.9)$$

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

Con lo anteriormente expuesto los términos  $B$  y  $a_P$  de la ecuación (3.2) son:

$$B = \bar{S}_{\phi,c}\Delta x\Delta y + a_T\tilde{\phi}_T \quad (3.10)$$

$$a_P = a_n + a_s + a_e + a_w + a_T - \bar{S}_{\phi,v}\Delta x\Delta y \quad (3.11)$$

La ecuación (3.2) es aplicada en cada una de las celdas que conforman el dominio, para cada  $\tilde{\phi}$  y para cada paso temporal  $\Delta t$ , por lo que se tiene como resultado un sistema de ecuaciones lineales (los coeficientes  $a$  pueden depender, directa o indirectamente, de  $\tilde{\phi}$  por lo que el sistema realmente es pseudo-lineal). Para resolver este sistema se puede utilizar cualquier método de resolución de ecuaciones lineales.

El cálculo de velocidades a partir de la ecuación de cantidad de movimiento, tiene el inconveniente de que la presión, cuyo gradiente aparece como término fuente en la ecuación de cantidad de movimiento, no tiene una ecuación propia para poder calcular. Una solución ampliamente usada, 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) ([13] y [16]). El algoritmo utilizado para resolver el problema de acoplamiento de la velocidad-presión, en la presente tesis, pertenece a esta familia.

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

Para procurar esta convergencia, se utiliza un método de relajación para alguna de las propiedades o variables dependientes. Los dos tipos de relajación empleados son la inercial y la lineal. La primera es usada para las velocidades y los parámetros de turbulencia, y aumenta la diagonal de la matriz de coeficientes al agregar a la ecuación de cualquier variable  $\tilde{\phi}$ , el termino fuente:

$$\bar{S}_{\phi,r} = \frac{\bar{\rho}V_P}{\Delta t_f}(\tilde{\phi}^{(n-1)} - \tilde{\phi}^{(n)}) \quad (3.12)$$

donde  $V_P$  es el volumen de la celda  $P$ ,  $\Delta t_f$  es el intervalo de tiempo falso y el superíndice  $n$  se refiere al número de interacción.

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

$$\tilde{\phi}_P^{(n)} = \alpha\tilde{\phi}_P^{(sol)} + (1 - \alpha)\tilde{\phi}_P^{(n-1)} \quad (3.13)$$

siendo  $\alpha$  es el factor de relajación, el superíndice *sol* se refiere al valor de la propiedades proporcionado por el "solver" en la iteración actual. El factor de relajación  $\alpha$ , 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 este trabajo se usa el código de fluido-dinámico computacional PHOENICS para resolver las ecuaciones que describen la dinámica del flujo: continuidad, cantidad de movimiento, conservación de la energía, conservación de las especies químicas en conjunto con los efectos de la turbulencia tiene sobre estos.

# Capítulo 4

## Ecuaciones, configuración y consideraciones realizadas para la simulación

En el modelo de la simulación se trabaja con dos fases, una sólida y otra gaseosa. Las reacciones químicas en la modelización de la gasificación, la composición de la biomasa, la configuración geométrica del gasificador y las condiciones de frontera usadas en la simulación se presentarán a lo largo del capítulo. Las ecuaciones que modelan cada uno de los procesos se basan en las estudiadas en el segundo capítulo.

### 4.1. Fracción masa, variables y tamaño de partícula.

Como se presentó en el primer capítulo, la gasificación es un conjunto de reacciones en las cuales existe un intercambio de masa y energía entre la fase gaseosa, oxidante, y la fase sólida, en este caso partículas de madera. Para simular este proceso de gasificación se usó un modelo basado en el concepto Euleriano-Euleriano; es decir, las ecuaciones mostradas en el capítulo 2 son resueltas para la fase sólida y gaseosa. Se incluyen procesos en la partículas, tales como el calentamiento, secado, volatización, reacciones heterogéneas, combustión, gasificación, además del arrastre de la partícula y la dispersión turbulenta. Es importante resaltar que las ecuaciones que se mostraron a lo largo de esta sección se encuentran escritas con la forma del promediado de Favre, las tildes y barras que denotan las fluctuaciones y el promedio se han omitido por simplicidad.

**Ecuación de fracción másica.** La forma de representa a la fase sólida y gaseosa es por medio de sus fracciones másicas, fracciones que denotaremos como  $r_i$  y cuya ecuación de conservación es la siguiente:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_i r_i) + \nabla(\rho_i r_i \vec{v}_i) - \nabla(\Gamma_{ri} \nabla r_i) = m_{j \rightarrow i} \quad (4.1)$$

si  $i = 1$  se trata del gas, y cuando  $i = 2$  hablamos del sólido;  $\rho_i$  representa la densidad de las fases,  $\vec{v}_i$  el vector velocidad,  $\Gamma_{r_i}$  es el coeficiente de difusividad y  $m_{j \rightarrow i}$  denota la transferencia de masa de la fase sólida a la fase gaseosa por unidad de volumen y tiempo. El termino que contiene a  $\Gamma_{r_i}$  cuantifica los efectos de la dispersión turbulenta de la partícula. El modelo de esta considera que la suma de fracción volumétrica tanto de la fase gaseosa como la solida es igual a uno.

$$r_1(x, y, z, t) + r_2(x, y, z, t) = 1 \quad (4.2)$$

**Tamaño de partícula.** El tamaño de la partícula va cambiando a través del procesos de gasificación. Este cambio de tamaño es calculado con el método desarrollado por Fueyo, que es una extensión del método de sombra de Spalding. El escalar de la fase sólida  $\Phi_S$  es usada en el presente método, representa la desaparición del sólido debido a la transferencia de masa. La variable  $\Phi_S$  es calculada por la ecuación de transporte:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_2 r_2 \Phi_S) + \nabla (\rho_2 r_2 \Phi_S \vec{v}_2) - \nabla (\Gamma_{r_2} \nabla r_2) = S_{\Phi_S} \quad (4.3)$$

Es importante resaltar que no todo el proceso de gasificación contribuye en el cambio del tamaño de la partícula, sólo las reacciones heterogéneas se toman en cuenta en la transferencia de masa, que lleva a la disminución del tamaño.

El diámetro local de la partícula es determinada por:

$$D = D_i \Phi_S^{-\frac{1}{3}} \quad (4.4)$$

donde  $D_i$  es el diámetro promedio de entrada.

**Componentes posteriores a la pirólisis.** Los componentes de la fase sólida y gaseosas presentes después de la pirólisis son: carbón crudo, agua, char y cenizas. Dichos componentes se calculan por medio la ecuación (4.6), en la cual se expresa con las fracciones másicas de cada uno de estos componentes ( $y_p^{char}$ ,  $y_p^{crudo}$ ,  $y_p^{agua}$ ). La fracción masa de cenizas es obtenida al restar a la unidad las demás fracciones másicas.

$$y_2^{cenizas} = 1 - y_2^{char} - y_2^{crudo} - y_2^{agua} \quad (4.5)$$

Es importante mencionar que el *TAR*, que también se encuentra en el proceso de gasificación de biomasa, es integrado como parte del *CHAR* para facilitar la solución del problema.

**Ecuación para las variables de las fases.** La ecuación Euleriana de conservación para  $\Phi_i$  de la fase sólida y gaseosa es:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho_i r_i \Phi_i) + \nabla (\rho_i r_i \Phi_i \vec{v}_i) - \nabla (\Gamma_{r_i} \Phi_i \nabla r_i) - \nabla (\Gamma_{\Phi_i r_i} \nabla \Phi_i) = \\ S_{\Phi_i} + \|m_{j \rightarrow i}\| \Phi_+ - m_{i \rightarrow j} \| \Phi_- + f_{j \rightarrow i} (\Phi_j - \Phi_i) \end{aligned} \quad (4.6)$$



Para la fase gaseosa, en la ecuación (4.6), se resuelven: tres componentes de velocidad, entalpía específica de la fase, fracción másica de todas las componentes químicas del gas, excepto una (la cual es calculada con la diferencia entre la unidad y la suma de todas las demás componentes), energía cinética turbulenta y disipación turbulenta. Para la fase sólida la ecuación (4.6) resuelve: tres componentes de velocidad, entalpía específica de la fase y la fracción másica de cada uno de los componentes de la fase sólida (raw, char, agua; la fracción másica de las cenizas es obtenida con la diferencia entre la unidad y la suma de las componentes mencionadas).

Dentro de la ecuación (4.6),  $\Phi_+$  representa el valor de  $\Phi$  dentro de la fracción másica ( $m_{j \rightarrow i}$ ) que va de la fase  $j$  a la fase  $i$ , similarmente con  $\Phi_-$ . La doble barra es un operador que toma el valor máximo entre el valor cero y una cantidad cerrada, y  $f_{j \rightarrow i}$  coeficiente de fricción del transporte difusivo de  $\Phi$  entre las fases. En la ecuación de momento,  $f_{j \rightarrow i}$  representa el arrastre de la partícula; y en la ecuación de la entalpía, la transferencia de calor entre las fases. Finalmente,  $S_{\Phi_i}$  representa otras fuentes, por ejemplo el gradiente de presión en la ecuación de momento. En esta ecuación también aparecen dos términos de difusión; el primer término  $\nabla(\Gamma_{r_i} \Phi_i \nabla r_i)$  es el transporte de  $\Phi_i$  debido a la difusión turbulenta de  $r_i$  en la ecuación (4.1). El segundo término  $\nabla(\Gamma_{\Phi_i} r_i \nabla \Phi_i)$  es inherente a la fase de difusión turbulenta, y esta sólo está presente en la fase gaseosa.

## 4.2. Reacciones fisicoquímicas

En el presente modelo se toma en cuenta el secado de la partícula, el proceso de volatilización, las reacciones homogéneas y las reacciones heterogéneas. Es importante mencionar que las reacciones que se toman en cuenta son algunas de la gran cantidad que existen en el proceso de gasificación, pero sin duda las más representativas de este fenómeno.

**Secado de la partícula.** Para el secado de la partícula, se asume que todo el calor que se transfiere de la fase gaseosa a la fase sólida es usada en el calor latente de vaporización. La transferencia de masa asociada es representada por:

$$\dot{m}_{secado} = \frac{\dot{q}_{1 \rightarrow 2}}{L} \quad si \quad y_2^{agua} > 0 \quad ; \quad \dot{m}_{secado} = 0 \quad si \quad y_2^{agua} = 0 \quad (4.7)$$

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

**Transferencia de calor entre la partícula y la fase gaseosa.** El flujo de calor entre la fase sólida y gaseosa es modelado por:

$$q_{j \rightarrow i} = 6 \frac{r_2}{D^2} \rho_1 Nu k_1 (T_j - T_i) \quad (4.8)$$

donde  $k_1$  es la conductividad térmica del gas, y  $Nu$  es el número de Nusselt, que es calculado acorde a:

$$Nu = 2,0 + 0,65Re^{\frac{1}{2}}Pr^{\frac{1}{3}} \quad (4.9)$$

donde  $Re$  y  $Pr$  son, respectivamente, el número de Reynolds y Prandtl de la fase gaseosa.

**Fuerza de arrastre entre la partícula y la fase gaseosa.** La fuerza de arrastre entre la fase gaseosa y la fase sólida se modela de la siguiente manera:

$$f_{i \rightarrow j} = f_{j \rightarrow i} = \frac{3r_2}{4D} \rho_1 C_d \|V_r\| \quad (4.10)$$

donde  $\|V_r\|$  es la velocidad relativa entre el gas y la partícula, y  $C_d$  es el coeficiente de arrastre el cual se calcula como se muestra a continuación:

$$C_d = \frac{24(1 + 0,15Re^{0,687})}{Re} \quad (4.11)$$

**Volatización.** En el proceso de volatización se considera que el carbón crudo es consumido para formar el char en fase sólida y materia volátil en la fase gaseosa. Este proceso se describe por medio de la reacción:



El material volátil es considerado como un hidrocarburo general ( $CH_x$ ). En  $CH_x$ , el coeficiente  $x$  representa la relación carbón/hidrógeno en el volátil, esta relación en nuestro caso es igual a cuatro para el metano, y es calculada por el análisis aproximado y el último análisis. El primer análisis dado por la división entre el  $CHAR$  y volátiles en la partícula y el análisis siguiente da la composición de la partícula. Para la reacción de tipo (4.12) se usa la siguiente ecuación:

$$\dot{m} = -A_v Y r_1 \rho_2 y_2^{coal} e^{\frac{-E_v}{RT_2}} \quad (4.13)$$

donde  $A_v$  es un factor pre-exponencial,  $E_v$  en la energía de activación; y  $R$  es la constante universal de los gases. Las constantes  $A_v$  y  $E_v$  son constante cinéticas que dependen del tipo de biomasa usada.

**Reacciones heterogéneas.** El  $CHAR$  producido en la volatización es consumido por reacciones heterogéneas de combustión y gasificación. Las ecuaciones químicas de las reacciones heterogéneas usadas en el modelo usado se muestran a continuación:



$CO$  y  $H_2$  son generados en las reacciones (4.15) y (4.16) y se incorporan a la fase gaseosa, y si las condiciones estequiométricas lo permiten entonces, son oxidados en  $CO_2$  y  $H_2O$  respectivamente, por medio de las reacciones homogéneas. El orden aparente de las reacciones, ecuaciones (4.15) y (4.16), es 0,5 y se obtiene con la expresión:

$$\dot{m}_{heterogenea} = \frac{6r_2k_c}{2Dk_d} \left[ -k_c + \left( k_c^2 + 4k_d^2p_i \right)^{\frac{1}{2}} \right] \quad (4.17)$$

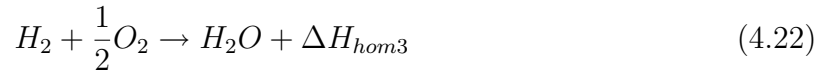
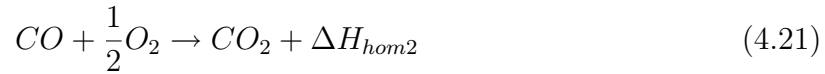
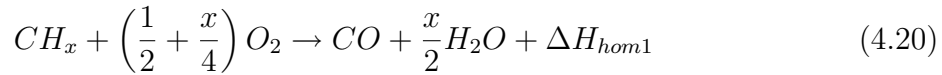
donde  $D$  es el diámetro de la partícula,  $p_i$  es la presión parcial del  $O_2$ ,  $CO_2$  y  $H_2O$ ,  $k_c$  y  $k_d$  son las tasas de cinética y difusión respectivamente. Los últimos dos valores se calculan como se muestra abajo.

$$k_c = A_h e^{\frac{-E_h}{RT_2}} \quad (4.18)$$

$$k_d = \frac{ShD_iM_c}{RT_1D} \quad (4.19)$$

siendo  $Sh$  es el número de Sherwood,  $D_i$  el coeficiente de difusión del  $O_2$ ,  $CO_2$  y  $H_2O$ ;  $M_c$  es el peso molecular del carbón. Los coeficientes en las reacciones (4.15) y (4.16) se toman de Smoot y Smith [20], Smith [20], y Mann y Kent [20].

**Reacciones homogéneas.** La combustión de los volátiles, producto del proceso de volatización, es asumido por el proceso descrito en las siguientes reacciones:



donde  $\Delta H_{hom2}$  es  $23,59 \left[ \frac{MJ}{Kg} \right]$ ,  $\Delta H_{hom3}$  es  $120,9 \left[ \frac{MJ}{Kg} \right]$  y  $\Delta H_{hom1}$  es calculado por:

$$\Delta H_{hom1} = \frac{PCI}{\left[ (1 - y_2^{agua}) - (y_c^{char}) (\Delta H_{hetero} + \Delta H_{hom2}) \right] (y_c^{volatiles})} \quad (4.23)$$

el  $PCI$  es el poder calorífico inferior de la biomasa,  $y_c^{agua}$  es la fracción másica del agua presente en la partícula,  $y_c^{char}$  es la fracción másica del carbón ( $C$ ) dentro del  $CHAR$ ,  $y_c^{volatiles}$  es la fracción másica del carbono dentro de los volátiles. La tasa de reacción química de (4.20)-(4.22) es calculada por:

$$\dot{k} = \min (k_{Ar}, \dot{k}_{EBU}) \quad (4.24)$$

donde  $k_{Ar}$  y  $k_{EBU}$  son las tasas de mezcla cinética y turbulenta; además,  $k_{EBU}$  es calculado según el modelo de Eddy Break-up.

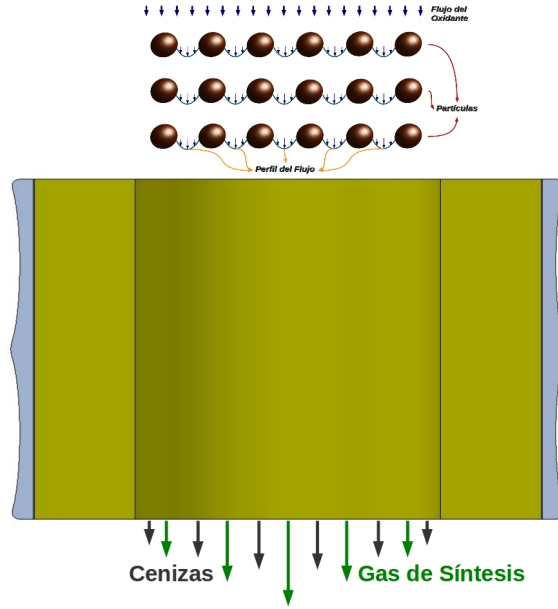


Figura 4.1: Esquema de entrada y salida de los reactivos y productos del gasificador.

$$k_{EBU} = C_{EBU} \frac{\varepsilon}{k} \min \left( \frac{y_1^i}{S_i}, \frac{y_1^j}{S_j} \right) \quad (4.25)$$

en donde  $y_1^i$  y  $y_1^j$  son las dos especies químicas que participan en la ecuación,  $S_i$  y  $S_j$  son los coeficientes estequiométricos asociados,  $k$  y  $\varepsilon$  es la energía cinética turbulenta y la tasa de disipación, respectivamente. El término  $K_{Ar}$  es determinada por:

$$k_{Ar} = A\rho_1 e^{-\frac{E}{RT_1}} \quad (4.26)$$

### 4.3. Configuración del gasificador y condiciones de la simulación

Se simulara un gasificador de lecho arrastrado en el cual por la parte superior se introducirá la biomasa, madera, así como el agente oxidante, aire, *figura (4.1)*.

El volumen de trabajo, donde se realizan las reacciones de la gasificación, consta de un cilindro de  $0,5[m]$  de alto y un diámetro de  $0,45[m]$  como se muestra en la *figura (4.3)*. La simulación se realizo bidimensionalmente y en coordenadas cartesianas, con una malla de  $45 \times 50$ , que se selecciono debido a que los resultados son independientes de la malla, *figura [4.2]*.

En en cuadro 4.3 se encuentran los componentes de la biomasa y el oxidante después de la pirólisis primaria.

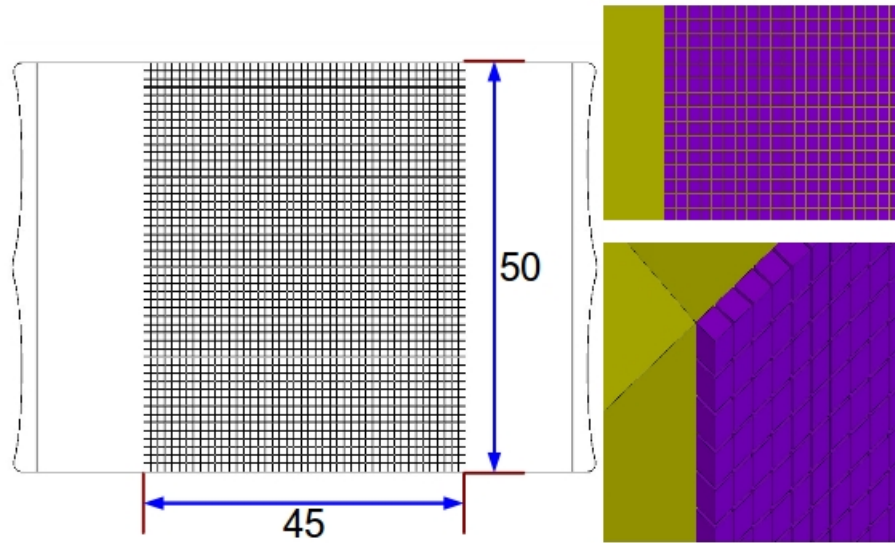


Figura 4.2: Mallado elegido para la simulación.

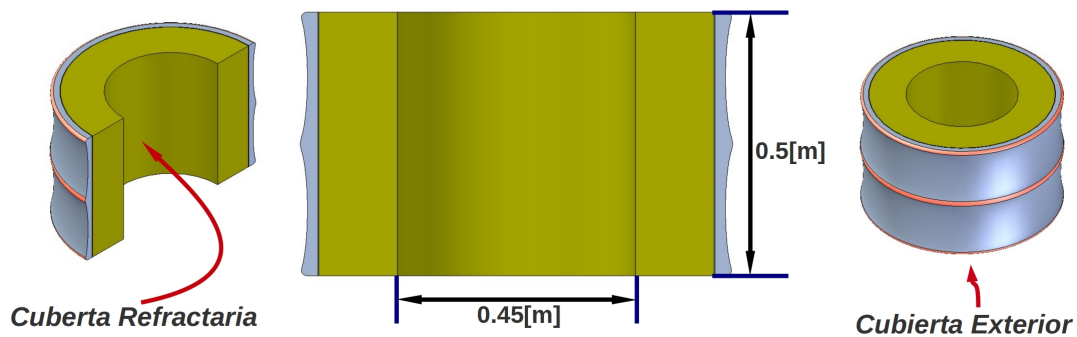


Figura 4.3: Configuración del gasificador.

Condiciones de Entrada al Gasificador	Magnitud	Unidades
$T_{Solido}$	300	[K]
$T_{Aire}$	300	[K]
$T_{Pared}$	300	[K]
$v_{Solido}$	0.00032	$\frac{m}{s}$
$v_{Aire}$	0.048	$\frac{m}{s}$
Presión de Trabajo [ $P_0$ ]	1	Atm

Cuadro 4.1: Condiciones de entrada de la biomasa y el agente oxidante.

Propiedades	Magnitud	Unidades
Densidad de la Biomasa [ $\rho_{S0}$ ]	200	$\frac{Kg}{m^3}$
Densidad del Aire [ $\rho_{Aire}$ ]	1.18	$\frac{Kg}{m^3}$
Diámetro Inicial [ $d_{S0}$ ]	0.01	[ $m$ ]

Cuadro 4.2: Propiedades de el aire y biomasa al inicio del proceso de gasificación.

Composición de la Biomasa y Oxidante	Fracción Másica
Carbonizado [Char $V_C$ ]	0.206
Alquitranes [Tar $V_T$ ]	0.138
Monóxido de Carbono $CO$	0.109
Dióxido de Carbono $CO_2$	0.298
Agua $H_2O$	0.235
Hidrógeno $H_2$	0.001
Metano $CH_4$	0.013
Humedad en la Biomasa	0.015

Cuadro 4.3: Coeficientes estequiométricos posteriores a la pirólisis, Di Blasi.

Composición del Aire	Fracción Másica
Nitrógeno	0.77
Oxígeno	0.23

Cuadro 4.4: Composición estequiométrica del agente oxidante usado.

Composición Ingresada en el Programa	Fracciones Másicas
WAT	0.05
ASH	0.105
CHAM	0.5009
RAW	0.334

Cuadro 4.5: Variables usadas por el programa anexo a PHOENICS, GROUND.

Elemento	Fracciones Másicas
Carbono	0.431
Hidrógeno	0.027
Oxígeno	0.0437
Nitrógeno	0.000
Azufre	0.000

Cuadro 4.6: Composición después de la pirólisis expresada en elementos químicos.

La composición del aire, cuadro 4.4, no toma en cuenta la humedad que este contiene considerándolo totalmente seco y los gases inertes presentes se consideran como parte del nitrógeno.

Los cuadros 4.5 y 4.6, contienen los valores ingresados en el programa, donde la variable *RAW* esta formada por la suma de los valores del *CHAR* y *TAR*. Los valores de los gases presentes después de la pirólisis se encuentran expresadas en la variable *CHAM*; *WAT* representa la humedad presente en la biomasa al inicio del proceso y *ASH* son las cenizas que esta misma contiene. En el segundo cuadro mencionado, se encuentran las variables de la tabla 4.5 deslosados en elementos químicos.

# Capítulo 5

## Resultados

En el presente capítulo se mostrarán los datos proporcionados por la simulación, mismos que serán analizados y comparados con el trabajo realizado anteriormente por Colomba Di Blasi, el cual consiste en una simulación unidimensional para poder obtener el gas de síntesis. Las imágenes que se muestran son tridimensionales pero es importante resaltar que la simulación se realizó en dos dimensiones (las fracciones másicas de cada uno de los componentes van de 0 a 1, donde 1 representa el 100 % del componente).

### 5.0.1. Predicciones numéricas para la fase sólida

El contenido de agua que presenta la biomasa, en fase líquida, es evaporada rápidamente al entrar en el gasificador, pasando a formar parte de la fase gaseosa como se puede apreciar en la *figura (5.1)*, resultado esperado debido a la forma en que se modela el proceso de secado.

La biomasa desaparece, al igual que el agua, rápidamente para poder dar paso a la formación de los productos de la pirólisis, productos que paulatinamente reaccionan y forman al final del proceso el gas de síntesis, véase *figura (5.2)* y *(5.3)* respectivamente.

Al consumirse los componentes de la biomasa gradualmente la fase sólida se va conformando en mayor proporción por ceniza, de tal modo que a la salida del gasificador esta fase sólida está compuesta en su totalidad por cenizas, como se puede apreciar en la *figura (5.4)*, donde se muestra esta condición al final de proceso de gasificación.

El conjunto de procesos que conforman la gasificación, vistos en el primer capítulo, traen como origen que el tamaño de la partícula disminuya debido a que la atmósfera gaseosa reacciona con la biomasa haciendo que la mayor parte de esta pase a conformar el gas de síntesis, véase *figura (5.5)*.

### 5.0.2. Predicciones numéricas para la fase gaseosa

A la entrada del gasificador no existe el monóxido de carbono, este se va formando con forme las dos fases, sólida y líquida, van reaccionando entre si dejando al final del



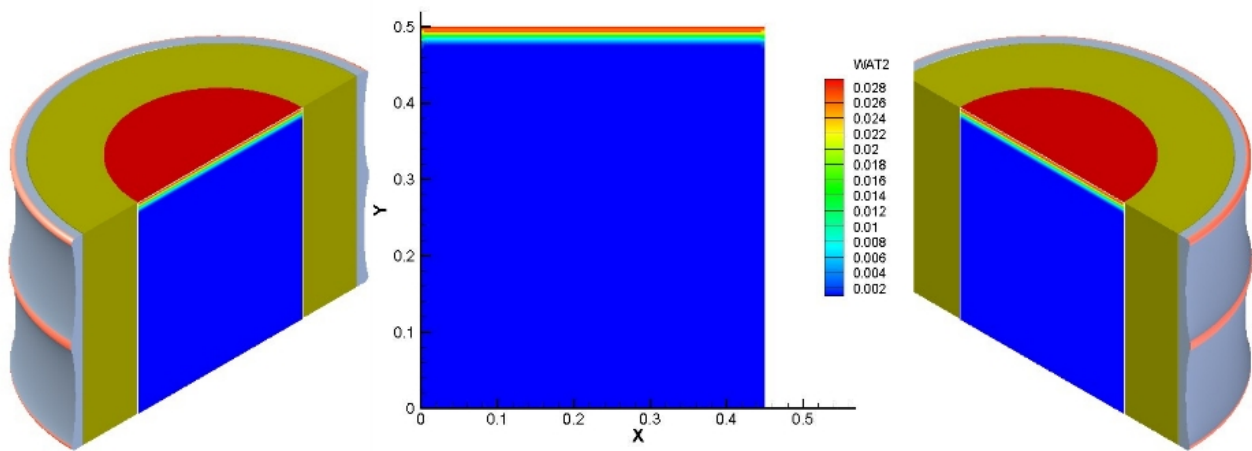


Figura 5.1: Cambio de la fracción másica de agua presente en la biomasa a lo largo del gasificador.

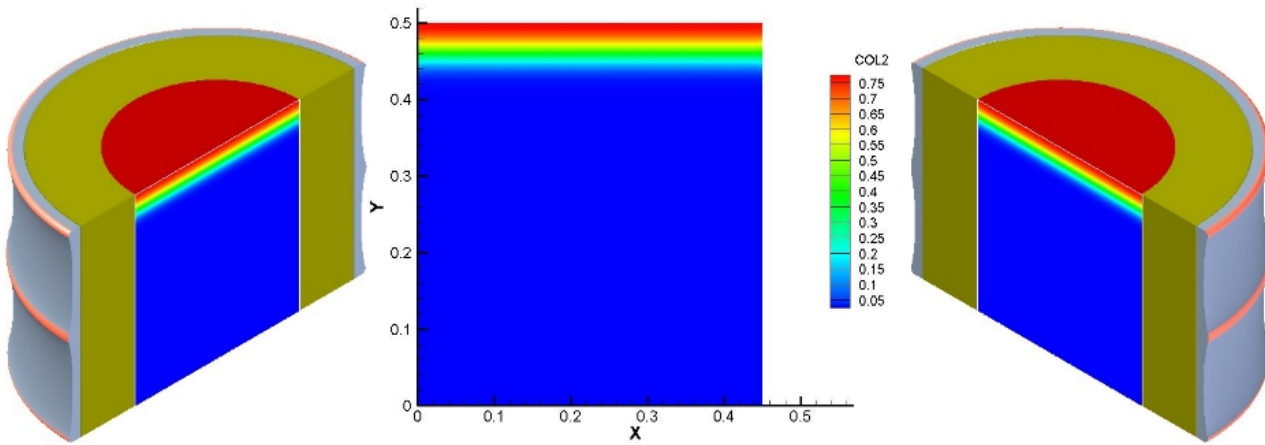


Figura 5.2: Cambio de la fracción másica de carbón crudo presente en la biomasa a lo largo del gasificador.

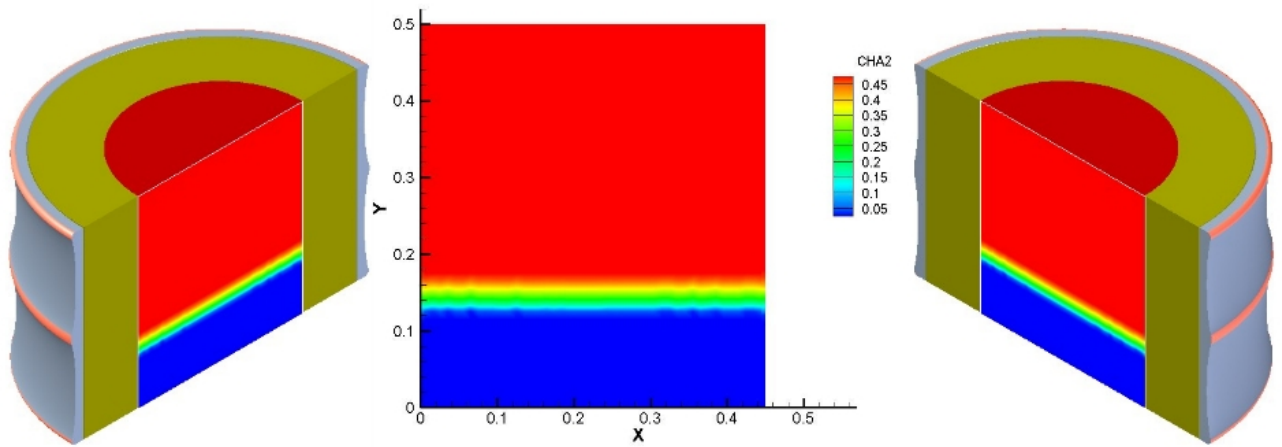


Figura 5.3: Cambio de la fracción másica de los productos de la pirólisis a lo largo del gasificador.

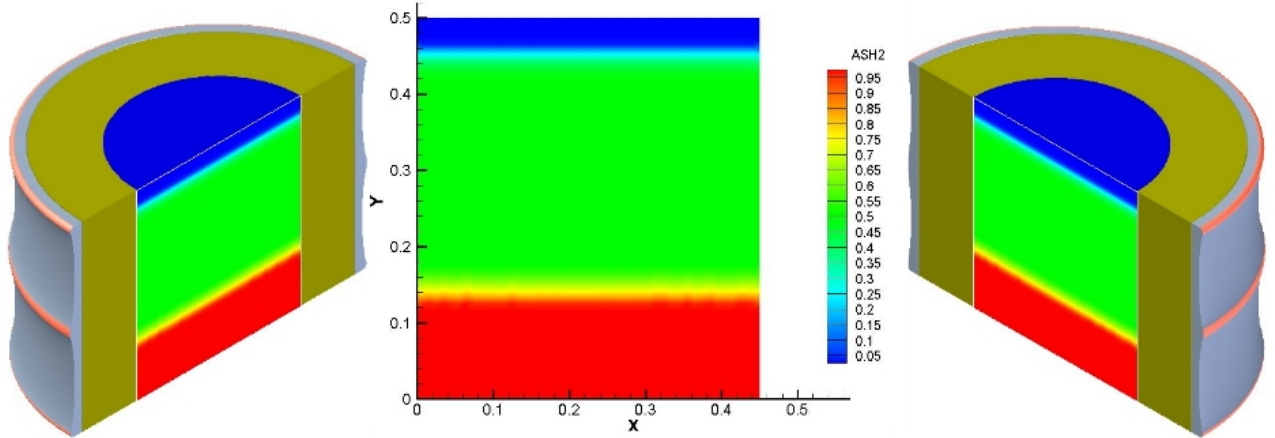


Figura 5.4: Cambio de la fracción másica de la cenizas presente en la biomasa a lo largo del gasificador.

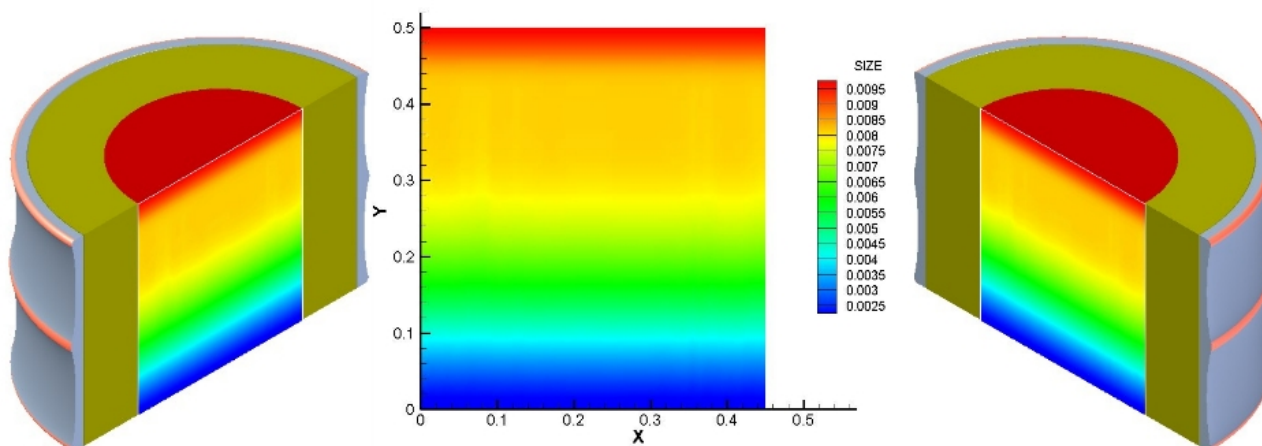


Figura 5.5: Cambio del tamaño de la partícula de biomasa a lo largo del gasificador.

gasificador una concentración máxima de este componente, véase *figura (5.6)*, de igual manera para el dióxido de carbono, *figura (5.7)*.

Al inicio del proceso la presencia de vapor de agua es nula, este es generado por la evaporación de agua al absorber la energía proveniente de las reacciones exotérmicas, llegando a un máximo, el cual posteriormente disminuye debido a las reacciones endotérmicas que dan paso a la formación de hidrógeno que es uno de los componentes del gas de síntesis, este proceso se puede visualizar en la *figura (5.8)*.

No hay presencia de hidrógeno cuando la biomasa entra al gasificador, el cual es formado al absorber el calor que se libera de las reacciones exotérmicas, calor que descompone el vapor de agua presente, en la atmósfera gaseosa, en hidrógeno ( $H_2$ ) y oxígeno ( $O_2$ ) que reacciona con el monóxido de carbono para obtener la concentración final de dióxido de carbono.

El valor máximo del oxígeno se encuentra a la entrada del gasificador, este reacciona paulatinamente para dar paso a la generación de vapor de agua, monóxido y dióxido de carbono, haciendo que la concentración de oxígeno presente al final del proceso sea nula, *figura (5.11)*.

En esta simulación se considero que el nitrógeno no reacciona, aunque en la realidad este genera óxido de nitrógeno. La disminución de la fracción másica de nitrógeno se debe a la adición de masa proveniente de la fase sólida a la fase gaseosa para obtener otros compuestos mientras que la masa del nitrógeno permanece constante, véase *figura(5.12)*.

### 5.0.3. Propiedades de flujo

La variación de la presión se relaciona directamente con densidad y la velocidad de la fase, en este caso la fase gaseosa. A lo largo del gasificador la velocidad aumenta lo que traería, como consecuencia, un aumento en la presión; sin embargo, la densidad del

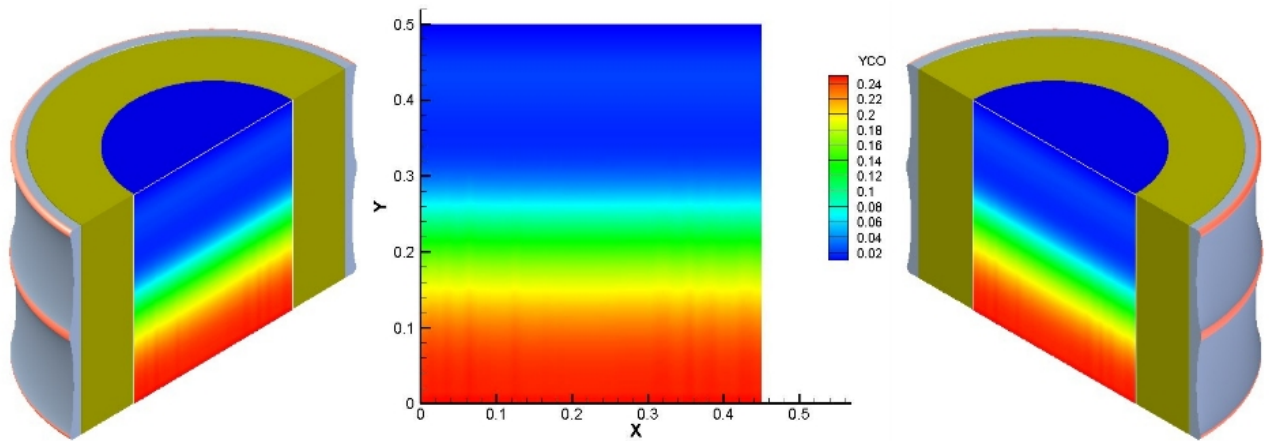


Figura 5.6: Cambio de la fracción másica monóxido de carbono presente en la biomasa a lo largo del gasificador.

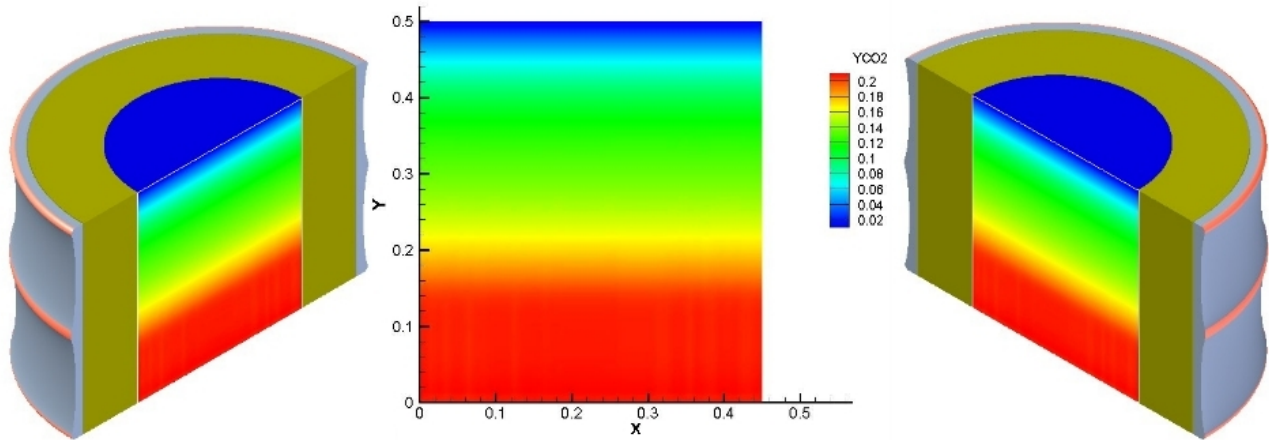


Figura 5.7: Cambio de la fracción másica dióxido de carbono presente en la biomasa a lo largo del gasificador.

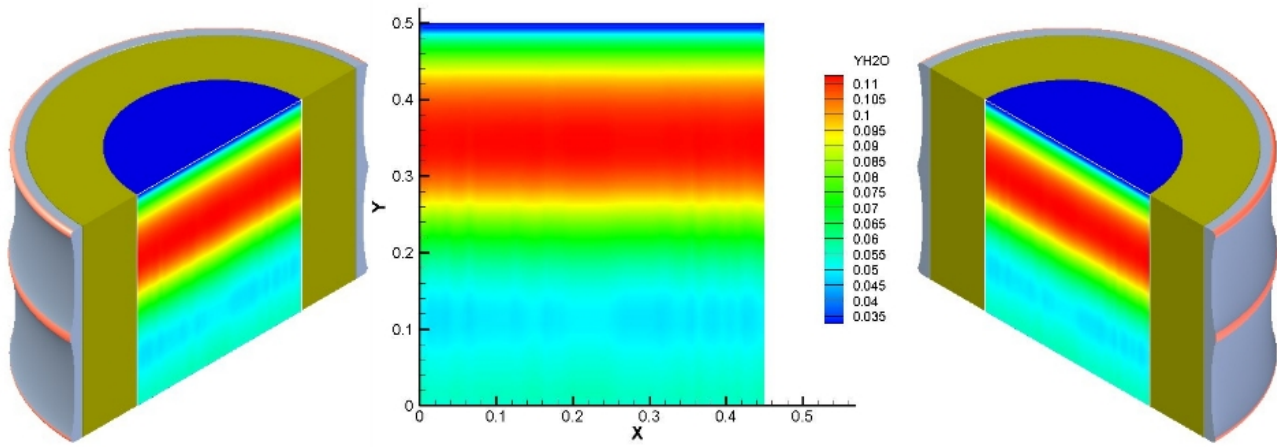


Figura 5.8: Vapor de agua generada durante el proceso de gasificación.

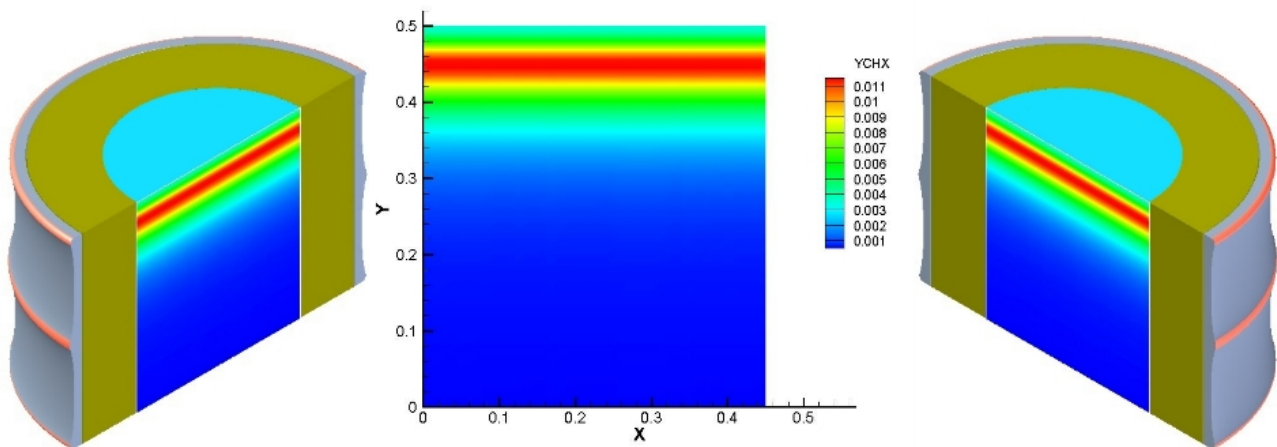


Figura 5.9: Generación de metano en el proceso de gasificación.

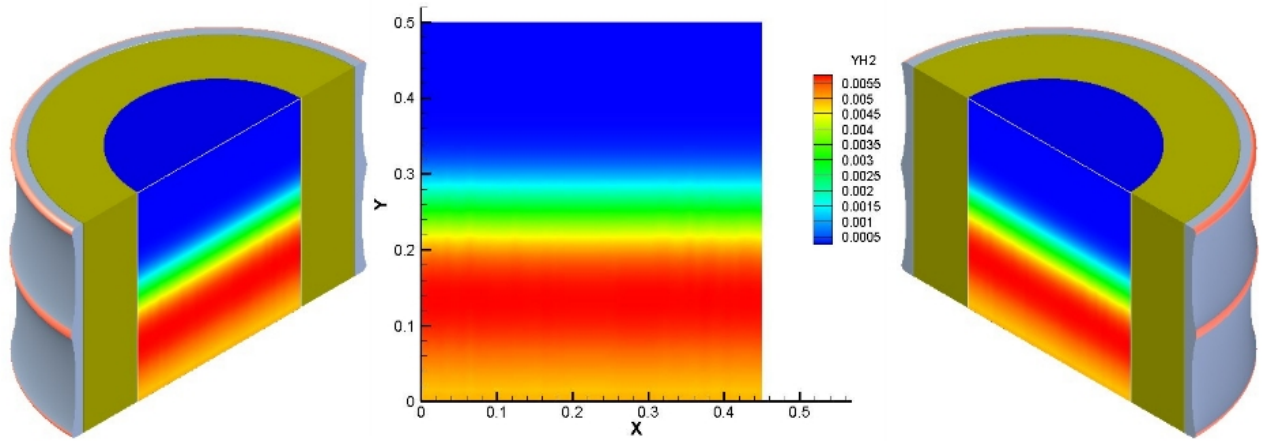


Figura 5.10: Generación de hidrógeno en el proceso de gasificación.

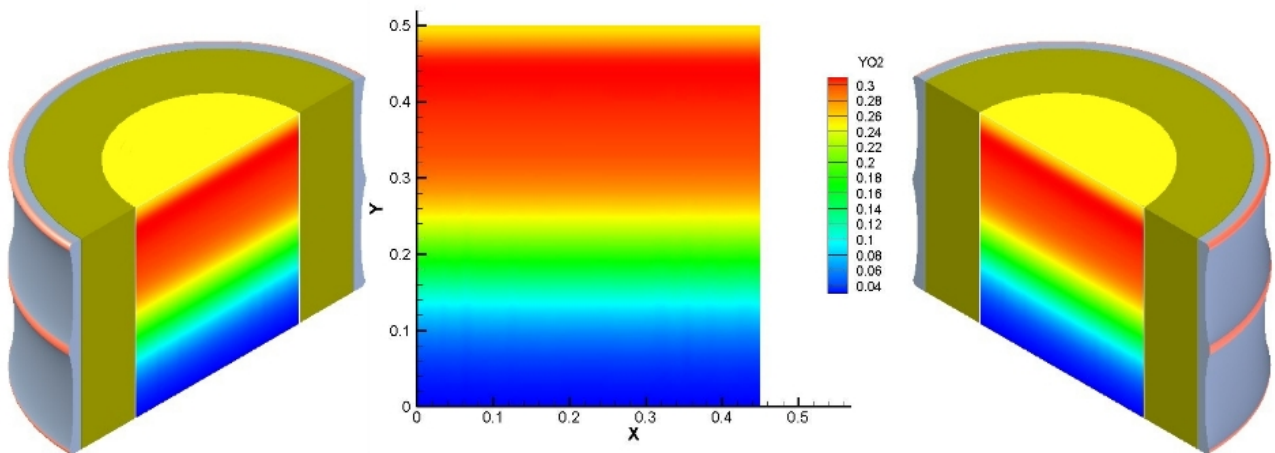


Figura 5.11: Cambio de la fracción másica de oxígeno durante la gasificación.

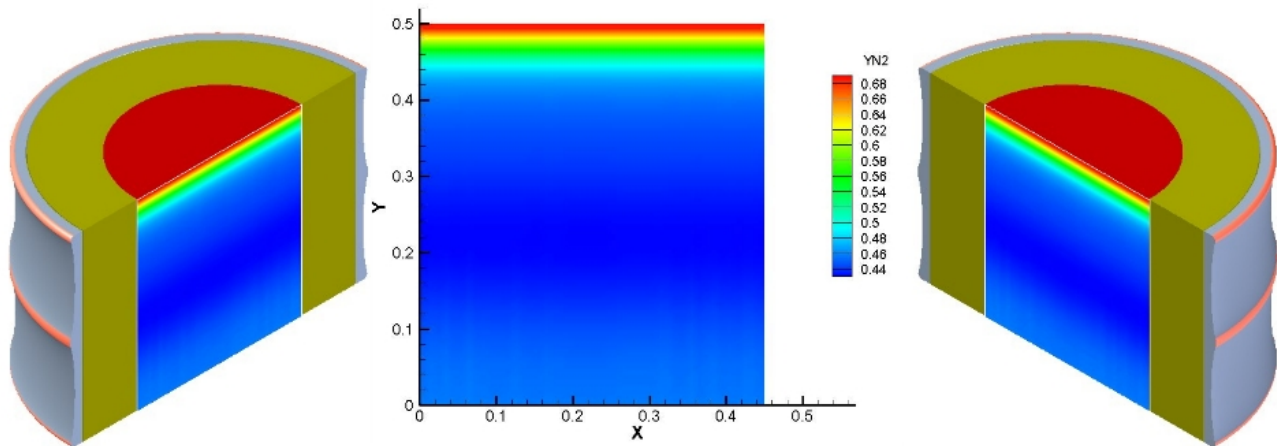


Figura 5.12: Cambio de la fracción másica de nitrógeno durante la gasificación.

gas disminuye demasiado al aumentar su temperatura, por lo que la presión disminuye, teniendo como resultado que la presión a la entrada del gasificador tiene su valor máximo y a la salida su valor mínimo. La distribución de presiones se puede observar en la *figura (5.13)*.

El aumento de la velocidad de la fase sólida es provocada por la fuerza gravitatoria que actúa sobre esta y por la fuerza de arrastre que ejerce la fase gaseosa al entrar con mayor velocidad al gasificador, siendo esta segunda fuerza afectada por la disminución del tamaño de partícula a lo largo del proceso de gasificación, la *figura (5.14)* muestra la distribución de velocidad de esta fase.

El aumento en la temperatura, debido a las reacciones exotérmicas, genera una expansión del gas dando lugar a que la velocidad de esta fase aumente, como se muestra en la *figura (5.15)*, haciendo que este sea máxima a la salida gasificador.

El valor del monóxido de carbono y vapor de agua que se obtuvo en la simulación se encuentra entre los valores de los resultados con los que se compara (Colomba Di Blasi), la fracción volumétrica del dióxido de carbono se encuentra por debajo del otro valor al igual que el metano y el hidrógeno que se produce al final del gasificador. La presencia de oxígeno es nula al final de la gasificación en las simulaciones unidimensionales, lo cual no sucede en la simulación bidimensional, realizada en esta tesis; además, de una mayor fracción másica de nitrógeno en el gas de síntesis.

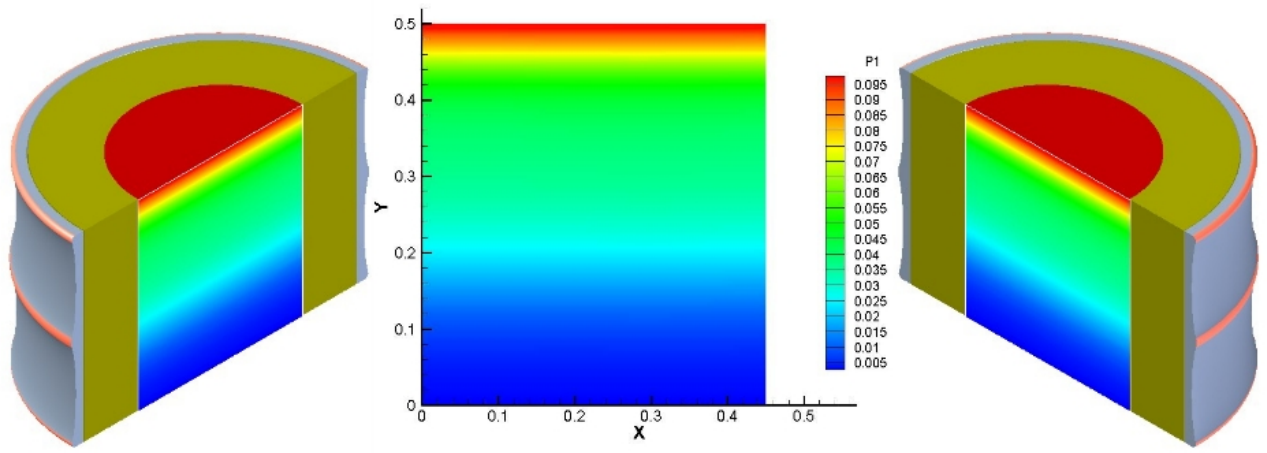


Figura 5.13: Cambio de presión a lo largo del gasificador.

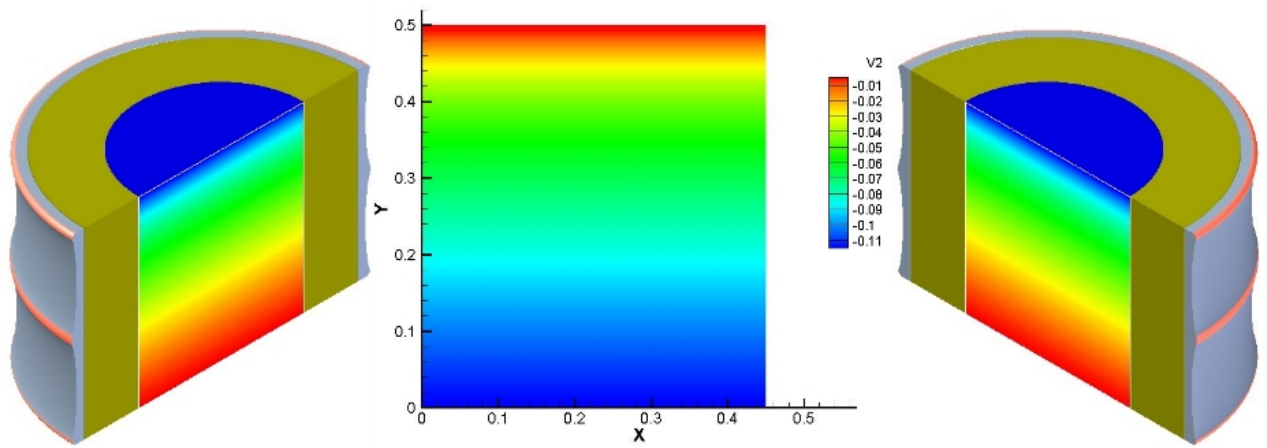


Figura 5.14: Velocidad de la fase sólida a través del gasificador.



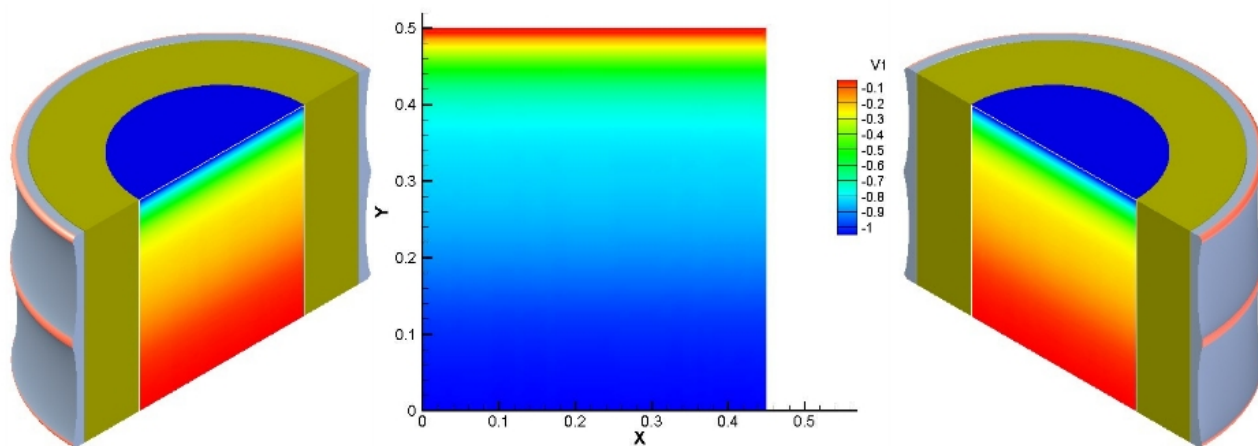


Figura 5.15: Velocidad de la fase gaseosa a través del gasificador.

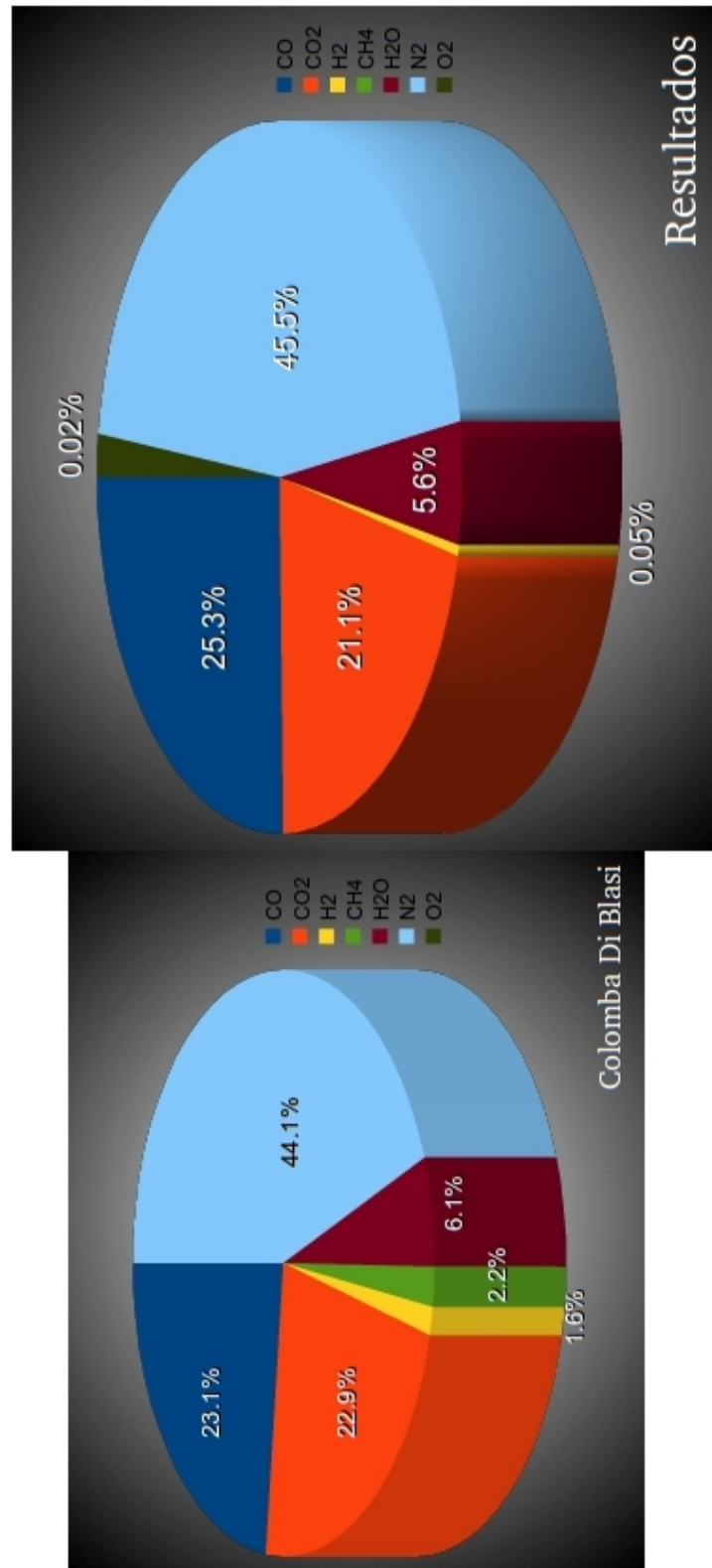


Figura 5.16: Gas de síntesis resultantes de las simulaciones.

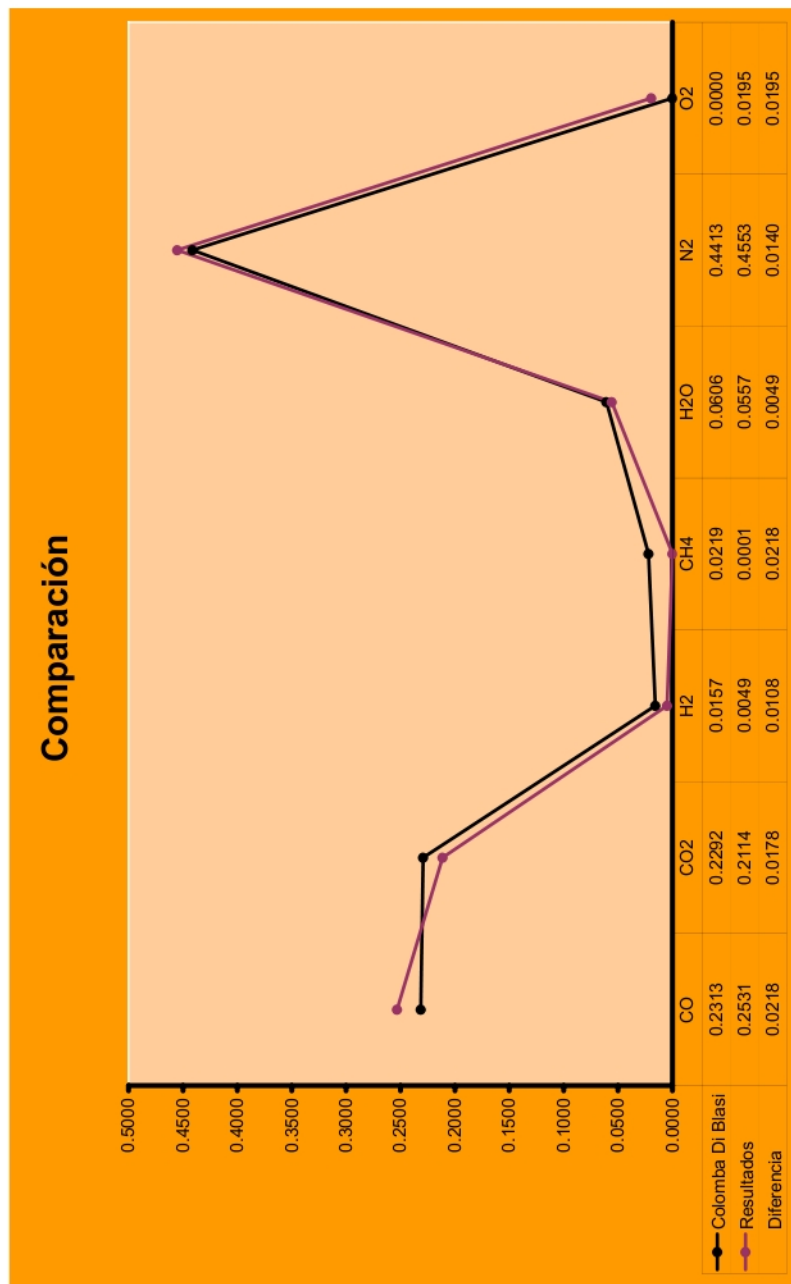


Figura 5.17: Comparación de cada uno de los elementos del gas de síntesis de las dos simulaciones, en fracción volumétrica.

# Capítulo 6

## Conclusiones

En este trabajo se simula, en dos dimensiones, el proceso de gasificación en un reactor de lecho arrastrado, donde se introduce partículas de madera y aire por la parte superior. Para simular este proceso se usó un modelo basado en el concepto Euleriano-Euleriano, resolviendo las ecuaciones de transporte, que se adaptan a cada uno de los fenómenos que intervienen en la gasificación, por medio del método numérico de Volúmenes Finitos, además de aplicando el modelo de turbulencia  $\kappa - \varepsilon$ . Se analizaron variables como el tamaño de partícula, velocidades de las fases y gas de síntesis proporcionado por la simulación, además de compararlo con el gas obtenido en el trabajo de Colomba Di Blasi.

La fracción volumétrica de monóxido de carbono es cercano valor obtenido por Colomba Di Blasi; sin embargo, en la simulación bidimensional se muestra la presencia de oxígeno al final del gasificador lo cual no sucede en el trabajo unidimensional (0.02, en fracción volumétrica), trayendo en consecuencia una concentración más grande de monóxido y una baja presencia de dióxido de carbono además de afectar en la concentración de vapor de agua. El fracción volumétrica de hidrógeno que se encuentra en el gas de síntesis es aproximadamente tres veces más pequeña en comparación con los resultados arrojados en los otros dos trabajos, que en parte se debe al considerar el aire como seco y no húmedo.

Las diferencias encontradas en el gas de síntesis con el trabajo unidimensional son aceptables, estas variaciones en los resultados de las dos simulaciones se deben a:

1. La consideración del arrastre de partícula en el modelo usado, haciendo que esta aumentara su velocidad dentro del gasificador, disminuyendo de esta manera el tiempo de residencia de dicha partícula.
2. La consideración de que el *TAR* también formaba parte del *CHAR* (aunque se realizó el balance de los componentes químicos del *TAR* para ser considerados en la simulación).
3. La falta de las reacciones químicas inherentes al *TAR*.

A pesar de lo anteriormente explicado, se considera que los resultados suministrados por la simulación bidimensional son válidos como una primera iteración, debido a que los

valores de las fracciones volumétricas se encuentran entre los obtenidos por Colomba Di Blasi y Ulises Baldillo, pero es indispensable incluir el *TAR* y las reacciones químicas que este trae con sígo.

## Trabajos a futuro

La gasificación de biomasa es una de las tecnologías que pueden aportar al desarrollo sustentable de la humanidad, por lo que seguir estudiando esta tecnología es de vital importancia par este objetivo. Bebido a esto es necesario:

1. Agregar el *TAR* y las reacciones químicas inherentes a este compuesto al programa.
2. Realizar simulaciones con base a trabajos experimentales y comparar los resultados.
3. Cambiar la configuración del gasificador a uno de lecho fluidizado o lecho fijo, comparando los resultados con trabajos experimentales de estos mismos.
4. Usar diferentes tipos de biomasa en la simulación (como rastrojo de caña, estiércol, etc.).

Si los resultados de las simulaciones concuerdan con los experimentales se puede variar condiciones de frontera, como presión y temperatura, así como los tamaños de partícula de la biomasa y su humedad para encontrar los parámetros con los cuales se puede obtener la mejor composición de gas de síntesis. Finalmente se puede desarrollar todo lo anteriormente descrito en una simulación tridimensional.

# Apéndice A

## Turbulencia

En este apéndice se define el concepto de turbulencia, los niveles de modelización de esta; además del modelo  $\kappa - \varepsilon$ , usado para la solución del problema presentado en esta tesis. El indispensable mencionar que las ecuaciones que se usan consideran al flujo turbulento como un medio continuo.

### A.1. Concepto turbulencia

La definición del flujo turbulento es muy complejo, por lo que se opta por mencionar las propiedades más destacadas del movimiento turbulento, estas son:

**Irregularidad.** Se manifiesta con la aparición de variaciones, con tiempos y valores muy dispares (diferentes escalas), en las propiedades fluidinámicas (presión, temperatura, velocidad, etc.). Se producen fluctuaciones no estacionarias en flujos inicialmente estacionarios.

**Tridimensionalidad.** Existen flujos turbulentos que al ser promediados en el tiempo resulten planos y otros cuyas escalas de fluctuaciones más grandes es bidimensional; sin embargo, a medida que se desciende en el tamaño de las escalas del amplio espectro que caracteriza al flujo turbulento, se encuentra que el movimiento asociados a estas escalas pequeñas es siempre tridimensional.

**Difusividad.** Debido a las fluctuaciones del flujo turbulento los fenómenos de transporte de masa, cantidad de movimiento y energía se ven notablemente amplificadas. Esto produce efectos difusivos parecidos a los que se dan a escala molecular.

**Disipación.** El flujo turbulento es siempre disipativo, este necesita siempre de un aporte continuo de energía, la cual es extraída del flujo principal y se disipa al deformar las partículas fluidas (disipación viscosa).

**Altos números de Reynolds.** El valor efectivo de número de Reynolds depende del tipo de aplicación.

Un flujo turbulento se presenta debido a pequeñas perturbaciones, vórtices, que posteriormente crecen hasta una cierta amplitud alcanzando un nuevo estado; el nuevo estado puede ser a su vez, inestable frente a otras perturbaciones y crecer hasta pasar a otro estado; por último, el flujo se convierte en una superposición de perturbaciones aleatorias y alcanzando la condición de flujo turbulento.

En un flujo turbulento existe una gran variedad de escalas, que corresponden a la variedad de tamaños de vórtices, torbellinos, que en este existen. Estos vórtices son afectados por los gradientes de velocidad del flujo medio dominante y por la interacción existente entre los demás vórtices. Este proceso de división continua hasta que la escala de los torbellinos es tan diminuta que el número de Reynolds de los mismos no es lo suficientemente grandes para que la inestabilidad persista. La energía cinética contenida en estos pequeños vórtices se transforma en energía térmica debido a la disipación viscosa. Esta variedad de tamaños de torbellinos se pueden agrupar en tres escalas.

**Macroescala.** Es la escala asociadas a los vórtices más grandes presentes en el flujo. Las características de estos grandes torbellinos dependen de las condiciones de contorno del flujo y presentan un marcado carácter anisótropo.

**Escala intermedia.** Son escalas inferiores a la macroescala pero en las que aun no existe una disipación de energía.

**Microescala.** Es la escala más pequeña, en la que se tiene una disipación de energía. Los vórtices presente en esta escala presentan un carácter, al contrario del torbellino en la macroescala, isótropo.

## A.2. Niveles de modelización

La modelización matemática de los flujos turbulento se lleva acabo usando las ecuaciones de constitutivas de Mecánica de Fluidos para un medio continuo. Esta ecuaciones tiene solución analítica para algunos caso especiales, pero en lo general es imposible obtener soluciones de este tipo para la mayor parte de los problemas que se presentan en ingeniería. La rápida evolución en los ordenadores y la creación de algoritmos específicos a generado un gran avance en la solución numérica de dichos problemas dando lugar a la dinámica de fluidos computacional (CFD, Computacional Dynamics Fluid ).

## DNS (Direc Numerical Simulation)

La resolución directa de la ecuaciones de Navier-Stokes (DNS), es la manera más evidente y exacta de predecir un flujos turbulento. En este tipo de simulación no se hacen aproximaciones ni promediados al resolver todas las escalas espaciales y temporales presentes en el flujo y los errores que en esa solución se tiene son causa por la forma que se realizo la discretización numérica. A pesar de su precisión, el costo computacional para poder realizar las simulaciones es muy alto y además sólo se puede aplicar a geometrías sencillas.

## LES (Large Eddy Sumulati6n)

Dentro del las escalas espaciales y temporales presentes en los flujos turbulentos, las más efectivas para el transporte de propiedades son las grandes escalas, mientras las demás escalas son muy débiles en el transporte de dichas propiedades. La simulación de los grandes torbellinos (LES) simula esta escalas mayores y los efectos de las demás escalas se suman a las de mayor magnitud. Aun haciendo esta consideración la simulación exige una gran capacidad computacional y tiempo de cálculo, que no se compara al DNS, pero que aun hace este tipo de simulación sea muy costosa.

## RANS (Reynolds-Average Navier-Stokes Equations)

Los flujos estudiados en ingeniería son muy complejos por lo que las aproximaciones usadas para el estudio de estos flujos turbulentos son los basados en métodos estadísticos. Es así como surge una gran variedad de modelos basados en el promediado de Reynolds de la ecuaciones de Navier-Stokes (RANS).

En los flujos ingenieriles se esta más interesado en el comportamiento del flujo medio que en los detalles de las fluctuaciones existentes, con lo que se adopta una aproximación estadística de dichas fluctuaciones. Promediando las ecuaciones de conservación en periodos de tiempos más amplios que el tiempo característico de las fluctuaciones.

A continuación se mostrara el promediado de la ecuación de conservación de masa y cantidad de movimiento en un flujo incompresible y estacionario.

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (u\mathbf{u}) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \nu(\nabla \cdot \nabla u) \quad (\text{A.1})$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \nabla \cdot (v\mathbf{u}) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \nu(\nabla \cdot \nabla v) \quad (\text{A.2})$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \nabla \cdot (w\mathbf{u}) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \nu(\nabla \cdot \nabla w) \quad (\text{A.3})$$

Se descompone la variable instantánea en la suma de su valor medio y su fluctuación ( $\mathbf{u} = \mathbf{U} + \mathbf{u}'$ ;  $u = U + u'$ ;  $v = V + v'$ ;  $w = W + w'$ ,  $p = P + p'$ ). Para poder estudiar las fluctuaciones introducimos la descomposición de  $\mathbf{u}$  y  $p$  en las ecuaciones de conservación



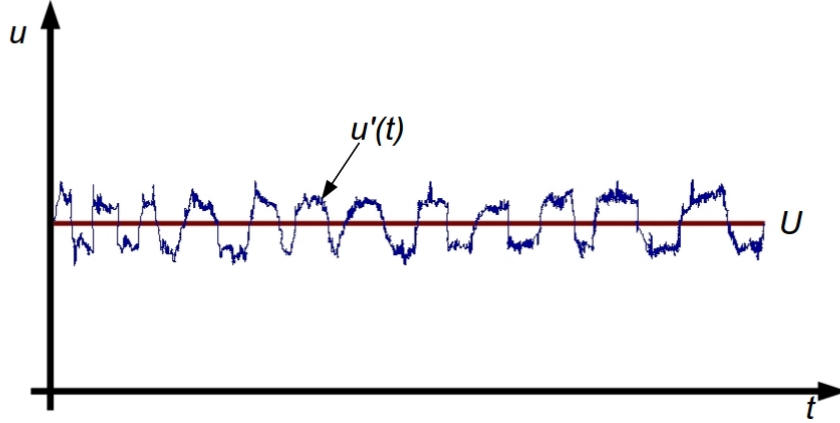


Figura A.1: Variación de las fluctuaciones en un periodo de tiempo cualquiera.

de masa y cantidad de movimiento. La ecuación de continuidad toma en cuenta que  $\overline{\nabla \cdot \mathbf{U}} = \nabla \cdot \mathbf{U}$ , recalcando que el flujo es incompresible y estacionario tenemos:

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0 \quad (\text{A.4})$$

Sustituyendo el promedio y fluctuación de la velocidad en la ecuaciones (A.2), (A.3), (A.3), y realizando la aritmética de variables fluctuantes se obtienen las siguientes ecuaciones.

$$\underbrace{\frac{\partial U}{\partial t}}_{\text{(I)}} + \underbrace{\nabla \cdot (U\mathbf{U})}_{\text{(II)}} + \underbrace{\nabla \cdot (\overline{u'\mathbf{u}'})}_{\text{(III)}} = \underbrace{-\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x}}_{\text{IV}} + \underbrace{v(\nabla \cdot \nabla U)}_{\text{V}} \quad (\text{A.5})$$

$$\underbrace{\frac{\partial V}{\partial t}}_{\text{(I)}} + \underbrace{\nabla \cdot (V\mathbf{U})}_{\text{(II)}} + \underbrace{\nabla \cdot (\overline{v'\mathbf{u}'})}_{\text{(III)}} = \underbrace{-\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial y}}_{\text{IV}} + \underbrace{v(\nabla \cdot \nabla V)}_{\text{V}} \quad (\text{A.6})$$

$$\underbrace{\frac{\partial W}{\partial t}}_{\text{(I)}} + \underbrace{\nabla \cdot (W\mathbf{U})}_{\text{(II)}} + \underbrace{\nabla \cdot (\overline{w'\mathbf{u}'})}_{\text{(III)}} = \underbrace{-\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial z}}_{\text{IV}} + \underbrace{v(\nabla \cdot \nabla W)}_{\text{V}} \quad (\text{A.7})$$

El termino (III), que no aparece en la ecuaciones instantáneas, es el promedio de las fluctuaciones presentes en el flujo. A las ecuaciones (A.5), (A.6) y (A.7) se les llama ecuaciones de Reynolds que se pueden reescribir de la siguiente manera:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \nabla \cdot (U\mathbf{U}) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} + v(\nabla \cdot \nabla U) - \frac{\partial \overline{u'^2}}{\partial x} - \frac{\partial \overline{u'v'}}{\partial y} - \frac{\partial \overline{u'w'}}{\partial z} \quad (\text{A.8})$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} + \nabla \cdot (V\mathbf{U}) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial y} + v(\nabla \cdot \nabla V) - \frac{\partial \overline{u'v'}}{\partial x} - \frac{\partial \overline{v'^2}}{\partial y} - \frac{\partial \overline{v'w'}}{\partial z} \quad (\text{A.9})$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \nabla \cdot (W\mathbf{U}) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial z} + v(\nabla \cdot \nabla W) - \frac{\partial \overline{u'w'}}{\partial x} - \frac{\partial \overline{v'w'}}{\partial y} - \frac{\partial \overline{w'^2}}{\partial z} \quad (\text{A.10})$$

Estos nuevos términos se pueden expresar como una matriz que lleva por nombre Tensor de Esfuerzos de Reynolds, que en realidad no representa esfuerzos, representa una relación entre las fluctuaciones que se tienen en una dirección con las que se tienen en otra.

$$(\text{Tensor\_de\_Esfuerzos\_de\_Reynolds}) = \bar{\rho} \begin{bmatrix} \overline{u'u'} & \overline{u'v'} & \overline{u'w'} \\ \overline{u'v'} & \overline{v'v'} & \overline{v'w'} \\ \overline{u'w'} & \overline{v'w'} & \overline{w'w'} \end{bmatrix}$$

Es importante resaltar que se considera isotropía del flujo, dando como resultado que el tensor sea simétrico. Ahora las seis nuevas incógnitas se deben de relacionar con las ya existentes, resolviendo una ecuación de transporte para cada una, por lo que es necesario un modelo de turbulencia (o cierre de las ecuaciones), con el cual podamos, simplificar o encontrar las incógnitas de las ecuaciones.

### A.3. Modelos de Viscosidad Turbulenta

Un método alternativo para poder medir los esfuerzos de Reynolds, vistos anteriormente y cuya notación indicial en el presente trabajo es  $\overline{u'_i u'_j}$ , son los modelos que se basan en el concepto de la existencia de una viscosidad turbulenta, en la que se supone, en la misma manera que en un flujo laminar los esfuerzos viscosos son proporcionales al gradiente de velocidad. En un flujo turbulento los esfuerzos generados por las fluctuaciones son proporcionales al gradiente de velocidades media. Esta relación existente entre los esfuerzos de Reynolds y las variables medias es:

$$\overline{\rho u'_i u'_j} = -\bar{\rho} \nu_T \left( \frac{\partial \tilde{U}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{U}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \left( \bar{\rho} k + \bar{\rho} \nu_T \frac{\partial \tilde{U}_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \quad (\text{A.11})$$

donde  $\nu_T = \frac{\mu_T}{\rho}$  es la viscosidad turbulenta. Esta viscosidad, a diferencia de la viscosidad molecular  $\nu = \frac{\mu}{\rho}$ , no es una propiedad del fluido, sino es una característica del régimen de flujo, y puede tener variaciones significativas dentro de un punto a otro en el mismo flujo.

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

$$\overline{\rho u'_i u'_\alpha} = -\bar{\rho} \frac{\nu_T}{S_{CT}} \frac{\partial \tilde{\phi}_\alpha}{\partial x_j} \quad (\text{A.12})$$

donde  $S_{C_T}$  es el número de Schmidt/Prandtl turbulento.

La viscosidad turbulenta puede calcularse de diversas formas, dando lugar a una variedad de modelos con un número de variable de ecuaciones diferenciales. Entre los más usados de estos modelos son, probablemente, los de la familia  $\kappa-\varepsilon$ , método que se presenta a continuación.

### A.3.1. Modelo $\kappa - \varepsilon$

Modelo de viscosidad turbulenta, donde la viscosidad turbulenta es puesta en función de dos nuevas variables,  $\kappa$  y  $\varepsilon$ . A continuación se muestra la ecuación de conservación de  $\kappa$ .

$$\begin{array}{ccccccc}
 \underbrace{\frac{\partial \rho \kappa}{\partial t}} & + & \underbrace{\nabla \cdot (\rho \kappa \mathbf{U})} & = & \underbrace{-\nabla \cdot (-p' \mathbf{u}')} & + & \underbrace{\nabla \cdot (2\mu \mathbf{u}' e'_{ij})} \\
 \text{Cambio de} & & \text{Transporte} & & \text{Transporte} & & \text{Transporte} \\
 \kappa \text{ en el} & & \text{de } \kappa \text{ por} & & \text{de } \kappa \text{ por cambio} & & \text{de } \kappa \text{ debido} \\
 \text{tiempo} & & \text{convección} & & \text{de presión} & & \text{esfuerzos viscosos} \\
 \text{(I)} & & \text{(II)} & & \text{(III)} & & \text{(IV)} \\
 & & \underbrace{-\nabla \cdot \rho \frac{1}{2} \overline{(u'_i \cdot u'_i u'_j)}} & - & \underbrace{2\mu \overline{e'_{ij} \cdot e'_{ij}}} & - & \underbrace{\rho \overline{u'_i u'_j} \cdot E_{ij}} \\
 & & \text{Transporte de } \kappa & & \text{Cambio de } \kappa & & \text{Producción} \\
 & & \text{por esfuerzos} & & \text{por} & & \text{turbulenta} \\
 & & \text{de Reynolds} & & \text{disipación} & & \\
 & & \text{(V)} & & \text{(VI)} & & \text{(VII)}
 \end{array} \tag{A.13}$$

Donde  $e_{ij} = E_{ij} + e'_{ij}$ ; por ejemplo:

$$e_{xx} = \frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial u'}{\partial x}; e_{xy} = 0,5 \left( \frac{\partial U}{\partial y} + \frac{\partial U}{\partial x} \right) + 0,5 \left( \frac{\partial u'}{\partial y} + \frac{\partial v'}{\partial x} \right)$$

El término (VI) es la disipación de energía debido a los remolinos más pequeños existentes en el régimen de flujo turbulento. Este termino es siempre negativo, al igual que los (III), (V) y (VII), esto de debe al transporte de la propiedad que se tiene en un punto del flujo y sus vecinos. El termino  $\varepsilon = 2\nu \overline{e'_{ij} e_{ij}}$  es conocido como la tasa de disipación de energía cinética turbulenta y es el termino con mayor valor en la ecuación. Se puede establecer una ecuación de transporte para  $\kappa$  y  $\varepsilon$ ; además, usar estas variables para definir una escala de velocidades y la longitud característica.

$$v = \kappa^{\frac{1}{2}} \quad ; \quad 1 = \frac{\kappa^{\frac{3}{2}}}{\varepsilon} \quad ; \quad \mu_T = \rho C_\mu \frac{\kappa^2}{\varepsilon}$$

$$\underbrace{\frac{\partial \rho \kappa}{\partial t}}_{\text{Cambio de } \kappa \text{ respecto al tiempo (I)}} + \underbrace{\nabla \cdot (\rho \kappa \mathbf{U})}_{\text{Transporte de } \kappa \text{ por convección (II)}} = \underbrace{\nabla \cdot \left( \frac{\mu_T}{\sigma_\kappa} \nabla \kappa \right)}_{\text{Transporte de } \kappa \text{ por difusión (III)}} + \underbrace{2\mu_T E_{ij} \cdot E_{ij}}_{\text{Cambio por producción de } \kappa \text{ (IV)}} - \underbrace{\rho \varepsilon}_{\text{cambio por destrucción de } \kappa \text{ (V)}} \quad (\text{A.14})$$

$$\underbrace{\frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t}}_{\text{Cambio de } \varepsilon \text{ respecto al tiempo (I)}} + \underbrace{\nabla \cdot (\rho \varepsilon \mathbf{U})}_{\text{Transporte de } \varepsilon \text{ por convección (II)}} = \underbrace{\nabla \cdot \left( \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \nabla \varepsilon \right)}_{\text{Transporte de } \varepsilon \text{ por difusión (III)}} + \underbrace{C_{1_\varepsilon} \frac{\varepsilon}{\kappa} 2\mu_T E_{ij} \cdot E_{ij}}_{\text{Cambio por producción de } \varepsilon \text{ (IV)}} - \underbrace{C_{2_\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{\kappa}}_{\text{cambio por destrucción de } \varepsilon \text{ (V)}} \quad (\text{A.15})$$

Estas ecuaciones contienen cinco incógnitas ajustables, para las cuales el modelo  $\kappa - \varepsilon$  utiliza valores obtenidos mediante ajuste para un amplio rango de flujos turbulentos, valores que se muestran a continuación.

$$C_\mu = 0,09 \quad \sigma_\kappa = 1 \quad \sigma_\varepsilon = 1,3 \quad C_{1_\varepsilon} = 1,44 \quad C_{2_\varepsilon} = 1,92$$

# Apéndice B

## Esquemas de Discretización

A lo largo de este apéndice se presentan los diversos sistemas lineales de discretización del término convectivo de la ecuación general de transporte presentada en el tercer capítulo de presente trabajo.

En la formulación de la ecuación discretizada (3.1), se necesita conocer la densidad y la variable escalar,  $\phi$ , en cada una de las caras de la celda. Estas variables se calculan en el nodo de cada celda, por lo que es necesario interpolar entre estas para conocer su valor en las caras. Dicha interpolación de  $\phi$  y  $\rho$  da lugar a los diversos esquemas de discretización lineales. La determinación de los valores, mencionados anteriormente, en las caras es de suma importancia para la precisión y convergencia del cálculo numérico.

Los esquemas de discretización se describirán en base al sistema de celdas que se puede apreciar en la *figura (B.1)*. Como ejemplo se obtendrá el valor de  $\phi$  en la cara  $e$  de la celda  $P$ . En esta cara la velocidad se considera, sin pérdida de la generalidad, positiva  $u_e > 0$ .

### B.1. Esquemas lineales discretización

#### Diferencias desplazadas de primer orden

En este esquema se supone que el valor de la variable  $\phi$  en la cara  $e$  es igual al valor que tiene el nodo adyacente aguas arriba, es decir, para  $u_e > 0$ .

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

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

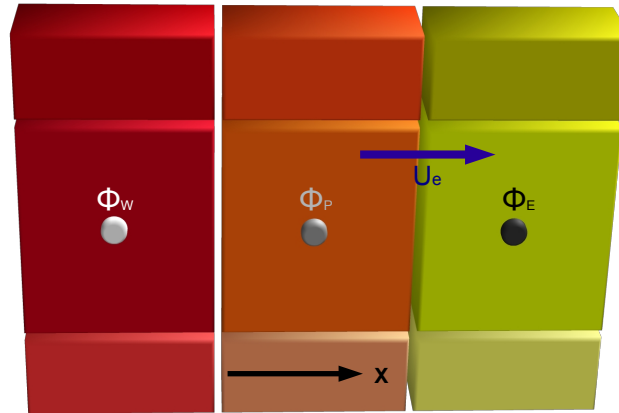


Figura B.1: Diagrama esquemático de unas celdas

## Diferencias centradas

Las Diferencias centradas supone la variación lineal de  $\phi$  entre los nodos  $P$  y  $E$ ; por lo tanto, el valor en la cara  $e$  es:

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

La precisión que el esquema tiene es de segundo orden pero tiene el inconveniente de no estar acotado, por lo que se pueden presentar inestabilidades numéricas. El límite de estabilidad de este esquema viene dado en función del número de Peclet, ecuación (3.3), el cual es un parámetro comparativo entre el proceso convectivo y el difusivo.

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

## Híbrido

Este esquema fue introducido por Spalding, y consiste en combinar los los esquemas de diferencias desplazadas y centradas para calcular el valor de la propiedad  $\phi$  en la cara del volumen de control. La selección del esquema esta en función del número de Peclet que tenga la celda.

- Si  $Pe > 2$ , se usan diferencias desplazadas (ecuación B.1).
- Si  $Pe \leq 2$ , se usan diferencias centradas (ecuación B.2).

Para flujos con bajo número de Reynolds/Peclet el esquema a usar es el de diferencias centradas, y por tanto resultan orden 2; sin embargo, el esquema presenta problemas asociados al esquema de diferencias desplazadas cuando el flujo esta 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 con más facilidad, comparados con los esquemas mencionados anteriormente, oscilaciones numéricas. Su uso no es recomendado en el cálculo de cantidades que no aceptan valores negativos, o en general de cantidades acotadas (tales como concentraciones), pues las oscilaciones introducidas por el modelo pueden sacar al escalar de su dominio de definición.

# Apéndice C

## Ecuaciones

### Ecuaciones del modelo

- Biomasa

$$\frac{\partial \rho_B}{\partial t} + \frac{\partial U_s \rho_B}{\partial z} = -R_{p1} \quad (\text{C.1})$$

- Humedad

$$\frac{\partial \rho_H}{\partial t} + \frac{\partial U_s \rho_H}{\partial z} = -m_H \quad (\text{C.2})$$

- Especies de la fase gaseosa

$$\begin{aligned} \varepsilon \frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_i U_g)}{\partial z} &= \frac{\partial}{\partial z} \left( \varepsilon D_i \rho_g \frac{\partial Y_i}{\partial z} \right) + M_i \sum_j \nu_{ij} R_j + \omega_{pi} \\ i &= O_2, H_2, CO, CO_2, CH_4; j = c_1 - c_4, g_1 - g_3, w_g \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

- Vapor

$$\begin{aligned} \varepsilon \frac{\partial \rho_{H_2O}}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_{H_2O} U_g)}{\partial z} &= M_{H_2O} \sum_j \nu_{H_2Oj} R_j + \frac{\partial}{\partial z} \left( \varepsilon D_\nu \rho_g \frac{\partial Y_{H_2O}}{\partial z} \right) \\ &+ m_H + \omega_{pH_2O}; j = c_1 - c_4, g_1 - g_3, w_g \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$



- Fase gaseosa del tar

$$\varepsilon \frac{\partial \rho_T}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_T U_g)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left( \varepsilon D_T \rho_g \frac{\partial Y_T}{\partial z} \right) + \nu_T R_{p1}$$

- Nitrógeno

$$\rho_{N_2} = \rho_g - \sum_{i \neq N_2} \rho_i \quad (C.5)$$

- Ecuación de continuidad del gas total

$$\varepsilon \frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_g U_g)}{\partial z} = \sum_i \sum_j \nu_{ij} M_i R_j + m_M + (1 - \nu_C) R_{p1} \quad (C.6)$$

$i = N_2, O_2, H_2, CO, CO_2, CH_4, H_2O; j = c_1 - c_4, g_1 - g_3, w_g$

- Energía de la fase sólida

$$\begin{aligned} \frac{\partial \sum_i \rho_i H_i}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial z} \left( \lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial z} \right) + \frac{\partial (U_s \sum_i \rho_i H_i)}{\partial z} \\ &\quad - \sum_j R_j \Delta H_j - Q_{sg} + Q_{sw} - m_H \Lambda \end{aligned} \quad (C.7)$$

$H_i = c_{si} (T_s - T_0); i = B, C, M; j = c_5, g_1 - g_3, p1$

- Energía de la fase gaseosa

$$\begin{aligned} \varepsilon \frac{\partial \sum_i \rho_i H_i}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial z} \left( \lambda_g \frac{\partial T_g}{\partial z} \right) - \frac{\partial (U_g \sum_i \rho_i H_i)}{\partial z} \\ &\quad + Q_{sg} + Q_{gw} - \sum_j R_j \Delta H_j \end{aligned} \quad (C.8)$$

$$H_i = c_{gi} (T_g - T_0); i = N_2, O_2, H_2, CO, CO_2, CH_4, H_2O, T; j = c_1 - c_4, w_g, p2$$

$$Q_{sg} = h_{sg} \nu_p (T_s - T_g); Q_{sw} = \frac{4h_{sw}}{D} (T_w - T_s); Q_{qw} = \frac{4h_{gw}}{D} (T_w - T_q)$$

- Ley del gas ideal

$$P = \frac{\rho_g RT_g}{M_g} \quad (\text{C.9})$$

- Ley de Darcy

$$\frac{B_g}{\mu} \frac{\partial P}{\partial z} = U_s - U_g \quad (\text{C.10})$$

# Referencias Bibliográficas

1. RODRÍGUEZ, Bárbara Angélica. *Fuentes Renovables de la energía: ¿Qué son las energías renovables?* [En línea]. México; CONUEE. [Consulta 24 febrero 2010]. Disponible en:  
[http://www.conae.gob.mx/wb/CONAE/CONA\\_1334\\_que\\_son\\_las\\_energia](http://www.conae.gob.mx/wb/CONAE/CONA_1334_que_son_las_energia)
2. ESTRADA, Alejandro. *Las energías renovables en México y el Mundo: Semblanza* [En línea]. México; CONUEE. [Consulta 26 febrero 2010]. Disponible en:  
<http://www.conuee.gob.mx/work/sites/CONAE/.../1/Semblanza09.pdf>
3. ESTRADA, Alejandro. *Biomasa* [En línea]. México; CONUEE. [Consulta 1 marzo 2010]. Disponible en:  
[http://www.conae.gob.mx/wb/CONAE/CONA\\_622\\_energia\\_de\\_la\\_biomasa](http://www.conae.gob.mx/wb/CONAE/CONA_622_energia_de_la_biomasa)
4. TORRES ROLDÁN, Francisco; GÓMEZ MORALES, Emmanuel. *Energías renovables en México: Estado actual y el potencial*. Primera edición. En: SENER y GTZ; *Energías renovables para el desarrollo sustentable en México*. México; Secretaría de Energía; 2006, p. 19-27.
5. HERRERA FLORES, Jordy; MALO BOLIVAR, Ian; VALLE PEREÑA, Julio; DE LOA MASA HERNANDEZ, Roberto, PARRA HERNANDEZ, María del Carmen; ARBOLEYA GONZÁLEZ, Georgina; GUZMÁN VELÁZQUEZ, Diego, NÚÑEZ VELASCO, Carolina; CEBALLOS CARDOSO, Claudia. *Energía de la biomasa*. Primera edición. En: SENER; Programa especial para el aprovechamiento de energías renovables. México, Secretaría de Energía; 2007, p. 84-94.
6. TREVIÑO COCA, Manuel. *Descripción de la tecnología GICC*. ELCOGAS y Club Español de Energía. Tecnología de gasificación integrada en el ciclo combinado: GICC. España, p 7-52.
7. DE SOUZA-SANTOS, MARCIO L. *Solid fuels*. First edition. *Solid fuels combustion and gasification: modeling, simulation and equipment operation*. USA; Marcel Dekker; 2004, p. 18-37.
8. DE SOUZA-SANTOS, MARCIO L. *Equipment and processes*. First edition. *Solid fuels combustion and gasification: modeling, simulation and equipment operation*. USA; Marcel Dekker; 2004, p. 38-68.

9. DE SOUZA-SANTOS, MARCIO L. *Basic calculation*. First edition. *Solid fuels combustion and gasification: modeling, simulation and equipment operation*. USA; Marcel Dekker; 2004, p. 69 -86.
10. DE SOUZA-SANTOS, MARCIO L. Moving bed combustion and gasification model. First edition. *Solid fuels combustion and gasification: modeling, simulation and equipment operation*. USA; Marcel Dekker; 2004, p. 18-37.
11. SHAMES, H. Irving. *Principios básicos para sistemas y volúmenes de control*. Primera edición. *La mecánica de los fluidos*. México; MacGraw Hill; 1979, p.109-197 .
12. WHITE, Frank M. *Fundamental equation of compressible Viscous Flow*. First edition. United States of America. McGraw-Hill; 1974, p. 62-102.
13. SPALDING, D Brian. *Combustión y transferencia de masa*. Ing. Quim. HILL V, Alejandro. Primera edición. México; Compañía Editorial Continental; 1983, 176 p.
14. KUO, Kenneth K. *Review of Chemical Thermodynamics*. Second edition. *Principles of combustion*. United States of America; John Wiley & Sons; 2005, p. 11-115.
15. FAVRE, A. *Problems of hydrodynamics and continuum mechanics*. SIAM, 1969.
16. S.V. Pantankar. *Numerical heat transfer and fluid flow*. Series in computational methods in mechanics and thermal science. Hemisphere Publishing Corporation; 1980.
17. FERZINGER, H.H.; PERIC, M. *Computational methods for fluids dynamics*. Springer-Verlag; 1996.
18. BALDILLO HERNÁNDEZ, Ulises. *Modelado de gasificadores orientado al control*. Tesis de maestría en Ingeniería Eléctrica (Control). Programa de Maestría y Doctorado de la Universidad Nacional Autónoma de México; México, 2009.
19. COLOMBA, Di Blasi. *Dynamic behaviour of stratified downdraft gasifiers*. PERGAMON. Italy; 1999, 14 p.
20. VICENTE, William; OCHOA, Salvador; AGUILLÓN, Javier; BARRIOS, Esteban. *An Eulerian model for the simulation of an entrained flow coal gasifier*. PERGAMON. México; 2003, 16p.
21. BALLESTEROS TAJARUDA, Rafael. *Turbulencia*. Universidad de Oviedo: Área de Mecánica de Fluidos. España; 2004, 25p.