



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

**PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN
INGENIERÍA**

*SIMULACIÓN NUMÉRICA DE UN GASIFICADOR DE BIOMASA DE FLUJO
CONCURRENTE*

TESIS

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:

MAESTRO EN INGENIERÍA

INGENIERÍA MECÁNICA-TERMOFLUIDOS

P R E S E N T A:

JAVIER ALEJANDRO VILLEGAS LEGAL

TUTOR:

DR. WILLIAM VICENTE Y RODRÍGUEZ



MÉXICO, CIUDAD UNIVERSITARIA

2012

JURADO ASIGNADO

Presidente:	Dr. Fernandez Zayas Jose Luis
Secretario:	Dr. Solorio Ordaz Francisco Javier
Vocal:	Dr. Vicente y Rodríguez William
1er. Suplente:	Dr. Salinas Vazquez Martin
2do. Suplente:	Dr. Gonzalez Oropeza Rogelio

Lugar o lugares donde se realizó la tesis

Instituto de Ingeniería

TUTOR DE TESIS:

WILLIAM VICENTE Y RODRÍGUEZ

FIRMA

Índice

RESUMEN	6
Capítulo 1 “INTRODUCCIÓN”	8
1.1 Antecedentes	9
1.2. Clasificación de los gasificadores.....	11
1.2.1. Tipo de fuente de energía:	11
1.2.2. Tipo de configuración de entrada del combustible y del aire:.....	12
1.2.3. Condiciones de temperatura y presión.	13
1.2.4. Tipo de movimiento del lecho sólido-gas:	13
1.3. Características de los flujos de alimentación en un gasificador	15
1.3.1. Tipos de agentes gasificantes:.....	15
1.3.2. Propiedades del combustible (biomasa) de alimentación:	16
1.4. Procesos físico-químicos que ocurren durante la gasificación	17
1.4.1. Evaporación de la humedad (373 K – 573K).	18
1.4.2. Pirólisis o Volatilización (673 K – 1123 K).....	18
1.4.3. Oxidación y Reducción de los gases volátiles y del carbonizado	19
(923K – 1773K).	19
1.5. Beneficios de la generación de energía por medio de gasificadores de biomasa vegetal.....	21
1.6. Uso del gas de síntesis.....	22
1.7. Problema a resolver	22
1.8. Objetivo de la tesis	23
1.9. Estructura de la tesis	23
CAPÍTULO 2 “ECUACIONES DE CONSERVACIÓN”	26
2.1. Ecuaciones de conservación.....	26
CAPÍTULO 3 “ECUACIONES DEL PROCESO”	32
3.1. Componentes de la fase sólida y de la fase gaseosa.....	33
3.2. Reacciones químicas en el proceso de gasificación	33

3.2.1. Secado de la partícula	33
3.2.2. Pirólisis (Volatilización)	34
3.2.3. Combustión (Reacciones homogéneas)	35
3.2.4. Gasificación (Reacciones heterogéneas).....	36
3.3. Tamaño de partícula	38
3.4. Coeficiente de transferencia de calor en la interfase	38
3.5. Fuerza de arrastre entre la partícula y la fase gaseosa	39
Capítulo 4 “Método de solución”	41
4.1. Método de volúmenes finitos	41
4.2. Discretización de las ecuaciones	44
Capítulo 5 “Resultados”	48
5.2. Descripción del sistema utilizado	48
5.3. Condiciones de frontera.....	49
5.4. Detalles numéricos.....	52
5.5. Resultados	54
5.5.1 Temperaturas	55
5.5.2. Velocidades	57
5.5.3. Contornos de las especies químicas de la fase gaseosa.....	59
5.5.4. Monóxido de carbono CO	60
5.5.5. Metano CH ₄	61
5.5.6. Bióxido de carbono CO ₂	62
5.5.7. Hidrógeno H ₂	64
5.5.7. Oxígeno O ₂	65
5.5.8. Vapor de agua H ₂ O	66
5.5.9. Contornos de la fase sólida	67
5.5.10. Carbonizado (CHAR)	68
5.5.11. Cenizas (ASH).....	69
5.5.12. Alquitrán (TAR).....	70
5.5.13. Tamaño de partícula	71
5.6. Validación y verificación de resultados	73
5.7. Gráficas comparativas	76
5.8. CONCLUSIONES	83

5.9. TRABAJOS A FUTURO	85
APÉNDICE “Esquemas de discretización”	86
Esquemas lineales	86
-Diferencias desplazadas de primer orden	87
-Diferencias centradas.....	87
-Hibrido	87
APÉNDICE “Modelos de combustión”	89
Modelo Eddy Break Up.....	90
Modelos de Flamelet.....	91
Mecanismos reducidos	92
BIBLIOGRAFIA.....	95

RESUMEN

La actual situación energética permite que la generación de energía mediante sistemas basados en energías renovables tome cada vez una mayor relevancia a nivel global. Estos sistemas tienen una doble ventaja ya que posibilitan la diversificación energética y reducen la dependencia del petróleo con lo cual disminuyen las emisiones globales de CO₂. Alrededor de las tres cuartas partes de las emisiones de CO₂ antropogénicas que se han producido en los últimos 20 años en el mundo se deben a la quema de combustibles fósiles, ya que el 80% de nuestra energía depende todavía de los combustibles fósiles (petróleo y gas natural). El resto se debe fundamentalmente a los cambios en el uso del suelo y especialmente a la deforestación. La única manera de evitarlo es gestionar la demanda de energía, aumentar la eficiencia energética y el uso de energías renovables.

El proceso más flexible que existe para el aprovechamiento de residuos biomásicos es la gasificación. Este proceso permite la obtención de un gas que puede ser utilizado tanto para la generación de energía eléctrica como térmica, incluyendo la combinación de ambos procesos (mediante sistemas de cogeneración). El desarrollo de este tipo de equipos está ligado al establecimiento de modelos que permitan caracterizar el proceso de gasificación tanto desde el punto de vista de balances de materia y energía, como con los que permitan diagnosticar el desempeño del proceso a partir de medidas experimentales del proceso en tiempo real. De los tipos de gasificación, el que utiliza aire como agente oxidante es el más utilizado, a pesar de que se obtiene un gas con un bajo poder calorífico, debido a su bajo costo.

La gasificación es un proceso termoquímico que transforma un combustible sólido en uno gaseoso. El proceso está conformado por varios fenómenos complejos que van desde los mecanismos de transferencia de masa y energía en un sistema reactivo heterogéneo, derivando las etapas de secado y devolatización del combustible, para dar paso a la oxidación de los volátiles y el carbón, con el subsecuente cambio del diámetro de las partículas y las pérdidas de presión en el lecho. Se relacionan las variables de entrada y de salida con el fin de predecir la composición final del gas pobre y la temperatura final en función de parámetros tales como el tipo de biomasa (análisis elemental y aproximado), humedad de la biomasa, poder calorífico, relación de aire combustible, entre otros. El estudio de

la evolución de las especies químicas existentes requiere de cálculos acoplados de cinética química, fenómenos de transporte de masa, energía y movimiento.

En este trabajo se presenta un modelo numérico para la representación de los principales procesos físicos y químicos, en un gasificador con flujos concurrentes (downdraft); El modelo se basa en un concepto Euleriano-Euleriano y toma en cuenta los efectos de la difusión de masa entre fases, transferencia de calor y arrastre de partícula. El modelo se construye en el código para CFD PHOENICS. Para determinar la evolución de diferentes parámetros del proceso termoquímico a través de su paso por el gasificador se utilizan ecuaciones de transporte para cada parámetro.

El sistema por analizar consta de dos flujos entrantes por la parte superior del volumen de control (reactor), agente oxidante y biomasa. La combustión tiene lugar dentro del reactor, además de los procesos de gasificación, pirólisis, y secado.

El modelo de ecuaciones para el reactor de flujos concurrentes se basa en las ecuaciones de conservación de la masa, de la energía y conservación de las fases. El modelo proporciona información sobre la composición del gas de síntesis, velocidades, presión y temperaturas del proceso. Por último, los resultados obtenidos serán comparados con datos disponibles en la literatura.

Capítulo 1 “INTRODUCCIÓN”

Los sistemas de gasificación de residuos sólidos, ya sean de origen forestales, agrícolas o urbanos, se enmarcan dentro del desarrollo sostenible tanto en los países desarrollados como en los emergentes ya que se integran con planes de manejo integral de residuos de sólidos, generando energía eléctrica, disminuyendo la dependencia de combustibles derivados del petróleo y reduciendo las emisiones de dióxido de carbono en la atmósfera.

Uno de los procesos con mayor potencial es la gasificación. Este permite la generación tanto de energía térmica como eléctrica, mediante tecnologías de bajo costo como los gasificadores de lecho fijo. En el proceso de gasificación, la biomasa atraviesa por varios procesos termoquímicos compuestos por reacciones endotérmicas (secado, pirólisis y reducción) y exotérmicas (oxidación de volátiles y carbón) obteniéndose al final un producto gaseoso conocido como gas de síntesis que puede ser aprovechable en motores de combustión interna alternativos o en turbinas de gas como combustible. La selección de un gasificador requiere conocer las propiedades de la biomasa, mientras que el diseño del mismo exige conocer el fenómeno termoquímico por completo.

La gasificación es un proceso térmico que permite la conversión de un combustible sólido, tal como la biomasa en un combustible gaseoso, mediante un proceso de oxidación parcial. El gas pobre resultante, conocido como gas de síntesis, con un valor calórico utilizable de fácil manejo, puede ser utilizado en turbinas de gas, en motores de combustión interna o en equipos de producción de calor y potencia. Ambos motores térmicos pueden ser acoplados a un generador para la producción de electricidad. Como agente oxidante se emplea el vapor, el oxígeno o el aire. El gas de síntesis contiene monóxido de carbono (CO), dióxido de carbono (CO₂), hidrógeno (H₂), metano (CH₄), alquitrán (TAR), agua y pequeñas cantidades de hidrocarburos tales como el etano. Este gas posee un bajo poder calórico, del orden de 4 a 7 "MJ"/ "m" ^3; en cambio, si se emplea como agente oxidante el O₂ se pueden alcanzar de 10 a 18 "MJ"/ "m" ^3. Sin embargo, en la mayoría de los procesos se utiliza aire como agente oxidante, por razones económicas y tecnológicas. A diferencia de los procesos de combustión de carbón, la gasificación se realiza con defecto de oxígeno.

El dispositivo en el cual se lleva a cabo el proceso de gasificación se conoce como gasificador. Además de sustituir a combustibles ligeros de origen fósil, la gasificación permite obtener altos rendimientos eléctricos a partir de biomasa. Mediante la gasificación se pueden obtener rendimientos eléctricos de hasta un 30-32% mediante el uso de moto-generadores de gas de síntesis, mientras que con un ciclo Rankine convencional simple se tiene un rendimiento de hasta 22%.

1.1 Antecedentes

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

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

Los sistemas de gasificación se vienen usando desde hace muchos años. La producción de biogás a partir de materiales a base de carbono es una tecnología antigua, y a pesar de que las ventajas del proceso de gasificación fueron descubiertas a principios de los años 1800, la utilización de esta tecnología se ha planteado como una alternativa viable hasta en los últimos 50 años. Estos sistemas han demostrado ser una buena alternativa para resolver los problemas energéticos en comunidades aisladas del sistema electro-energético. El primer gasificador de flujos paralelos concurrentes fue instalado en 1839. Los principios básicos de la gasificación de la biomasa han sido conocidos desde finales del siglo XVIII, pero las primeras aplicaciones comerciales datan de 1830. Hacia comienzos de 1850 un gran número de lámparas de alumbrado público en Londres ya funcionaban con gas producido de la gasificación de biomasa, este experimento constituyó en el comienzo definitivo de las investigaciones en esta área.

Los orígenes del proceso de gasificación comienzan en Francia e Inglaterra en el siglo XIX donde se empleaba para la manufactura de un gas combustible cuyo uso

era doméstico. Durante la Primera Guerra Mundial su uso se extendió en la fabricación de motores alimentados por biomasa o carbón para vehículos automotores, barcos, trenes y generadores de energía eléctrica de pequeña escala. Sin embargo, la llegada de combustibles fósiles relativamente baratos y de “quemado” fácil como la gasolina desplazó a los gasificadores de la industria energética. En el inicio de la Segunda Guerra Mundial surgió un interés por formas alternativas de producir combustibles, retomando el uso de gasificadores en la industria automotriz. Un caso destacable de este hecho surgió en Suecia, donde en 1943 alrededor del 90% de los vehículos contaban con un motor basado en gasificador.

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

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

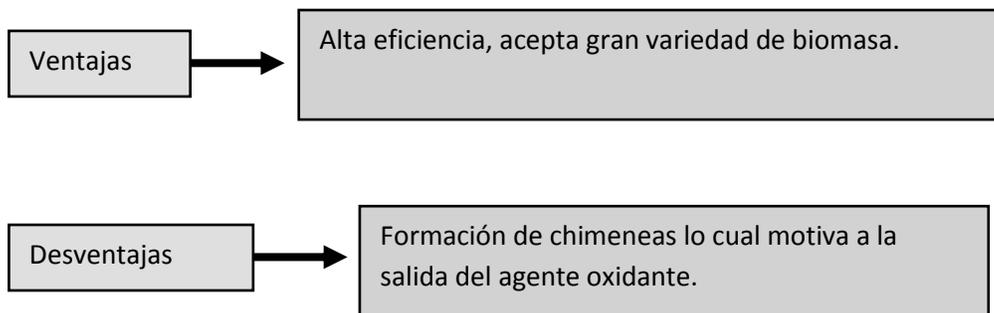
En el presente existe una creciente preocupación por el medio ambiente, que ha hecho generar una serie de cuestionamientos sobre continuar usando combustibles fósiles y por ello, la necesidad de producir energía sostenible ha incrementado la investigación en este campo y especialmente en el campo de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

1.2. Clasificación de los gasificadores

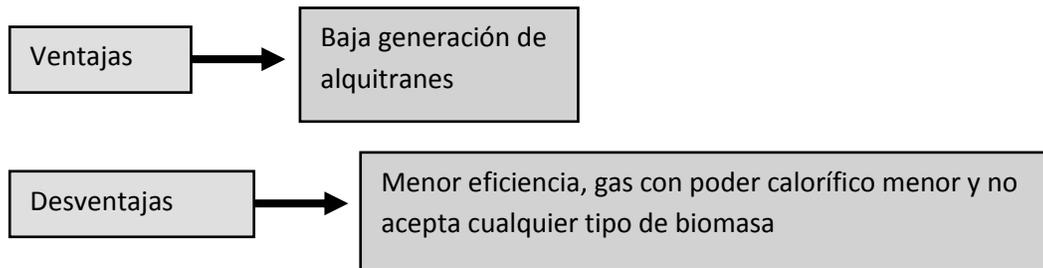
El gasificador es el medio físico en el cual se proporcionan las condiciones adecuadas para llevar a cabo la gasificación del combustible y en la actualidad son cuidadosamente elaborados para procesarlo de varias maneras de acuerdo al tipo de combustible, tipo de agente oxidante y finalidad del biogás. Estos dispositivos son reactores de conversión termoquímica donde un combustible sólido/líquido reacciona con un agente oxidante/gasificante, produciendo un combustible gaseoso con una composición simple (mezcla de los gases H₂, CO y CO₂ principalmente); Los criterios para caracterizar un gasificador son:

1.2.1 Tipo de fuente de energía:

Gasificador Directo. La principal fuente de energía es el calor producido por la oxidación parcial de combustible sólido dentro del gasificador por lo que se debe controlar la relación de aire/combustible para conseguir que el calor aportado por unas partículas oxidadas sea igualmente absorbido por las otras, manteniéndose la temperatura del reactor constante. Los principales inconvenientes provienen de la posibilidad de que se produzcan chimeneas en el equipo, lo cual motiva la salida de oxígeno.



Gasificador Indirecto. El proceso descrito es endotérmico por lo que hace falta aportar energía al sistema. La energía calórica es proporcionada por una fuente externa como puede ser una fase o un medio inerte calentado por la combustión del carbonizado producida en un gasificador de biomasa independiente. La principal ventaja de estos gasificadores radica en la posibilidad de producir un gas sin alquitrán.



1.2.2 Tipo de configuración de entrada del combustible y del aire:

Gasificador Updraft. El aire es admitido por la parte baja de gasificador mientras que los sólidos se mueven de arriba hacia abajo en contracorriente con la corriente de gas generada por la introducción del agente oxidante o viceversa. Este tipo de gasificador tiene bien definidas las zonas de combustión parcial, reducción y pirólisis. Según descende el sólido, es calentado por la corriente ascendente del gas hasta llegar a la zona de combustión donde alcanza su máxima temperatura sufriendo un enfriamiento previo a la descarga. El calor sensible del gas es utilizado para precalentar y secar el combustible, con ello, se logran altas eficiencias. El gas de síntesis obtenido tiene alta eficiencia y baja temperatura.

Las desventajas que acusa este sistema de gasificación, son el alto contenido de alquitrán del gas producido y la capacidad marginal que tiene en su carga, y por ende la imposibilidad de generación de gas continuo que redundaría en dificultades para la utilización en motores de combustión interna.

Gasificador Downdraft. La partícula de combustible y los gases se mueven en la misma dirección. El sólido entra por la parte superior experimentando sucesivamente los procesos de secado y pirólisis al ser sometido a un aumento progresivo de la temperatura. Este perfil de temperaturas se debe al hecho de que la conducción del calor tiene lugar desde la parte inferior, donde se está generando calor mediante combustión parcial de los productos que llegan hasta allí. Las dificultades que se tiene que enfrentar en esta configuración es el contenido de cenizas y humedad en el gas producido; El gas obtenido es de baja calidad energética, pero tiene la ventaja de tener un contenido bajo de alquitranes. En general este tipo de configuración es más aceptable para aplicaciones en motores de combustión interna y turbinas de gas. Las desventajas de este sistema

son el alto nivel de cenizas que despiden los gases de combustión, la baja eficiencia térmica del gas obtenido y la necesidad de utilizar biomasa muy seca.

Gasificador Crossdraft. Los flujos de combustible y agente oxidante, entran al reactor en la dirección perpendicular entre sí, juntándose en la zona de combustión, reaccionando y debido al tiro producido por la diferencia de presiones entre la entrada y la salida del reactor, sale por el lado opuesto al que entra el agente oxidante. Los gases generados se mueven de manera transversal con relación al combustible. La idea general es que los aceites alquitranes y los vapores que se despiden en la zona de destilación son muy inestables a altas temperaturas y para llegar a la salida deben pasar necesariamente por la zona de combustión parcial en donde una gran cantidad de productos gaseosos no condensados serán fácilmente fracturados antes de abandonar el gasificador al entrar en contacto con estos. El tiempo de arranque es de alrededor 5 minutos, tienen capacidad de operar con combustibles húmedos o secos y la temperatura del gas producido es relativamente alta. La composición del gas producido tiene un bajo contenido de hidrógeno y de metano. Como desventaja se debe considerar la necesidad de ser utilizados con combustibles con bajo contenido de cenizas, como son la madera y el carbón mineral.

1.2.3. Condiciones de temperatura y presión.

Gasificador Subcrítico. La temperatura y presión del gasificador se encuentran abajo del punto crítico agente gasificante dominante (presión de 220.9 bar y temperatura de 375.4°C).

Gasificador Supercrítico. El punto de operación del gasificador se encuentra por encima del punto crítico.

1.2.4. Tipo de movimiento del lecho sólido-gas:

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

Lecho fijo (cama fija). El combustible permanece estático dentro del gasificador, y el frente de pirólisis va consumiendo la totalidad de la carga ingresada. Las partículas permiten el paso del fluido sin separarse unas de otras, lo cual hace que la altura del lecho se mantenga constante. Además las partículas se encuentran en estado estacionario sobre la rejilla para desechar las cenizas, por la cual fluye el aire de entrada ejerciendo una fuerza de arrastre sobre la fase sólida de combustible que entra al reactor, produciendo una caída de presión cambiante a lo largo del lecho. La ceniza es removida como polvo o aglomerados pesados que caen por gravedad.

Lecho fluidizado. El combustible viaja dentro del gasificador junto con el agente oxidante, el cual reacciona con las partículas de biomasa mientras se encuentran en suspensión. El gasificador de lecho fluidizado permite más fácilmente el escalado del proceso y un mejor control de temperaturas del proceso. Además permite la adición de catalizadores. La principal desventaja es la alta concentración de partículas sólidas emitidas en el gas de salida, lo implica las subsecuentes etapas de depuración y acondicionamiento de los gases. La fluidización es el proceso que transforma partículas finas de sólido a un estado físico muy parecido al de un fluido por medio del contacto de un gas o un líquido. Las temperaturas alcanzadas en este tipo de gasificadores son ligeramente mayores y el rendimiento del combustible es mayor que en los gasificadores de cama fija. Estos gasificadores son usados para combustibles que generan ceniza altamente corrosiva que puede dañar las paredes.

En un lecho fluidizado, la fuerza gravitacional sobre las partículas fluidizadas es vencida por la fuerza de arrastre del gas entrante, ejercida hacia arriba, manteniendo así una condición de semisuspendida. Existen dos tipos de fluidizaciones:

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

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

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

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

-*Etapa cautiva.* No existe migración de partículas con el flujo del gas fuera del gasificador.

-*Etapa de Transporte.* Existe una gran migración de partículas fuera del gasificador debido a la fuerza de arrastre del flujo de gas saliente.

Flujo arrastrado. El combustible es pulverizado para lograr una densa nube de combustible, forzando al agente gasificante a fluir a través de él en corriente paralela, reaccionando al pasar. Las reacciones de gasificación se dan en una densa nube de pequeñas partículas de combustible. La mayoría de carbones son convenientes para este tipo de gasificadores debido a las altas temperaturas de operación y porque sus partículas son fácilmente separables. Las altas presiones y temperaturas alcanzadas, facilitan el alcance de muy altos desempeños, aunque la eficiencia térmica es ligeramente baja debido a que el gas producido debe ser enfriado antes de ser filtrado con las tecnologías existentes actualmente.

Todos los gasificadores de flujo arrastrado remueven la mayor parte de la ceniza en forma de escoria debido a que la temperatura de funcionamiento es más alta que la temperatura de fusión de ceniza. Las partículas de combustible deben ser mucho más pequeñas que para otros tipos de gasificadores. Por lo que el combustible debe ser pulverizado antes de ser introducido al gasificador. Con este tipo de sistema se obtiene un gas de síntesis con alto rendimiento y altas temperaturas, con ausencia de alquitranes. La desventaja radica en la necesidad de pulverizar el combustible.

1.3. Características de los flujos de alimentación en un gasificador

1.3.1 Tipos de agentes gasificantes:

Se introducen para aportar calor y fluidizar el sólido en el caso de que se trate de un gasificador directo. El agente oxidante debe contener el oxígeno necesario para llevar a cabo la combustión parcial del combustible. Según el agente gasificante que se emplee se producen efectos distintos en el proceso de gasificación, en la composición del gas de síntesis y en su poder calorífico.

Gasificación con aire. Si se gasifica con aire parte de la biomasa procesada se quema con el oxígeno presente, no obstante, el 50% del gas de síntesis es nitrógeno y en términos de poder calorífico el gas ronda los 5.5 MJ/m³. El gas obtenido tendrá un contenido energético bajo debido a que está diluido con el N₂ del aire.

Gasificación con vapor de agua. Se obtiene un gas enriquecido en H₂ y CO, por lo que aumenta el contenido energético del gas.

Gasificación con oxígeno. Se obtiene un gas de síntesis con contenido energético medio ya que no se encuentra diluido en N₂ como en el caso del aire pero tiene el inconveniente de ser caro ya que la generación de O₂ es costosa.

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

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

1.3.2. Propiedades del combustible (biomasa) de alimentación:

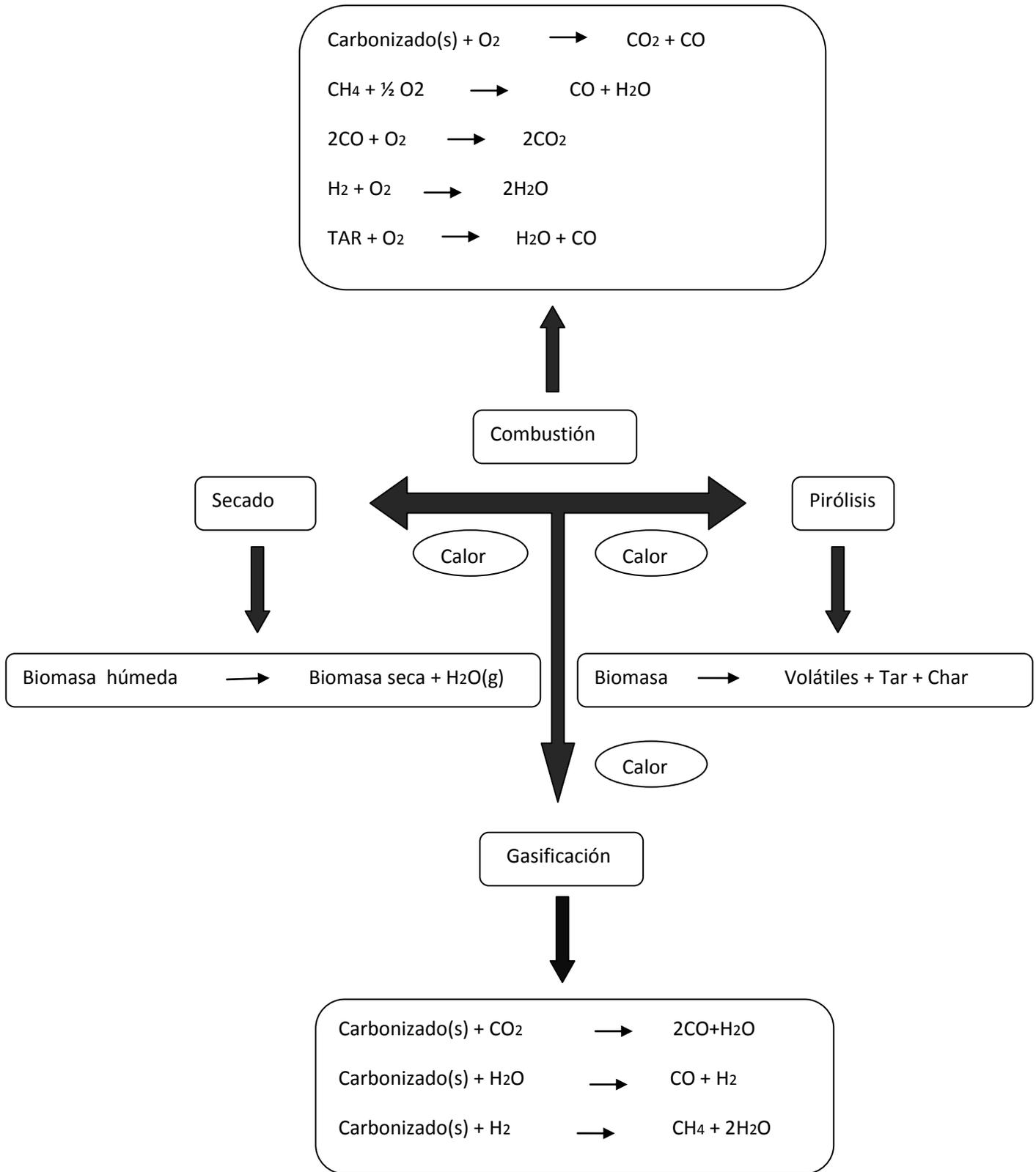
-Propiedades físicas. La biomasa vegetal tiene un tamaño homogéneo, estable en el tiempo y lo suficientemente pequeño para que las reacciones se produzcan a una velocidad adecuada, en un volumen razonable.

Un tamaño de partícula pequeño permite aumentar la calidad de gas de síntesis, reducir el tamaño del reactor o bien aumentar el tiempo de permanencia para el craqueo de las fracciones más pesadas y condensable (alquitranes). Un tamaño excesivamente pequeño puede hacer que la biomasa se atasque en los conductos o que sea arrastrada junto con las cenizas volantes al exterior de reactor antes de tiempo. En conclusión en la mayoría de los casos, el tamaño de partícula no debe ser menor de 2-3 mm de diámetro.

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

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

1.4. Procesos físico-químicos que ocurren durante la gasificación



La transformación de un combustible sólido a un combustible gaseoso, en cualquier gasificador se lleva a cabo a través de varios procesos físicos y químicos complejos a diferentes temperaturas cuyo orden e importancia depende de las condiciones de operación, del combustible y de los elementos del agente gasificante. La biomasa es secada, calentada, pirolizada, parcialmente oxidada y reducida dentro de este reactor a medida que la misma fluye a través de él.

1.4.1 Evaporación de la humedad (373 K – 573K).

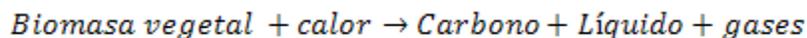
El combustible sólido introducido en el gasificador es secado y calentado por medio de una corriente de aire convectiva precalentada a una temperatura mayor al punto de ebullición del agua.

A la salida de este proceso la mayoría de la humedad del combustible ha sido evaporada y separada con una temperatura cercana a la de la pirolisis.

El proceso de secado es necesario para evitar ciertos problemas asociados a la cantidad de humedad presente en el combustible, ya que si la humedad del combustible es muy alta, se puede obtener un gas de síntesis con baja calidad, una eficiencia del gasificador baja, y los procesos de devolatilización y oxidación se retardarían.

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

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



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

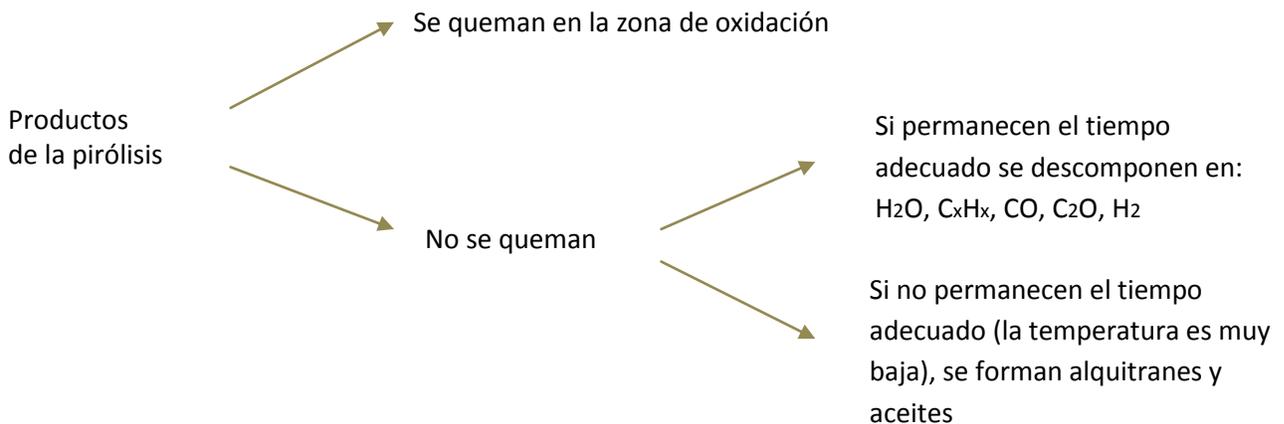
- Temperatura del reactor.
- Tiempo de residencia de los productos en el reactor.
- Razón de calentamiento asociada con el tamaño de la partícula.
- Velocidad del gas de entrada.

Los productos de la pirólisis son agrupados en tres sustancias:

-*Gases permanentes o volátiles*. Son gases simples como: CO_2 , CO , CH_4 , H_2 y otras cantidades pequeñas de hidrocarburos.

-*Líquidos o gases pirolíticos (bio-aceite o alquitranes)*. Tiene un alto contenido de humedad proveniente del combustible y de las relaciones de descomposición.

-*Carbonizado*. Es un hidrocarburo de fase sólida.



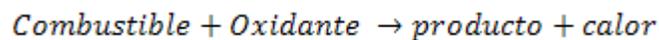
1.4.3. Oxidación y Reducción de los gases volátiles y del carbonizado

(923K – 1773K).

Se suele llevar a cabo dos tipos de reacciones en este proceso:

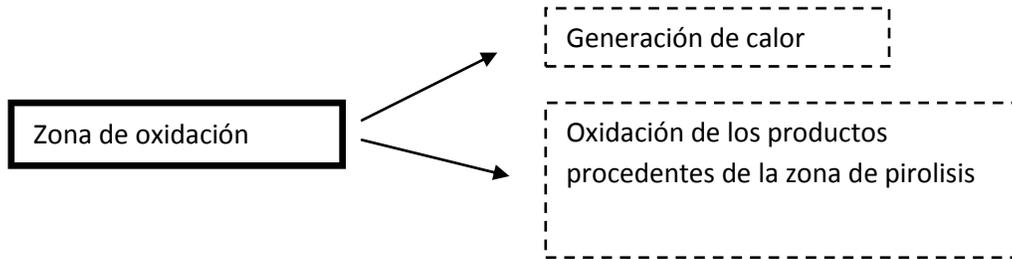
-Reacciones de Oxidación.

En este proceso se oxidan los productos volátiles y el carbonizado procedentes de la pirólisis. En las reacciones de oxidación se genera el calor necesario para que el proceso se mantenga. En el proceso de combustión se combina un combustible y un oxidante, según proporciones másicas fijas, para producir un producto único y producir el calor necesario para que el proceso se mantenga:



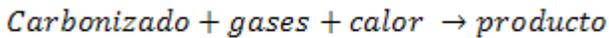
En este proceso se obtiene la mayor energía calórica de la gasificación del carbonizado.

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

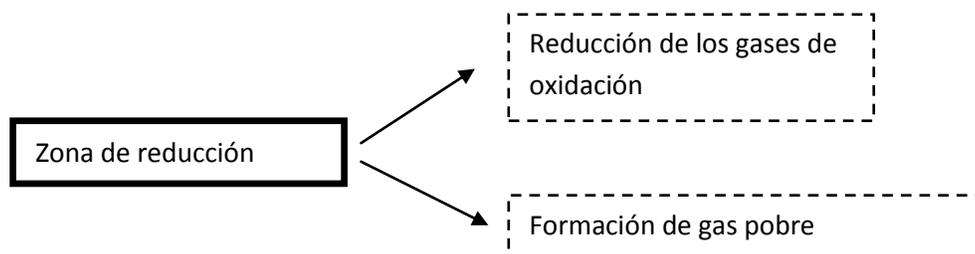


-Reacciones de Reducción.

Las reacciones de reducción o gasificación la constituyen las reacciones sólido-gas, mediante las cuales el sólido se convierte en gas. Son reacciones endotérmicas. Las etapas de oxidación y reducción pueden considerarse conjuntamente en una sola etapa de gasificación en la que tiene todo tipo de reacciones posibles entre el char y la mezcla gaseosa.



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



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

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

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

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

-No emite contaminantes sulfurados o nitrogenados.

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

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

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

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

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

1.6. Uso del gas de síntesis

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

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

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

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

1.7. Problema a resolver

Analizar el comportamiento de los procesos fisicoquímicos que ocurren durante el proceso de gasificación es importante para poder optimizar el rendimiento de un gasificador a diferentes parámetros de operación.

Para obtener dicho análisis se utiliza un método de simulación numérica computacional. Este método es una herramienta de gran utilidad para este tipo de estudios, en los cuales, su análisis por método experimental es poco conveniente debido a los altos costos de construcción de prototipos o modelos físicos. Además, el método numérico computacional es muy conveniente dado que los resultados que entrega son muy confiables y de gran exactitud para una aplicación en un caso real.

El análisis numérico de este proceso posee una gran complejidad debido al gran número de reacciones de cada especie (cinética química) y a la turbulencia derivada de la combustión del carbón. El medio en el que se desarrolla el proceso de gasificación es turbulento, por lo cual las propiedades del sistema varían de manera constante. Por lo tanto para poder modelar dicho movimiento de forma precisa es necesario proponer un modelo matemático que permita resolver y analizar la naturaleza turbulenta del proceso.

Por todo lo anterior esta tesis se basa en un modelo numérico computacional que representará el proceso de gasificación de biomasa por medio de un gasificador de flujo arrastrado.

La simulación numérica se basa en la solución de las ecuaciones de conservación de la energía, masa, momentum y especies químicas sometidas al proceso fisicoquímico. La turbulencia del proceso será considerada implícitamente dentro de la formulación de las ecuaciones de transferencia de masa y de calor. La solución de estas ecuaciones se lleva a cabo mediante el método de volúmenes finitos.

1.8. Objetivo de la tesis

Se simulará numéricamente los procesos fisicoquímicos internos que se presentan durante la gasificación de biomasa, utilizando un gasificador de tipo flujo arrastrado, mediante un modelo de dinámica de fluidos computacional para reproducir, de manera cuantitativa, el comportamiento real de las variables de operación. Así mismo, los resultados serán comparados respecto a los obtenidos experimental y numéricamente en la literatura disponible para un gasificador con las mismas características y mismos parámetros operacionales.

1.9. Estructura de la tesis

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

En el segundo capítulo se describen las ecuaciones que dominan en el proceso, tales como las ecuaciones de conservación, reacciones químicas, modelos de arrastre, de transferencia de calor y de transferencia de masa, principalmente.

El tercer capítulo presenta una breve introducción sobre el método de solución por volúmenes finitos, el cual permite resolver las ecuaciones de transporte planteadas en el segundo capítulo.

La simulación numérica realizada en base a él modelo numérico descrito en el segundo capítulo, se presenta en el cuarto capítulo. El análisis de los resultados obtenidos en la investigación, también se describen en el cuarto capítulo.

Finalmente, en el quinto capítulo, se muestran las conclusiones en base a los resultados obtenidos en la presente investigación, así como posibles trabajos a futuro.

El proceso de gasificación produce un biogás a partir de materiales orgánicos como biomasa, calentándolos bajo condiciones cuidadosamente controladas como la temperatura, presión y las condiciones atmosféricas. La clave para la gasificación es usar menos oxígeno del necesario para una combustión completa. El combustible resultante de la gasificación es un combustible el cual (como el gas natural) puede quemarse en turbinas de gas de alta eficiencia. La gasificación es un proceso limpio con poca o ninguna emisión de ceniza. Es muy económico y su desempeño depende del tamaño del gasificador.

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

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

CAPÍTULO 2 “ECUACIONES DE CONSERVACIÓN”

En este capítulo se abordan las ecuaciones de conservación que describen al flujo en estudio. El proceso de gasificación es modelado por las principales ecuaciones de conservación: masa, momentum, energía y especies químicas. Usadas para ambas fases del flujo bifásico, fase sólida y fase gas.

Estas ecuaciones representan los fenómenos físicos del proceso de gasificación. Los modelos de transferencia de masa, transferencia de calor y las reacciones cinéticas representan los fenómenos químicos del proceso de gasificación.

2.1. Ecuaciones de conservación

-*Continuidad.* La ecuación de continuidad es una ecuación de conservación de la masa, se expresa como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (1)$$

Donde \vec{v} y ρ son la velocidad y la densidad de la mezcla.

Dado que para el proceso de gasificación el flujo bajo análisis es bifásico, con una fase sólida y una fase gaseosa, existe una ecuación de continuidad para cada fase.

Cada variable independiente es asociada a una ecuación de transporte, con excepción de la presión. Como la ecuación de continuidad no tiene una variable propia, la presión se acopla en esta ecuación mediante un algoritmo de acoplamiento de velocidad y presión, transformándose en una ecuación para la presión.

-*Conservación de momentum.* La conservación de cantidad de movimiento del flujo está dada por la ecuación:

$$\frac{\partial(\rho \vec{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla P + \nabla \cdot \vec{\tau} + \rho \vec{f}_m \quad (2)$$

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

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

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

Donde μ es la viscosidad de la mezcla, μ_v es el coeficiente de viscosidad volumétrica y $\vec{\delta}$ es el tensor delta de Kronecker. El coeficiente de viscosidad volumétrica se desprecia. Sustituyendo la ecuación (3) en (2), obtenemos las ecuaciones de Navier-Stokes:

$$\frac{d(\rho\vec{v})}{dt} + \nabla \cdot (\rho\vec{v}\vec{v}) = -\nabla P + \nabla \cdot \left[\mu \left(\nabla\vec{v} + (\nabla\vec{v})^T + \frac{2}{3}(\nabla \cdot \vec{v})\vec{\delta} \right) \right] + \rho\vec{g} \quad (4)$$

Considerado que el flujo es incompresible y que la viscosidad es constante ($Ma < 0.3$), la ecuación (4) se simplifica a:

$$\frac{d(\rho\vec{v})}{dt} + \nabla \cdot (\rho\vec{v}\vec{v}) = -\nabla P + \nabla \cdot [\mu(\nabla\vec{v})] + \rho\vec{g} \quad (4.1)$$

La ecuación de conservación de momentum se resuelve para cada fase, por lo tanto habrá un campo de velocidades para la fase sólida y otro para la fase gaseosa.

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

$$e = U + \frac{1}{2}|\vec{v}|^2 + u \quad (5)$$

La ecuación de la energía total es:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(U + \frac{1}{2}|\vec{v}|^2 + u \right) \right] + \nabla \cdot \left[\rho\vec{v} \left(U + \frac{1}{2}|\vec{v}|^2 + u \right) \right] \\ = \nabla \cdot (\vec{\tau} \cdot \vec{v}) - \nabla \cdot (\rho\vec{v}) - \nabla \cdot \vec{J}_\theta + \dot{Q}_r \end{aligned} \quad (6)$$

Donde \vec{J}_θ es el flujo difusivo de calor y \dot{Q}_r es el intercambio de calor por radiación y los primeros términos de la derecha representan el trabajo de las fuerzas viscosas y de presión. La entalpía de la mezcla se define mediante la siguiente ecuación:

$$h = u + \frac{P}{\rho} \quad (7)$$

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

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(U + \frac{1}{2} |\vec{v}|^2 + h \right) \right] + \nabla \cdot \left[\rho \vec{v} \left(U + \frac{1}{2} |\vec{v}|^2 + h \right) \right] \\ = \left(\frac{dP}{dt} + \vec{v} \cdot \nabla \right) + \bar{\tau} : \nabla \vec{v} - \nabla \cdot \vec{J}_\theta + \dot{Q}_r \end{aligned} \quad (8)$$

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

Dado que en el sistema existen bajas temperaturas, el intercambio de calor por radiación no se considera. También, el término de la energía potencial total en el fluido y la variación de la presión se consideran despreciables. Además, en flujos de baja velocidad ($Ma \ll 1$) tanto la energía cinética como el trabajo viscoso son despreciables comparados con la entalpía [17]. Por todo lo anterior, la ecuación (6) para un fluido incompresible se simplifica a:

$$\frac{\partial}{\partial t} [\rho(h)] + \nabla \cdot [\rho \vec{v}(h)] = (\nabla \cdot k \nabla T) \quad (8.1)$$

La ecuación de la energía se resuelve para ambas fase, y en base a ella se obtiene un gradiente de temperaturas para cada fase.

-*Conservación de especies químicas.* La fracción másica de una especie “r” de una mezcla de N especies se obtiene con la siguiente ecuación:

$$Y_a = \frac{m_a}{m_T} \quad (9)$$

La suma de todas las fracciones másicas de una misma fase debe de ser uno. La conservación de una especie “r” se expresa en términos de la fracción másica:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_k) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} Y_k) + \nabla \cdot J_k = S_k \quad k = 1, 2, \dots, N \quad (10)$$

En el modelo matemático construido, existe una ecuación de conservación de especie química para cada uno de los componentes que forman cada fase.

Para la fase sólida, las ecuaciones de conservación de especie química correspondientes en la dirección “y”, que es la dirección del flujo son:

Combustible (Biomasa):

$$\frac{\partial \rho_{bio} Y_{bio}}{\partial t} + \frac{\partial \rho_{bio} Y_{bio} v_s}{\partial y} = -r_{p1} \quad (11)$$

Carbonizado (Char):

$$\frac{\partial \rho_C Y_C}{\partial t} + \frac{\partial \rho_C Y_C v_s}{\partial y} = r_{p1} - \sum_j r_j; \quad j = c5, g1 - g3 \quad (12)$$

Humedad (Agua):

$$\frac{\partial \rho_w Y_w}{\partial t} + \frac{\partial v_s \rho_w Y_w}{\partial y} = -m_w \quad (13)$$

Alquitrán (Tar):

$$\frac{\partial \rho_T Y_T}{\partial t} + \frac{\partial v_s \rho_T Y_T}{\partial y} = r_{p1} - r_{c1}; \quad (14)$$

Cenizas (Ash):

$$Y_{ash} = 1 - \sum_{i \neq ash} Y_i \quad (15)$$

Para la fase gaseosa, las ecuaciones de conservación de especie química correspondientes en la dirección “y” son:

Especies gaseosas (i):

$$\frac{\partial \rho_i Y_{gi}}{\partial t} + \frac{\partial \rho_i Y_{gi} v_g}{\partial y} - \frac{\partial \left(\varepsilon D_i \rho_g \frac{\partial Y_{gi}}{\partial y} \right)}{\partial y} = \sum_j r_j + r_{p1} \quad (16)$$

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

Vapor de agua (H₂O):

$$\frac{\partial \rho_{H_2O} Y_{gH_2O}}{\partial t} + \frac{\partial \rho_{H_2O} Y_{gH_2O} v_g}{\partial y} - \frac{\partial \left(\rho_{H_2O} \varepsilon D_{H_2O} \frac{\partial Y_{gH_2O}}{\partial y} \right)}{\partial y} = \sum_j r_j + r_{p1} + m_w; \quad j = c1 - c5, g1 - g3 \quad (17)$$

Nitrógeno (N₂):

$$Y_{N_2} = 1 - \sum_{i \neq N_2} Y_i \quad (18)$$

Para la obtención de las concentraciones de nitrógeno (fase gaseosa) y cenizas (fase sólida) no fue necesario el uso de ecuaciones de transporte, dado que el concepto de fracciones másicas nos permite obtener los campos de concentración mediante la suma algebraica de las especies químicas de cada fase, ya que nos dice que la suma de los compuestos de una fase debe ser igual a 1.

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

$$\frac{\partial(\rho_i r_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_i r_i V_i) - \nabla(\Gamma_{r_i} \nabla r_i) = m_{j \rightarrow i} \quad (19)$$

Donde r_1 es para el gas, y r_2 es para el sólido (biomasa), ρ_i es la densidad de la fase, Γ_{r_i} es el coeficiente de difusión, y $m_{j \rightarrow i}$ representa la transferencia de masa entre las fases en las reacciones heterogéneas, de secado y de volatización, y el último termino de lado izquierdo de la ecuación (19) representa los efectos de la turbulencia sobre la dispersión de las partículas, que para este análisis no será utilizado, ya que el flujo es laminar.

Las fracciones volumétricas deben de cumplir la condición:

$$r_1(x, y, z, t) + r_2(x, y, z, t) = 1 \quad (20)$$

Esta ecuación se resuelve para cada fase, teniéndose así, una fracción volumétrica de la fase gaseosa y otra para la fase sólida.

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

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho_i r_i \phi_i)}{\partial x} + \nabla(\rho_i r_i \phi_i V_i) - \nabla(\Gamma_{r_i} \phi_i \nabla r_i) - (\Gamma_{\phi_i} r_i \nabla \phi_i) \\ = S_{\phi_i} + \|m_{j \rightarrow i}\| \Phi_+ - \|m_{i \rightarrow j}\| \Phi_- + f_{j \rightarrow i}(\Phi_j - \Phi_i) \end{aligned} \quad (21)$$

Esta ecuación representa a todas las ecuaciones medias de conservación, se discretiza por el método de volúmenes finitos y permite un tratamiento sistemático y generalizado de todos los problemas de flujos computacionales.

En la ecuación (21) Φ_+ representa el valor proveniente de la fase en la fracción másica ($m_{j \rightarrow i}$) proveniente de la fase j hacia la fase i ; De la misma forma Φ_- .

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

Los dos términos de difusión aparecen en la ecuación (21). El término $\nabla(\Gamma_{r_i} \Phi_i \nabla r_i)$ es el transporte de Φ_i debido a la difusión turbulenta de r_i de la ecuación (19). El término $(\Gamma_{\Phi_i} r_i \nabla \Phi_i)$ es la fase inherente a la difusión turbulenta de Φ_i , y esta solo se presenta en la fase del gas. El último término es modelado de la misma manera como el caso de una sola fase del modelado de la correlación $\overline{V' \phi'}$.

Para la fase sólida, la ecuación (21) se resuelve para la entalpía, para la velocidad en cada componente y para las fracciones másicas de los componentes sólidos: carbonizado, humedad, alquitranes. La fracción másica de la ceniza se obtiene de la suma de las otras componentes.

Para la fase gaseosa, la ecuación (21) se resuelve para la entalpía, la velocidad de cada componente y para las fracciones másicas de todas las especies químicas de la fase gaseosa (CH_4 , CO_2 , CO , H_2 , O_2). La fracción másica de la N_2 se obtiene de la suma de las otras componentes.

CAPÍTULO 3 “ECUACIONES DEL PROCESO”

En este capítulo se describen las ecuaciones que representan el fenómeno químico de gasificación. Las ecuaciones de conservación del capítulo 2 deben ser complementadas con ecuaciones de estado que relacionen la presión, densidad, temperatura y capacidades específicas.

Para el cálculo de la densidad, se considera una mezcla de gases ideales, por lo que la ecuación general de gas ideal puede ser utilizada:

$$P = \frac{\rho_g RT_g}{W_g} \quad (22)$$

$$W_g = \sum_i W_{gi} Y_{gi}; \quad i = N_2, O_2, CO_2, CO, H_2, CH_4, H_2O \quad (23)$$

Donde T_g es la temperatura de la mezcla, ρ_g la densidad de la mezcla y P la presión del sistema. La temperatura del gas se determina a partir de una mezcla de entalpías:

$$h = \sum_{k=1}^n y_k h_k \quad (24)$$

Donde el término h_k es la entalpía de cada especie química de la mezcla y y_k son las fracciones másicas de los gases que componen dicha mezcla. La entalpía h_k considera tanto a la entalpía térmica como a la entalpía química:

$$h_k = \int_{T^0}^T C_{pk} dT + \Delta h_{f,k} \quad (25)$$

Donde T^0 es la temperatura de referencia, C_{pk} es la capacidad térmica a presión constante para cada especie química k que compone la mezcla de gases, $\Delta h_{f,k}$ es la entalpía de formación para cada especie k .

En la fase sólida, tanto la densidad como la capacidad térmica específica se consideran constantes y la temperatura se obtiene por medio de la entalpía, la

cual está en constante intercambio de energía con los gases producidos en el proceso.

3.1. Componentes de la fase sólida y de la fase gaseosa

La biomasa se considera estar compuesta por cinco componentes: carbón seco (col), agua (wat), carbonizado (char), alquitranes (tar) y cenizas (ash). Estos componentes de la partícula se obtienen a partir de la ecuación de conservación de las especies químicas, que utiliza las fracciones másicas.

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

$$y_2^{ceniza} = 1 - y_2^{carbón\ seco} - y_2^{agua} - y_2^{char} - y_2^{tar} \quad (26)$$

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

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

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

3.2. Reacciones químicas en el proceso de gasificación

3.2.1. Secado de la partícula

Cuando la partícula contiene agua, todo el calor transferido de la fase gaseosa, en este caso el aire caliente, a la fase sólida, es utilizado como calor latente de evaporización. La transferencia de masa asociada a este proceso es:

$$\dot{m}_{secado} = \frac{\dot{q}_{1 \rightarrow 2}}{L} \text{ para } y_2^{agua} > 0; \quad (27)$$

$$\dot{m}_{secado} = 0 \quad ; \quad \text{para } y_2^{agua} = 0 \quad (28)$$

Donde L es el calor latente de evaporización del agua, y $\dot{q}_{1 \rightarrow 2}$ representa el calor transferido de la fase sólida a la fase gaseosa. La evaporación de la humedad de la biomasa se controla por medio de la siguiente ecuación:

$$q_{j \rightarrow i} = 6 \frac{r_2}{D^2} \rho_1 Nu k_1 (T_j - T_i) \quad (29)$$

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

$$Nu = 2.0 + 0.65 Re^{1/2} Pr^{1/3} \quad (30)$$

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

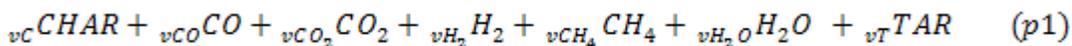
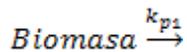
3.2.2. Pirólisis (Volatización)

En el proceso de volatización se considera que la biomasa seca se descompone térmicamente para formar char, alquitrán y ceniza, en la fase sólida, y materia volátil, en la fase gaseosa.

$$1 \text{ kg de Biomasa seca} \rightarrow Y \text{ kg volátiles} + x \text{ kg Tar} + (1 - Y - x) \text{ kg char} \quad (31)$$

Como parte de la materia volátil se considerará un hidrocarburo general (CH_x). En el compuesto CH_x , el subíndice "x", representa la relación de carbono/hidrogeno y se calcula por medio del análisis aproximado y elemental del combustible.

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



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

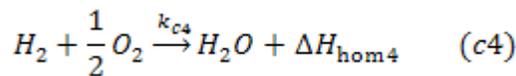
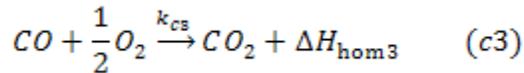
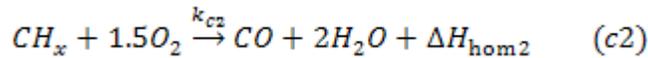
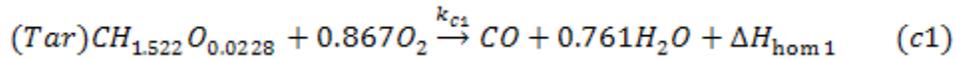
$$\dot{m}_{\text{volatización}} = -A_v Y r_1 \rho_2 y_2^{\text{comb}} e^{-\frac{E_{p1}}{RT_2}} \quad (32)$$

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

3.2.3. Combustión (Reacciones homogéneas)

Los procesos de gasificación y de combustión se llevan a cabo de manera simultánea, ya que las reacciones exotérmicas proporcionan la energía necesaria para que las reacciones heterogéneas se puedan completarse.

La combustión de los volátiles (reacciones homogéneas) incluye la oxidación del hidrocarburo genérico, del monóxido de carbono y del hidrógeno. También se incluye la combustión del alquitrán con un modelo proporcionado por Diblasi. La combustión se lleva a cabo a través de las siguientes reacciones:



Donde:

$$\Delta H_{hom1} = 50,190 \frac{kJ}{kg}, \quad \Delta H_{hom4} = 17,473 \frac{kJ}{kg}$$

$$\Delta H_{hom2} = 10,107 \frac{kJ}{kg}, \quad \Delta H_{hom3} = 142,919 \frac{kJ}{kg}$$

Las tasas de reacción química se calculan por medio de modelos cinéticos simples de tipo Arrhenius:

$$k_{ar} = A\rho_1 e^{-\frac{E}{RT_i}} \quad (33)$$

Por lo tanto, las reacciones cinéticas utilizadas para el proceso de oxidación son:

- Oxidación del alquitrán:

$$R_{c1} = A_{c1} e^{\left(\frac{-E_{c1}}{RT_m}\right)} T_m C_T^{0.5} C_{O_2} \quad (34)$$

- Oxidación del metano:

$$R_{c2} = A_{c2} e^{\left(\frac{-E_{c2}}{RT_m}\right)} T_m C_{CH_4} C_{O_2} \quad (35)$$

- Oxidación del monóxido de carbono:

$$R_{c3} = A_{c3} e^{\left(\frac{-E_{c3}}{RT_m}\right)} C_{O_2} C_{CO} C_{H_2O}^{0.5} \quad (36)$$

- Oxidación del Hidrógeno:

$$R_{c4} = A_{c4} e^{\left(\frac{-E_{c4}}{RT_m}\right)} C_{O_2} C_{H_2} \quad (37)$$

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

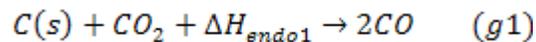
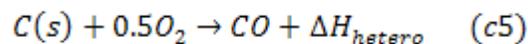
$$T_m = \begin{cases} T_g + T_s; & \text{si } T_g \leq T_s \\ T_g; & \text{si } T_g > T_s \end{cases} \quad (38)$$

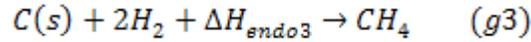
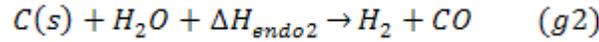
3.2.4. Gasificación (Reacciones heterogéneas)

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

Las limitaciones de transferencia de masa durante una reacción heterogénea o disminución del tamaño de partícula por medio del modelo de núcleo no reactivo dependen del contenido de cenizas en el combustible.

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





Donde:

$$\Delta H_{\text{hete}} = 2.5 \times 10^7 \left(\frac{kJ}{kg} \right) \quad \Delta H_{\text{endo1}} = -9.3 \times 10^6 \left(\frac{kJ}{kg} \right)$$

$$\Delta H_{\text{endo2}} = -6.4 \times 10^6 \left(\frac{kJ}{kg} \right) \quad \Delta H_{\text{endo3}} = -7.2 \times 10^6 \left(\frac{kJ}{kg} \right)$$

Si las condiciones estequiometrias lo permiten, CO y H₂ son oxidados, generando como productos: CO₂ y H₂O; Después, estos productos reaccionarán con el carbonizado sobrante, inducidos por la combustión incompleta debida a la deficiencia de oxígeno en el sistema.

La velocidad de reacción heterogénea se calcula como sigue:

$$\dot{m}_{\text{heterogeneo}} = \frac{6r_2 k_c}{2Dk_d} [-k_c + (k_c^2 + 4k_d^2 P_i)^{1/2}] \quad (39)$$

Donde D es el diámetro de la partícula, P_i es la presión parcial de O₂ y H₂O, k_c y k_d son las tasas cinéticas y de difusión, respectivamente y r₂ es la fracción volumétrica de la fase gaseosa. Los valores de k_c y k_d se calculan por medio de las siguientes ecuaciones:

$$k_c = A_j e^{-\frac{E_j h}{RT_2}} \quad (40)$$

$$j = c5, g1 - g3$$

$$k_d = \frac{Sh D_k M_c}{RT_1 D} \quad (41)$$

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

También se puede considerar un modelo de reacción, el cual relacione las tasas de reacción cinética y difusiva:

$$k_T = \frac{1}{\frac{1}{k_c} + \frac{1}{k_m}} \quad (42)$$

$$\dot{m}_{heterogeneo} = \frac{6r_2 k_T}{D} P_i$$

Donde K_m es el coeficiente difusivo de transferencia de masa correspondiente a la especie reactante a través de la capa de la fase gaseosa que se forma alrededor de la partícula, K_c es la velocidad de la reacción química descritas anteriormente.

3.3. Tamaño de partícula

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

$$\frac{\partial(\rho_2 r_2 \Phi_s)}{\partial t} + \nabla(\rho_2 r_2 \Phi_s V_2) - \nabla(\Gamma_{r_2} \nabla r_2) = S_{\Phi_s} \quad (43)$$

La ecuación anterior incluye todas las fuentes asociadas a la fase de las partículas, esto es, todos los procesos que contribuyen al cambio de tamaño de partícula. Después de obtener la variable Φ_s , se calcula el diámetro medio, el cual se determina con la siguiente expresión:

$$D = D_i \Phi_s^{-1/3} \quad (44)$$

3.4. Coeficiente de transferencia de calor en la interfase

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

$$q_{j \rightarrow i} = 6 \frac{r_2}{D^2} \rho_1 Nu k_1 (T_j - T_i) \quad (45)$$

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

$$Nu = 2.0 + 0.65Re^{1/2}Pr^{1/3} \quad (46)$$

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

3.5. Fuerza de arrastre entre la partícula y la fase gaseosa

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

$$f_{i \rightarrow j} = f_{j \rightarrow i} = \frac{3r_2}{4D} \rho_1 C_d |V_r| Vol \quad (47)$$

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

$$C_D = \frac{24(1 + 0.15Re^{0.687})}{Re} \quad (48)$$

Tabla 2. Tabla de parámetros de cinética química y entalpías de reacción.

Parámetro	Valor	Referencia
$E_{p1} (kJ/mol)$	105	Roberts 1970
$E_{g1} (kJ/mol)$	218	Goeneveld and Swaaij, 1980
$E_{g2} (kJ/mol)$	218	Goeneveld and Swaaij, 1980
$E_{g3} (kJ/mol)$	218	Goeneveld and Swaaij, 1980
$E_{c1} (kJ/mol)$	80	Bryden y Ragland, 1996
$E_{c2} (kJ/mol)$	80	Bryden y Ragland, 1996
$E_{c3} (kJ/mol)$	166	Bryden y Ragland, 1996
$E_{c4} (kJ/mol)$	42	Bryden y Ragland, 1996
$E_{c5} (kJ/mol)$	160	Kashiwagi y Nambu, 1992
$A_{p1} (s^{-1})$	1.516×10^3	Roberts, 1970
$A_{g1} (m^3/mol s)$	7.92×10^4	Goeneveld and Swaaij, 1980
$A_{g2} (m^3/mol s)$	7.92×10^4	Goeneveld and Swaaij, 1980
$A_{g3} (m^3/mol s)$	7.92×10^4	Goeneveld and Swaaij, 1980
$A_{c1} ((m^3/mol))/sK$	9.2×10^6	Bryden y Ragland, 1996
$A_{c2} ((m^3/mol))/sK$	9.2×10^6	Bryden y Ragland, 1996
$A_{c3} ((m^3/mol))/sK$	$1 \times 10^{17.6}$	Bryden y Ragland, 1996
$A_{c4} ((m^3/s mol))$	1×10^{11}	Bryden y Ragland, 1996
$A_{c5} (s^{-1})$	5.67×10^9	Kashiwagi y Nambu, 1992

Capítulo 4 “Método de solución”

Los métodos numéricos discretizan y resuelven numéricamente las ecuaciones diferenciales que gobiernan los fenómenos físicos. Uno de los métodos numéricos más utilizado, debido a su facilidad de implementación, sencillez conceptual, forma conservativa de sus ecuaciones y eficiencia computacional, es el método de volúmenes finitos, el cual discretiza el dominio en estudio y en torno a cada punto de esta malla se construye un volumen de control que no se traslapa con los de los puntos vecinos. De esta forma, el volumen total de fluido resulta ser igual a la suma de los volúmenes de control considerados. La ecuación diferencial a resolver se integra sobre cada volumen de control, lo cual entrega como resultado una versión discretizada de dicha ecuación. La principal propiedad del sistema de ecuaciones discretizadas resultante, es que la solución obtenida satisface en forma exacta las ecuaciones de conservación consideradas, independientemente del tamaño de la malla.

En este trabajo, la solución de las ecuaciones que rigen el movimiento del flujo y las ecuaciones de transporte asociadas al flujo en estudio, se obtiene mediante el método de volúmenes finitos, que se describe a continuación.

4.1. Método de volúmenes finitos

Se pueden representar las ecuaciones medias de continuidad, cantidad de movimiento, energía, conservación de especies y del modelo de turbulencia, mediante una ecuación general, donde la variable dependiente de la ecuación diferencial está representada por $\tilde{\phi}$ (u, v, w, h, k, mi...etc). Esta ecuación general se conoce como la ecuación de transporte y permite un tratamiento sistemático y generalizado de todos los problemas de CFD:

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{\phi})}_{\text{temporal}} + \underbrace{\nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\phi}\tilde{u}_i)}_{\text{convectivo}} - \underbrace{\nabla \cdot (\Gamma_{\phi}\nabla\tilde{\phi})}_{\text{difusivo}} = \underbrace{\bar{S}_{\phi}}_{\text{fuente}} \quad (49)$$

Donde Γ_{ϕ} es el coeficiente de difusión, y \bar{S}_{ϕ} es el término fuente. Los términos del lado izquierdo de la ecuación (49) son el término transitorio, convectivo y de

difusión respectivamente. El término temporal recoge las variaciones locales (con el tiempo) de $\rho\Phi$, tanto acumulación como disminución de la propiedad. El término convectivo se encarga del transporte de la propiedad Φ , entre dos puntos próximos del dominio por medio de la velocidad del flujo. El término difusivo expresa la tendencia del fluido al equilibrio, mediante la destrucción de los gradientes de la propiedad Φ . Estos tres términos no son suficientes para representar, de manera general, todas las ecuaciones de la mecánica de fluidos. Por esta razón se introduce un término adicional, conocido como término fuente, en el cual se incluirá cualquier otro término de una ecuación determinada que no esté incluido en los otros tres términos anteriores.

Los términos Γ_{ϕ} y \bar{S}_{ϕ} están especificados para cada variable ϕ , dado que son propiedades que se obtienen por medio de leyes algebraicas. En el caso de la ecuación de continuidad $\phi = 1$.

La ecuación anterior se puede discretizar con el método de volúmenes finitos. Con dicho método, el dominio se divide en pequeños volúmenes de control, como se observa en la figura 1, asociando a cada uno de ellos un punto nodal. De forma similar se discretiza el tiempo en intervalos temporales. La ecuación diferencial resultante se integra en cada volumen de control y en cada intervalo temporal; El resultado es una ecuación discretizada que relaciona los valores de ϕ para un determinado grupo de puntos nodales. Esta ecuación algebraica expresa el principio de conservación de ϕ en el volumen finito, de la misma manera que la ecuación diferencial lo expresa para un volumen infinitesimal. La ecuación algebraica para un nodo P puede expresarse en forma general como:

$$a_p \phi_p = \sum_{i,I=B,W,N,S,H,L} a_i \phi_i + a_T \phi_T + B \quad (50)$$

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

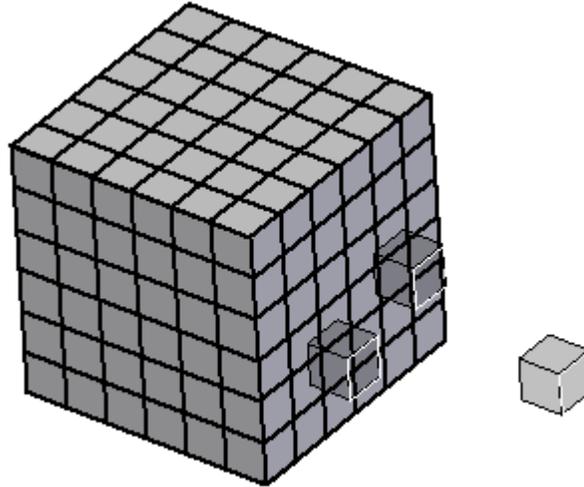


Figura 1. Representación del sistema discretizado en volúmenes finitos.

En el caso de una malla cartesiana y uniforme (celdas de iguales dimensiones espaciales), se puede emplear por sencillez un volumen de control bidimensional, como el que se muestra en la figura 2. El espesor de la celda en dirección z puede considerarse la unidad.

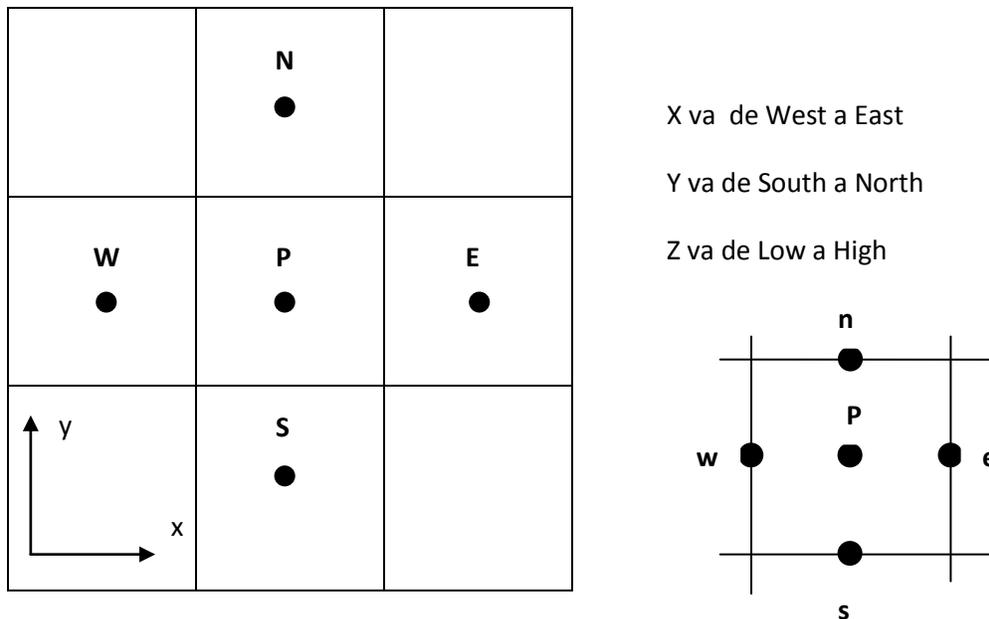


Figura 2. Diagrama esquemático de un volumen de control bidimensional.

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

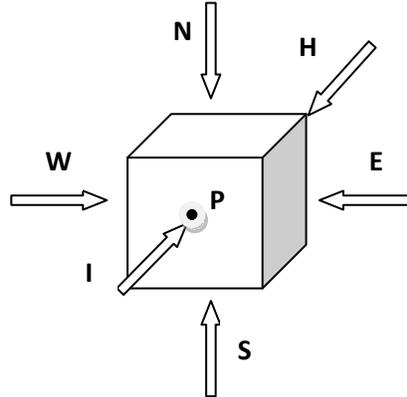


Figura 3. Diagrama esquemático de un volumen de control en tres dimensiones.

Al tener discretizado el dominio computacional es necesario definir el punto en el cual se encuentren almacenadas las variables, para esto las variables del tipo escalar (presión P, entalpía h, fracciones másicas m_i , etc.) son almacenadas en el centro de la celda y por el otro lado la variable de la velocidad está directamente disponible sin necesidad de interpolación, en las caras de la celda, donde su valor es necesario para calcular el flujo convectivo entrante en la celda, siendo la velocidad directamente gobernada por los nodos vecinos.

4.2. Discretización de las ecuaciones

A continuación, se presentan los términos de la ecuación discretizada (49).

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

$$F = \overline{\rho \tilde{v}}_i \quad D = \frac{\Gamma}{\delta_i} \quad P_e = \frac{F}{D} \quad (51)$$

Donde \tilde{v}_i es la velocidad en la cara i, δ_i es la densidad entre los nodos que incluyen la cara i y Pe es el número de Peclet, que es la fracción entre la convección y la difusión, \tilde{v} es la velocidad de la cara i y x_i . Las expresiones F y D representan el efecto de los términos convectivo y difusivo de la ecuación de transporte (49) respectivamente.

Los coeficientes a_i de la ecuación de la ecuación (50) son:

$$a_i = D_i f(|Pe|_i) + \max(-F_i, 0) \quad (52)$$

Los valores F y D en la cara de la celda de la ecuación (51) son:

$$F_i = (\overline{p\tilde{v}})_i \Delta_i, \quad D_i = \frac{\Gamma_i \Delta_i}{(\delta_i)}, \quad i = n, s, e, w \quad (53)$$

Donde Δ_i es la longitud de la cara i .

Para determinar F_i se necesita conocer \bar{p} y \tilde{u}_i en la cara de la celda, El cálculo del término convectivo de la ecuación de transporte (49) requiere también el conocimiento de la variable escalar, $\tilde{\phi}$, en la cara de la celda. La velocidad \tilde{v}_i está calculada en la cara de la malla secuenciada; pero \tilde{p} y $\tilde{\phi}$ están calculados en el nodo y necesitan ser interpolados a la cara para calcular los coeficientes a_i de la ecuación discretizada (50).

La obtención de estas variables en la cara de la celda es importante para la precisión y convergencia de la solución. El cálculo de \tilde{p} y $\tilde{\phi}_i$ da lugar a los llamados esquemas de discretización. La función $f(|Pe|)$ de la ecuación (50) depende del esquema de interpolación. Por ejemplo, en el esquema de diferencias desplazadas $f(|Pe|) = 1$, y para el sistema híbrido:

$$f(|Pe|) = \max(0.1 - 0.5|Pe|) \quad (54)$$

El coeficiente para el término transitorio es:

$$a_T = \frac{\rho_T \Delta x \Delta y}{\Delta t} \quad (55)$$

Para obtener el coeficiente D_i (52) se necesita calcular el coeficiente de difusión, Γ , en la cara de la celda. El coeficiente Γ no es necesariamente una constante, sino probablemente una función de los valores variables que se conocen en los nodos, y por lo tanto es necesario interpolarlo a la cara. Esta interpolación puede ser aritmética o armónica. Por ejemplo, para la cara e, estas son las interpolaciones:

$$\Gamma_e = \frac{\Delta x (\Gamma_p + \Gamma_E)}{2\delta x_e} \quad (56)$$

$$\Gamma_s = \frac{2\delta x_s}{\Delta x \left(\frac{1}{\Gamma_p} + \frac{1}{\Gamma_p} \right)} \quad (57)$$

El término fuente de la ecuación general (49) δ_ϕ , se linealiza como:

$$\bar{S}_\phi = \bar{S}_{\phi,c} + \bar{S}_{\phi,v} \bar{\phi} P \quad (58)$$

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

Con esta suposición, los términos B y a_p de la ecuación (50) son:

$$B = \bar{S}_{\phi,c} \Delta x \Delta y + a_T \bar{\phi}_T \quad (59)$$

$$a_p = a_s + a_w + a_n + a_s + a_T - \bar{S}_{\phi,v} \Delta x \Delta y \quad (60)$$

La ecuación (49) se aplica en cada celda del dominio, para cada ϕ y para cada paso temporal Δt , por lo que se tiene un sistema de ecuaciones lineales (los coeficientes de a pueden depender, directa o indirectamente de $\bar{\phi}$, por lo que el sistema es realmente pseudo-lineal). Para resolver el sistema de ecuaciones se puede utilizar cualquier método de resolución de ecuaciones diferencial. Entre los algoritmos iterativos que se basan en este procedimiento, están los de la familia SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations). El algoritmo utilizado en esta tesis para resolver el problema de acoplamiento velocidad-presión pertenece a esta familia.

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

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

$$\bar{S}_{\phi,T} = \frac{\rho V_p}{\Delta t_f} \left(\bar{\phi}_p^{(n-1)} - \bar{\phi}_p^{(n)} \right) \quad (61)$$

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

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

$$\tilde{\phi}_p^{(n)} = \alpha \tilde{\phi}_p^{sol} + (1 - \alpha) \tilde{\phi}_p^{(n-1)} \quad (62)$$

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

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

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

Capítulo 5 “Resultados”

En este trabajo de tesis se realizó la simulación numérica del proceso de gasificación de biomasa en un gasificador de flujo concurrente en estado permanente.

En este capítulo se presentan los resultados numéricos obtenidos en el presente trabajo de tesis. La simulación numérica realizada en esta tesis incluye los fenómenos físico-químicos de secado, pirolisis, gasificación y combustión.

A continuación, se describe el sistema simulado así como los detalles numéricos y las condiciones de frontera que se utilizaron para simular el proceso de gasificación. También, se realiza un análisis de comparación de los resultados obtenidos en esta tesis con los resultados registrados en trabajos similares disponibles en la literatura correspondiente.

5.2. Descripción del sistema utilizado

El reactor (lugar donde se lleva a cabo el proceso de gasificación) que se simula en esta tesis, es un cilindro hueco con un diámetro de 0.45 m y una altura de 0.5 m, tomado del trabajo de Manurung and Beenackers [16]. El reactor es continuamente llenado por un flujo de biomasa, mientras se inyecta aire desde la parte superior, en sincronía con la biomasa en forma de pellets. Un esquema del reactor (volumen de control) utilizado se puede observar en la figura 4. Los flujos de entrada de aire y biomasa son por la parte superior del reactor. La salida del gas de síntesis y la ceniza se da por la parte inferior del reactor.

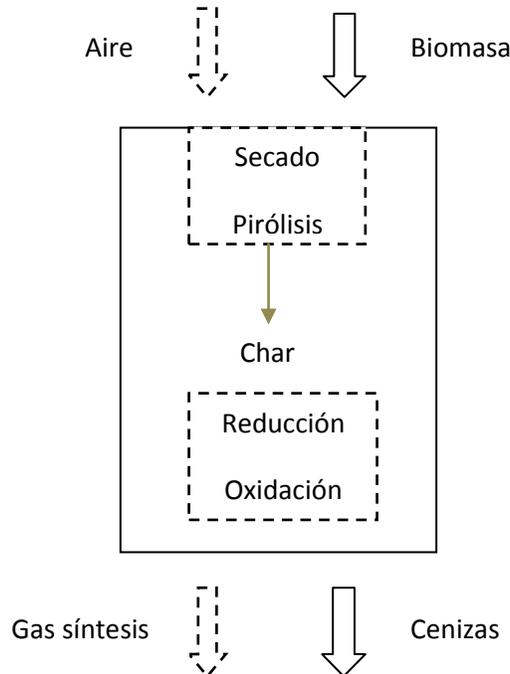


Figura 4. Gasificador de biomasa con flujos concurrentes (Downdraft)

Los procesos de secado, pirólisis, combustión, y gasificación tienen lugar dentro del reactor. La combustión proporciona el calor necesario para llevar a cabo el proceso endotérmico de gasificación entre el carbonizado (char) y los volátiles.

La biomasa se volatiliza y reacciona con el oxígeno, elevando su temperatura para posteriormente llevarse a cabo las reacciones endotérmicas (Char-CO₂ y Char-H₂O). Las reacciones producen principalmente CO y CH₄, y en menor proporción, H₂ y CO₂.

5.3. Condiciones de frontera

Las condiciones de frontera y condiciones iniciales utilizadas en las ecuaciones de conservación del proceso, se describen en esta sección.

Se consideraron pellets de biomasa de 0.05 cm de diámetro y el aire de alimentación tiene una composición de 77% de nitrógeno y 21% de oxígeno en volumen. Ambos con una temperatura de inicial 600 K. Todos los componentes de la fase gaseosa (YCH₄, YCO, YCO₂, YH₂O y YH₂) tienen un valor inicial de 0%, en base másica, ya que estos comienzan a producirse en cuanto el proceso de gasificación empieza a accionar.

-La biomasa introducida tiene las siguientes características:

$$\rho_{biomasa} = \rho_{s0} = 360 \text{ kg/m}^3$$

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

$$T_{s0} = 600$$

donde V_{s0} , es la velocidad inicial de la biomasa, T_{s0} la temperatura a la que entra la biomasa y ρ_{s0} su densidad inicial.

-El aire entra con las siguientes características:

$$\rho_{aire} = \rho_{g0} = 1.1614 \text{ kg/m}^3$$

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

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

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

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

Para mantener un equilibrio de operación en el cual los frentes de reacción de combustión, pirolisis y gasificación se encuentran en la parte superior del reactor, es necesario imponer un flujo másico de biomasa en la entrada del gasificador \dot{m}_s ($y=0.5 \text{ m}$) y un flujo másico de aire \dot{m}_g ($y=0.5 \text{ m}$); ésto según la literatura correspondiente [13] y [15]. Por lo tanto, los gastos de aire y biomasa utilizados a la entrada del reactor fueron:

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

La relación de aire/combustible es por lo tanto de 1.5. A partir de los flujos másicos y de las densidades, se puede calcular la velocidad del gas y del sólido a la entrada, como lo muestran las siguientes ecuaciones:

$$V_{s0} = \frac{\dot{m}_s}{\rho_s A} f_{vol s}; \quad V_{g0} = \frac{\dot{m}_g}{\rho_g A} f_{vol g}$$

$$f_{vol s} = \frac{\dot{Q}_s}{V_T}; \quad f_{vol g} = \frac{\dot{Q}_g}{V_T}$$

$$\frac{\dot{m}_s}{\rho_s} + \frac{\dot{m}_g}{\rho_g} = \dot{Q}_s + \dot{Q}_g = V_T$$

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

El aire y la biomasa suministrados al sistema por la parte superior del reactor, proveen una distribución uniforme de aire/combustible a lo largo del dominio, por lo tanto, existe un buen mezclado de aire/biomasa y éste contribuye a un buen proceso de combustión, el cual es primordial en el fenómeno de gasificación, ya que éste provee la energía suficiente para que se lleven a cabo las reacciones heterogéneas y el proceso se complete. Aunque solo se trate de una combustión parcial debido a la deficiencia de oxidante, esta proporcionará la mayor cantidad de energía para que el proceso prospere.

Tabla 3. Propiedades del reactor, composiciones y propiedades de los flujos.

Constantes y Propiedades del proceso	Valor
Altura del reactor	$L = 0.5 \text{ m}$
Diámetro interno del reactor	$D = 0.45 \text{ m}$
Tamaño inicial de partícula	$d_{p0} = 0.00005 \text{ m}$
Contenido de cenizas	$\chi_{ash} = 0.105$
Densidad de la masa entrante	$\rho_{biomasa} = \rho_{s0} = 360 \text{ kg/m}^3$
Densidad del aire entrante	$\rho_{aire} = \rho_{g0} = 1.18 \text{ kg/m}^3$
Temperatura de los flujos entrantes	$T_w = T_{g0} = T_{s0} = 600 \text{ K}$
Presión de Operación	$P_0 = 1 \text{ atm}$
Humedad del carbón entrante	$Y_{L0} = 10.5\%$

Composición del aire	$Y_{N_2O} = 0.764, Y_{O_2O} = 0.23, Y_{H_2O} = 0.006$
Composición de la biomasa (análisis aproximado fracción masa)	$Y_{humedad} = 0.10, Y_{char} = 0.27$ $Y_{volatil} = 0.3816, Y_{ash} = 0.105, Y_{tar} = 0.1434$
Composición de la biomasa sin humedad (análisis final)	$Y_{carbón} = 0.401, Y_H = 0.105$ $Y_{O_2} = 0.49, Y_N = 0.001$

5.4. Detalles numéricos

La simulación numérica realizada en esta tesis consideró las siguientes características para la construcción del modelo matemático utilizado:

- El flujo considerado es bifásico, con una fase sólida y una fase gaseosa.
- El flujo bajo análisis es estacionario y bidimensional.
- Los mecanismos de transporte del flujo bifásico (sólidos-gas) se describen de acuerdo a un enfoque Euleriano, el cual analiza el comportamiento de las variables de transporte en un volumen de control fijo con coordenadas espaciales fijas para ambas fases. El enfoque Euleriano es utilizado en mezclas heterogéneas de dos fases en las que se emplean ecuaciones de conservación de masa, energía, especies químicas y momentum para describir el comportamiento independiente de cada fase, suponiendo que éstas son continuas. Las ecuaciones de conservación para la fase gaseosa y la fase sólida son resueltas por medio de un programa de dinámica de fluidos computacional, utilizando el método de volúmenes finitos como método de solución.
- El reactor ó sistema de análisis es cilíndrico con área transversal constante. Dado que solo se presentan cambios importantes en la dirección vertical del reactor, eje "y", se hace un análisis unidireccional.
- Las especies químicas modeladas para la fase gaseosa son: CO₂, CO, O₂, CH₄, H₂, N₂ y Vapor de agua.

-Para la fase sólida se consideran cinco especies principales: TAR (alquitrán), CHAR (carbonizado, producto de la pirolisis), ASH (ceniza), WAT (humedad) y COL (biomasa seca).

-Los fenómenos termo-químicos modelados son: la evaporización de la humedad, la gasificación heterogénea (Vapor H₂O, CO₂ y H₂), la combustión del carbonizado (CHAR), la combustión de las especies volátiles, la pirolisis de biomasa, la transferencia de calor entre fases, la transferencia de masa y el arrastre de partícula debido al flujo de aire.

-Los fenómenos químicos modelados mediante reacciones de cinética química fueron: La pirolisis, que involucra únicamente la degradación térmica de la biomasa debido a la acción del calor, produciendo volátiles (CO₂, CO, H₂O, H₂, CH₄) y carbonizado. La combustión, que considera sólo la oxidación de los gases volátiles y del carbonizado. Y la gasificación entre la superficie de la fase sólida y la fase gaseosa.

-El método de volúmenes finitos es utilizado para la solución de las ecuaciones de transporte.

-El dominio del sistema fue discretizado por una malla cartesiana bidimensional de 70 x 130 en las direcciones "x" y "y" respectivamente. Esto debido a que pruebas posteriores demostraron que a partir del mallado presentado, los resultados eran independientes del tamaño de mallado y del número de barridas. La discretización del sistema se puede apreciar en la figura 5.

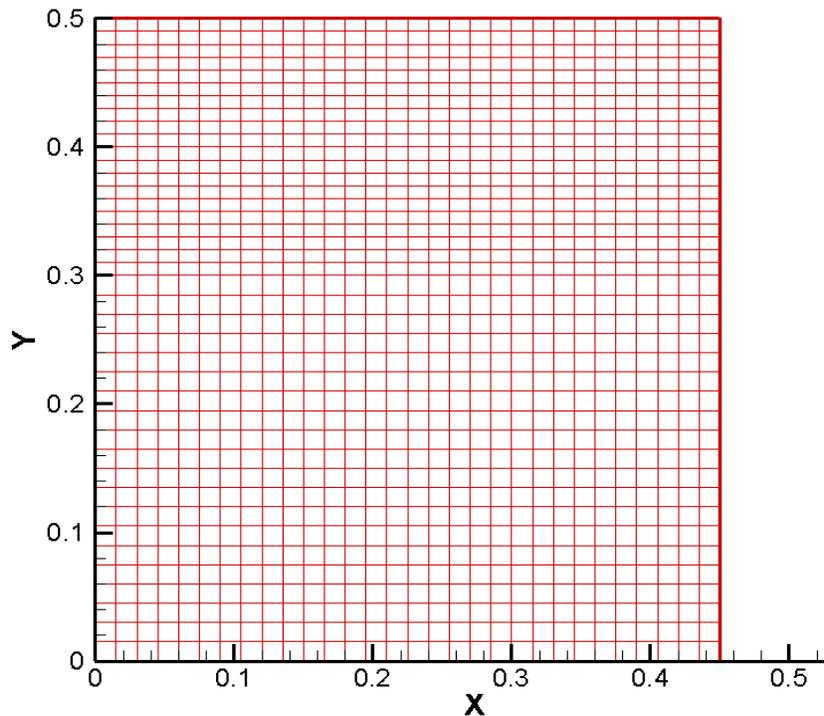


Figura 5. Discretización del sistema

5.5. Resultados

Los resultados obtenidos en la presente simulación numérica se describen a continuación. Dichos resultados serán validados con valores experimentales disponibles en la literatura correspondiente. Así mismo, se hará un análisis de comparación respecto a los resultados presentados por Colomba Diblasi [13] en su trabajo sobre gasificación de biomasa, ya que este trabajo es lo más representativo que existe en tanto al análisis numérico del proceso de gasificación. De esta manera se podrán verificar los resultados obtenidos en este trabajo de tesis. El modelo matemático desarrollado en esta tesis toma en cuenta los procesos de secado, pirolisis, combustión homogénea, combustión heterogénea y gasificación del carbonizado. Además de que se implementa un modelo para describir el comportamiento de la partícula a lo largo del proceso de gasificación, un modelo para representar el fenómeno de arrastre de partícula, y un modelo para describir la transferencia de calor y la transferencia de masa. El modelo matemático construido por Diblasi describe los procesos de secado, pirolisis, gasificación y combustión del carbonizado, combustión de los volátiles, transferencia de calor y transferencia de masa.

Cabe mencionar que Diblasi implementa una reacción adicional entre el monóxido de carbono y el vapor de agua, la cual no se incluye en esta tesis por problemas de divergencia.

La comparación de resultados se llevará a cabo considerando un gasto másico de combustible igual a 18 kg/h y un gasto másico de aire (oxidante) igual a 27 kg/h. El reactor considerado en esta tesis tiene las mismas dimensiones que el reactor utilizado en el trabajo de Columba Diblasi [13].

Los parámetros importantes en los que se enfoca este trabajo de tesis son: la velocidad del flujo en la fase gaseosa y en la fase sólida, la temperatura del gas y del sólido, los valores correspondientes a cada especie química que componen el gas de síntesis (bióxido de carbono CO_2 , monóxido de carbono CO , hidrogeno H_2 , vapor de agua H_2O , hidrocarburo CH_4) y los valores correspondientes a la fase sólida (char, carbón crudo, tar, ceniza y humedad).

5.5.1. Temperaturas

Las imágenes 6 y 7 muestran que las temperaturas de ambas fases, a la salida del gasificador, son relativamente las mismas. Esto se debe a que las partículas de biomasa están en constante intercambio de energía con la fase gaseosa, ganando energía calórica. Las temperaturas de ambas fases presentan cambios acorde al proceso que se lleva a cabo, y se puede observar que el frente de reacción tiene lugar en la parte superior del reactor, lo cual significa que tan pronto el char seco se encuentra con el oxígeno, comienza a llevarse a cabo su combustión heterogénea y como consecuencia de ello, existe un incremento en la temperatura de la fase sólida, lo cual también propicia el inicio de las tasas de gasificación.

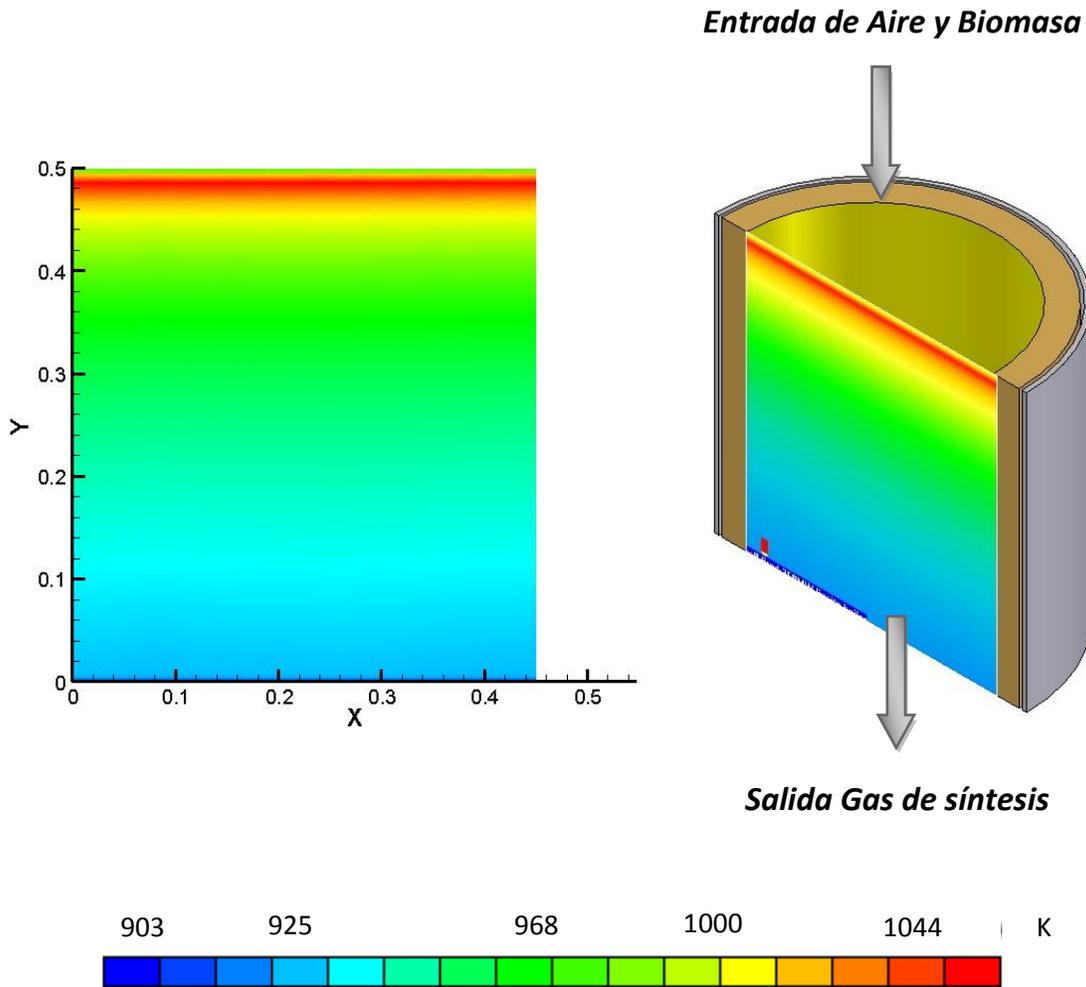


Figura 6. Contornos de temperatura de la fase sólida.

La figura 7 describe el comportamiento de la temperatura en la fase gaseosa. En la parte superior del reactor se alcanza la temperatura máxima, debido a las reacciones exotérmicas del char ó carbonizado y los volátiles, las cuales se llevan a cabo de manera rápida. La combustión es una reacción exotérmica que libera energía y por lo tanto, el mayor incremento de temperatura se tendrá en la zona de combustión. Posteriormente se observa que la temperatura va decreciendo; Esto se debe a las reacciones endotérmicas, las cuales requieren energía para desarrollarse y este cambio de energía se refleja en un cambio de temperatura. Además, las reacciones endotérmicas se llevan a cabo después de las reacciones exotérmicas, ya que estas últimas son las encargadas de proveer la energía necesaria para que se produzcan las reacciones heterogéneas de gasificación.

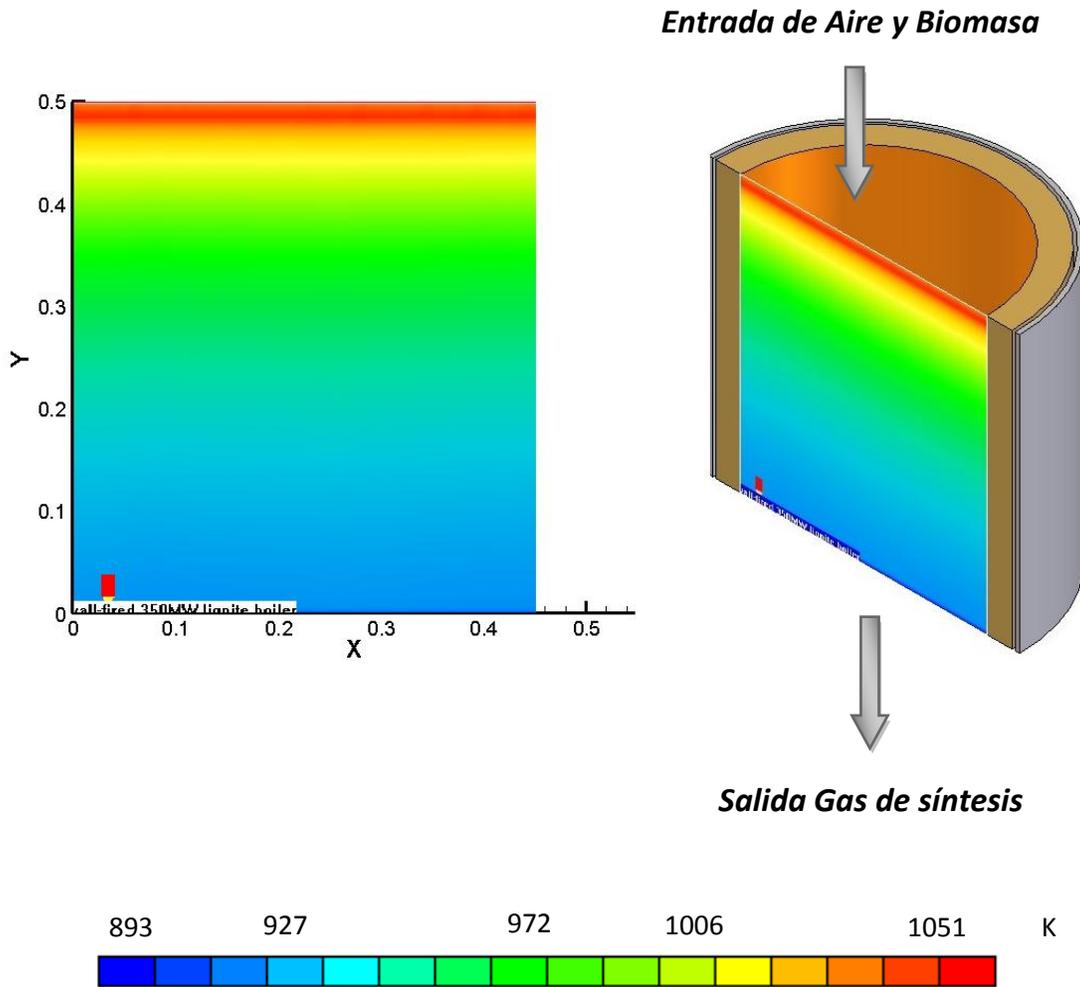


Figura 7. Contornos de temperatura de la fase gaseosa.

5.5.2. Velocidades

El campo de velocidades en la fase gaseosa muestra que la velocidad de la mezcla aumenta rápidamente en la parte superior del gasificador. Las reacciones exotérmicas que se llevan a cabo de manera casi inmediata cerca de la entrada del reactor, son la razón de este incremento de velocidad casi instantáneo. Durante la combustión la velocidad del gas incrementa y la densidad disminuye. El aumento de velocidad es necesario para mantener la conservación de la masa, estableciendo un equilibrio entre los gastos másicos de cada fase debido a él cambio de densidad, producido principalmente por la combustión.

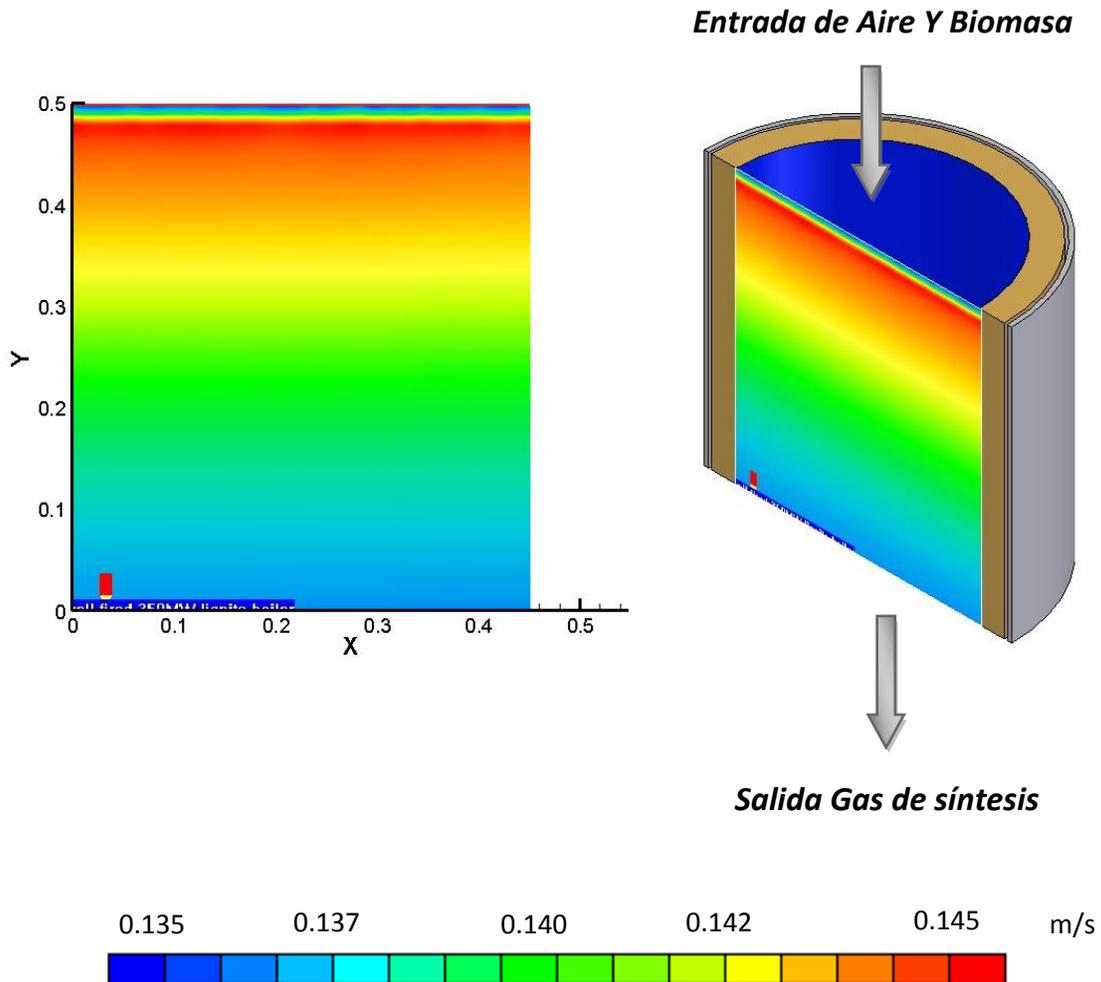


Figura 8. Contornos de velocidad de la fase gaseosa.

Las figuras correspondientes a los campos de velocidad para ambas fases muestran que las velocidades en la parte inferior del reactor son mayores que las velocidades de entrada correspondientes a cada fase; La velocidad del gas presenta mayores valores en la zona de oxidación (combustión y gasificación), debido a las reacciones exotérmicas de combustión de volátiles y de Char (carbonizado), donde existen los cambios de densidad más grandes. La velocidad de la partícula sigue la misma tendencia de la velocidad de la mezcla gracias a la fuerza de arrastre ejercida por el flujo de gas y al cambio de presión en el sistema.

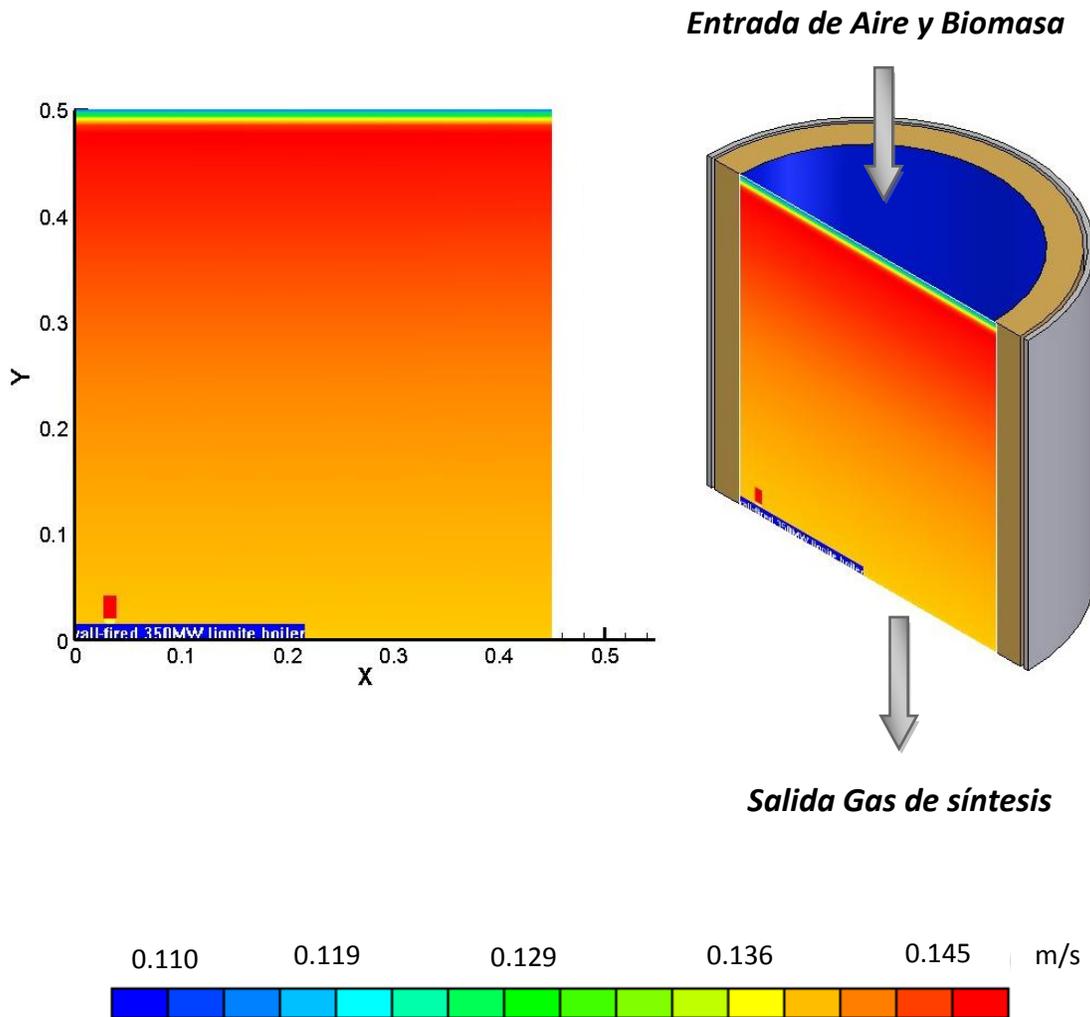


Figura 9. Contornos de velocidad de la fase sólida.

5.5.3. Contornos de las especies químicas de la fase gaseosa

La mezcla de gases está compuesta por CH_4 , CO , CO_2 , H_2O , H_2 y N_2 . El gas de síntesis se produce conforme se van llevando a cabo los distintos procesos que componen el fenómeno de gasificación. Durante la pirolisis se produce CH_4 principalmente. En el proceso de combustión se produce principalmente CO y en menor proporción CO_2 . Y por último, durante la gasificación se producen pequeñas cantidades de H_2 , CH_4 y en mayor proporción CO .

A continuación, la descripción de cada componente de la fase gaseosa es presentada.

5.5.4. Monóxido de carbono CO

La figura 10 muestra los contornos de monóxido de carbono (CO) a lo largo del reactor. En el frente de reacción, en la zona superior del reactor donde se lleva a cabo la combustión y gasificación del carbonizado, se genera la mayor cantidad de CO, la cual alcanza un valor aproximado a 0.17% en fracción masa. Posteriormente, la concentración de CO sigue incrementando hasta llegar a un valor máximo de 0.25% en fracción masa, esto gracias a las reacciones exotérmicas del CH₄ y del TAR, la cuales aportan pequeñas cantidades de CO a la mezcla. La reacción de heterogénea del carbonizado con el CO₂ y el H₂O, produce más CO, adicional al que ya se había generado en el proceso de combustión.

De la figura 10 se puede concluir que la mayor producción de CO ocurre durante la combustión del carbonizado y que las reacciones heterogéneas contribuyen en menor medida a la generación de CO. Estos resultados son similares a los reportados por Diblasi, en su trabajo sobre gasificación de biomasa, lo cual se verá más adelante.

El CO es considerado como la especie química gaseosa más importante dentro del proceso de gasificación y por ello se busca incrementar su generación para producir un gas de síntesis más eficiente.

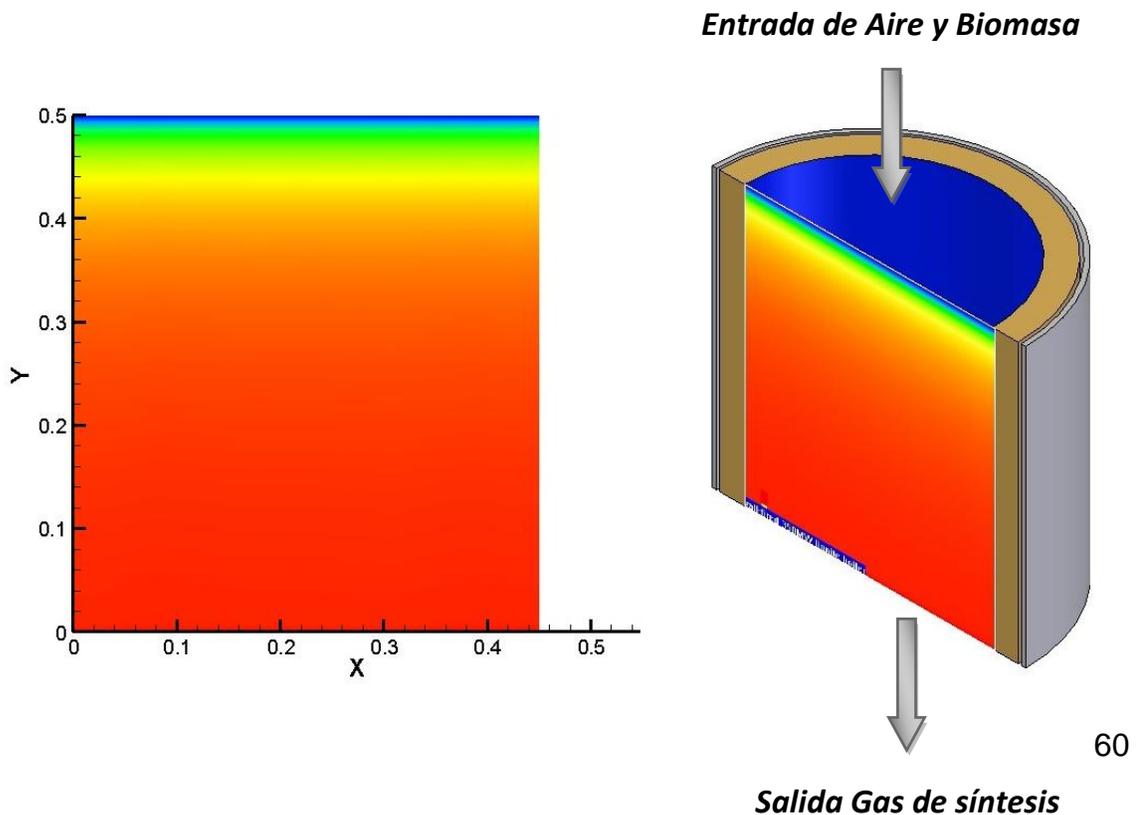




Figura 10. Contornos de CO.

5.5.5. Metano CH₄

En la figura 11 se pueden observar los contornos de metano (CH₄), que para el caso estudiado en esta tesis, es el único hidrocarburo generado en el proceso de gasificación, aunque no se descarta que dependiendo de las características de la biomasa, pueden generarse otro tipo de hidrocarburos. En la figura 11 se observa que la mayor formación de CH₄ se tiene en la parte superior del reactor y conforme el flujo sigue su trayectoria, dicha producción reacciona con el oxígeno y se consume en pequeñas cantidades. A la salida del reactor, la cantidad de CH₄ dentro de la mezcla ya ha disminuido un 4.25% con respecto al valor más alto registrado en la producción de este. La razón de este comportamiento es que la mayor producción de metano sucede durante el proceso de pirolisis, el cual se lleva a cabo en la parte superior del reactor, justo antes de los proceso de combustión y gasificación del carbonizado. Durante el proceso de pirolisis, también se produce alquitrán (tar), el cual contribuye a la producción de metano a través de su combustión, aunque en una menor cantidad comparada con lo generada en el proceso de pirolisis. Posteriormente existe una disminución en la cantidad de metano, lo cual se debe a la oxidación del mismo al entrar en contacto con el aire, y gracias a las condiciones de temperatura y concentración, principalmente, reaccionan para generar CO y H₂O. Por lo tanto los valores más bajos en la concentración de CH₄ se presentan durante la combustión del gas. Hay una pequeña aportación de CH₄ proveniente de la reacción heterogénea entre el carbonizado y el hidrogeno, pero como las concentraciones de hidrógeno son muy bajas, esta cantidad es casi despreciable.

En resumen, la mayor concentración de CH₄ se produce durante el proceso de pirolisis. Posteriormente su proporción va disminuyendo conforme se van llevando a cabo las reacciones de combustión.

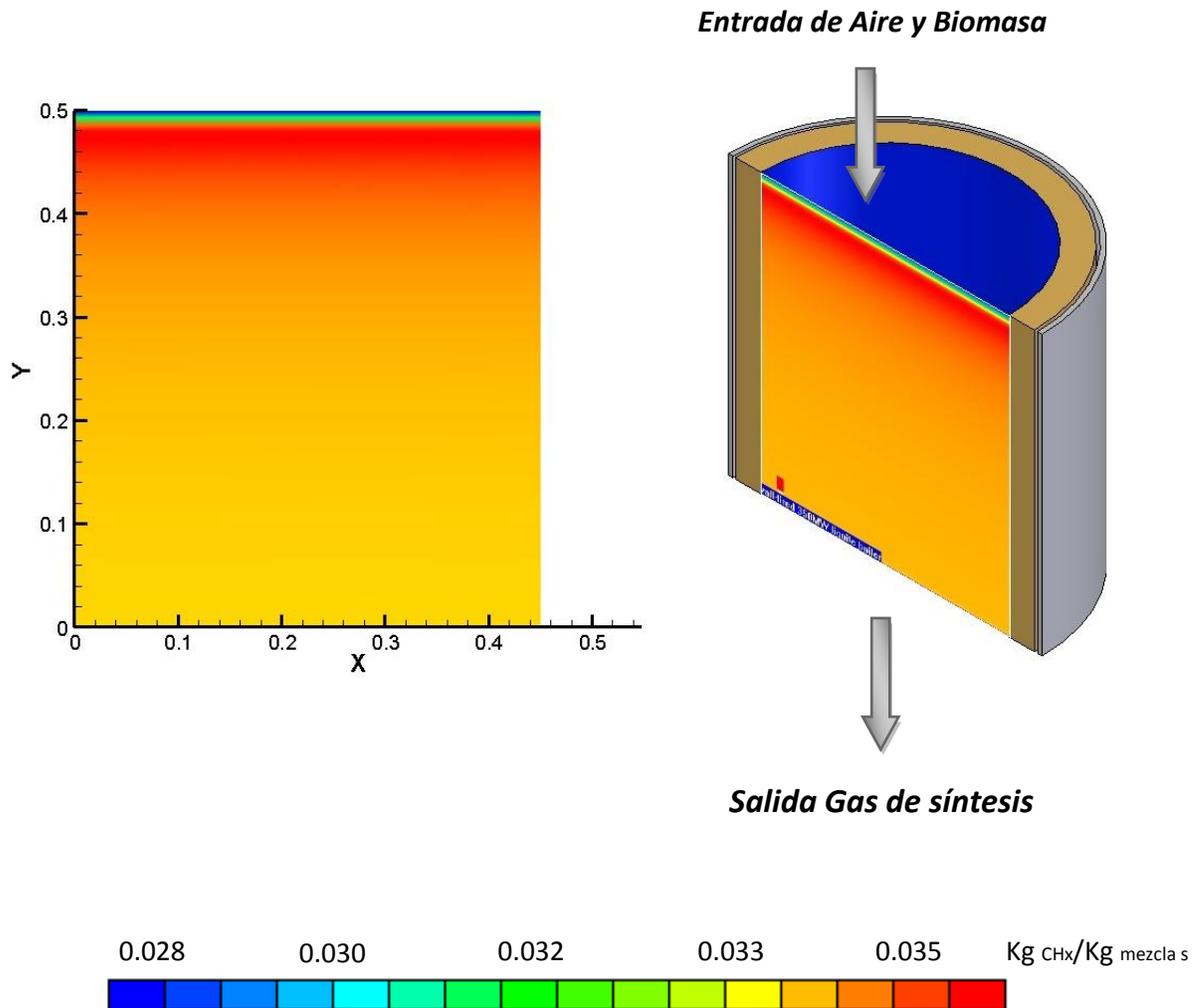


Figura 11. Contornos de CH₄.

5.5.6. Bióxido de carbono CO₂

El bióxido de carbono es la especie química menos deseada en el proceso de gasificación, por ello se busca disminuir su contenido dentro de la mezcla de gases, ya que reduce el valor del poder calorífico del gas de síntesis. La figura 12 muestra los contornos de bióxido de carbono (CO₂). En ella se puede observar que dicha formación de CO₂ aumenta conforme el gas fluye a través del reactor hasta llegar a un valor máximo en fracción masa de aproximadamente 0.02269%, el cual es un valor menor comparado con el valor que presenta el trabajo de Diblasi, como se verá más adelante. El CO₂ se genera principalmente por la combustión del CO. El CO reacciona con el aire para generar CO₂, por lo tanto, la generación de CO₂ está ligada a la generación de CO, por lo que cuando comienza la producción de CO también comienza, en menor medida, la producción de CO₂.

Así que, conforme crece la producción de CO, crece la producción CO₂ también, esto si la cantidad de oxígeno en el aire lo permite. Por lo anterior, de la figura 12 se puede concluir que la combustión del carbonizado, que se lleva a cabo en la parte superior del reactor, genera paulatinamente CO conforme se consume, y a su vez el CO comienza a reaccionar con el oxidante produciendo CO₂, que alcanza los valores, en dicha zona, de 0.0% hasta 1.16% en fracción masa. Posteriormente, se sigue incrementando la formación de CO₂ conforme se incremente la generación de CO, esto si las condiciones estequiométricas lo permiten.

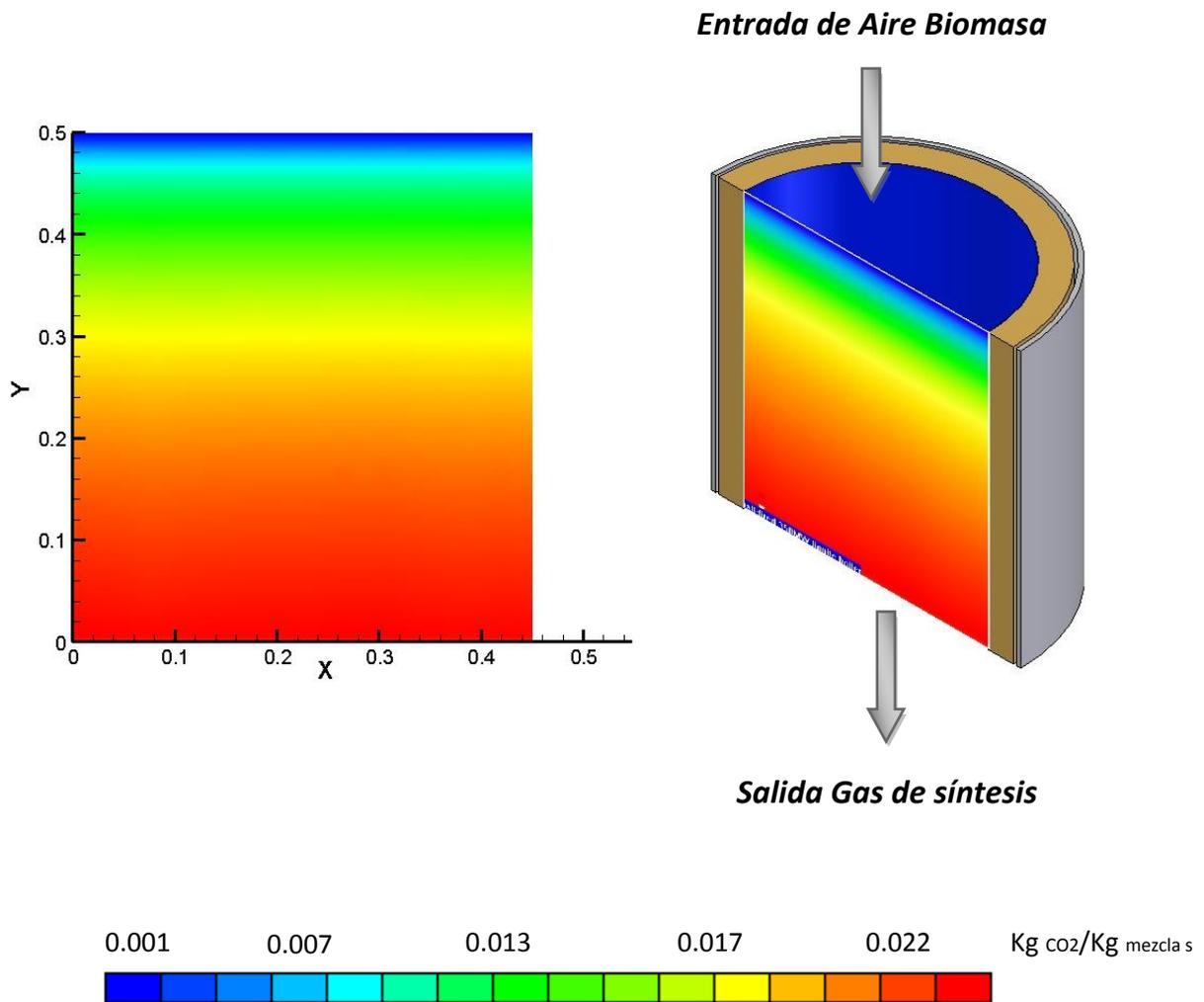


Figura 12. Contornos de CO₂.

5.5.7. Hidrógeno H₂

La figura 13 muestra los contornos de hidrógeno generado durante el proceso de gasificación. De esta figura se observa en dicha figura que la producción de hidrógeno crece conforme el gas se acerca a la salida. La formación de hidrógeno se debe principalmente a las reacciones heterogéneas. La reacción heterogénea del carbonizado con el agua, produce el hidrógeno registrado en este trabajo. En general, la cantidad de H₂ dentro de la mezcla es baja. Esto se debe a la también baja producción de H₂O, ya que la producción de H₂ está ligada a la generación de H₂O. Aunada a esta baja producción de H₂O también se debe de considerar la oxidación del H₂ generado. Todo esto genera una producción de H₂ baja.

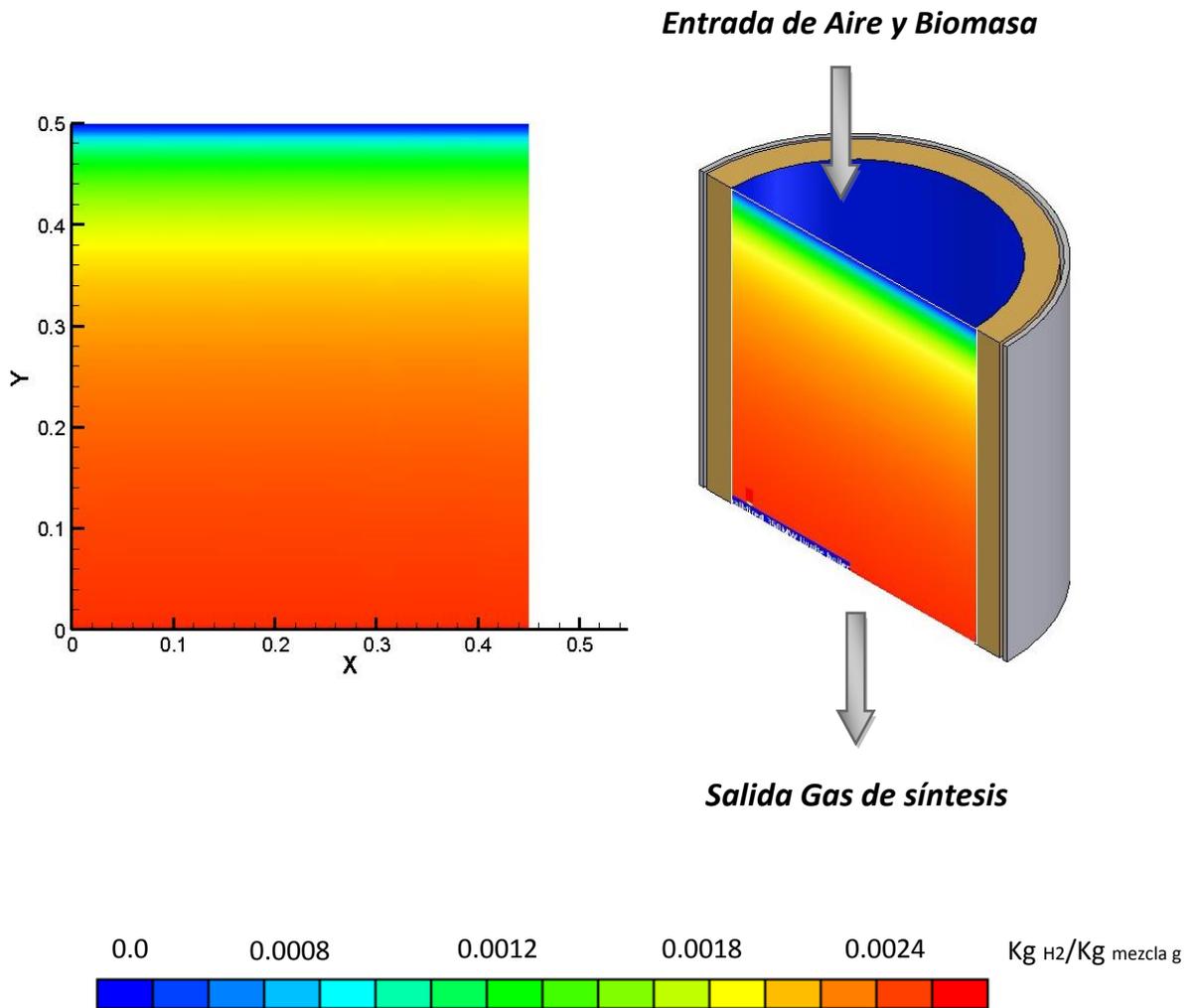


Figura 13. Contornos de H₂.

5.5.7. Oxígeno O₂

La figura 14 muestra los contornos de oxígeno; En ésta se puede observar que el oxígeno se consume paulatinamente, conforme los proceso de oxidación se llevan a cabo. Dado que el proceso de pirolisis se lleva a cabo en ausencia de oxígeno, la concentración de éste es mayor en la parte superior del reactor que en cualquier otra zona. Además, se puede observar en la figura 14 que durante la combustión del carbonizado se presenta el mayor consumo de oxidante (esto se observa en la parte superior del reactor) cuyo valor desciende de 14.09% a 6.25%, en fracción masa. El resto del oxidante es consumido por las reacciones exotérmicas restantes, hasta llegar a consumirse casi por completo. La combustión genera energía calorífica, la cual es necesaria para que se lleve a cabo la gasificación del carbonizado. Por lo que el proceso de combustión está ligado al proceso de gasificación y los dos se llevan a cabo de manera simultánea.

En el proceso de combustión, la reacción con el nitrógeno no se considera influyente en la generación del gas de síntesis, por lo que el nitrógeno contenido en el aire se considera inerte en la reacción.

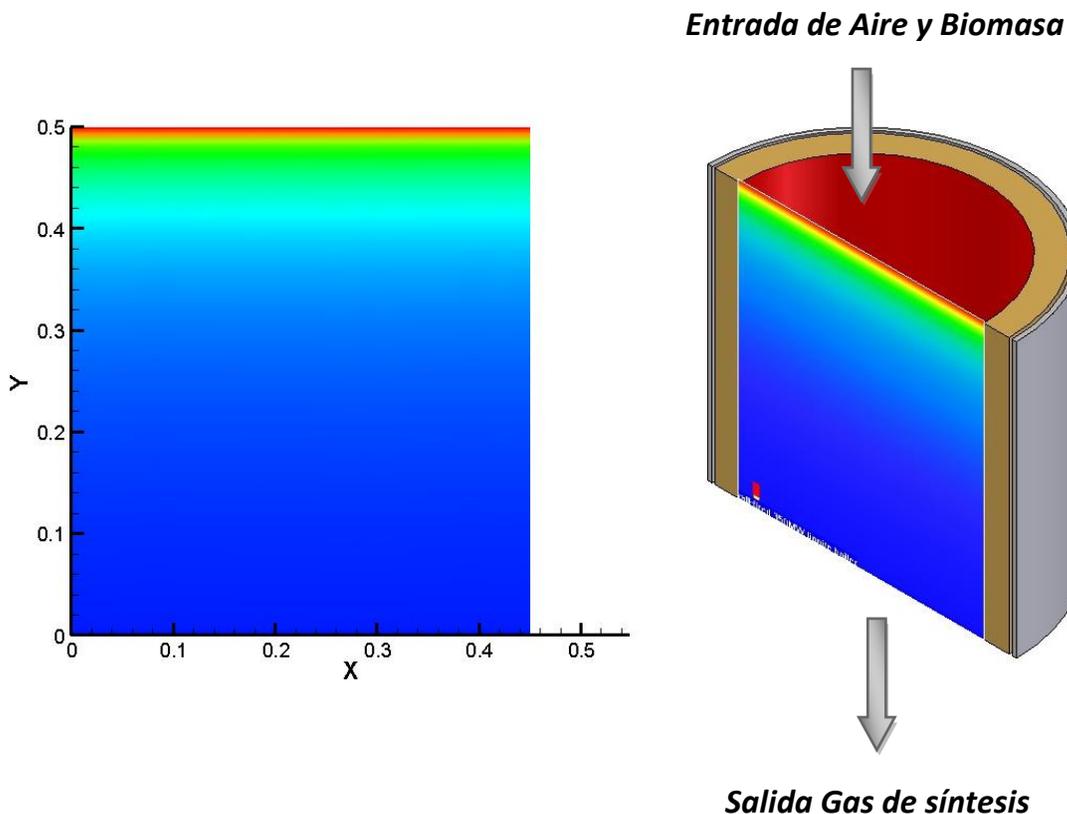




Figura 14. Contornos de O₂.

5.5.8. Vapor de agua H₂O

La producción de vapor de agua se debe principalmente a las reacciones de combustión del alquitrán y del metano. Durante el proceso de pirolisis se produce alquitrán, carbonizado y volátiles (metano). Tan pronto el alquitrán (tar) entra en contacto con el oxígeno, este comienza a reaccionar, generando CO y H₂O, hasta que se consume en su totalidad. De manera simultánea, el metano, producido en el mismo proceso de pirolisis comienza a oxidarse, generando CO y H₂O en menor cantidad. La figura 15 muestra los contornos de H₂O a lo largo del reactor. En dicha figura se observa que la cantidad de vapor de agua contenida en la mezcla va disminuyendo conforme el flujo se dirige a la salida del reactor, después de alcanzar su máximo valor en la parte superior, lugar del frente de reacción. Los valores máximos de producción se localizan en la parte superior del reactor, dado que ahí es donde se lleva a cabo la combustión del alquitrán y del metano. Posteriormente, prosigue una pequeña disminución en la cantidad de H₂O en la mezcla, esto debido a que una cierta proporción del gas (alrededor de 2.0% en fracción masa) reacciona con el carbonizado para producir hidrógeno.

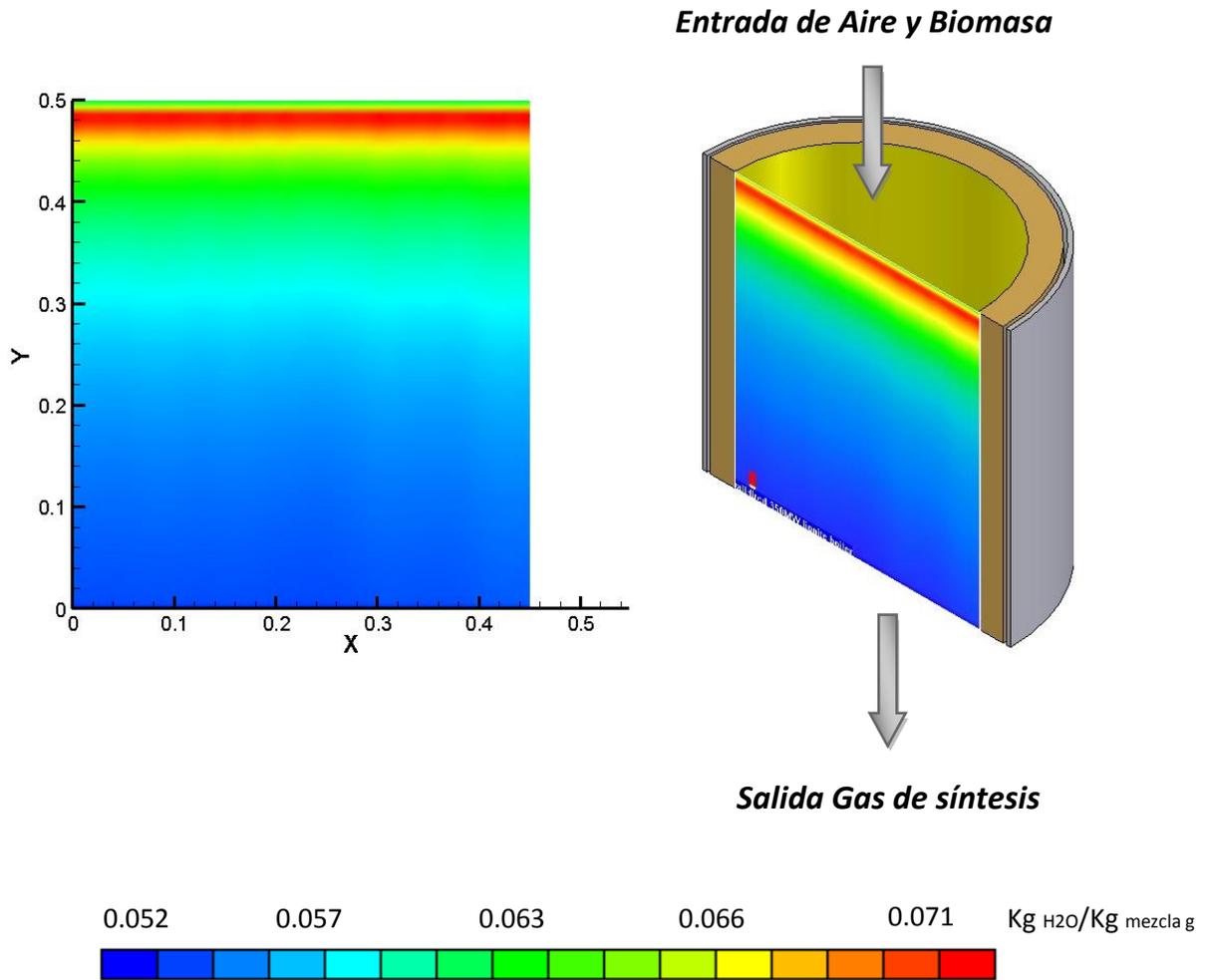


Figura 15. Contornos de H₂O.

5.5.9. Contornos de la fase sólida

La fase sólida está compuesta por el carbonizado (char), el alquitrán (tar), la ceniza (ash) y la humedad (wat). Los compuestos de la fase sólida, excepto la ceniza, se consumen en su totalidad a su paso por el reactor para generar los componentes de la mezcla gaseosa. La humedad contenida dentro de la partícula se evapora gracias a la temperatura inicial de los flujos de entrada y contribuye a la formación de vapor de agua dentro de la mezcla de gases. El alquitrán se genera durante el proceso de pirolisis y contribuye a la formación de CO y CH₄. El carbonizado es otro producto formado durante el proceso de pirolisis y es el componente más importante dentro de la fase sólida, ya que este proporciona la cantidad de energía necesaria para llevarse a cabo el proceso de gasificación. La

ceniza representa el porcentaje de la fase sólida que ha sido consumida durante los procesos termoquímicos de la gasificación.

A continuación, la descripción de cada componente de la fase sólida es presentada.

5.5.10. Carbonizado (CHAR)

El carbonizado (char) es un producto del proceso de pirolisis y representa, principalmente, la cantidad de carbono contenido en el combustible, en este caso, el carbono contenido en la biomasa. El char es un compuesto importante, ya que el poder calorífico del gas de síntesis depende de su porcentaje en masa contenido en el combustible.

La figura 16 presenta los contornos de carbonizado a lo largo del reactor. En ella se puede observar que el carbonizado (char) es consumido en su totalidad por las reacciones heterogéneas, lo cual indica que el proceso de gasificación fue completo. Durante el proceso de pirolisis se produce el carbonizado (char) y dicho proceso se lleva a cabo en la parte superior del reactor, por lo que en esta zona, se debe presentar la mayor cantidad de char generado en la fase sólida. Posteriormente, durante gasificación se consumirá en su totalidad. El carbonizado forma principalmente CO, durante su combustión y en menor cantidad CH₄ y H₂, durante su gasificación.

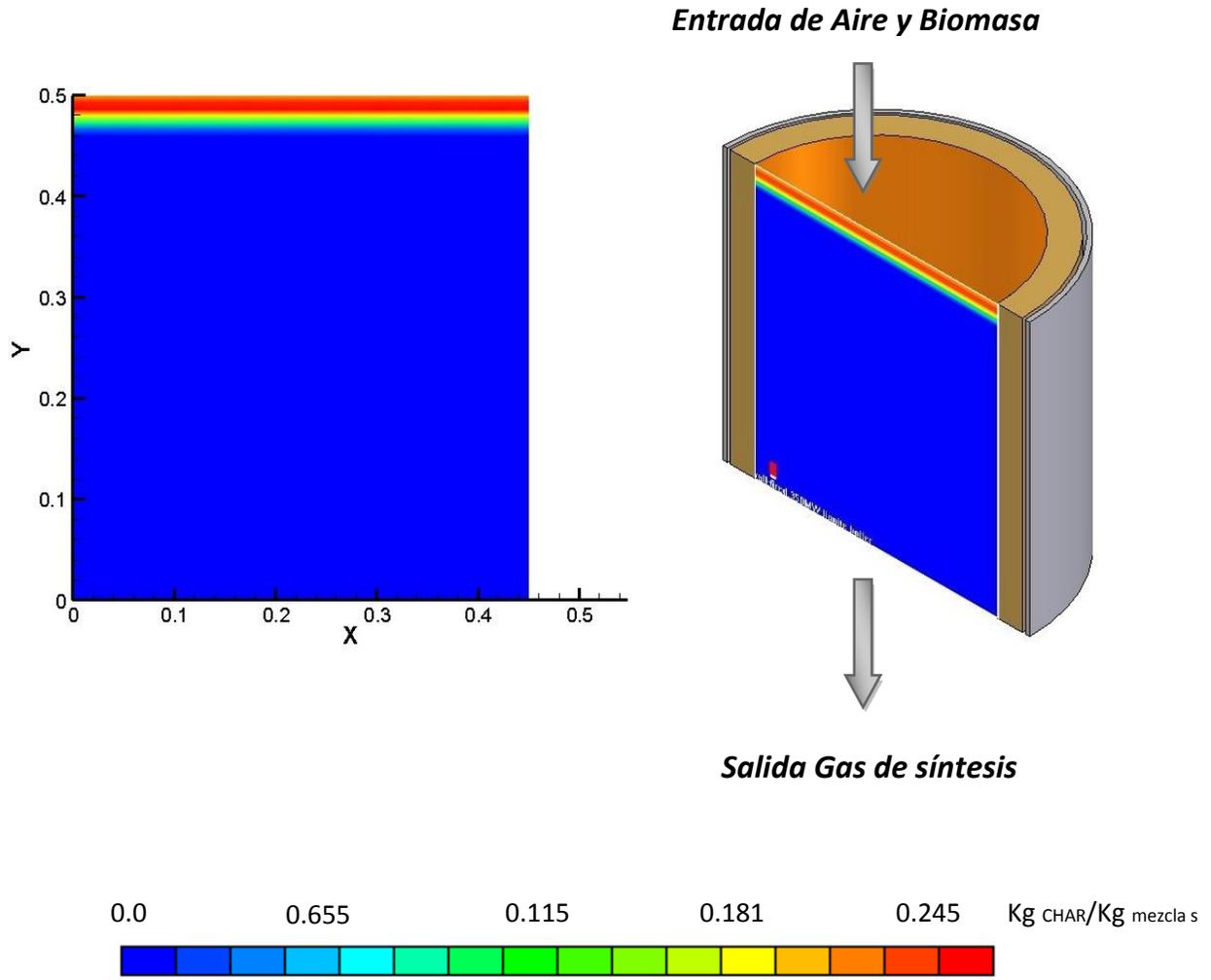


Figura 16. Contornos de CHAR.

5.5.11. Cenizas (ASH)

Los contornos de ceniza (ash) contenida en la fase sólida de la figura 17 muestran que a la salida del reactor tenemos un 100% de ceniza, lo cual significa que la biomasa fue consumida en su totalidad por el proceso global de gasificación.

Conforme el carbonizado se va consumiendo, las cenizas se van produciendo, por lo que, cuando el carbonizado es consumido en su totalidad, la fase sólida estará representada únicamente por cenizas. Por todo lo anterior, se puede establecer que la figura 17 está estrechamente relacionada con la figura 16, la cual muestra

la producción de char a lo largo del reactor, ya que la formación de ceniza depende de la cantidad de char consumido. Por lo tanto, en la región donde el char es consumido en su totalidad, la cantidad de ceniza debe llegar al cien por ciento, lo cual se puede verificar en estas figuras.

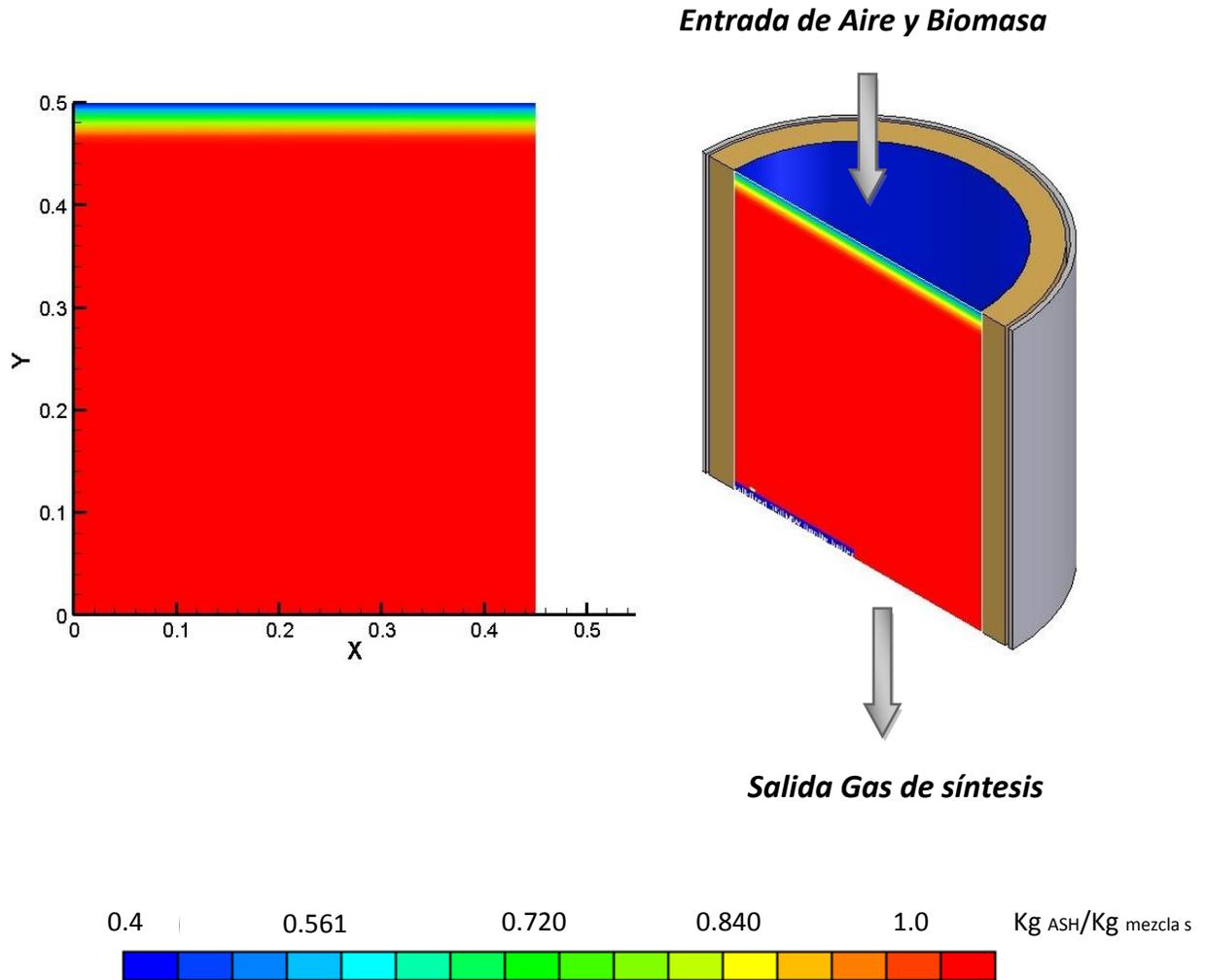


Figura 17. Contornos de Ceniza ASH.

5.5.12. Alquitrán (TAR)

Los contornos de la figura 18 muestran los valores de alquitrán a lo largo del reactor. En dicha figura se puede observar como el alquitrán es generado durante el proceso de pirolisis, el cual se lleva a cabo en la zona superior del reactor, y

posteriormente es consumido en su totalidad al reaccionar con el oxígeno, generando CO y CH₄.

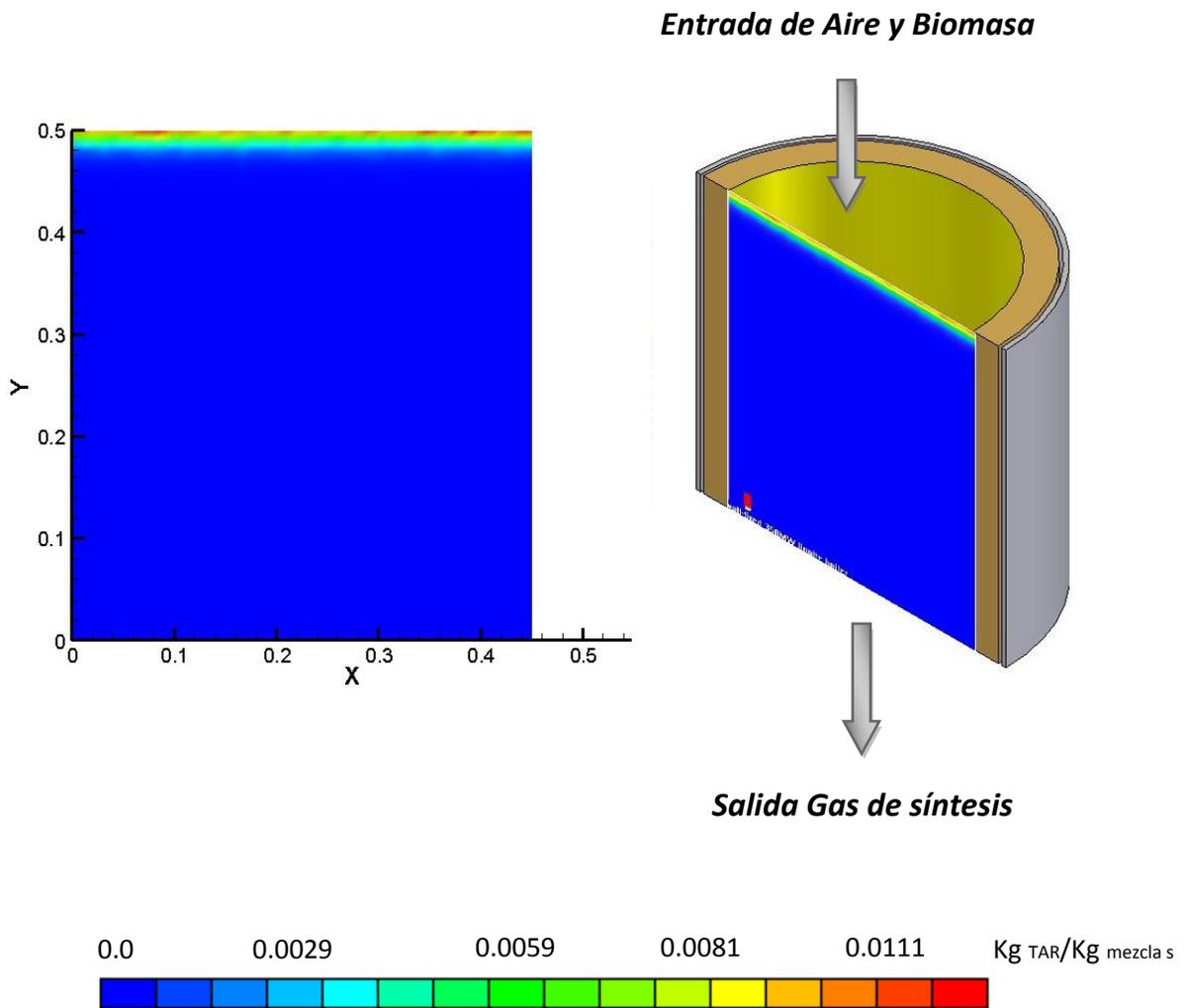


Figura 18. Contornos de Alquitrán TAR.

5.5.13. Tamaño de partícula

La figura 19 ilustra los cambios que va experimentando la partícula de biomasa durante el proceso global de gasificación. Se puede observar la evolución de la partícula desde su entrada al reactor hasta la salida.

Los cambios más significativos en el tamaño de la partícula ocurren durante las reacciones heterogéneas entre el carbonizado y la fase gaseosa, y durante la combustión del carbonizado al entrar en contacto con el oxígeno.

El esquema muestra cómo va disminuyendo de tamaño la partícula, desde un valor inicial de 0.00005m hasta un valor de 0.000011m, debido principalmente a las reacciones heterogéneas de gasificación y a la reacción exotérmica de combustión del carbonizado, en donde se da el fenómeno transferencia de masa entre la fase sólida y la fase gaseosa.

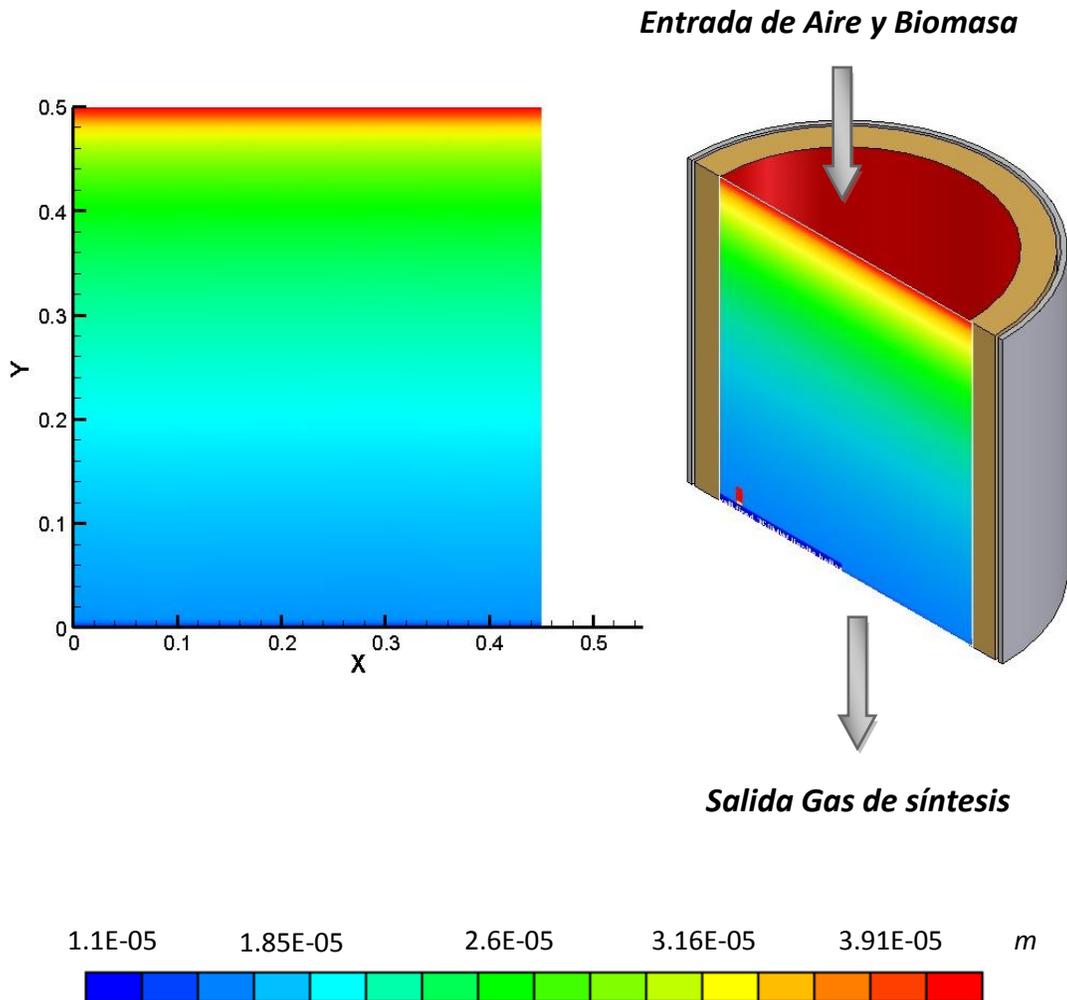


Figura 19. Contornos de tamaño de partícula.

5.6. Validación y verificación de resultados

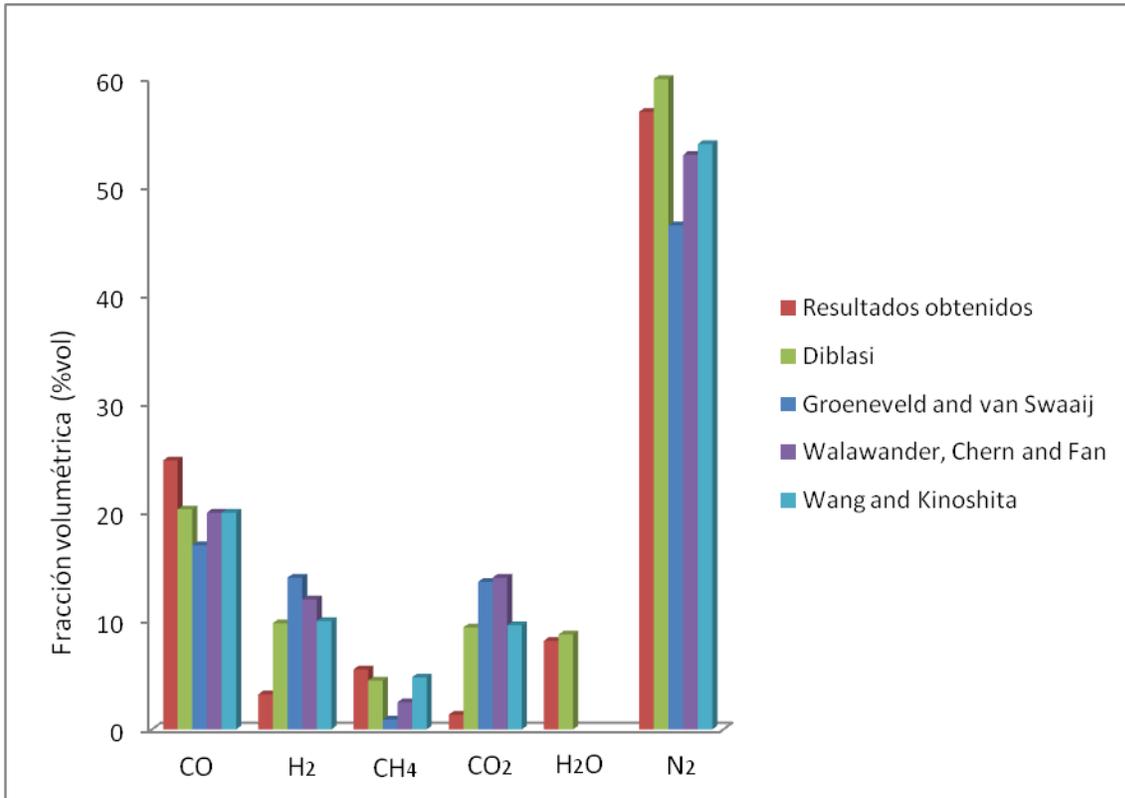


Figura 20. Comparación de los resultados obtenidos en esta simulación numérica y los resultados registrados en la literatura correspondiente.

Tabla 4. Porcentaje en volumen de cada especie química presente en el gas de síntesis según algunos trabajos encontrados en la literatura.

Facción volumétrica	Este Estudio (num)	Diblasi (num)	Groeneveld and Swaaij (exp)	Walawander, Chern and Fan (exp)	Wang and Kinoshita (exp)
CO	24.8	20.3	17	20	20
H ₂	3.2	14	14	12	10
CH ₄	5.5	4.5	0.9	2.5	4.8
CO ₂	1.35	9.4	13.6	14	9.6
H ₂ O	8.17	8.75	8	-	-
N ₂	56.98	43	46.5	53	54

En la figura 20, se comparan los valores de cada una de las especies químicas que componen el gas de síntesis obtenido en este trabajo y los valores registrados en la literatura disponible para cada una de estas especies químicas.

Respecto a la figura 20 se pueden establecer los siguientes aspectos:

-Comparando los resultados obtenidos en la presente simulación numérica respecto a los valores registrados en el trabajo de DiBlasi [13], se observa que las concentraciones de CO, H₂O y CH₄ son muy cercanas, esto se debe a que se utilizó un mecanismo similar para modelar el proceso de pirolisis y el proceso de combustión, tanto para reacciones homogéneas gas-gas y como para reacciones heterogéneas gas-sólido. Recordemos que durante los procesos de pirolisis y combustión del carbonizado se obtiene la mayor cantidad de CO y CH₄ que se puede obtener en todo el proceso global y la oxidación del metano aunada a la del alquitrán, producen la mayor cantidad de vapor de agua que puede ser generada en el proceso. Con esto se puede verificar de manera aproximada, los valores predichos de CO, CH₄ y H₂O.

-Las concentraciones de H₂ y CO₂ discrepan un poco dado que DiBlasi modela una reacción adicional entre el CO y el H₂O, en donde los productos de dicha reacción son precisamente CO₂ y H₂, lo cual incrementa los valores contenidos en la mezcla de estas dos especies químicas. La reacción adicional que utiliza DiBlasi es una reacción entre el CO y el H₂O conocida como water-gas shift. Esta reacción se modela por medio de dos reacciones tipo arrhenius, las cuales no son incluidas en el modelo desarrollado, para la simulación numérica realizada en esta tesis, dado los problemas de divergencia que ocasionaba su integración al modelo.

-Los valores de CO, CH₄, y N₂ obtenidos en la actual simulación numérica presentan una gran similitud con los valores registrados en trabajos experimentales respecto a la gasificación de biomasa, con lo cual se puede concluir que los modelos utilizados para representar los procesos de pirolisis, combustión y gasificación del carbonizado, y la combustión homogénea gas-gas son correctos. Con esto, se puede validar los resultados obtenidos de dichos gases.

-La simulación numérica realizada en esta tesis registra una desviación considerable en los valores de H₂ y CO₂ [de cuanto] respecto a los valores registrados en trabajos experimentales similares. Por lo que se puede concluir que la reacción modelada por DiBlasi entre el CO y el H₂O tiene una importante participación en el proceso global, ya que los productos de dicha reacción son CO₂

y H₂, con lo cual se incrementarían los valores de dichas especies químicas en el presente trabajo de tesis.

Por todo lo antes dicho, se puede concluir que los parámetros de operación, tales como las velocidades de entrada de los flujos, las temperaturas iniciales de los flujos de entrada, el tamaño de partícula y el flujo másico de aire/combustible, son de gran importancia para producir un gas de síntesis con mayor riqueza en composición y en poder calorífico. Además, es importante considerar el tipo de gasificador, el tipo agente gasificante y el tipo de combustible que se utilizara en el proceso de gasificación.

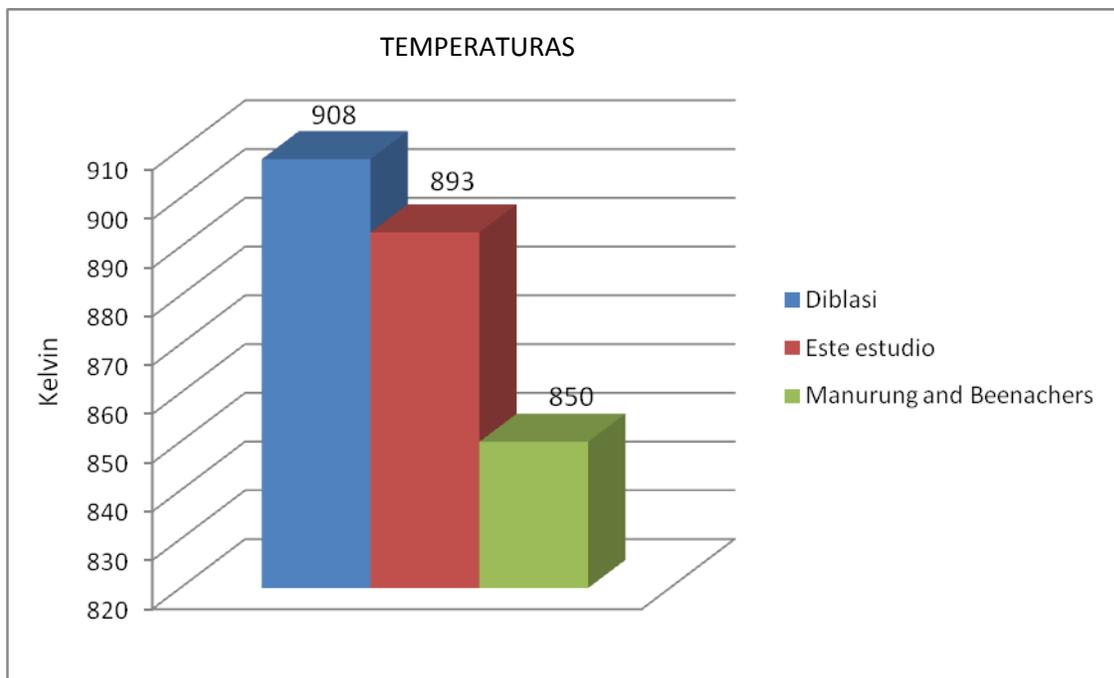


Figura 21. Comparación de temperaturas

La figura 21 muestra los valores de temperatura obtenidos en el presente trabajo de tesis, en el trabajo realizado por Diblasi y en el trabajo experimental realizado por Manurung and Beenackers sobre gasificación de biomasa [15]. En la figura 21 se puede observar que la discrepancia entre los valores de temperatura registrados en los tres trabajos es pequeña. La causa de estas discrepancias entre los valores obtenidos se debe a las pérdidas de calor que pueden existir en el sistema, dado el tipo de gasificador utilizado. Por todo lo anteriormente dicho, se puede establecer que el modelo utilizado en este trabajo de tesis para representar los fenómenos de transferencia de calor entre la fase sólida y la fase gaseosa, es muy aproximado a la realidad. Por otra parte, las constantes cinéticas y los valores

de entalpia utilizados en las reacciones exotérmicas y endotérmicas respectivamente, son adecuados; por lo cual, la temperatura del gas obtenida en este trabajo de tesis es muy cercana a la medida por Manunrung and Beenackers [16] for rice husk gasification y a la calculada por Colomba Diblasi [13] en su trabajo numérico.

5.7. Gráficas comparativas

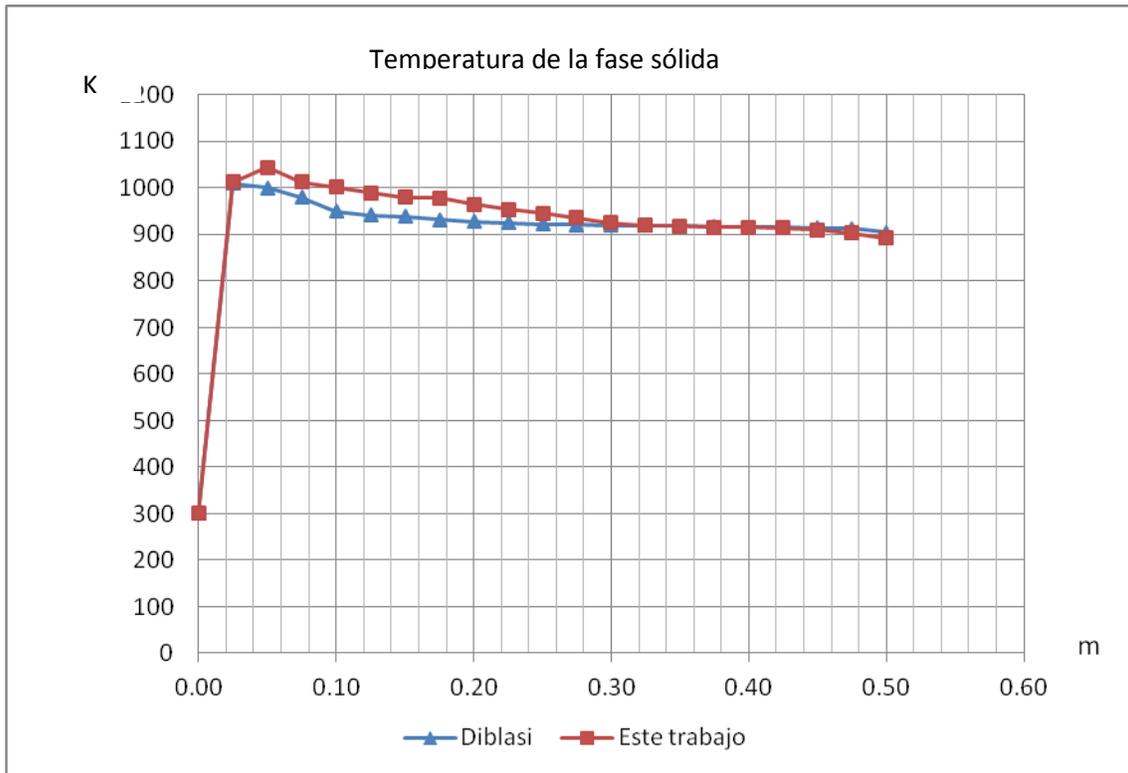


Figura 22. Gráfica de comparación. Temperaturas de la fase sólida

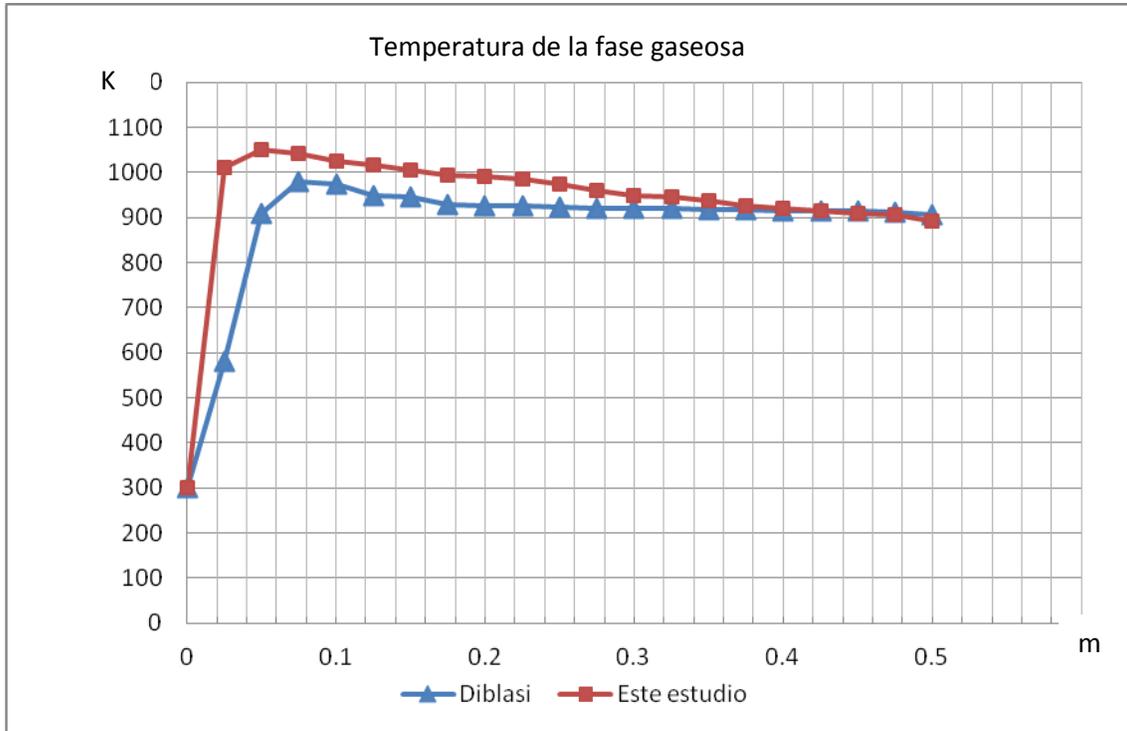


Figura 23. Gráfica de comparación. Temperaturas de la fase gaseosa.

La figura 22 y 23 describe el comportamiento evolutivo de la temperatura en la fase sólida y en la fase gaseosa respectivamente. Comparando los valores registrados en el trabajo sobre gasificación de biomasa de Di Blasi [13] respecto a los datos proporcionados en este trabajo de tesis, se concluye que el gas de síntesis alcanza una mayor temperatura en la zona de combustión y gasificación del carbonizado, lo cual ocurre en la parte superior del reactor. También con estas graficas se pueden verificar los valores de temperatura obtenidos en la presente simulación numérica, con lo cual se puede establecer que la transferencia de calor entre la fase sólida y la fase gaseosa y los procesos de combustión heterogénea y homogénea son modelados de forma adecuada, ya que las temperaturas obtenidas para la fase sólida y para la fase gaseosa presenta un comportamiento semejante a los valores registrados por Diblasí en su trabajo sobre gasificación de biomasa.

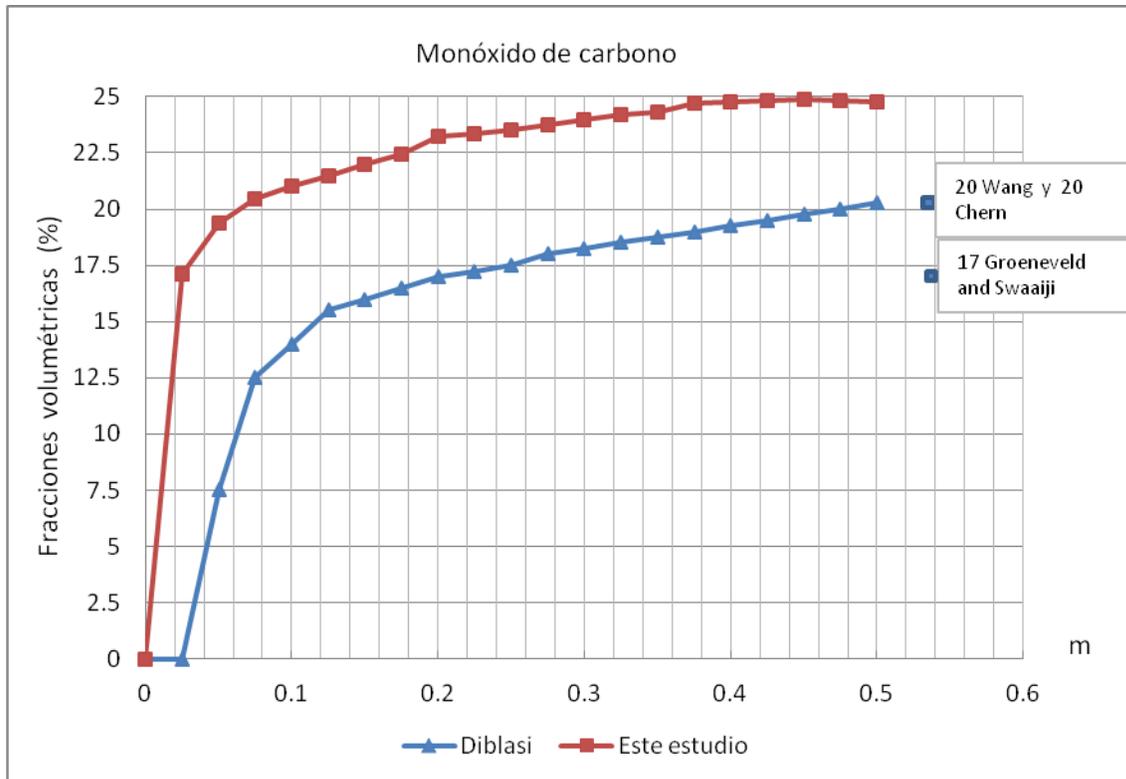


Figura 24. Gráfica de comparación. Valores de CO generado en el proceso de gasificación.

La figura 24 describe la generación de monóxido de carbono obtenido en este trabajo de tesis y el obtenido en el trabajo de Columba Diblasí. Los valores registrados de CO en ambos trabajos mantienen un comportamiento similar y de ellos se puede concluir que en la parte superior del reactor, esto es, 10 cm después de la entrada de los flujos al reactor, se genera la mayor cantidad de CO, que puede ser producido en todo el proceso de gasificación.

Según la gráfica de la figura 24, la discrepancia de los valores registrados de CO en ambos trabajos, es de una pequeña proporción de aproximadamente 4% en su valor. Lo cual se puede deber a la ausencia de la reacción entre el CO y el vapor de agua H₂O implementada por Diblasí, que disminuiría los valores obtenidos de CO y H₂O para dar lugar a un aumento en la generación de CO₂ y H₂.

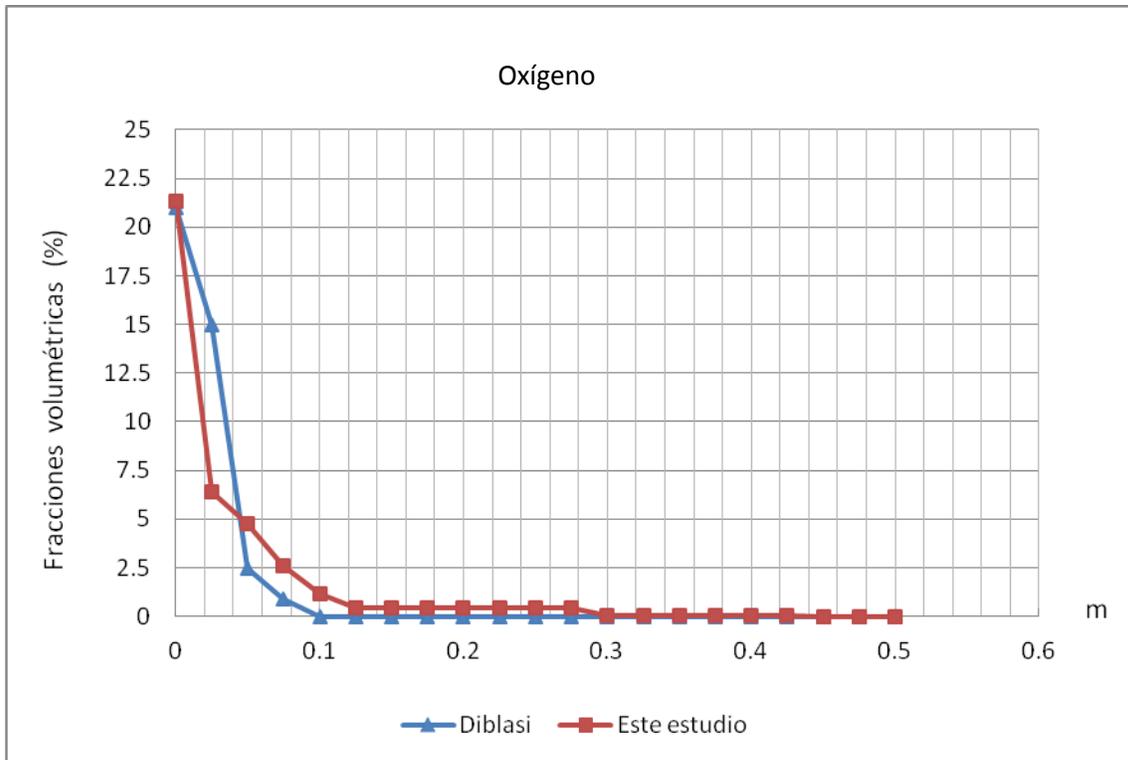


Figura 25. Gráfica de comparación. Valores de O₂ consumido en el proceso de gasificación.

La figura 25 muestra los valores de oxígeno registrados a lo largo del reactor en este trabajo de tesis y en el trabajo realizado por Diblasí. En dicha figura se observa que el oxígeno es consumido en su totalidad por el proceso de combustión. Este mismo comportamiento se presenta en ambos trabajos. Recordemos que los procesos de pirólisis y combustión se modelan de manera semejante tanto en esta simulación numérica como en el trabajo realizado por Diblasí, por lo cual, dicho comportamiento era esperado.

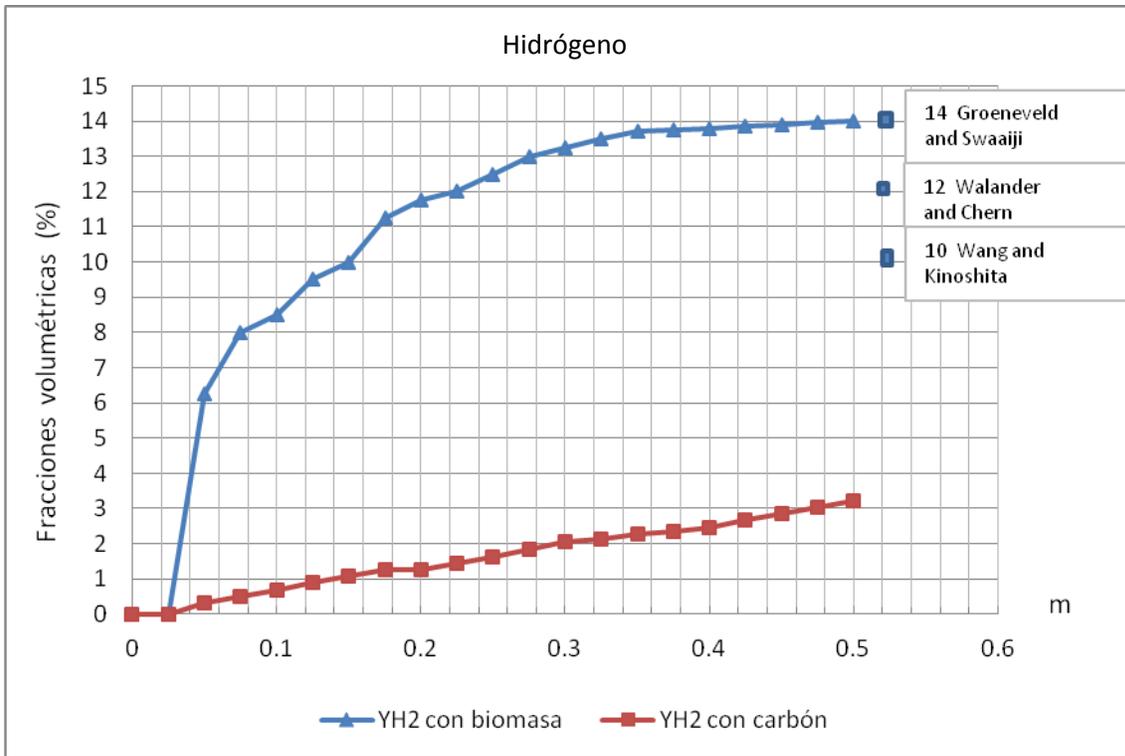


Figura 26. Gráfica de comparación. Valores de H₂ generado en el proceso de gasificación.

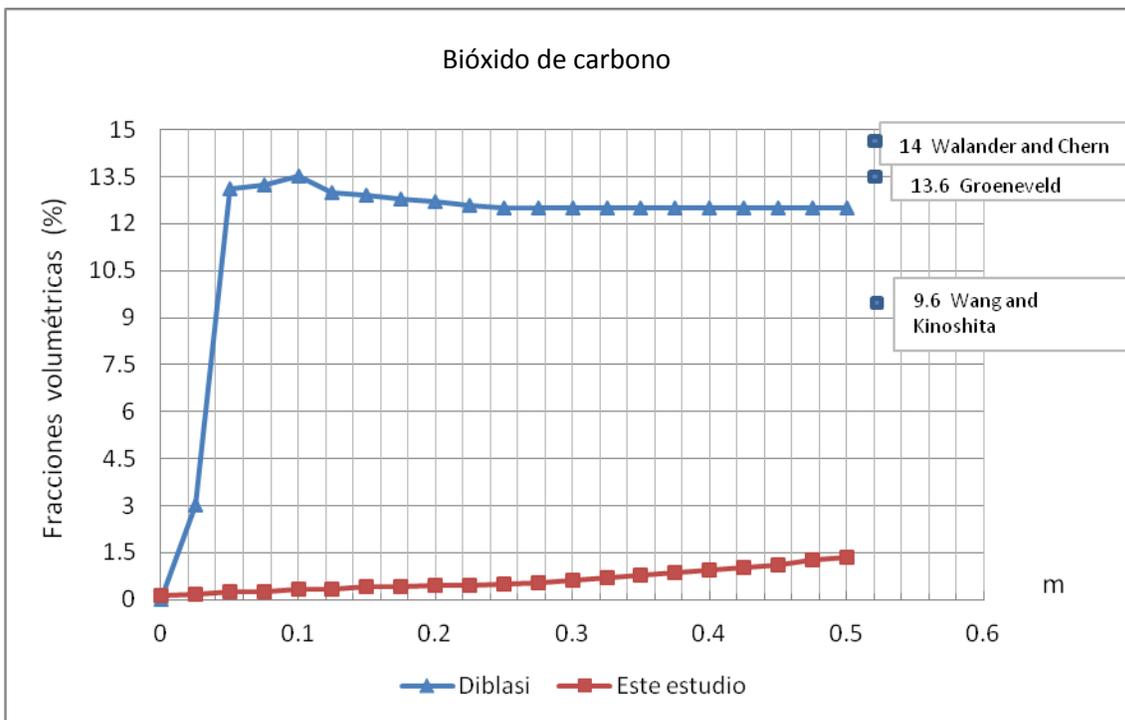


Figura 27. Gráfica de comparación. Valores de CO₂ generado en el proceso de gasificación.

La figura 26 muestra los valores de H₂ obtenidos en este trabajo de tesis y en el trabajo realizado por Columba Diblasi. La figura 27 muestra los valores de CO₂ registrados en ambos trabajos. De dichas figuras se puede observar que los valores de H₂ y CO₂ obtenidos en esta simulación numérica son menores que los valores registrados por Diblasi. Esta discrepancia entre valores se debe principalmente a que no se incluyó dentro del modelo matemático construido, la reacción water-shift entre el CO y H₂O, debido a problemas de divergencia que ocasionaba su manejo. Otra posible razón puede ser que las reacciones cinéticas utilizadas para representar el proceso de combustión del CO y del H₂, no representan de manera correcta, las tasas de producción correspondientes al proceso real.

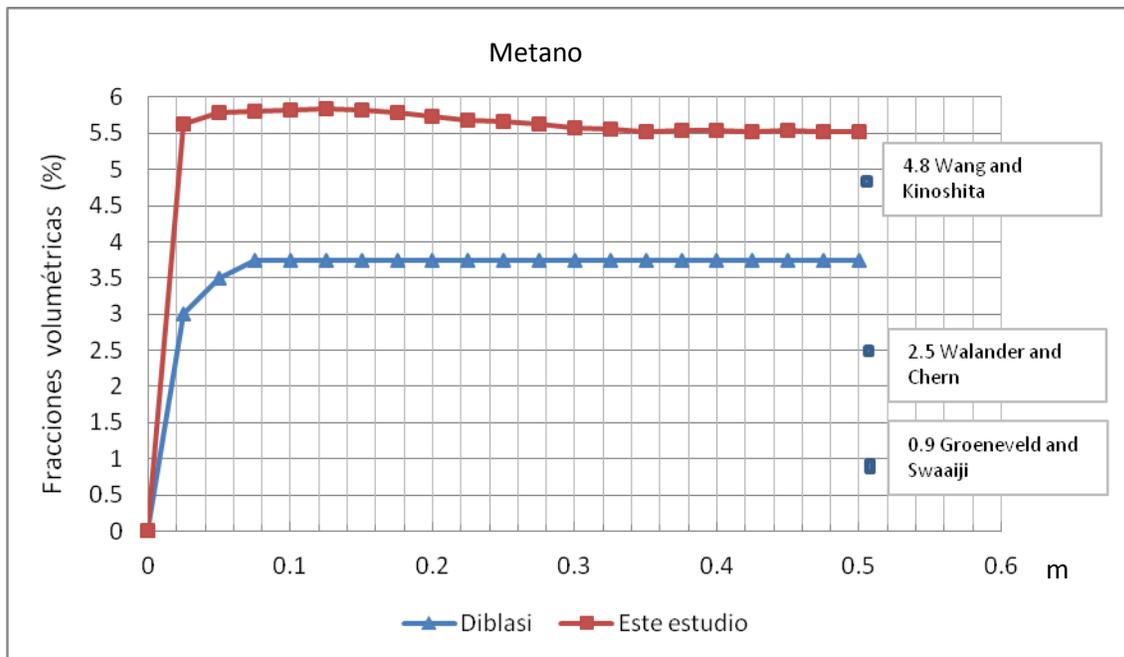


Figura 28. Gráfica de comparación. Valores de CH₄ generado en el proceso de gasificación.

Durante el proceso de pirolisis, se obtiene la mayor producción de metano. Esto se puede corroborar en la grafica de la figura 28, ya que dicha figura nos muestra los valores de metano obtenidos a lo largo del proceso, tanto para este trabajo de tesis como para el trabajo realizado por Diblasi. La grafica muestra como los niveles de metano incrementan de manera inmediata después de la entrada de los flujos al reactor. Según la figura 28, los valores de CH₄ obtenidos en este trabajo y los registrados por Diblasi son muy parecidos, lo cual es un resultado esperado dado que el proceso de pirolisis de modela de manera similar en ambos trabajos.

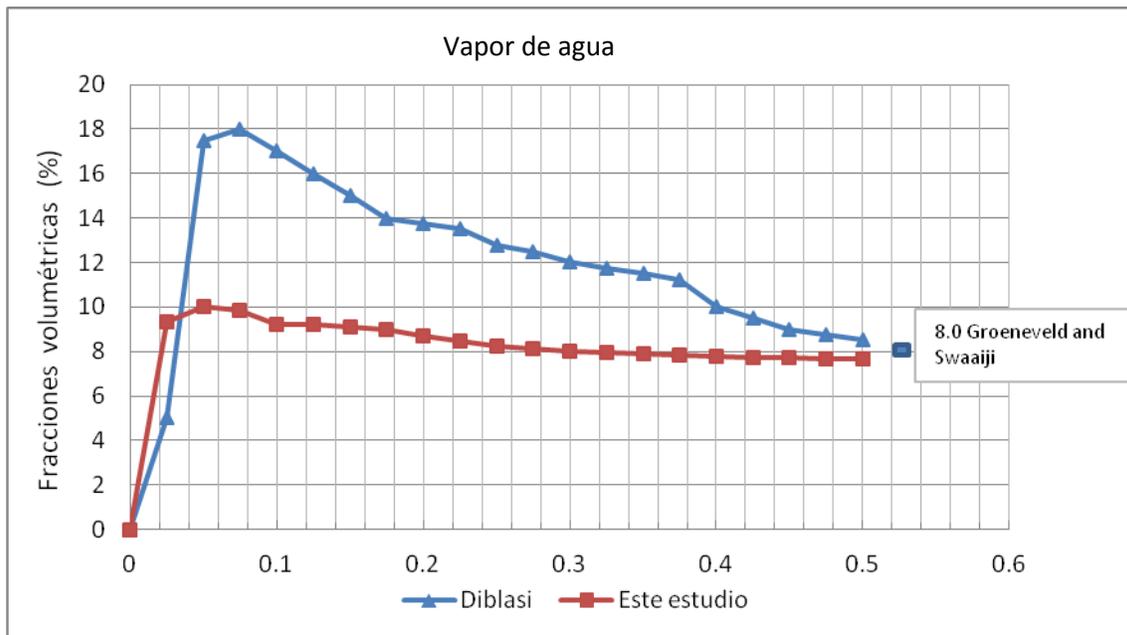


Figura 29. Gráfica de comparación. Valores de H₂O generado en el proceso de gasificación.

Según la gráfica de la figura 29, el vapor de agua mantiene un comportamiento similar a lo largo del reactor en ambos estudios. Se puede observar en dicha gráfica que la mayor producción de H₂O tiene lugar en la parte superior del gasificador. Durante el proceso de secado, la humedad contenida en la partícula de biomasa es transferida a la fase gaseosa, por lo cual este proceso aporta vapor de agua a la mezcla. Además, seguido del proceso de secado se lleva a cabo el proceso de pirolisis, el cual libera una gran cantidad de metano que inmediatamente reaccionará con el oxígeno para formar CO y H₂O, incrementando los niveles de vapor de agua.

En el presente trabajo de tesis, la reacción cinética que modela la oxidación de metano generó una cantidad muy pobre de vapor de agua, por lo cual no se llegó a los valores de H₂O presentados por Diblasi en la zona de combustión y dado que la reacción water shift no fue incluida en el modelo matemático, el agua mantiene un comportamiento casi constante después de la zona de combustión ubicada 10 cm después de la entrada al reactor.

5.8. CONCLUSIONES

El proceso de gasificación es simulado numéricamente mediante un modelo de dinámica de fluido computacional para reproducir, de manera cuantitativa, el comportamiento real de las variables de operación con el objetivo de mejorar el desempeño del proceso de gasificación y así mismo, proporcionar una alternativa de generación de energía calorífica a menor costo y con bajos índices de contaminación, en comparación con la generación de energía utilizando combustibles derivados del petróleo.

De la simulación numérica realizada en este trabajo de tesis se concluye lo siguiente:

-La temperatura del gas aumenta de manera importante en la parte superior del reactor, esto se debe a que los procesos de pirolisis, de combustión del carbonizado y de combustión de los volátiles se llevan a cabo en esta misma zona del reactor (2 a 3cm después de la entrada de los flujos al reactor) y tales procesos son los principales aportadores de energía al sistema ya que dichas reacciones van liberando energía calorífica en diferentes proporciones por lo tanto, conforme las reacciones cinéticas se llevan a cabo, la temperatura del flujo va incrementando; Posteriormente, la temperatura comienza a disminuir su valor dado que las reacciones heterogéneas comienza a llevarse a cabo. Por todo lo anterior se puede concluir que el mayor incremento de temperatura tiene lugar en la zona de combustión, zona superior del reactor.

La temperatura de la fase sólida presenta un comportamiento parecido al de la temperatura de la fase gaseosa, esto se debe al constante intercambio de energía que existe entre las fases.

Los valores de temperatura obtenidos en este trabajo de tesis son validados y verificados, por lo cual se puede concluir que el modelado de los procesos internos de gasificación representan de manera adecuada los balances de energía que se llevan a cabo dentro del reactor en un proceso real.

-Los valores de hidrógeno (H_2) y bióxido de carbono (CO_2) obtenidos en esta simulación numérica son bajos respecto a los valores reportados en la literatura, tanto para trabajos experimentales, como para trabajos numéricos. La causa principal de estos bajos valores de H_2 y CO_2 se debe a la ausencia dentro del modelo matemático construido de la reacción entre el CO y H_2O , la cual, según algunos investigadores, tiene lugar dentro del proceso de gasificación, debido a las escasas de oxígeno dentro del sistema. Por otra parte, el modelado del proceso

de combustión del CO y del H₂, puede no representar de manera correcta las tasas de reacción correspondientes al proceso real.

-Los valores de CO y CH₄ muestran un semejanza con los valores registrados por Diblasi, lo que cual verifica el modelo empleado en esta tesis para representar los procesos de pirolisis y combustión heterogénea del carbonizado, los cuales son los principales responsables de la producción de estos gases.

-La producción de vapor de agua (H₂O) depende principalmente de la cantidad de humedad contenida en la partícula. Dado que el oxígeno dentro del reactor es insuficiente para que se lleve a cabo una reacción de combustión completa, la cantidad de vapor de agua producida durante la oxidación del metano es mínima comparada con la generada en el proceso de secado. También, el hidrogeno producido durante la gasificación del carbonizado se oxida para generar vapor de agua, pero en una mínima proporción.

-El oxígeno es consumido en su totalidad lo cual permite el desarrollo de las reacciones heterogéneas. La combustión que se lleva a cabo en el proceso de gasificación es incompleta, ya que no se utiliza el porcentaje de aire teórico correspondiente para que exista una combustión completa. Debido a la ausencia de oxígeno y a las altas temperaturas en el sistema, los gases reaccionan con el carbonizado que no fue consumido por el oxígeno, esto si las condiciones estequiométricas lo permiten. A estas reacciones se les conoce como reacciones endotérmicas.

-El modelo depende de las características de la biomasa y de las condiciones de operación: gastos máxicos del combustible y del agente gasificante, tamaño de partícula del combustible, temperaturas de entrada, velocidad del flujo.

-La reacción homogénea entre el CO y el H₂O tiene una gran influencia en la producción de CO₂ y H₂ dentro del proceso de gasificación.

-Los modelos cinéticos utilizados en esta simulación numérica para interpretar los procesos químicos de pirolisis, combustión heterogénea y combustión homogénea, representaron de buena manera los fenómenos ocurridos durante el proceso global de gasificación, esto según la comparación hecha con datos registrados en la literatura correspondiente.

-Conforme se llevan a cabo las reacciones heterogéneas, la partícula de biomasa disminuye su tamaño.

-El fenómeno de secado se lleva a cabo de manera muy rápida, probablemente como consecuencia del modelo muy simplificado que se utiliza para representar dicho fenómeno.

-Los procesos de pirolisis y combustión homogénea e heterogénea, se desarrollan de manera simultáneamente en la parte superior del reactor, presentando grandes tasas de reacción, a una distancia de 0.15m respecto a la entrada del reactor.

-Entre los productos obtenidos en el proceso gasificación, la especie química más abundante fue el monóxido de carbono, seguida por el metano y el vapor de agua.

-La reacción cinética que modela la oxidación de metano genero una cantidad muy pobre de vapor de agua, por lo cual esta reacción debe ser corregida, para poder así elevar los índices de producción de vapor de agua debido a la oxidación del metano.

5.9. TRABAJOS A FUTURO

Como trabajos a futuro se tiene lo siguiente:

-Incluir en el modelo matemático la reacción de water-shift entre el monóxido de carbono y el vapor de agua, ya que se estableció que tiene un peso importante dentro del proceso de gasificación

-Implementar el modelo matemático construido a distintas configuraciones de gasificadores.

-Analizar de la relación de aire-combustible dentro del proceso de gasificación, así como la influencia de otros parámetros como el tamaño de partícula y composición de la biomasa.

APÉNDICE “Esquemas de discretización”

En este apéndice se presentan los esquemas lineales que se usan en la discretización del término convectivo de la ecuación general de transporte, mostrada en el capítulo 4.

En la formulación de la ecuación discretizada (50), se requiere conocer la densidad ρ y la variable escalar ϕ en la cara de la celda. Estas variables se calculan en el nodo de la celda, por lo que es necesario interpolar entre celdas para conocer su valor en la cara. De tal modo que el cálculo de ρ y ϕ en la cara de la celda da lugar a los llamados esquemas de discretización. La determinación de los valores de estas variables en la cara es importante para la precisión y convergencia de la solución numérica.

Esquemas lineales

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

Estos esquemas se describirán en base al sistema de celdas que se ilustra en la figura 4. Como ejemplo, se obtendrá el valor de ϕ en la cara e de la celda P. La velocidad en la cara e se considerará, positiva ($u_e > 0$).

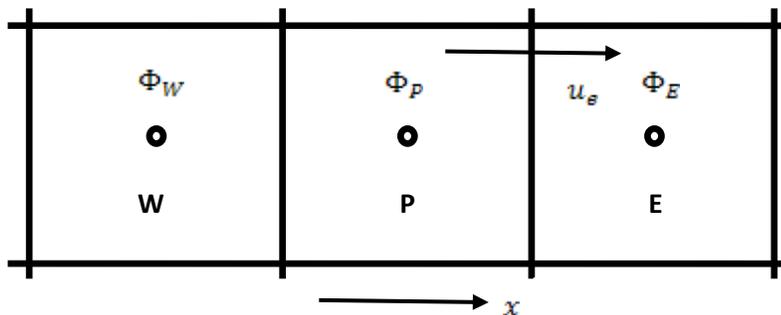


Figura 4. Diagrama esquemático de celdas.

-Diferencias desplazadas de primer orden

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

$$\phi_e = \phi_P$$

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

-Diferencias centradas

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

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

Este esquema tiene una precisión de segundo orden, pero tiene el inconveniente de no estar acotado, por lo que puede presentar inestabilidades numéricas. El límite de estabilidad de este esquema viene dado en función del número de Peclet dado en la ecuación (54) del capítulo 4, que es un parámetro comparativo entre los procesos convectivo y difusivo.

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

-Híbrido

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

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

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

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

$$\phi_g = \phi_P$$

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

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

APÉNDICE “Modelos de combustión”

En este apéndice se aborda el problema de cierre de la ecuación de transporte de la fracción másica asociado a la reacción química de la ecuación (2) del apéndice de promediado de ecuaciones, así como algunas de las aproximaciones propuestas para describir la reacción química en el flujo laminar y turbulento.

En la ecuación de transporte (2) aparece como último término, el valor medio de la tasa de reacción \bar{S}_α , para la especie α . La modelización de esta tasa de reacción media es una de las principales dificultades que se presentan en la simulación de flujos turbulentos reactivos. Esto se debe al efecto que tienen las fluctuaciones turbulentas en la tasa de reacción media. La tasa de reacción química es altamente no lineal, por lo que su media no puede ser calculada simplemente a partir de las variables medias, que son los resultados que se obtienen del modelo. Matemáticamente:

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

En el modelado del término de reacción química es conveniente referirse a dos casos extremos que limitan el rango de situaciones posibles, que son las hipótesis de reacciones infinitamente rápidas o muy lentas.

Estas hipótesis se hacen a partir de comparaciones entre los tiempos característicos de la cinética química t_q y de una escala de tiempos de turbulencia (por ejemplo la escala integral, t_l). El número de Damköhler es la relación entre estos tiempos:

$$Da = \frac{t_l}{t_q}$$

La hipótesis de química rápida implica que $t_q \ll t_l$ ó $Da \gg 1$ y la hipótesis de química lenta implica $t_q \gg t_l$ ó $Da \ll 1$.

Si se supone que la cinética química es infinitamente rápida ($Da \gg 1$), se puede considerar que la reacción ocurre en una capa delgada, que sufre convección, además de ser alabeada, y estirada o comprimida por la turbulencia, pero cuya

estructura interna no es afectada por ella. Este tipo de hipótesis han dado lugar al desarrollo de modelos de tipo “mixed is burned” y de “laminar flamelet”. Los primeros ignoran totalmente la cinética química, mientras que los segundos consideran que dentro de la zona de reacción el flujo es laminar. Un modelo del tipo “mixed is burned”, utilizado frecuentemente en la simulación de flujos industriales de llamas premezcladas, supone que la reacción química procede al paso dictado por la mezcla de reactantes a nivel molecular. Dando lugar a los modelos de combustión de la familia Eddy Break Up (EBU).

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

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

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

Modelo Eddy Break Up

En llamas premezcladas con química rápida, el término de reacción química \bar{S}_α , se modela frecuentemente mediante el modelo llamada Eddy Break Up (EBU). Este modelo, propuesto inicialmente por Spalding y después modificado por varios autores, supone que el factor limitante en la tasa de reacción química no es la velocidad cinética, sino la velocidad a la que los reactantes se mezclan a nivel molecular. Esta velocidad de mezcla se puede representar mediante un término proporcional a la velocidad de disipación de las fluctuaciones del escalar, a menudo modelada como:

$$\bar{S}_c = -C_{EBU} \bar{\rho} \frac{\tilde{\epsilon}}{\bar{k}} \sqrt{\tilde{Y}_c''^2}$$

Donde C_{EBU} es una constante y $\tilde{Y}_c''^2$ es la varianza de Fravre de la fracción másica del combustible. Para escalares pasivos, esta varianza puede modelarse mediante una ecuación de transporte; Para escalares reactivos, el término de reacción

química da lugar a correlaciones no cerradas, difíciles de modelar y que en combustión turbulenta pueden ser importante.

Magnussen propone evitar este problema sustituyendo $\sqrt{Y_c''^2}$ por la fracción másica media de la especie química con menor presencia:

$$\bar{S}_c = -C_{EBU} \bar{\rho} \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}} \min \left(\tilde{Y}_c, \frac{\tilde{Y}_o}{s}, \frac{\tilde{Y}_p}{1+s} \right)$$

Donde s es el coeficiente estequiométrico y los subíndices c , o , y p se refieren al combustible, oxidante y productos respectivamente. El coeficiente estequiométrico es la masa de oxidante por unidad de combustible que se necesita para la reacción completa. La presencia de los términos mínimos en la función asegura que la velocidad de reacción es nula cuando alguno de los reactantes no está en proporciones suficientes para la reacción. La presencia de y_p representa, en reacciones exotérmicas, la existencia de altas temperaturas (presencia de productos calientes), necesarias para la reacción; es por tanto, una forma indirecta de limitar la reacción cuando la velocidad cinética es inferior a la velocidad de mezcla.

La ausencia (o presencia de forma muy simplificada) de efectos cinéticos hacen el uso de este modelo desaconsejable cuando dichos efectos son relevantes, por ejemplo, en la formación o destrucción de contaminantes, o en fenómenos de ignición o extinción de llama.

Modelos de Flamelet

Los modelos de "flamelet" describen al flujo turbulento reactivo como un conjunto de elementos de llama laminar denominados "flamelets". Estos elementos son transportados por convección y distorsionados por el movimiento turbulento pero conservan su estructura de llama laminar. En los modelos "flamelet" se supone que la reacción tiene lugar en una capa muy estrecha ($Da \gg 1$) y la tasa de consumo del combustible (masa de combustible quemado por unidad de tiempo y volumen) se expresa como:

$$\bar{S}_c = \omega_F \sum \quad \text{donde: } \omega_F = \rho_o Y_c U_F$$

Donde ρ_o es la densidad de los gases frescos, Y_c es la fracción másica del combustible de los gases frescos, Σ es la densidad de superficie de la llama (superficie de la llama por unidad de volumen) y U_F es la velocidad de llama laminar.

La densidad de superficie de llama necesita ser modelada, lo cual deriva en varios grados de complejidad en los modelos “flamelet”. De forma general, e supone una ecuación de transporte de la forma:

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial t} + \frac{\partial(u_i \Sigma)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_T}{S_{c_T}} \frac{\partial \Sigma}{\partial x_i} \right) + P_\Sigma - D_\Sigma$$

Donde S_{c_T} es el número de Schmidt turbulento, P_Σ es el término de producción de superficie de la llama que describe el incremento del área de la llama debido a la relación de deformación local y D_Σ representa la disipación de superficie de la llama debida a la interacción mutua de los elementos adyacentes de la llama. Los términos P_Σ y D_Σ requieren modelización. Algunos modelos pueden ser encontrados en la literatura de Duclos et al [44].

Mecanismos reducidos

La combustión de incluso los hidrocarburos más sencillos, como el metano, tiene lugar a través de un gran número de reacciones y de especies. En la combustión del metano en aire, el mecanismo real tiene aproximadamente 279 reacciones y 49 especies si se incluye la formación de NOx. El conjunto de estas reacciones reales y especies que participan en el sistema químico se conoce como mecanismo detallado de la reacción.

La inclusión de un mecanismo detallado en cálculos de geometrías multidimensionales requiere una gran cantidad de memoria y tiempo de cálculo. Estos requerimientos computacionales se deben no sólo a la dimensionalidad del sistema (en términos de especies), sino a su “stiffness”, asociada a la presencia de escalas temporales muy dispares ligadas a las diversas velocidades de reacción.

Para disminuir el número de especies (y a la vez reducir la “stiffness” del sistema), es práctica habitual reducir el sistema químico detallado a un número tratable de especies y ecuaciones. El mecanismo resultante se denomina mecanismo

reducido. Este mecanismo reducido debe ser suficientemente detallado para predecir de forma correcta los fenómenos de interés.

Los mecanismos reducidos pueden clasificarse en dos tipos: los sistemáticamente reducidos y los globales.

Los mecanismos sistemáticamente reducidos se obtienen generalmente al aplicar a los llamados mecanismos “skeletal” las hipótesis de estado estacionario para algunas especies y de equilibrio parcial para reacciones particulares. Los mecanismos “skeletal” se deducen a partir de un análisis del sistema completo, que identifica la importancia de las especies y reacciones en el proceso de la combustión. Las reacciones que no contribuyen de forma importante en la reacción se eliminan del mecanismo detallado, el resultado es el sistema químico “skeletal”. El resultado de esta reducción sistemática no es sólo un sistema de ecuaciones más sencillo (por eliminación de especies), sino también un sistema menos “stiff”, que las reacciones más rápidas se han puesto en equilibrio. El análisis y reducción del sistema se hace para determinadas condiciones, por lo que frecuentemente el mecanismo reducido es sólo válido para una zona específica del espacio termoquímico. Fuera de esta zona, los modelos presentan predicciones con baja exactitud.

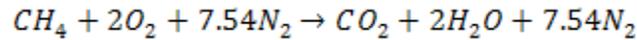
Los mecanismos globales se desarrollan típicamente a partir de una proposición inicial en cuanto a especies y reacciones que compondrán el modelo químico. Estas especies y reacciones se pueden escoger con base a un conocimiento previo del sistema, a necesidades de modelización (por ejemplo, que esté presente determinada especie), o a un análisis sistemático para identificar que especies y reacciones son eliminadas. Los parámetros cinéticos asociados a las distintas reacciones del mecanismo propuesto son ajustados de forma que el mecanismo reducido reproduzca algunos de los comportamientos fundamentales del sistema original, como por ejemplo, la velocidad de propagación del frente de reacción.

Otra aproximación que se ha desarrollado recientemente para simplificar la cinética química es el llamado método de colectores intrínsecos de baja dimensión (ILDm por sus siglas en inglés Intrinsic Low Dimensional Manifolds). El ILDM se basa en que las reacciones más rápidas conducen rápidamente los estados de composición a superficies en el espacio de composición. La cinética química se simplifica con la suposición de que estos puntos de composición se moverán, reaccionando, a lo largo de esta superficie de baja dimensión hacia el equilibrio químico, mientras que la reacción química será despreciable fuera de ella. Con esta aproximación no se requiere un conocimiento previo de las especies químicas que se situarán en estado estacionario, o de las reacciones que se supondrán en

equilibrio parcial; solamente es necesario suponer la dimensión de este espacio químico que configura el colector o superficie.

Ejemplos de mecanismos reducidos:

Un mecanismo químico global de un paso para la combustión del metano es:

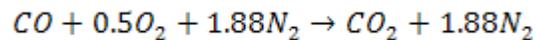
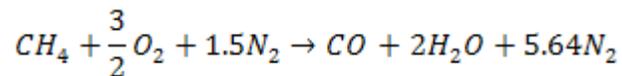


La reacción es irreversible (tiene lugar solamente en una dirección) y su velocidad de reacción es:

$$\omega = 1.3 \times 10^9 e^{\frac{2.026 \times 10^8}{RT}} [CH_4]^{-0.3} [O_2]^{1.3}$$

Donde ω tiene unidades de $kmol/m^3 s$.

Un mecanismo global de dos pasos para la combustión del metano, que incluye la oxidación del CH_4 a CO y la oxidación del CO a CO_2 es:



Las tasas químicas de las reacciones son:

$$\omega_{R1} = 2.9 \times 10^9 e^{\frac{2.026 \times 10^8}{RT}} [CH_4]^{-0.3} [O_2]^{1.3}$$

$$\omega_{R2} = 4.778 \times 10^7 e^{\frac{6.698 \times 10^7}{RT}} [CH_4]^{-0.5} [O_2]^{0.3} [CO]$$

Donde ω_{R1} y ω_{R2} tienen unidades de $kmol/m^3 s$.

Estos mecanismos globales fueron propuestos por Westbrook y Dryer.

BIBLIOGRAFIA

- [1] Fueyo, Norberto (1996), Mecánica de fluidos computacional para ingeniería, universidad de zaragoza ISBN.
- [2] Gupta, A. S., & Thodos, G. (1963). Direct analogy between mass and heat transfer to beds of spheres. A.I.Ch.E. Journal, 9, 751.
- [3] WARK, Kenneth (1993), Termodinámica , ed. Mc Graw Hill. México.
- [4] INCROPERA, Frank P. (1990), Fundamentos de transferencia de calor y masa, tercera edición. Ed. PEARSON.
- [5] COLOMBA DI BLASI. Modeling wood gasification in a countercurrent fixed-bed reactor, American Institute of chemical engineers, 2004.
- [6] Roman, Monica. Bobasu, Eugen. Selisteanu, Dan., Modeeling of biomass combustion process, Elsevier, 2010.
- [7] PATANKAR, Suhas V, Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, Hermisphere Publishing Corporation.
- [8] JONES, W. P. Turbulence Modeling and Numerical Solutions Methods for Variable Density and Combustion Flows. pp 306-374. Academic Press. 1994.
- [9] Ragland, K.W., Aerts D.J., properties of wood for combustion analysis. Biomsource technology 37, 161-168. October 1990
- [10] SPALDING, D. B. Combustion and Mass transfer. Pergamon. 1979.
- [11] SPALDING, D. B. Mathematical Modeling of Fluid Dynamics, Heat Transfer and Math Transfer Process. Technical Report HTS/8011, Imperial College of Science Technology and Medicine. 1980.
- [12] VICENTE, W., ESTEBAN, B., JAVIER, A. SALVADOR, O., Modelo euleriano para la simulación de un gasificador de flujo arrastrado de carbón. PERGAMON. 2003., 1999.
- [13] COLOMBA DI BLASI. Dynamic behavior of stratified downdraft gasifiers. PERGAMON. Nomvember, 1999.
- [14] Wang, Y. and Kinoshita, C. Temperature fields in downdraft biomass gasification, London: Blakie A & P. 1994.

- [15] Walawender, W.P., Chern, S. M., Fan, L.T. Wood chip gasification in a commercial downdraft gasifier, Amsterdam, Elsevier, 1985.
- [16] Manurung, R.K., & Beenackers, A. Modeling and simulation of an open-core downdraft moving bed rice husk gasifier. London: Blackie A &, 1994.
- [17] Groeneveld, M. J., and Van Swaaiji, W. P. (1980) gasification of char particles with CO₂ and H₂O. Chemical Engineering Science, 35. 307.
- [18] J. W. Daily y D. R. F. Harleman. Fluid Dynamics. Addison-Wesley. 1966.