

Alberto Sánchez Insa

Un algoritmo consistente para la simulación de flujos multifásicos, y su aplicación a lechos fluidos

Departamento
Ciencia y Tecnología de Materiales y Fluidos

Director/es
Fueyo Díaz, Norberto
Cubero García, Ana

<http://zaguan.unizar.es/collection/Tesis>



Universidad
Zaragoza

Tesis Doctoral

UN ALGORITMO CONSISTENTE PARA LA SIMULACIÓN DE FLUJOS MULTIFÁSICOS, Y SU APLICACIÓN A LECHOS FLUIDOS

Autor

Alberto Sánchez Insa

Director/es

Fueyo Díaz, Norberto
Cubero García, Ana

UNIVERSIDAD DE ZARAGOZA

Ciencia y Tecnología de Materiales y Fluidos

2016

UNIVERSIDAD DE ZARAGOZA



Tesis Doctoral

Un algoritmo consistente para la simulación de flujos multifásicos reactivos, y su aplicación a lechos fluidos

por *Alberto Sánchez Insa*

Dirigida por:

Dr Norberto Fueyo Díaz y
Dr Ana Cubero García

OCTUBRE DE 2015



Escuela de
Ingeniería y Arquitectura
Universidad Zaragoza



Departamento de
Ciencia y Tecnología
de Materiales y Fluidos
Universidad Zaragoza

Índice general

Índice de figuras	VII
Índice de tablas	XIII
1 Introducción	1
1.1 Introducción a la tecnología de fluidización	1
1.2 Descripción del flujo del lecho fluido gas-sólido	4
1.3 Modelado del lecho fluido	8
1.3.1 Modelado de la fluidodinámica	9
1.3.2 Teoría cinética del flujo granular	11
1.3.3 Modelado de la transferencia de cantidad de movimiento entre las fases	12
1.3.4 Modelado de las escalas no resueltas	13
1.3.5 Modelado de la transmisión de calor	14
1.3.6 Modelado de la transferencia de masa	15
1.3.7 Modelado de la reacción química	15
1.4 Códigos de Fluidodinámica Computacional para flujo multifásico	17
1.5 Objeto de la Tesis	21
1.6 Estructura del documento	21
2 Modelado matemático de flujos multifásicos gas-sólido	23
2.1 Modelo euleriano-euleriano para flujos multifásicos	23
2.2 Ecuaciones de conservación para flujos gas-sólido	25
2.2.1 Conservación de masa de las especies químicas	26
2.2.2 Conservación de cantidad de movimiento	26
2.2.3 Conservación de energía	28
2.3 Leyes constitutivas para la fase sólida	28
2.3.1 Modelo viscoso: Teoría Cinética del Flujo Granular	29
2.3.2 Modelo friccional	34
2.3.3 Modelo combinado friccional-cinético	36
2.4 Modelos de transferencia de cantidad de movimiento entre fases	37

2.4.1	Modelos de arrastre gas-sólido	38
2.4.2	Modelos de arrastre sólido-sólido	41
2.5	Modelado de la transferencia de calor gas-sólido	42
2.6	Modelado de la conductividad de las fases sólidas	43
2.7	Densidades de la fase gas y sólidas	43
3	Modelado de la reacción química y de la transferencia de materia	45
3.1	Modelado de la partícula de carbón	46
3.1.1	Modelado de la composición del carbón	46
3.1.2	Modelado de la estructura de la partícula reactiva	47
3.2	Procesos de la partícula de carbón en el lecho fluido	49
3.3	Modelado de la transferencia de masa	50
3.4	Modelado del cambio del tamaño de partícula	52
3.5	Modelado del secado de la partícula de sólido	53
3.6	Modelado de la reacción química	55
3.6.1	Modelado de la reacción química homogénea	55
3.6.2	Modelado de la reacción química heterogénea	57
3.7	Modelado de la devolatilización del carbón	60
3.7.1	Distribución de los productos de la devolatilización de carbón . . .	63
4	Algoritmo de resolución	65
4.1	Discretización	66
4.1.1	Discretización del espacio y del tiempo	66
4.1.2	Discretización de las ecuaciones	67
4.2	Interpolación del Momento en flujos multifásicos	68
4.2.1	Interpolación del Momento para flujos monofásicos	69
4.2.2	Interpolación del Momento para flujos monofásicos transitorios . .	71
4.2.3	Propuesta de Interpolación del Momento Compacta para flujos multifásicos	73
4.2.4	Interpolación de los coeficientes de la interpolación compacta del momento multifásica	75
4.3	Método de resolución	76
4.3.1	Resolución de la ecuación de presión	79
4.3.2	Resolución de la ecuación de la fracción volumétrica de fase	82
4.3.3	Algoritmo de resolución del sistema de ecuaciones	84
4.4	Diseño e implementación del <i>solver CIPSA_nPhaseEulerReactFoam</i>	89
4.4.1	Estructura del <i>solver CIPSA_nPhaseEulerReactFoam</i>	89
4.4.2	Implementación de la reacción homogénea: <i>Cantera</i>	94
5	Validación del algoritmo	99

5.1	Descripción del experimento y configuración numérica	99
5.2	Consistencia del algoritmo multifásico	101
5.3	Validación del algoritmo para flujo gas-sólido	102
5.3.1	Estudio de la influencia en la solución de la técnica de Interpolación del Momento	103
5.3.2	Estudio de la influencia en la solución estacionaria del tamaño del paso temporal	105
5.3.3	Estudio de la influencia en la solución de la discretización espacial	106
5.4	Conclusiones	109
6	Simulación fluidodinámica del flujo inerte en lechos fluidos	111
6.1	Descripción del experimento y configuración numérica	111
6.2	Descripción cualitativa del flujo	114
6.3	Validación con medidas experimentales	121
6.4	Conclusiones	128
7	Simulación de la combustión y gasificación en un lecho fluido	129
7.1	Descripción del experimento y configuración numérica	130
7.2	Descripción cualitativa y cuantitativa del flujo	136
7.2.1	Descripción fluidodinámica del lecho	137
7.2.2	Descripción de la segregación en el lecho	138
7.2.3	Densidad de sólido y tasa de devolatilización del carbón	139
7.2.4	Composición química del gas en el gasificador. Reacción heterogénea y homogénea	140
7.2.5	Temperatura en el lecho	147
7.3	Validación con medidas experimentales	147
7.4	Estudio de la influencia del tamaño de partícula de carbón	153
7.4.1	Estudio de la influencia del tamaño de partícula de carbón	153
7.4.2	Estudio de la influencia de la polidispersión de tamaño de partícula	163
7.4.3	Estudio de la influencia del modelado de la partícula carbón con tamaño variable	173
7.5	Estudio de la influencia de la presencia de la reacción química	184
7.6	Conclusiones	188
8	Resumen, discusión y sugerencias de trabajo futuro	191
8.1	Resumen	191
8.2	Discusión	194
8.3	Sugerencias de trabajo futuro	196
	Nomenclatura	206

Bibliografía**207**

Índice de figuras

1.1	Esquema de regímenes en el flujo gas-sólido	6
1.2	Diagrama de tipos de partícula de Geldart	6
1.3	Artículos publicados recientemente sobre el modelado euleriano del flujo multifásico incluyendo la combustión y gasificación.	9
3.1	Procesos en la combustión de una partícula de carbón	50
3.2	Esquema del método "shadow" para el transporte del tamaño de partícula	52
4.1	Diagrama de dependencia de los modelos y de las propiedades de las fases	90
4.2	Esquema de la estructura del <i>solver CIPSA_nPhaseEulerReactFoam</i>	91
5.1	Validación del algoritmo. Esquema de la configuración en código	100
5.2	Validación del algoritmo. Consistencia del algoritmo multifásico Perfiles transversales de la componente longitudinal de la velocidad para una única fase gaseosa representada como dos fases distintas. Comparación de las técnicas CMIm y SMI para varios repartos en la entrada de la fracción volumétrica de las fases	102
5.3	Validación del algoritmo. Consistencia del algoritmo multifásico Campo de la componente horizontal de velocidad aplicando la técnica SMI con $r_{g,1} = 0,5$ y oscilaciones cuando se reinicia con $r_{g,1} = 0,9$	103
5.4	Validación del algoritmo. Influencia en la solución de la técnica de Interpolación del Momento. Contornos de la fracción volumétrica de sólido r_s obtenidas con las técnicas de Interpolación del Momento SMI, y CMI; y sus extensiones propuestas para su aplicación a flujos multifásicos SMIm y CMIm	104
5.5	Validación del algoritmo. Influencia en la solución estacionaria del tamaño del paso temporal. Comparación de las técnicas SMI y CMIm en el estado estadísticamente estacionario para dos tamaños del paso temporal (adimensionalizado). Figura (a). Perfil transversal ($x/D_v = 3$) en el conducto horizontal de la fracción volumétrica de sólido. Figura (b). Inventario de sólidos	106

5.6	Validación del algoritmo. Influencia en la solución de la discretización espacial. Figura (a). Perfil transversal en el conducto horizontal (en $x/D_v = 3$) de la fracción volumétrica de sólido promediada temporalmente, para las tres mallas utilizadas. Figura (b). Detalle del cambio del tamaño de discretización tras el codo en la malla no uniforme	107
5.7	Validación del algoritmo. Influencia en la solución de cambios abruptos en el mallado. Contornos de la fracción volumétrica de sólido instantánea con las técnicas CMIm y SMI; y de la suma de los coeficientes utilizados en la técnica CMIm propuesta ($a^T + a^D$ en la Ecuación 4.23)	108
6.1	NETL SCCP-1. Esquema del lecho	113
6.2	NETL SCCP-1. Evolución temporal de la fracción volumétrica de sólido	115
6.3	NETL SCCP-1. Evolución temporal de la componente vertical de la velocidad del sólido en dos puntos seleccionados	117
6.4	NETL SCCP-1. Contornos de la componente vertical de la velocidad media, de la componente horizontal de la velocidad media, y de la fracción de sólido media	118
6.5	NETL SCCP-1. Contornos de la varianza de la componente vertical de la velocidad, de la varianza de la componente horizontal de la velocidad, y de la varianza de la fracción de sólido	119
6.6	NETL SCCP-1. Contornos de la <i>skewness</i> de la componente vertical de la velocidad, de la <i>skewness</i> de la componente horizontal de la velocidad, y de la <i>skewness</i> de la fracción de sólido	120
6.7	NETL SCCP-1. Comparación de las componentes de la velocidad media con medidas experimentales	122
6.8	NETL SCCP-1. Comparación de la <i>rms</i> de las componentes de la velocidad con medidas experimentales	123
6.9	NETL SCCP-1. Comparación de la <i>skewness</i> de las componentes de la velocidad con medidas experimentales	124
6.10	NETL SCCP-1. Comparación de las componentes de velocidad media con los resultados de otros autores	125
6.11	NETL SCCP-1. Comparación de las componentes de la velocidad media con los resultados de Hu et al.	126
6.12	NETL SCCP-1. Comparación de la caída media de presión y su desviación estándar	127
7.1	Gasificador de Ocampo. Configuración experimental	131
7.2	Gasificador de Ocampo. Descripción del flujo. Contornos de fracción volumétrica instantánea de gas	138

7.3	Gasificador de Ocampo. Descripción del flujo. Contornos de fracción volumétrica media de gas, caliza, y carbón	139
7.4	Gasificador de Ocampo. Descripción del flujo. Evolución con la altura de la fracción volumétrica media de carbón y caliza	140
7.5	Gasificador de Ocampo. Descripción del flujo. Evolución con la altura de la densidad media del carbón	141
7.6	Gasificador de Ocampo. Descripción del flujo. Evolución con la altura de la tasa media de devolatilización	142
7.7	Gasificador de Ocampo. Descripción del flujo. Contornos de fracción másica media de CO, CO ₂ , CH ₄ , H ₂ y O ₂	143
7.8	Gasificador de Ocampo. Descripción del flujo. Evolución con la altura de la fracción másica media de las especies químicas O ₂ , CO ₂ , CO, H ₂ y CH ₄ en la fase gaseosa	144
7.9	Gasificador de Ocampo. Descripción del flujo. Evolución con la altura de las tasas medias de formación de CO	145
7.10	Gasificador de Ocampo. Descripción del flujo. Evolución con la altura de las tasas medias de formación de CH ₄	145
7.11	Gasificador de Ocampo. Descripción del flujo. Evolución con la altura de las tasas medias de formación de H ₂	146
7.12	Gasificador de Ocampo. Descripción del flujo. Contornos de la tasa de devolatilización media y de las tasas medias de reacción heterogénea . . .	146
7.13	Gasificador de Ocampo. Validación. Comparación de valores experimentales con resultados computacionales para distintas configuraciones de operación	148
7.14	Gasificador de Ocampo. Validación. Comparación de valores experimentales con los resultados computacionales de esta Tesis y de otros autores para distintas condiciones de operación	152
7.15	Gasificador de Ocampo. Efecto del tamaño de partícula de carbón. Contornos de fracción volumétrica media de gas	154
7.16	Gasificador de Ocampo. Efecto del tamaño de partícula de carbón. Comparación de los resultados de simulación con datos experimentales	155
7.17	Gasificador de Ocampo. Efecto del tamaño de partícula de carbón. Evolución con la altura de la tasa media de reacción heterogénea	156
7.18	Gasificador de Ocampo. Efecto del tamaño de partícula de carbón. Evolución con la altura de la tasa media de devolatilización	157
7.19	Gasificador de Ocampo. Efecto del tamaño de partícula de carbón. Contornos de fracción másica media de CH ₄ , H ₂ , CO ₂ , CO y O ₂ , y de la componente vertical de la velocidad media de carbón para tres tamaños de partícula	158

7.20	Gasificador de Ocampo. Efecto de la dispersión del tamaño del carbón. Perfil horizontal en la parte superior de la entrada de sólidos ($h = 0,36\text{m}$) de las tasas medias de reacción para el metano CH_4	159
7.21	Gasificador de Ocampo. Efecto del tamaño de partícula de carbón. Evolución con la altura de la fracción másica de las especies químicas O_2 , CO_2 , CO , H_2 y CH_4 en la fase gaseosa	160
7.22	Gasificador de Ocampo. Efecto del tamaño de partícula de carbón. Evolución con la altura de las tasas medias de reacción del CH_4	161
7.23	Gasificador de Ocampo. Efecto del tamaño de partícula de carbón. Evolución con la altura de las tasas medias de reacción del H_2	161
7.24	Gasificador de Ocampo. Efecto del tamaño de partícula de carbón. Comparación de valores experimentales con los resultados computacionales para distintos tamaños de carbón	162
7.25	Gasificador de Ocampo. Efecto de la dispersión del tamaño del carbón. Distribuciones de diámetro de carbón para el análisis	163
7.26	Gasificador de Ocampo. Efecto de la polidispersión del tamaño del carbón. Contornos de fracción volumétrica media de gas y de caliza para la fase de carbón modelada con partículas de un tamaño, tres tamaños y siete tamaños	164
7.27	Gasificador de Ocampo. Efecto de la polidispersión del tamaño del carbón. Evolución con la altura de la fracción volumétrica media del carbón, caliza, y gas	165
7.28	Gasificador de Ocampo. Efecto de la polidispersión del tamaño del carbón. Evolución de la fracción volumétrica media de cada fase de carbón para dos distribuciones con tres y siete fases de carbón con distinto tamaño de partícula	167
7.29	Gasificador de Ocampo. Efecto de la polidispersión del tamaño del carbón. Contornos de fracción másica media de CH_4 , H_2 , O_2 y CO en el gas para distribuciones de carbón con partículas de un tamaño, tres tamaños y siete tamaños	168
7.30	Gasificador de Ocampo. Efecto de la polidispersión del tamaño del carbón. Evolución con la altura de la tasa media de reacción heterogénea	169
7.31	Gasificador de Ocampo. Efecto de la polidispersión del tamaño del carbón. Evolución con la altura de la tasa media de devolatilización	169
7.32	Gasificador de Ocampo. Efecto de la polidispersión del tamaño del carbón. Perfil horizontal en la parte superior de la entrada de sólidos ($h = 0,36\text{m}$) de las tasas medias de reacción de H_2	170
7.33	Gasificador de Ocampo. Efecto de la polidispersión del tamaño del carbón. Evolución con la altura de las tasas medias de reacción de H_2	171

- 7.34 Gasificador de Ocampo. Efecto de la polidispersión del tamaño del carbón. Comparación de valores experimentales con resultados computacionales para distintas distribuciones de tamaño de la partícula de carbón 171
- 7.35 Gasificador de Ocampo. Efecto de la polidispersión del tamaño del carbón. Evolución con la altura de la fracción másica media de las especies químicas O_2 , CO_2 , CO , H_2 y CH_4 en la fase gaseosa 172
- 7.36 Gasificador de Ocampo. Efecto del tamaño de partícula de carbón variable. Comparación de valores experimentales con resultados computacionales para tamaño de partícula constante y variable 173
- 7.37 Gasificador de Ocampo. Efecto del tamaño de partícula de carbón variable. Contornos de fracción volumétrica media de gas comparación de tamaño de partícula de carbón constante y variable 175
- 7.38 Gasificador de Ocampo. Efecto del tamaño de partícula de carbón variable. Evolución con la altura de la fracción volumétrica media de carbón y caliza 176
- 7.39 Gasificador de Ocampo. Efecto del tamaño de partícula de carbón variable. Evolución con la altura de la tasa media de devolatilización 177
- 7.40 Gasificador de Ocampo. Efecto del tamaño de partícula de carbón variable. Evolución con la altura de la tasa media de reacción heterogénea . . . 178
- 7.41 Gasificador de Ocampo. Efecto del tamaño de partícula de carbón variable. Contornos de fracción másica media de CH_4 , y CO_2 para tres distribuciones de tamaño de la partículas de carbón 179
- 7.42 Gasificador de Ocampo. Efecto del tamaño de partícula de carbón variable. Evolución con la altura de la fracción másica media de las especies químicas mayoritarias O_2 , CO_2 , CO , y H_2 en la fase gaseosa 180
- 7.43 Gasificador de Ocampo. Efecto del tamaño de partícula de carbón variable. Evolución con la altura de la fracción másica media de las especies químicas minoritarias CO , y CH_4 en la fase gaseosa 181
- 7.44 Gasificador de Ocampo. Efecto del tamaño de partícula de carbón variable. Evolución con la altura de las tasas medias de reacción para el CH_4 182
- 7.45 Gasificador de Ocampo. Efecto del tamaño de partícula de carbón variable. Evolución con la altura de las tasas medias de reacción para el H_2 183
- 7.46 Gasificador de Ocampo. Efecto de la presencia de la reacción química. Contornos de fracción volumétrica media de gas para distribuciones de carbón con partículas de un tamaño, tres tamaños y siete tamaños 184

- 7.47 Gasificador de Ocampo. Efecto de la presencia de la reacción química. Evolución con la altura de la fracción volumétrica media de sólido para el lecho reactivo y modelado como inerte utilizando tres distribuciones de tamaño de la partícula de carbón 186
- 7.48 Gasificador de Ocampo. Efecto de la presencia de la reacción química. Contornos de la componente vertical de la velocidad media de caliza para distribuciones de carbón con partículas de un tamaño, tres tamaños y siete tamaños 187

Índice de tablas

1.1	Precusores tecnológicos del uso industrial del lecho fluido para combustión (basada en [145])	3
1.2	Propiedades básicas de los distintos grupos de partícula de Geldart	6
1.3	Comparación de tres tipos de <i>solver</i> alternativos para su aplicación al desarrollo de modelos para el flujo multifásico reactivo	20
3.1	Parámetros cinéticos del modelo de devolatilización de dos pasos según Kobayashi et al.	63
4.1	Distribución de los modelos contenidos en el <i>solver CIPSA_nPhaseEulerReactFoam</i>	93
6.1	NETL SCCP-1. Propiedades de la partícula y condiciones experimentales	112
7.1	Gasificador de Ocampo. Análisis químico del carbón	132
7.2	Gasificador de Ocampo. Condiciones experimentales de los cuatro casos simulados	133
7.3	Gasificador de Ocampo. Propiedades de los sólidos	134
7.4	Gasificador de Ocampo. Mecanismo de reacción química utilizado	135
7.5	Gasificador de Ocampo. Constantes de reacción y expresión del factor de concentración para las reacciones homogéneas y heterogéneas	136
7.6	Gasificador de Ocampo. Descripción del flujo. Temperatura en el reactor .	147
7.7	Gasificador de Ocampo. Validación. Comparación de los modelos utilizados por los distintos autores	150
7.8	Gasificador de Ocampo. Distribución de tamaño del carbón	153
7.9	Gasificador de Ocampo. Efecto del tamaño de partícula de carbón. Tamaños de partícula utilizados en el análisis, y su relación área volumen relativa a la de la partícula de tamaño medio	154

CAPÍTULO 1

Introducción

La tecnología de flujo fluidizado es una opción actualmente en rápido desarrollo e implementación para procesos químicos, producción de calor y energía, porque permite una alta eficiencia, unas bajas emisiones y un buen control de su operación.

La necesidad de diseñar equipos cada vez mas eficientes requiere el apoyo de herramientas que permitan la descripción detallada del complejo flujo que en ellos se produce. Para ello, la tendencia actual es la simulación numérica del flujo mediante el uso de técnicas de Fluidodinámica Computacional.

Una descripción completa mediante estas técnicas requiere modelos matemáticos para todos los fenómenos relevantes que tienen lugar. No obstante, los códigos disponibles hasta la fecha no reúnen todas las características deseables para su descripción numérica (por ejemplo, se limitan al flujo inerte, o a casos monodispersos).

En este trabajo se propondrá, con el objeto de suplir algunas de estas deficiencias, un nuevo algoritmo para el modelado consistente del flujo gas-sólido reactivo con un número arbitrario de fases sólidas multicomponente con densidad variable.

1.1. Introducción a la tecnología de fluidización

Fritz Winkler diseñó en la década de 1920 los primeros gasificadores de lecho fluido burbujeante BFB¹ (del inglés, *Bubbling Fluidized Bed*). La primera demostración² de

¹ Patentado en el año 1922 (DRP 437.970), el primer gasificador comenzó su operación en el año 1926 [121].

² Winkler suele considerarse el inventor de la tecnología de lecho fluido burbujeante porque diseñó y comercializó los primeros reactores comerciales de gran escala, aunque anteriormente se usaba la fluidización para el tratamiento de sólidos. Por ejemplo, Elmas (citado por [29]) reporta que ya en 1566 se utilizaba el lecho fluido para purificar minerales.

su uso la realizó en el año 1921, introduciendo productos gaseosos de combustión por la parte inferior de un crisol conteniendo partículas de coke [163]. El movimiento de las partículas, arrastradas por el gas, hace comportarse a la mezcla como un líquido en ebullición. Este proceso se conoce como fluidización.

Las aplicaciones industriales de la fluidización se han desarrollado durante el siglo XX. Los primeros estudios se orientaron a reemplazar los lechos fijos y móviles utilizados entonces para las reacciones químicas de craqueo catalítico [121]. En las siguientes décadas se produjo la implantación y el uso en proceso discontinuo de estas unidades.

En el año 1937, Lewis y Gilliland, en el Instituto Tecnológico de Massachusetts (MIT), confirmaron experimentalmente que un circuito completamente neumático formado por lechos fluidos y líneas de transporte podía ser utilizado de forma estable [121, 163]. Su trabajo estableció una forma de contacto gas-sólido adecuada para el proceso de craqueo catalítico FCC (del inglés, *Fluid Catalytic Cracking*). El régimen de operación, caracterizado porque el sólido es arrastrado por el fluido, se denominó ‘fluidización rápida’ (o de flujo ascendente, para distinguirlo del régimen burbujeante). Esta tecnología fue puesta en marcha industrialmente³ por primera vez en el año 1942 en la refinería de Baton Rouge propiedad de la Standard Oil Company [121].

La aplicación del lecho fluido a la combustión de carbón⁴, en lugar de a su gasificación, fue defendida vehemente al comienzo de la década de 1960 en Inglaterra por Elliot [163, 212]. Gracias a su iniciativa se inició en Inglaterra un programa de desarrollo tecnológico en el Central Electricity Generation Laboratory de Marchwood. La primera planta industrial de combustión de carbón en lecho fluido para la generación eléctrica entró en operación a comienzos de la década de 1980 [163, 170].

La compañía finlandesa Almstrom, en torno al año 1960, comenzó el desarrollo de la combustión en lecho fluido burbujeante. Este desarrollo llevó a la puesta en funcionamiento de la primera instalación industrial basada en esta tecnología en Pihlava (Finlandia) en el año 1979 [52, 163].

Las tecnologías descritas, que se resumen en la Tabla 1.1, son las precursoras comunes a las distintas tecnologías de lecho fluido hoy existentes [145] (ver, por ejemplo, [19, 121, 170]).

La investigación del lecho fluido y el desarrollo de nuevas aplicaciones están favorecidos por sus buenas características, la necesidad de utilizar tecnologías más limpias que permitan reducir la huella de carbono, y una normativa de emisiones cada vez más res-

³ Mediante la colaboración de ingenieros de la M.W.Kellog y de la Standard Oil Company.

⁴ Inicialmente propuesta por Odel en el año 1942 [59].

Década	Tecnología
1910	(previo) Establecimiento de las calderas de carbón pulverizado [163].
1920	Desarrollo de la primeros reactores de lecho fluido [19, 121, 163]
1940	Desarrollo del proceso de reactores de lecho fluido para el craqueo catalítico del petróleo [125, 199]
1950	Desarrollo de calcinadores de lecho fluido para la industria de la alumina [18, 169, 170]
1960	Desarrollo de la combustión en lecho fluido [120]
1980	Instalación de la primera planta de combustión de lecho fluido para la producción exclusiva de vapor y calor [163, 170].

Tabla 1.1: Precursores tecnológicos del uso industrial del lecho fluido para combustión (basada en [145])

trictiva. Estas han impulsado su aplicación reciente a más de veinte nuevos procesos, que extienden su rango de operación a temperaturas desde 650°C a 1450°C, y que están actualmente en distinto punto de desarrollo [78].

La cantidad de energía producida globalmente por lechos fluidos y su capacidad máxima de producción han estado creciendo constantemente desde la aparición de los primeros equipos comerciales. Se espera que la capacidad instalada globalmente crezca en el futuro cercano a una tasa compuesta anual cercana al 12,2 % del año 2012 al 2018 [78]. Se espera un crecimiento especialmente fuerte en las economías de la zona Asia-Pacífico donde existe una alta demanda de equipos y tecnologías industriales. Las limitaciones impuestas por el coste del combustible en estas economías hace de esta tecnología, debido a los múltiples combustibles que pueden ser utilizados en lecho fluido, una opción preferente.

En Europa y Norteamérica la limitación de emisiones es el principal motivo para utilizar lechos fluidos de operación cada vez más eficiente [78]⁵.

Entre las tecnologías que se denominan de carbón limpio, terminología referente a la minimización de emisiones de contaminantes, se encuentran los lechos fluidos supercríticos SC, ultrasupercríticos USC, circulantes CFB y el ciclo combinado con gasificación integrada IGCC. Además actualmente están en fase de desarrollo nuevos procesos como, por

⁵ Por ejemplo, en Estados Unidos la regulación puede obligar a una reducción de un 71 % del dióxido de azufre y un 52 % en óxidos de nitrógeno (respecto al nivel del año 2005) [34]

ejemplo, la oxidación en lecho fluido, que permitirá la captura del CO_2 reduciendo la huella de carbono del proceso [145].

Entre las principales ventajas del lecho fluido está el buen control de su operación debido a la homogeneidad causada por la buena mezcla entre los sólidos. La facilidad para el control de temperatura junto con la capacidad para la adición de absorbentes permiten que las tecnologías de lecho fluido produzcan bajos niveles de contaminantes, tales como dióxido de azufre, óxidos de nitrógeno y dióxido de carbono. El uso de una temperatura de combustión baja (y uniforme) ayuda a controlar el fundido de las cenizas y la corrosión de las superficies.

Otra de las principales ventajas es la flexibilidad en el combustible utilizado. La presencia en el reactor de sólidos calientes permite el uso de combustibles y mezclas de ellos incluso de baja calidad. Los combustibles utilizados actualmente en lecho fluido incluyen una gran variedad de tipos de carbón, distintas biomásas, residuos agrarios, residuos industriales, residuos urbanos, o residuos del petróleo [145, 163]. Por ejemplo, la configuración de la planta de Pilhava citada es lo suficientemente versátil para operar con distintos combustibles en régimen de cogeneración, tales como pasta maderera o aceite de esquisto [52].

Los sistemas de lecho fluido operando en condiciones de diseño presentan alta eficiencia y bajos niveles de emisión. Un desvío de estas condiciones, sin embargo, puede provocar una disminución significativa de su eficiencia o altos niveles de emisión [19]. Además, el uso de distintos combustibles introduce desafíos técnicos tales como la contaminación y la corrosión de las superficies, la aglomeración de las partículas, problemas en la alimentación del lecho o de eliminación de inquemados [145].

Para investigar estos problemas en el diseño de sistemas eficientes se requiere una descripción, con suficiente nivel de detalle, del flujo y de los procesos de combustión que en ellos se producen. La tendencia actual es utilizar modelos basados en técnicas de Fluidodinámica Computacional que sean de ayuda en el diseño, y que permitan modelar su comportamiento en régimen de operación, durante su encendido y apagado, o con el cambio del combustible y de la carga, e investigar la forma de controlar la temperatura y las emisiones [86].

1.2. Descripción del flujo del lecho fluido gas-sólido

Un lecho fluido está formado por partículas sólidas (*e.g.* de carbón) sometidas a un flujo de gas en dirección ascendente. El flujo en un lecho fluido gas-sólido presenta un

comportamiento diverso en función del gasto de gas y de las propiedades de la partícula (básicamente, de su diámetro y densidad). La Figura 1.1 muestra esquemáticamente los distintos regímenes que se producen a distintas velocidades de gas a la entrada.

Si la velocidad del gas es baja, el sólido reposa sobre el distribuidor. Este régimen se conoce como ‘lecho fijo’. En este régimen las partículas se mantienen estáticas pero imponen una resistencia en el flujo de gas que se incrementa conforme aumenta el gasto másico.

Cuando la fuerza ascendente causada por el flujo de gas iguala la ejercida por el peso de las partículas estas quedan suspendidas. El lecho está en estado de ‘fluidización incipiente’, y la velocidad de gas en este punto se denomina ‘velocidad mínima de fluidización’

El siguiente estadio se conoce como ‘fluidización’. En este, un aumento de la velocidad del gas no produce un incremento significativo de la resistencia al paso del gas, y el comportamiento del flujo depende de las propiedades de la partícula. Geldart propuso la clasificación de las partículas en cuatro tipos, como se muestra en la Tabla 1.2 y la Figura 1.2 [70], que se comportan como se describe a continuación:

- En lechos constituidos por partículas de tipo Geldart A se produce inicialmente una fluidización sin burbujas de gas. Cuando se alcanza una cierta velocidad estas comienzan a aparecer⁶. Las partículas toman entonces las características fluidodinámicas de un líquido. El movimiento lateral y ascendente de las burbujas provoca una mezcla intensa de las partículas en lecho. Este movimiento aumenta la transferencia de masa y calor entre las fases, y de calor con las paredes del reactor.
- En los lechos formados por partículas de tipo Geldart B el burbujeo comienza a la velocidad mínima de fluidización, y al aumentar el gasto de gas las burbujas aumentan su tamaño. En lechos de diámetro pequeño con partículas grandes, las burbujas se expanden y ocupan horizontalmente todo el reactor. Este régimen se conoce como *slugging*.
- En los lechos de partículas del tipo Geldart C no se producen burbujas sino que se forman canales por los que atraviesa el gas (las fuerzas cohesivas dominan sobre las inerciales).
- El comportamiento en la fluidización de las partículas de tipo Geldart D es como el de las de tipo Geldart A.

Si se aumenta más el gasto másico de gas se produce un comportamiento burbujeante,

⁶ La velocidad a la que se producen las burbujas se llama ‘velocidad mínima de burbujeo’ (aproximadamente tres veces la mínima de fluidización) [11]

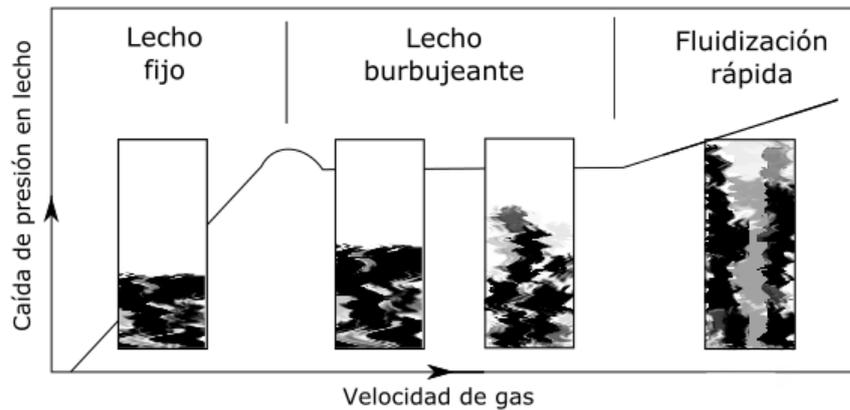


Figura 1.1: Esquema de regímenes en el flujo gas-sólido

	Grupo C	Grupo A	Grupo B	Grupo D
Denominación	Cohesivo	Aireable	Burbujeante	-
Diámetro	Fino	30 – 100 μm	40 – 500 μm	Grueso
Densidad	-	< 1400 kg m^{-3}	1400 – 4000 kg m^{-3}	Denso

Tabla 1.2: Propiedades básicas de los distintos grupos de partícula de Geldart

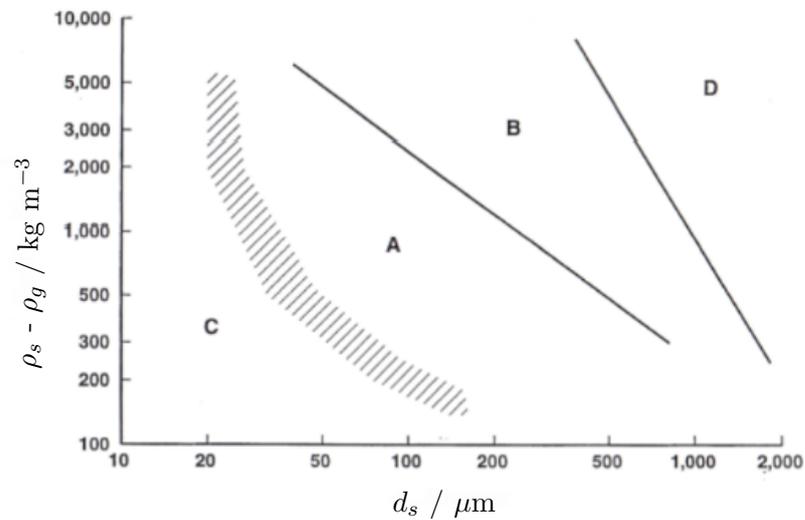


Figura 1.2: Diagrama de tipos de partícula de Geldart en función del diámetro de partícula de sólido d_s y de la diferencia de densidad del sólido y del gas fluidizante ($\rho_s - \rho_g$)

conocido como ‘fluidización turbulenta’, en el que las partículas son despedidas hacia el *freeboard*. Si localmente la velocidad es menor que la ‘velocidad terminal’, las partículas regresan al lecho, y si es mayor las partículas son arrastradas por el flujo. Este último modo es conocido como régimen de ‘fluidización rápida’. En él, dependiendo (principalmente) de la geometría, se produce flujo descendiente en las paredes del reactor, formando una ‘estructura de núcleo-anillo’, o bien un flujo ascendente en todo el reactor. La estructura denominada de núcleo-anillo se caracteriza por la presencia de clústeres densos de partículas en la pared y de un flujo diluido de partículas en la parte central del lecho [73].

Las condiciones de transición entre ambos regímenes no han sido aún bien determinadas, y los datos disponibles indican que ambos regímenes pueden coexistir a distintas alturas del lecho [126].

La presencia de la reacción química modifica el comportamiento del lecho fluido, por ejemplo al incorporar procesos que forman productos gaseosos o que modifican el tamaño de la partícula. A continuación se describe la fluidodinámica típica de un lecho fluido reactivo de carbón, como introducción al que será estudiado en esta Tesis.

La operación habitualmente comienza con el calentamiento del lecho de sólidos hasta una temperatura superior a la temperatura de ignición del combustible. El combustible sólido, al entrar en el reactor, se mezcla con las partículas calientes presentes alcanzando su temperatura de ignición y dando comienzo a su reacción química con el gas fluidizante (*e.g.* aire).

La temperatura necesaria se mantiene mediante la presencia de materiales refractarios que constituyen el lecho de partículas (*e.g.* arena de 1mm de diámetro que permite velocidades de fluidización de 1m/s a 3m/s) [212]. Alternativamente, pueden utilizarse absorbentes, como caliza o dolomita, para capturar el dióxido de azufre. En este caso, para mantener la altura de lecho constante (que es un parámetro importante en el control de operación), es necesario alimentar el lecho con absorbente fresco y extraer el saturado.

La extracción de sólido puede ser también necesaria para regular los residuos del sólido reactivo. Si el carbón utilizado tiene un contenido muy bajo de ceniza, esta es fracturada por la acción de las partículas del lecho y elutriada por el gas. En cambio, si se trata de un carbón con alto contenido de ceniza, o contiene impurezas adheridas, parte se quedará en el lecho. Las partículas originales que forman el lecho pueden ser sustituidas por el residuo carbonoso, que continuará en fluidización si es del mismo tamaño y densidad que las partículas del lecho originales. Sin embargo, si las partículas de ceniza remanentes son mayores que la partícula original pueden hacer que el lecho se compacte, disminuyendo la transferencia del calor y pudiendo formarse escorias.

El control de la operación en un lecho fluido normalmente se realiza utilizando como variables principales la velocidad superficial de gas, y el gasto másico de sólido⁷. Un primer parámetro a controlar es el régimen de operación; un combustor de lecho fluido opera normalmente en régimen de fluidización turbulenta, fluidización rápida o transporte neumático [28, 121]. Otro parámetro importante es la temperatura, que se mantiene regulando el flujo de gas para modificar el balance entre la liberación de calor de la combustión y la pérdida de calor en la salida de gases y por las paredes o intercambiadores. Una combustión efectiva se consigue manteniendo estable la temperatura del lecho. En combustión de carbón se opera normalmente en el rango de 850 – 950°C.

Las características del flujo gas-sólido no son completamente conocidas, y existen cuestiones por dilucidar [30, 125]. Aún no se conoce totalmente cómo las condiciones de operación, la interacción entre sólidos (incluyendo sólidos de distinto tipo y reactividad) y las dimensiones del lecho afectan al flujo (*e.g.* a la distribución de sólidos, o al tiempo de residencia). Se siguen presentando estudios experimentales que tratan de proporcionar una mejor comprensión de los sistemas gas-sólido [29, 87, 126, 204]. El objeto de estos trabajos es ayudar a determinar el régimen adecuado para una aplicación específica, mediante la modificación de las condiciones de operación, el diseño del reactor o las características del sólido [29].

La complejidad del flujo hace que su escalado a plantas industriales sea complicada (ver, por ejemplo, [60]). Fenómenos locales pueden afectar el rendimiento global de su operación (*e.g.* flujo cerca de la entrada de sólido).

La comprensión de estos sistemas puede mejorarse mediante el desarrollo de modelos avanzados que consideren todos los procesos relevantes, que permitan la simulación de su operación. Estos modelos se introducen en la sección siguiente.

1.3. Modelado del lecho fluido

El creciente interés en la tecnología de lecho fluido se puede apreciar en las proyecciones de la potencia instalada [78], y en los recursos de investigación dedicados a la comprensión de su comportamiento.

Una muestra de este interés es el aumento en el número de artículos científicos publicados para el estudio del flujo fluidizado reactivo utilizando modelos de Fluidodiná-

⁷ Por ejemplo, los lechos arrastrados en combustión, y en otras reacciones no catalíticas, operan con $U_g > 2\text{m/s}$ y $J_s > 100\text{kg m}^{-2}\text{s}^{-1}$ y se utilizan partículas de tipo Geldart B. En reacciones catalíticas las partículas utilizadas son de tipo Geldart A y los flujos de sólido J_s superan los $250\text{kg m}^{-2}\text{s}^{-1}$.

mica Computacional (como el presentado en esta Tesis). En la Figura 1.3 se muestra la evolución del número de artículos publicados sobre el modelado euleriano del flujo multifásico con combustión y gasificación desde el año 1995 hasta marzo de 2015 en <http://sciencedirect.com>. Las palabras claves que se han utilizado son *coal*, *gasification*, *combustion*, *multiphase* y *eulerian*.

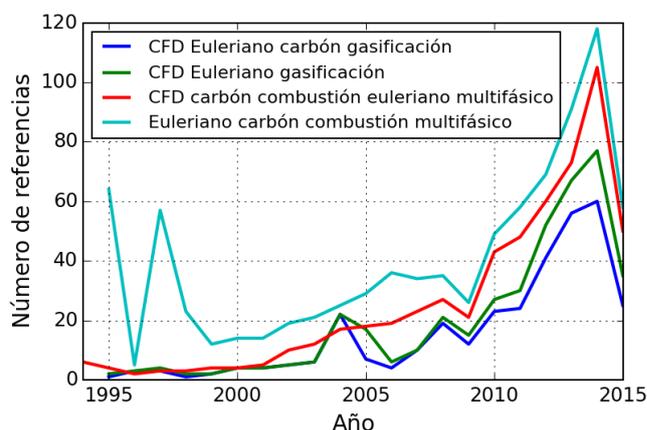


Figura 1.3: Artículos publicados sobre el modelado euleriano del flujo multifásico con combustión y gasificación de 1995 hasta marzo de 2015 en <http://sciencedirect.com> (elaboración propia)

El uso de códigos de Fluidodinámica Computacional para modelar los lechos fluidizados permite optimizar su diseño y predecir los parámetros críticos de su operación [186]. En esta sección se revisa el estado actual y los principales retos en el modelado del lecho fluido gas-sólido mediante el uso de técnicas de Fluidodinámica Computacional.

1.3.1. Modelado de la fluidodinámica

El uso de la computación para el modelado del lecho fluido comenzó en el año 1961 con la descripción de una burbuja propuesta por J.F. Davidson [110]. Este modelo⁸, era capaz de predecir algunas características del movimiento de una burbuja en lechos fluidos, y por ello supuso un primer avance en la comprensión de la fluidización [24].

Desde este primer modelo matemático para flujo burbujeante, se ha tratado de formular,

⁸ Incluyendo las extensiones propuestas al modelo de J.F. Davidson [110] en la misma década [104, 143, 166, 173, 192].

utilizando distintas aproximaciones⁹, un modelo completo para describir con precisión todos los regímenes del flujo gas-sólido [203].

Una formulación única para modelar el flujo gas-sólido es complicada puesto que, en función de las propiedades del sólido y de las condiciones del flujo, este puede comportarse como un sólido, un líquido o un gas [105]. Dicha formulación, para ser general, debe representar los distintos comportamientos mediante un único modelo matemático basado en las ecuaciones de gobierno obtenidas a partir de primeros principios físicos: ecuaciones de conservación de masa (especies químicas), cantidad de movimiento y energía.

Los modelos así deducidos se clasifican en tres categorías: modelos eulerianos-lagrangianos, modelos híbridos eulerianos-lagrangianos, y modelos eulerianos-eulerianos [178].

Los modelos eulerianos-lagrangianos se basan en el seguimiento individualizado de las partículas presentes y sus interacciones [93, 214]. La aplicación de modelos eulerianos-lagrangianos en lechos fluidos con un gran número de partículas (*e.g.* configuraciones industriales) es computacionalmente inabordable o extremadamente cara [11, 178].

Los modelos híbridos como el de partícula en celda MP-PIC (del inglés, *Multiphase Particle-Particle In Cell*) [9] tratan de solventar este problema. Este modelo se basa en un seguimiento lagrangiano de las partículas combinado con un tratamiento euleriano de las interacciones entre las partículas y de las partículas con la fase gaseosa. Ejemplos recientes de la aplicación de uno de estos modelos a distintas configuraciones, incluyendo la combustión de carbón, puede encontrarse en [1, 2, 116].

De las alternativas presentadas, la descripción euleriana-euleriana es la utilizada habitualmente, por sus menores requerimientos computacionales, para la simulación mediante técnicas de Fluidodinámica Computacional de lechos fluidos y de equipos industriales gas-sólido [145, 178]. Esta descripción en esta Tesis se denominará euleriana por simplicidad.

El modelado euleriano, que es el utilizado en esta Tesis, trata todas las fases como medios continuos e interpenetrantes [56, 73]. La primera formulación de estas ecuaciones suele atribuirse a Anderson y Jackson [8] para mezclas gas-sólido y a Ishii [102] para mezclas gas-líquido [219]. Anderson y Jackson deducen las ecuaciones que describen la evolución del flujo multifásico mediante la aplicación de un promediado volumétrico a la formulación local e instantánea de las ecuaciones de Navier-Stokes para el fluido y las leyes de Newton aplicadas a la partícula sólida [222]. Las asunciones inherentes al

⁹ Entre ellas: Teoría del continuo clásica, mecánica estadística, micromecánica, y modelos fenomenológicos basados en experimentos o simulaciones.

proceso de deducción limitan los tipos de flujo a los que estas ecuaciones pueden ser aplicadas. La forma de estas ecuaciones y el tratamiento de algunos de sus términos, especialmente en flujos con transferencia de masa entre las fases, aún sigue siendo objeto de debate [144].

El promediado en la deducción de las ecuaciones introduce términos no *cerrados* que requieren modelado¹⁰. El modelado de la ley constitutiva del sólido se realiza habitualmente mediante la aplicación de la Teoría Cinética del Flujo Granular KTGF (del inglés, *Kinetic Theory of Granular Flow*). Los términos de transferencia entre las fases sólidas y la fase gas también requieren modelado: el intercambio de cantidad de movimiento, la transmisión de calor y la transferencia de masa. Estos modelos se introducen en las secciones siguientes.

La resolución numérica de las expresiones para los términos de *cierre* y de las leyes de conservación es compleja. El comportamiento oscilatorio inherente al flujo multifásico requiere algoritmos de resolución transitorios computacionalmente costosos. Casi todos los códigos de Fluidodinámica Computacional existentes utilizan extensiones de los procedimientos de solución monofásicos que producen soluciones inestables o difusivas, que requieren bajos pasos temporales o números de Courant [222].

Para evitar estos problemas en la resolución de las ecuaciones de conservación en mallas colocalizadas es especialmente importante el uso adecuado de la técnica de Interpolación del Momento para asegurar el acoplamiento de los campos de velocidad y presión. El desarrollo de estos algoritmos no es trivial, y puede resultar en inconsistencias en la solución y oscilaciones espúreas en los campos de velocidad y presión [113]. Existen varias propuestas para la adaptación de estos algoritmos a flujo multifásico [122, 160], que, sin embargo, retienen algunas de las características no deseadas de los algoritmos para flujo monofásico. En esta Tesis se propondrá una nueva técnica de Interpolación de Momento, que evita ciertas desventajas de estos algoritmos (ver Capítulo 4).

1.3.2. Teoría cinética del flujo granular

La Teoría Cinética del Flujo Granular fue propuesta inicialmente por Bagnold [15]¹¹, quien propuso realizar un tratamiento de las partículas de sólido análogo al de las moléculas de gas en la Teoría Cinética de los Gases [39].

¹⁰ Los términos que requieren modelado, como se detallará más tarde, son el tensor de esfuerzos, la presión de sólido y los de interacción entre las fases (*e.g.* fuerza de arrastre).

¹¹ Bagnold propuso, a partir de un modelado para la frecuencia de colisión de las partículas de sólido, una formulación para el cálculo de la presión repulsiva en un flujo cizallante.

Esta formulación se ha extendido y generalizado mediante la aplicación de hipótesis más complejas [73]. Ogawa et al. sugirieron que la energía mecánica del flujo granular es primero transformada en movimiento aleatorio y después disipada como energía interna [152]. La pérdida de energía debida a choques inelásticos se incluyó, a través de un coeficiente de restitución, en la ecuación de transporte de Boltzmann para gases densos inicialmente por Savage [175] y a continuación por Shahinpoor, M. y Ahmadi, G. [179]; Lun et al. [129]; y Johnson y Jackson [111].

El efecto del arrastre gas-sólido en la Teoría Cinética del Flujo Granular fue añadido posteriormente por Syamlal [205] y Ding y Gidaspow [54]. La extensión a mezclas binarias de sólidos permitió evaluar numéricamente el efecto de fenómenos debidos a la dispersión tales como la segregación de partículas de diferentes tamaños [97, 205]. Algunos autores han propuesto una generalización a un número arbitrario de fases sólidas, que permiten simular una distribución realista de tamaño de las partículas (ver, por ejemplo, [95, 96, 133, 168]).

Una revisión detallada de la Teoría Cinética del Flujo Granular, y de las opciones utilizadas en su deducción, puede encontrarse en [76, 203].

1.3.3. Modelado de la transferencia de cantidad de movimiento entre las fases

El intercambio de cantidad de movimiento fundamentalmente se realiza a través de la fuerza de arrastre¹², que se introduce en las ecuaciones como un término proporcional a la diferencia de velocidad entre las fases. El coeficiente de este término se suele determinar empíricamente¹³ para distintas condiciones de flujo.

Ergun propuso una correlación para la pérdida de presión para lechos empaquetados [57]. No obstante, un modelo válido para todos los regímenes de fluidización debe considerar regiones con alta y baja concentración de sólido. Para ampliar el rango de aplicación Gidaspow et al. proponen un modelo que aplica la ecuación de Ergun para régimen denso y la formulación propuesta por Wen y Yu [228] para el flujo diluido¹⁴. Otros modelos propuestos en la literatura para el cálculo de este coeficiente se pueden consultar en [10, 74, 77, 172, 208].

La fuerza de arrastre sólido-sólido se modela utilizando un coeficiente de forma análoga

¹² Existen otras fuerzas (*e.g.* empuje), pero normalmente se consideran despreciables en flujo gas-sólido (ver Capítulo 2).

¹³ Los modelos de arrastre habitualmente se basan en correlaciones para el coeficiente de una única partícula en suspensión, o en la pérdida de presión por unidad de longitud en una suspensión [56]

¹⁴ El modelo de Gidaspow et al. [74] presenta una discontinuidad entre ambos modelos (ver Capítulo 2)

[21, 74, 205]; las expresiones para determinar este coeficiente se suelen deducir a partir de la Teoría Cinética del Flujo Granular.

Los modelos de arrastre no pueden considerarse basados en primeros principios puesto que normalmente solo dependen del número de Reynolds del flujo y de la fracción volumétrica; no consideran parámetros como la forma de la partícula y la rugosidad [11].

Además su formulación numérica no suele ser compatible con el modelado de múltiples fases sólidas, como el que se realiza en esta Tesis. En su aplicación a la simulación de estos sistemas estos modelos deben ser consistentes, es decir, deben predecir la misma fuerza en las mismas condiciones cuando las fases son descritas como una única fase o como varias fases diferentes de idénticas propiedades. Los modelos que pueden tener esta propiedad (habitualmente) requieren una nueva formulación para asegurar su consistencia (ver Sección 2.4) El término de fuerza de arrastre, como se señala por distintos autores, tiene una influencia significativa en los resultados. No obstante, en la literatura no existe preferencia por un modelado concreto [82, 217], o se reporta una mayor coincidencia con los resultados experimentales utilizando distintos modelos (*e.g.* modelo de Gidaspow [27, 130, 243]).

1.3.4. Modelado de las escalas no resueltas

El gas y el sólido se encuentran habitualmente distribuidos de forma heterogénea, pudiéndose distinguir distintas estructuras (*e.g.* clústeres de partículas o *streamers*), en función de las condiciones de operación y de las propiedades de las partículas (ver [145, 225]).

La descripción numérica adecuada del flujo de mesoescala requiere el uso de tamaños de discretización de varias veces el diámetro de partícula ($\approx 10 - 100$ diámetros) [4, 9]. En mallas con celdas gruesas, necesarias para que las simulaciones de equipos industriales sean computacionalmente abordables, algunas de estas estructuras tienen un tamaño inferior al de la celda de discretización. La aparición de estas estructuras de tamaño inferior al resuelto pueden causar errores en la predicción con los modelos estándares (por ejemplo hacen que la fuerza de arrastre sea sobrepredicha¹⁵ [11, 202, 225]). Problemas análogos se han encontrado para el modelo euleriano-lagrangiano MP-PIC [25].

Actualmente se están realizando propuestas para corregir los modelos habitualmente utilizados para su aplicación en mallas con celdas gruesas [4, 27, 224, 237, 243]. Las estrategias habitualmente utilizadas consisten en incluir el efecto de estas estructuras en el coeficiente de arrastre (asumiendo una distribución de partículas y velocidades interna

¹⁵ Los modelos eulerianos-eulerianos asumen que en cada celda los campos son uniformes, donde en realidad el flujo es heterogéneo y el gas pasa con menor interacción con las partículas [178]

a la celda) o en utilizar resultados filtrados de simulación con mallas con celdas finas para deducir correlaciones para su aplicación en mallas con celdas gruesas [142, 211, 243].

Para la fase gaseosa el tensor de esfuerzos de Reynolds puede obtenerse utilizando un modelo de turbulencia (ver, por ejemplo, [71]), o aplicando un modelo de simulación de grandes escalas LES (del inglés, *Large Eddy Simulation*) [133]. Una propuesta reciente es la aplicación conjunta a la misma simulación de ambos modelos utilizados como multiescala, mejorando la descripción de las estructuras que se forman [7]. No obstante, la comparación de simulaciones laminares (*i.e.* sin modelo de turbulencia) y con modelos de turbulencia realizadas por varios autores parecen sugerir que los resultados de las primeras son más consistentes [45]; sin embargo se requiere un mayor estudio de la influencia estos modelos [11]. Una discusión más amplia de los modelos de turbulencia en flujo gas-sólido se puede encontrar en [164].

El efecto de la formación de estructuras de partículas subcelda en la transmisión de calor y en la transferencia de masa se ha de considerar análogamente al término de arrastre (ver propuestas en [184, 235]). Shuai et al. reportan que esta consideración en la transferencia de calor consigue una ligera mejora en los resultados predichos, pero que posiblemente su efecto es menos importante que el producido por la consideración en la transferencia de masa [184].

En flujos reactivos también es necesaria una formulación adecuada del filtrado de los términos fuente de reacción química, aunque la formulación de estos términos es aún objeto de estudio [184].

En las simulaciones realizadas esta Tesis utilizarán celdas suficientemente finas de forma que no se requerirá el uso de modelos de filtrado.

1.3.5. Modelado de la transmisión de calor

La transmisión de calor en el lecho fluido entre las fases requiere la determinación de un coeficiente análogo al de la fuerza de arrastre. Los modelos disponibles no proporcionan una descripción fundamental de los mecanismos que intervienen, como ocurre en los análogos de transferencia de cantidad de movimiento.

El calor transmitido entre el gas y cada una de las fases sólidas generalmente se describe mediante la correlación de Gunn, que es válida para un amplio rango de condiciones y considera la interacción de la convección, la conducción de calor, y el intercambio de calor y masa [83].

El efecto de la transmisión de calor partícula-partícula suele ser despreciado. Chang et al.

reporta que la relación entre el calor transmitido de sólido a sólido y de gas a sólido se encuentra en el rango 1,27 % – 3,09 % para un flujo denso gas-sólido binario [38].

Una revisión del modelado de la transmisión de calor puede encontrarse en [11].

1.3.6. Modelado de la transferencia de masa

La transferencia de masa se ha estudiado mucho menos extensamente que la transferencia de cantidad de movimiento y la transmisión de calor. La transferencia de masa suele estar ligada a procesos de reacción química del sólido, y de cambio de fase.

La transferencia de masa se modela habitualmente mediante un coeficiente de transferencia. Los modelos existentes suelen considerar en su cálculo únicamente parámetros generales del flujo (*e.g.* velocidad de fluidización o tamaño del lecho). En el modelado euleriano es más interesante estimar la transferencia de masa en función de parámetros locales del flujo, como, por ejemplo, proponen Breault et al. [33].

La mayor parte de datos y correlaciones están disponibles únicamente para sólidos de tipo Geldart A. No obstante, la extensión de los modelos existentes a su aplicación a partículas de tipo Geldart B y Geldart D está actualmente en estudio (ver, por ejemplo, Vepsäläinen et al. [221]).

En los flujos con transferencia de materia entre las fases es además necesario modelar la transferencia de energía asociada a la masa. Musser et al. presenta una ecuación que describe la transferencia de calor asociada a la transferencia de masa (aplicada a la evaporación/condensación) [144]. Un tratamiento adecuado alternativo de este término se describe en el Capítulo 3. Además, en modelos eulerianos el uso intrínseco de valores promedio subcelda puede introducir estados no realistas, siendo necesarias correcciones como la propuesta en esta Tesis [48].

1.3.7. Modelado de la reacción química

Los primeros modelos para el cálculo detallado de las tasas de reacción química fueron propuestos para su uso en modelos de fluidización sencillos (como los utilizados por [41, 193]), y posteriormente aplicados a modelos donde el patrón gas-sólidos se calcula utilizando correlaciones semi-empíricas; y, tomando como base estos cálculos, se simulan los procesos de combustión [58, 117].

En la última década, debido al aumento de la capacidad de cálculo, se ha comenzado a incluir modelos de cinética química detallada en los modelos eulerianos-eulerianos, aunque

las principales líneas de investigación siguen dedicándose al modelado del flujo inerte [11]. Ejemplos recientes incluyendo cinética química detallada en modelos eulerianos-eulerianos para distintos procesos químicos son: biomasa en condiciones de oxidación [32], pirólisis de biomasa [241], *olive cake* [242], gasificación de carbón con desulfuración [183], craqueo catalítico (con transferencia de calor y reacción química) [20], o secado en procesos farmacéuticos [106].

Estos modelos químicos habitualmente proponen expresiones para la tasa de reacción química en función de una representación idealizada del sólido reactivo [121, 193]. Estos modelos para la partícula reactiva son bien conocidos y están bien establecidos (ver, por ejemplo, [85, 121]) La aplicación de estos modelos a los datos experimentales permite obtener las tasas intrínsecas de reacción química del sólido, es decir, sin tener en cuenta otros procesos que pueden ser limitantes como la difusión. Existe una amplia literatura que presenta, en base a estos modelos, tasas de reacción química para la cinética intrínseca de distintos materiales. Sin embargo, los resultados suelen reportar datos cinéticos intrínsecos globales, que predicen únicamente la pérdida de masa, y no suelen incluir datos relativos a la composición química de los productos (ver, por ejemplo, [3, 17]).

La pérdida de masa ocasiona una reducción del tamaño de la partícula. En el modelado euleriano habitualmente no se consideran las variaciones en el tamaño de la partícula reactiva. Uno de los tratamientos más comunes es modelar la partícula como un núcleo no reaccionado rodeado por una superficie externa de producto manteniendo constante el tamaño de la partícula [40, 72, 92, 194, 226, 240]. No obstante, la variación del tamaño de la partícula promedio se puede incorporar en estos modelos con métodos como el propuesto por Spalding [197], que se utilizará en este trabajo.

El modelado de la partícula de carbón, además, ha de representar los procesos de secado, devolatilización, reacción química homogénea, y reacción química heterogénea. La falta de un sistema de representación completa, que comprenda todos los procesos de los sistemas gas sólido reactivo, hace que para su simulación se utilice una combinación de modelos; habitualmente, uno para cada proceso.

La tasa de devolatilización suele ser calculada mediante modelos que consideran una única reacción química [13] o dos reacciones químicas competitivas [119, 216]. Un modelo general de devolatilización que incluya una distribución de los productos de la descomposición es difícil de formular, ya que depende de las propiedades intrínsecas del carbón; sin embargo pero los únicos datos disponibles suelen ser los proporcionados por el análisis inmediato y elemental del carbón. Los productos de la devolatilización se determinan habitualmente mediante distintas correlaciones a partir de estos valores obtenidos del análisis y de la temperatura de proceso [36]. Otra opción, cuando se dispone de datos estructurales, es el uso de modelos que tratan de predecir estos productos mediante

la asunción de una estructura molecular del carbón, y la consideración de una serie de reacciones de descomposición [231]. No obstante, la preferencia en la simulación del flujo fluidizado es el uso de las correlaciones sencillas, debido a que habitualmente se desconocen, con el detalle necesario, las propiedades del carbón [40, 223, 240].

Los mecanismos para la reacción química homogénea, o en fase gas, han sido bien establecidos y utilizados por un buen número de investigadores (*e.g.* combustión de carbón [40, 72, 193, 223, 240]). No obstante, las expresiones para el cálculo de las tasas de reacción química utilizadas en el modelado suelen variar y es necesario ajustarlas al caso estudiado (ver, por ejemplo, [53]).

En la reacción química heterogénea intervienen distintas fases (sólido y gas). En el caso del carbón, tratado en esta Tesis, se suelen considerar modelos para describir su combustión y gasificación. Estos modelos suelen ser simplificados, debido a los límites impuestos por los recursos computacionales, y a la falta de conocimiento detallado sobre los procesos de combustión del carbón [231]. Habitualmente se considera la parte del sólido reactiva (*i.e.* carbono fijo) como carbono atómico y sus reacciones con oxígeno, dióxido de carbono, vapor de agua, e hidrógeno [193]. Los datos experimentales de gasificación, más lenta que la combustión, indican que la tasa de las dos primeras reacciones químicas es del mismo orden de magnitud y la de la reacción química con el hidrógeno tres ordenes de magnitud inferior que estas [92].

El modelado de cada carbón requiere, para cada proceso, ajustes numéricos para representar adecuadamente su comportamiento experimental [112, 220]. Los ajustes más comunes son: las tasas de formación por combustión heterogénea de los óxidos de carbono (monóxido CO y dióxido de carbono CO₂), y la composición de los productos formados en la devolatilización [193].

La aplicación de los distintos modelos a la combustión de carbón en lecho fluido se puede consultar, por ejemplo, en [12, 72, 159, 220, 226, 240]. Una revisión completa de distintos modelos puede encontrarse en [85, 193].

1.4. Códigos de Fluidodinámica Computacional para la resolución de flujo multifásico

La compleja fenomenología que interviene en el flujo multifásico requiere para su modelado la utilización de códigos de Fluidodinámica Computacional CFD que incorporen modelos específicos sofisticados. De los códigos disponibles en la literatura solo unos pocos permiten la simulación del flujo multifásico reactivo, y, entre estos, frecuentemente el

usuario debe incorporar *ad hoc* los modelos necesarios para describir la reacción química y la transferencia de masa.

Entre los códigos de Fluidodinámica Computacional, que utilizan el modelado euleriano-euleriano para el flujo gas-sólido no reactivo y usan la Teoría Cinética del Flujo Granular, están [23]: *ANSYS Fluent* [64] utilizado por Benyahia et al. [24], *PHOENICS* [44] usado por Knowlton et al. [118], *CFX* por Yang et al. [237], *MFIX* utilizado por Wilde et al. [230], el código *FLOTRACS-MP-3D* [132] utilizado por Mathiesen et al. [134] o el *ITT code* usado por Gidaspow [73] o Tsuo y Gidaspow [215].

En esta enumeración de códigos para la simulación de flujo no reactivo, hay tanto códigos de propósito general (los tres mencionados primero) como códigos específicos desarrollados para flujo multifásico.

Para su aplicación al flujo multifásico reactivo, algunos de estos códigos permiten que el usuario incorpore modelos para la reacción y transferencia de materia entre las fases. A continuación se describen las modificaciones necesarias en un código ilustrativo en cada una de tres de categorías: un código abierto¹⁶ y específico para la resolución de flujo multifásico: *MFIX (Multiphase Flow with Interphase eXchanges)* [123, 209]; un código comercial, cerrado, de propósito general, *ANSYS Fluent* [64]; y un código libre (*i.e.* abierto de libre uso y distribución) de propósito general: *OpenFOAM* [157].

El uso de un código de propósito general cerrado para el modelado del flujo multifásico reactivo requiere a menudo su extensión. La ampliación de este tipo de códigos, cuando es posible, está normalmente limitada a ciertas modificaciones (*e.g.* términos fuente) que, en algún caso, pueden ser insuficientes. Por ejemplo, la versión existente al comienzo de esta Tesis del *software ANSYS Fluent* [64], código comercial de propósito general, disponía de modelos eulerianos-eulerianos para flujos multifásicos inertes, pero no acoplaba modelos para describir la combustión. No obstante, diversos autores lo han extendido con este fin mediante la incorporación de los modelos necesarios a través de *funciones definidas por el usuario* (ver, por ejemplo, [11, 240]). Estas subrutinas, citadas en la literatura, que amplían el uso de estos códigos, no son habitualmente de libre acceso. Los códigos específicos cerrados, que se desarrollan normalmente en el ámbito académico, suelen tener las mismas restricciones en su uso.

Un código abierto y específico para la resolución de flujo multifásico es *MFIX (Multiphase Flow with Interphase eXchanges)* [123, 209], desarrollado en el *National Energy Technology Laboratory* NETL. Este código, programado en FORTRAN90, se desarrolló específicamente para describir la fluidodinámica, el intercambio de calor y la reacción química en sistemas gas-sólido y ha sido aplicado satisfactoriamente a la simulación de

¹⁶ Se entiende por código abierto aquel cuyos ficheros fuente son accesibles y modificables

lechos fluidos. Para la simulación del flujo reactivo requiere la programación *ad hoc* de los modelos de reacción química y transferencia necesarios, de los que en su distribución solo contiene un ejemplo para una química de carbón sencilla.

Una opción alternativa es desarrollar un nuevo algoritmo a partir de algún código libre de Fluidodinámica Computacional. El *software OpenFOAM* es una plataforma de Fluidodinámica Computacional abierta que destaca por su tecnología de programación. Esta librería, escrita en lenguaje C++ y que utiliza la programación orientada a objetos, permite que el usuario pueda construirse su propio *solver* definiendo las ecuaciones a resolver, los modelos para cerrar dichas ecuaciones, y en general la algoritmia de resolución. Además, soporta mallas no estructuradas con celdas poliédricas.

La distribución básica de *OpenFOAM*¹⁷ proporciona una serie de *solvers* entre los que se encuentran varios para flujo multifásico [157]. Entre ellos, el *solver* llamado `twoPhaseEulerFoam` es el que incluye un modelo euleriano-euleriano para el transporte de dos fases (fluido-fluido o fluido-sólido).

Sin embargo, para los requerimientos del modelado del flujo multifásico reactivo, tiene las siguientes limitaciones¹⁸:

- Sólo puede resolver una fase dispersa. No puede representar, por tanto, una distribución de diámetros de partículas o la combustión de carbón en un lecho fluido en el que además hay partículas inertes.
- Se ha desarrollado para flujo incompresible y densidad constante de las fases. Las ecuaciones de conservación se utilizan en una formulación α -intensiva (ver Sección 4.3), divididas por la densidad, y la extensión de esta formulación a flujos no isoterms con densidad variable no es evidente.
- El diámetro de las partículas de la fase sólida es constante. En consecuencia, no se pueden tener en cuenta fenómenos como la agregación o coalescencia, o la disminución del tamaño de partícula conforme procede la combustión.
- No se resuelven las ecuaciones de conservación de la energía de las fases. No se modela, por tanto, la transferencia de calor y solo se puede aplicar a flujo isoterms.
- Las ecuaciones de conservación de masa no incluyen términos fuente y, en consecuencia, no se pueden representar fenómenos asociados a un cambio de fase (*e.g.* evaporación).

¹⁷ Versión 2.2.2.

¹⁸ Que comparte parcial o totalmente con los códigos antes mencionados.

Código	Tipo	Ventajas	Inconvenientes
Código cerrado	<i>ANSYS</i> <i>Fluent</i>	Fácil de utilizar Variedad de modelos	Algoritmo numérico prefijado Expansibilidad limitada
Código abierto	<i>MFIX</i>	Código abierto Específico multifásico Ampliamente usado para lechos fluidos	FORTRAN90 Mallas estructuradas Reacción química programada por usuario
Código libre	<i>OpenFOAM</i>	Código libre Arquitectura orientada a objetos Todo tipo de mallas Método de resolución robusto Facilita construcción nuevos <i>solver</i>	C++ <i>solver</i> con funcionalidad limitada (<i>e.g.</i> densidad constante, dos fases, o no-conservativo) Modelos limitados para reacción química (en fase gas)

Tabla 1.3: Comparación de tres tipos de *solver* alternativos para su aplicación al desarrollo de modelos para el flujo multifásico reactivo

- No incorpora modelos para la reacción química homogénea ni heterogénea.

Además el algoritmo `twoPhaseEulerFoam` no presenta un buen comportamiento comparado con los otros códigos mencionados [88].

De las alternativas enumeradas (ver Tabla 1.3) se ha optado por crear un nuevo *solver* sobre *OpenFOAM*.

1.5. Objeto de la Tesis

El objeto de esta Tesis es el desarrollo y validación de una metodología para la simulación del flujo multifásico gas-sólido reactivo, con modelos eulerianos y con un número arbitrario de fases sólidas multicomponentes de tamaño y densidad variable.

La validación del modelo fluidodinámico reactivo se llevará a cabo mediante el estudio de la combustión y gasificación del carbón en un lecho fluido.

Los principales objetivos se enumeran a continuación:

- El modelo numérico desarrollado incluirá la simulación del flujo de las fases, de la transferencia de calor, de la transferencia de masa y de la reacción química en la combustión de carbón (que será fácilmente extensible a otros sólidos combustibles).
- El modelo euleriano-euleriano desarrollado permitirá el uso de un número arbitrario de fases sólidas multicomponentes, cuyo tamaño y densidad podrán evolucionar en el tiempo.
- Las leyes constitutivas de las fases sólidas se modelarán mediante la Teoría Cinética del Flujo Granular, que será adaptada para asegurar su consistencia cuando se aplica a múltiples fases sólidas.
- Se diseñará un algoritmo para el tratamiento del flujo multifásico transitorio y reactivo. Su construcción requerirá la revisión, comprobación de la consistencia, y perfeccionamiento (en su caso) de los métodos de resolución existentes. En concreto, la técnica de Interpolación del Momento deberá adaptarse al tratamiento euleriano del flujo multifásico en mallas colocalizadas.
- El algoritmo se implementará sobre la plataforma de *software* libre *OpenFOAM* (Open Field Operation and Manipulation). *OpenFOAM* es una librería modular y extensible basada en el método de volúmenes finitos [157].
- Las tasas de las reacciones químicas en fase gas se calcularán utilizando la librería *Cantera* [79], una librería de código abierto y gratuita que ha sido diseñada para el modelado y la resolución de sistemas con reacción química.

1.6. Estructura del documento

La presente memoria se estructura como sigue:

- En el Capítulo 2 se presenta la formulación euleriana-euleriana de las leyes de conservación de masa (de especies químicas), cantidad de movimiento y energía que rigen el flujo multifásico. Además se detallan los modelos necesarios para su resolución, como la ley constitutiva del sólido y las del intercambio de cantidad de momento y calor.
- El Capítulo 3 presenta el modelado de los procesos de transferencia de masa y de reacción química. También se describen los modelos necesarios para los fenómenos que se producen en la combustión y la gasificación de carbón en el lecho fluido.
- El Capítulo 4 describe la algoritmia utilizada para la resolución numérica del sistema de ecuaciones planteado y la estructura del código desarrollado. El capítulo detalla el nuevo esquema de resolución planteado, que se ha llamado CIPSA, para flujos multifásicos. En el esquema de resolución se consideran variables la densidad de las fases y el tamaño de las partículas de sólido.
- El Capítulo 5 presenta la validación del nuevo algoritmo CIPSA. Se evalúa su comportamiento, comparado con el algoritmo estándar, en la zona de salida de un conducto que opera en el régimen de ‘fluidización rápida’.
- En el Capítulo 6 se presenta la validación del algoritmo utilizando datos experimentales, mediante la predicción de la hidrodinámica de sólidos de tipo Geldart D en un lecho en el ‘régimen burbujeante’.
- El Capítulo 7 se simula numéricamente la gasificación de carbón en un lecho fluido burbujeante, con partículas de carbón y caliza. Los modelos utilizados describen todos los fenómenos relevantes para la partícula de carbón reactiva. Los resultados de la simulación se validan comparando con resultados experimentales. Además se estudia el efecto en el comportamiento del lecho del tamaño de partícula de carbón, de la polidispersión de tamaño de las partículas de carbón y del diámetro variable de las mismas.
- El Capítulo 8 incluye un resumen del trabajo realizado y de los resultados, y sugerencias sobre el trabajo futuro.

Modelado matemático de flujos multifásicos gas-sólido

El flujo multifásico consiste en un número finito de fases termodinámicas limitadas por interfaces en movimiento. Cada fase se caracteriza por propiedades (tales como velocidad, tamaño, composición, o temperatura) que pueden ser localmente distintas para cada fase.

Se puede formular un modelo matemático para el flujo multifásico en términos de las variables instantáneas locales estableciendo condiciones de contorno en las interfaces [55, 56]. La resolución numérica directa de lechos fluidos utilizando este tipo de modelo no es abordable en la práctica, debido a su alto coste computacional.

No obstante, la formulación local e instantánea puede utilizarse como punto de partida para la deducción de ecuaciones promediadas, cuya solución computacional es viable.

En este capítulo se presenta un modelo euleriano-euleriano, que utiliza estas técnicas, para el modelado de la fluidodinámica del flujo multifásico en un lecho fluido.

2.1. Modelo euleriano-euleriano para flujos multifásicos

Los modelos eulerianos-eulerianos para flujos gas-sólido se basan en la hipótesis de que todas las fases presentes en el sistema se pueden considerar como medios continuos e interpenetrantes¹, y deducen las ecuaciones que describen la evolución del flujo multifásico, mediante la aplicación de un promediado volumétrico a la formulación local e instantánea.

El promediado se realiza sobre regiones de tamaño mayor que el volumen característico

¹Es decir, las distintas fases pueden estar presentes en la misma posición espacial al mismo tiempo

de las fases granulares, y da lugar a la aparición de nuevas variables dependientes: las fracciones volumétricas de cada fase r_p .

La pérdida de información de las escalas de menor tamaño, que es inherente al proceso de promediado, introduce en las ecuaciones términos no cerrados que requieren modelado.

Para describir los procesos de transferencia entre las distintas fases se ha propuesto una diversidad de expresiones en la literatura, basadas en correlaciones semi-empíricas y cuyo rango de aplicabilidad depende de los efectos de interacción que se hayan tenido en cuenta en su formulación [56].

En el caso de flujos con presencia de fases sólidas, en el modelado euleriano, se deben utilizar leyes constitutivas que describan la reología de la fase sólida. La tendencia actual para obtener estas leyes es aplicar la Teoría Cinética del Flujo Granular (KTGF, de sus siglas en inglés). Esta establece una analogía entre el movimiento aleatorio de las partículas debido a las colisiones partícula-partícula y el movimiento térmico de las moléculas en el gas [73].

La Teoría Cinética del Flujo Granular propone como nueva variable la temperatura granular (análoga a la temperatura en la Teoría Cinética de Gases) que cuantifica las desviaciones en el movimiento de las partículas respecto a su velocidad media. La mencionada temperatura granular se obtiene mediante la deducción y resolución de una ecuación diferencial de conservación de la energía granular. En esta ecuación la disipación de energía en las colisiones inelásticas entre las partículas se tiene en cuenta a través de un coeficiente de restitución e_p , que es un nuevo parámetro que caracteriza cada fase granular (además de otras propiedades físicas, como el tamaño).

Puede encontrarse una revisión crítica de artículos que tratan sobre la aplicación de los principios de la Teoría Cinética del Flujo Granular en lechos fluidos en Gidaspow et al. [76].

Inicialmente, según Enwald et al. [56], el modelo euleriano y la Teoría Cinética del Flujo Granular se desarrollaron para flujos bifásicos (una fase gaseosa y una sola fase granular), partiendo básicamente de datos experimentales del movimiento de una partícula en un medio fluido. Posteriormente, estos modelos se extendieron a mezclas binarias de sólidos, que tienen en cuenta el importante efecto en el comportamiento del flujo de procesos tales como la segregación de partículas de diferentes tamaños [97, 205]. Por último, solamente unas pocas referencias proponen una generalización de la Teoría Cinética del Flujo Granular a un número arbitrario de fases sólidas, permitiendo así simular una distribución realista de tamaños de partícula [98, 134].

A continuación se presentan las ecuaciones que rigen el flujo multifásico y los modelos

de cierre utilizados en esta Tesis para el modelado de flujos con un número arbitrario de fases dispersas.

2.2. Ecuaciones de conservación para flujos gas-sólido

Una mezcla multifásica evoluciona obedeciendo las leyes de conservación de la masa de cada especie, de conservación de la cantidad de movimiento, y de la energía. Para formular estas ecuaciones se ha de caracterizar la mezcla mediante un conjunto de variables dependientes que la definan.

La selección de variables no es única. En esta Tesis la mezcla multifásica se caracteriza mediante la presión p compartida por todas las fases, y un conjunto de variables para cada fase p (subíndice). Cada fase p se define termodinámicamente por su densidad (ρ_p), su temperatura (T_p), y la fracción másica de las especies α presentes y_p^α . Su flujo se describe agregando a este conjunto de variables la velocidad de fase (\mathbf{v}_p).

La primera formulación de las ecuaciones de conservación utilizando el modelado euleriano-euleriano desde primeros principios para flujo multifásico gas-sólido se suele atribuir a Anderson y Jackson [8], que las dedujeron para su aplicación a mezclas binarias en lechos fluidos.

Estos autores parten de las ecuaciones de Navier-Stokes para el fluido y de las leyes de Newton aplicadas a una partícula de sólido y, mediante una definición matemática de las variables medias locales del flujo, deducen las ecuaciones de transporte para las fases fluidas y granulares [222]

En dicha deducción se introduce como nueva variable la fracción volumétrica de cada fase (r_p), que se puede expresar como:

$$r_p = \frac{V_p}{V} \quad ; \quad V = \sum_p V_p \quad (2.1)$$

donde V es el volumen compartido por todas las fases presentes en el sistema y V_p es el volumen ocupado por la fase p contenido en él. Por su definición, la suma de todas las fracciones volumétricas es uno, $\sum_p r_p = 1$.

Utilizando el conjunto de variables indicado anteriormente y el concepto de fracción volumétrica, se obtienen expresiones para las leyes físicas que gobiernan la evolución del flujo multifásico reactivo: Leyes de conservación de masa (Sección 2.2.1), de conservación de cantidad de movimiento (Sección 2.2.2), y de conservación de energía (Sección 2.2.3).

2.2.1. Conservación de masa de las especies químicas

La variación de masa de una especie en un volumen sólo puede ser debida al transporte de masa de esa especie desde otras zonas por convección o difusión, o a fuentes o sumideros debidas a la transferencia con otras fases o a la reacción química.

Esta ley de conservación para la especie α de la fase p se puede expresar como:

$$\frac{\partial}{\partial t} (r_p \rho_p y_p^\alpha) + \nabla \cdot (r_p \rho_p \mathbf{v}_p y_p^\alpha) + \nabla \cdot (r_p \Gamma_p^{y^\alpha} \nabla y_p^\alpha) = \sum_x \sum_q \dot{m}_{qp}^{\alpha,x} + S_p^\alpha \quad (2.2)$$

donde $\Gamma_p^{y^\alpha}$ es el coeficiente de difusión de la especie α en la fase p , $\dot{m}_{qp}^{\alpha,x}$ es la masa de la especie química α transferida desde la fase q en el proceso x de intercambio de masa, y S_p^α es la generación de especie α por reacción química.

La suma de la ecuación anterior para todas las especies de cada fase resulta en la ecuación de conservación de masa o ecuación de continuidad para la fase p :

$$\frac{\partial}{\partial t} (r_p \rho_p) + \nabla \cdot (r_p \rho_p \mathbf{v}_p) = \sum_x \sum_q \dot{m}_{qp}^x \quad (2.3)$$

Por tanto, las únicas causas de la variación de la masa de una fase p en un volumen son el transporte por convección y la masa transferida desde otras fases \dot{m}_{qp}^x .

En el sumatorio para obtener la Ecuación 2.3 se ha tenido en cuenta:

- Que la suma de fracciones máxicas de las especies químicas de cada fase es, por definición, uno ($\sum_\alpha y_p^\alpha = 1$).
- Que la difusión es un proceso de intercambio interno a la fase por lo que no tiene efecto local neto sobre el balance de masa, ($\sum_\alpha \Gamma_p^{y^\alpha} \nabla y_p^\alpha = 0$).
- Que la reacción química no produce masa de forma neta, y que la transferencia de masa entre las fases debida a la reacción química heterogénea se incluye en el término de transferencia de masa \dot{m}_{qp}^x (ver Sección 3.6.2)

2.2.2. Conservación de cantidad de movimiento

La conservación de cantidad de movimiento para una fase p en flujo multifásico es:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (r_p \rho_p \mathbf{v}_p) + \nabla \cdot (r_p \rho_p \mathbf{v}_p \mathbf{v}_p) = & \quad (2.4) \\ - r_p \nabla p + \nabla \cdot (r_p \boldsymbol{\tau}_p) - r_p \rho_p \mathbf{g} + \sum_q f_{qp}^v (\mathbf{v}_q - \mathbf{v}_p) + \sum_x \sum_q \dot{m}_{qp}^x \mathbf{v}_x \end{aligned}$$

que expresa que la cantidad de movimiento en cada volumen elemental cambia únicamente por efecto del transporte convectivo de las fuerzas de superficie (presión y esfuerzos viscosos), de las fuerzas de volumen², además del intercambio de cantidad de movimiento a través de las entrefases y por transferencia de masa desde las otras fases presentes.

El primer término en el lado derecho de la Ecuación 2.4 incluye el gradiente de presión, que se considera común a todas las fases.

En el segundo término aparece el tensor de esfuerzos viscosos (τ_p), cuya expresión general es:

$$\tau_p = -\delta_{ps} p_p^s \bar{I} + \mu_p \left(\nabla \mathbf{v}_p + (\nabla \mathbf{v}_p)^T \right) + \left(\xi_p - \frac{2}{3} \mu_p \right) \nabla \cdot \mathbf{v}_p \bar{I} \quad (2.5)$$

siendo p_p^s , μ_p y ξ_p , respectivamente, la presión de sólido, la viscosidad molecular y su segundo coeficiente (o viscosidad de *bulk*) de la fase p . Para fases gaseosas, el primer término se anula ($\delta_{ps} = 0$) y el tensor de esfuerzos es función de ambas viscosidades, aunque la viscosidad de *bulk* se considera nula $\xi_g = 0$ para los flujos modelados en esta Tesis³. Para fases granulares ($\delta_{ps} = 1$) el primer término es igual a la presión de sólido (p^s), que representa la presión generada por las partículas. Además, en el tratamiento euleriano-euleriano con sólidos granulares se han de formular expresiones para los dos coeficientes de viscosidad, que expresan el balance de fuerzas entre partículas de la misma forma que para un fluido [129]. El modelado de estos tres campos se realiza utilizando la Teoría Cinética del Flujo Granular, que se presenta en la Sección 2.3.

En flujos gas-sólido, la fuerza de arrastre es la fuente dominante en la transferencia de cantidad de movimiento entre fases. Respecto a esta fuerza, en los flujos gas-sólido donde las partículas son relativamente pequeñas y su densidad es mucho mayor que la del gas, otras fuentes como las fuerzas de sustentación y de masa virtual son despreciables [222]. La fuerza de arrastre entre las fases se asume proporcional a su diferencia de velocidades. El coeficiente de proporcionalidad se calcula utilizando correlaciones semi-empíricas en el caso de transferencia sólido-gas f_{gs}^v o aplicando la Teoría Cinética del Flujo Granular para modelar la interacción entre fases sólidas f_{nm}^v . Los modelos utilizados para el cálculo de las fuerzas de arrastre se presentan en la Sección 2.4.

² En la Ecuación 2.4 sólo se ha incluido como fuerza de volumen la fuerza gravitatoria

³ En un gas la viscosidad de *bulk* se produce principalmente por los intercambios moleculares de la rotación/vibración con la translación con alta variación de la presión. Su consideración es importante en acústica o para la predicción del comportamiento del gas en ondas de choque.

2.2.3. Conservación de energía

La ley de conservación de la energía se expresa para su resolución como una ecuación de conservación para la temperatura:

$$\frac{\partial}{\partial t} (r_p \rho_p C_{p_p} T_p) + \nabla \cdot (r_p \rho_p \mathbf{v}_p C_{p_p} T_p) + \nabla \cdot (r_p \Gamma_p^T \nabla T_p) = \sum_q Q_{qp} + \sum_x \sum_q \dot{m}_{qp}^x C_{p_x} T_x + S_p^T \quad (2.6)$$

siendo las causas de la variación de la energía térmica el transporte convectivo o difusivo, el flujo de calor a través de la interfase, el flujo de energía térmica asociado a la transferencia de masa desde otras fases y la generación de energía térmica debida a la reacción química. Las consideraciones más importantes realizadas en su formulación son que:

1. Se ha despreciado la disipación de energía térmica e incremento de energía interna debido a disipación viscosa (puesto que estos términos sólo son significativos con velocidades próximas a las del sonido).
2. Se ha despreciado la potencia de expansión y compresión (de importancia en flujos compresibles transitorios).

Para cerrar las ecuaciones de conservación de la energía es necesario modelar el término de transferencia de calor entre las fases Q_{qp} (Sección 2.5). Además, para el tratamiento del flujo difusivo de calor en las fases sólidas, se requiere, debido a su carácter granular, un tratamiento especial de su coeficiente de conductividad térmica Γ_p^T (Sección 2.6).

2.3. Leyes constitutivas para la fase sólida

En esta sección se describen modelos y estrategias para evaluar el tensor de esfuerzos de las fases sólidas (Ecuación 2.5), que resulta de la aplicación del tratamiento euleriano-euleriano a un flujo con una fase fluida y múltiples fases granulares.

Dependiendo de las propiedades del material, del grado de empaquetamiento y de las condiciones de forzado, el material granular puede comportarse como un sólido, un líquido o un gas [105, 213]. Aunque no existe una descripción unificada para el comportamiento de las fases sólidas en todas las condiciones, se han desarrollado modelos independientes para describir los dos regímenes extremos según su grado de empaquetamiento: plástico y viscoso.

El régimen plástico se caracteriza por un contacto continuo entre las partículas y una

baja velocidad de deformación. En el límite, cuando los sólidos están compactados (en estado casi-estático) los esfuerzos cortantes se rigen por la ley de Coulomb y las fuerzas externas son soportadas por la estructura interna del material granular. Los modelos friccionales se han desarrollado para describir el flujo de sólido en este régimen. Estos modelos se basan habitualmente en teorías para la mecánica de suelos, fundamentadas en leyes de resistencia para la velocidad de deformación.

El otro régimen extremo consiste en el flujo rápido de material granular diluido. En este régimen, llamado viscoso o diluido, la disipación de la energía cinética se debe principalmente a las colisiones (rápidas) entre las partículas debidas a su movimiento. Para su descripción fluidodinámica se utiliza generalmente la Teoría Cinética del Flujo Granular, inspirada en la descripción estadística de la cinética molecular de gases.

El tratamiento del flujo denso que ocurre entre estos dos regímenes, y que comparte características con ambos, se realiza mediante la combinación de los modelos friccionales con la teoría cinética. Esta aproximación, conocida como friccional-cinética, permite el tratamiento de la fase sólida en todos los regímenes.

2.3.1. Modelo viscoso: Teoría Cinética del Flujo Granular

Las leyes constitutivas para la fase sólida se formulan mediante una aproximación estadística de las interacciones entre el movimiento fluctuante de las partículas y su movimiento promedio. La Teoría Cinética del Flujo Granular describe estas interacciones a partir de la analogía con el comportamiento de las moléculas en gases densos presentada por Chapman y Cowling [39].

La mayor diferencia para el tratamiento de las partículas en el flujo granular y de las moléculas en un gas es que en los choques producidos entre las primeras existe pérdida de cantidad de movimiento. Para cuantificar la cantidad de energía perdida en estos choques, Lun et al. [129] introducen el concepto de coeficiente de restitución e_p .

Las ecuaciones de transporte para la fase discreta se deducen suponiendo una distribución de velocidad e incorporando el concepto de temperatura granular, similar al de temperatura en la teoría cinética de gases. Los choques entre las partículas son representados, en estas ecuaciones, mediante términos integrales de colisión. Las expresiones para estas integrales de colisión proporcionan el cierre para las propiedades macroscópicas de presión y viscosidad. Una deducción completa de estas expresiones para un flujo bifásico gas-sólido con partículas de un solo tamaño puede consultarse en Gidaspow [73].

La Teoría Cinética del Flujo Granular desde la propuesta original de Bagnold [15] se

ha extendido y generalizado mediante la aplicación de hipótesis más complejas. Solo algunas de estas formulaciones se han deducido para su aplicación en flujos con dos o más fases sólidas; por ejemplo, Huilin et al. [97], Iddir et al. [99], Jenkins y Mancini [108], Lathouwers y Bellan [124], Mathiesen et al. [133] o Rahaman et al. [168]. Una revisión completa de distintas formulaciones de la Teoría Cinética del Flujo Granular para su aplicación en flujos polifásicos se puede encontrar en Sun [203].

Un modelado adecuado del tensor de esfuerzos para varias fases sólidas ha de ser consistente [133]. Es decir, cuando el modelo para varias fases se aplica a una sola, se ha de reducir al modelo para una sola fase sólida; y, correspondientemente, el resultado para una única fase granular debe ser igual al que se obtendría para un número arbitrario N_s de fases sólidas iguales que ocuparan el mismo volumen.

El modelo que se presenta y utiliza en esta Tesis, que cumple estas condiciones, es el propuesto por Mathiesen et al. [133]. Desarrollado para el modelado consistente del flujo en presencia de un número arbitrario de fases sólidas, el modelo se reduce para mezclas binarias sólido-gas al planteado por Gidaspow [73].

En las siguientes secciones se presentan las expresiones propuestas por este modelo para la presión y viscosidad de sólido, y la formulación de una ecuación de transporte para la temperatura granular.

2.3.1.1. Presión de sólido

En régimen viscoso, la presión de sólido $p_p^s = p_p^{vis}$ se puede expresar como la suma de dos contribuciones: una contribución cinética, originada por la fluctuación aleatoria de las partículas, y una colisional, causada por la colisión entre ellas:

$$p_p^{vis} = p_p^{cin} + p_p^{col}; \quad p_p^{cin} = r_p \rho_p \Theta_p; \quad p_p^{col} = \sum^{N_s} p_{pq}^{col} \quad (2.7)$$

La presión cinética es proporcional a la masa de las partículas por unidad de volumen o densidad específica $r_p \rho_p$ y a sus fluctuaciones translacionales cuantificadas por la temperatura granular Θ_p .

La presión colisional p_{pq}^{col} causada por las colisiones entre las fases p y q y se calcula como [133]:

$$p_{pq}^{col} = \frac{\pi}{3} d_{pq}^3 g_{pq} (1 + e_{pq}) n_p n_q m_p m_q \left(\frac{m_{pq} \Theta_p \Theta_q}{(m_p^2 \Theta_p + m_q^2 \Theta_q)} \right) \left(\frac{m_{pq}^2 \Theta_q}{(m_p^2 \Theta_p + m_q^2 \Theta_q)} \frac{\Theta_p}{(\Theta_p + \Theta_q)} \right)^{3/2} \quad (2.8)$$

donde e , d , n y m son el coeficiente de restitución, el diámetro, número⁴ y masa de las partículas respectivamente. g_{pq} es la función de distribución radial cuyo significado y expresión se presenta en la sección siguiente.

El coeficiente de restitución cuantifica la energía disipada en las colisiones, y su valor es uno para colisiones totalmente elásticas y cero para colisiones totalmente inelásticas.

Los valores promedio pq entre las fases p y q se calculan como sigue:

$$d_{pq} = \frac{1}{2}(d_p + d_q) ; e_{pq} = \frac{1}{2}(e_p + e_q) ; m_{pq} = (m_p + m_q) \quad (2.9)$$

Si las partículas son esféricas, el número de partículas y la masa de la partícula se calculan como:

$$n_p = r_p/V_p = \frac{6}{\pi d_p^3} r_p ; m_p = \rho_p V_p = \frac{\pi d_p^3}{6} \rho_p \quad (2.10)$$

siendo V_p el volumen de partícula.

2.3.1.2. Función de distribución radial

La función de distribución radial g_p es un factor de corrección que modifica la probabilidad de colisión de las partículas cuando la fase sólida es densa. Esta función, que puede ser interpretada como una distancia entre las partículas adimensionalizada, tiende a uno cuando el flujo es diluido y a infinito cuando es tan denso que el movimiento de las partículas es imposible.

Mathiesen et al. [133] proponen el uso de la la función propuesta implícitamente por Bagnold [15], que generalizan a un número arbitrario de fases sólidas N_s

$$g_0 = \left[1 - \left(\frac{\sum^{N_s} r_q}{r_p^{Me}} \right)^{\frac{1}{3}} \right]^{-1} ; g_{pq} = \frac{\frac{1}{2}(r_p + r_q)}{\frac{1}{N_s} \sum^s r_q} g_0 \quad (2.11)$$

En esta Tesis se propone $g_{pq} = g_0$ para el cálculo de la función radial promedio entre dos fases, que permite mantener la consistencia⁵ de la expresión anterior para fracciones de sólido no equidistribuidas.

⁴Número de partículas por unidad de volumen

⁵ La función de distribución radial debe reducirse a la función monodispersa para multiples fases sólidas con partículas idénticas, tomar valor infinito para el máximo empaquetamiento y ser una expresión de la probabilidad de colisión entre las fases [133]. Además para que la formulación sea consistente para cualquier pareja de fases se ha de cumplir que $g_{pp} = g_{qq} = g_{pq}$ (Ecuación 46 en Mathiesen et al. [133]), que la formulación anterior (Ecuación 2.11) no cumple para tres o más fases no equidistribuidas

El término r_p^{Me} se denomina fracción de máximo empaquetamiento Me , que se define como la fracción volumétrica de sólido cuando las partículas están dispuestas de forma que ocupan el mayor espacio posible⁶.

2.3.1.3. Viscosidad de sólido

En el tensor de esfuerzos de las fases sólidas es relevante tanto el primer coeficiente de viscosidad μ_p de deformación pura, como el segundo ξ_p de compresión (o viscosidad de *bulk*).

El segundo coeficiente de viscosidad cuantifica la resistencia de la fase a la expansión y compresión, debida a los choques entre partículas, y es [133]:

$$\xi_p = \sum^{N_s} p_{pq}^{col} \frac{d_{pq}}{3} (m_p \Theta_p + m_q \Theta_q) \sqrt{\frac{2}{\pi \Theta_p \Theta_q (m_p^2 \Theta_p + m_q^2 \Theta_q)}} \quad (2.12)$$

La viscosidad de deformación (o de corte) representa el intercambio de cantidad de movimiento de las partículas debido a su colisión (μ_p^{col}) y su translación (μ_p^{cin}). Estos términos pueden expresarse matemáticamente como [133]:

$$\mu_p = \mu_p^{col} + \mu_p^{cin} \quad (2.13)$$

$$\mu_p^{col} = \sum^{N_s} p_{pq}^{col} \frac{d_{pq}}{5} (m_p \Theta_p + m_q \Theta_q) \sqrt{\frac{2}{\pi \Theta_p \Theta_q (m_p^2 \Theta_p + m_q^2 \Theta_q)}} \quad (2.14)$$

$$\mu_p^{cin} = \frac{2\mu_p^{dil}}{\frac{1}{N_s} \sum^{N_s} (1 + e_{pq}) g_{pq}} \left(1 + \frac{4}{5} \sum^{N_s} r_p (1 + e_{pq}) g_{pq} \right)^2 \quad (2.15)$$

donde:

$$\mu_p^{dil} = \frac{15}{8d_{pq}^3} r_p l_p \sqrt{\frac{2m_p \Theta_p}{\pi}}; \quad l_p = \frac{1}{6\sqrt{2}} \frac{d_p}{r_p} \quad (2.16)$$

Para asegurar un valor finito de la viscosidad diluida μ_p^{dil} , ha de acotarse el recorrido libre medio de las partículas l_p a una dimensión característica⁷.

⁶Por ejemplo, para esferas sólidas uniformes empacadas de forma óptima $r_p^{Me} = \frac{1}{3\sqrt{2}} \approx 0,74$. Si el empaquetamiento se realiza de forma aleatoria el valor máximo es aproximadamente de 0,64 [191]. Este valor de 0,64 es utilizado habitualmente, cuando se desconoce el dato experimental en el modelado multifásico [64]

⁷Se suele utilizar la dimensión característica de la celda computacional

El valor de la energía granular promedio para la fase p en la mezcla $\bar{\Theta}_p$ (utilizado en la expresión anterior) se puede calcular como:

$$\frac{\bar{\Theta}_p}{2m_p\Theta_p} = \left(\sum^{N_s} \frac{n_p}{n_q} \frac{d_{pq}^2}{d_q^2} \left(\frac{m_{pq}^2\Theta_p}{(m_p^2\Theta_p + m_q^2\Theta_q)} \right)^2 \left(\frac{\Theta_q}{(\Theta_p + \Theta_q)} \right)^{3/2} \right)^{-2} \quad (2.17)$$

2.3.1.4. Ecuación de conservación de la energía granular

Se considera que la temperatura granular es distinta para cada fase sólida y se calcula a través de una ecuación de transporte para la conservación de energía granular, deducida a partir de los principios de la Teoría Cinética del Flujo Granular [133]:

$$\frac{3}{2} \left[\frac{\partial}{\partial t} (r_p \rho_p \Theta_p) + \nabla \cdot (r_p \rho_p \mathbf{v}_p \Theta_p) \right] = \tau_p :: \nabla \mathbf{v}_p + \nabla \cdot (r_p \Gamma_p^\Theta \nabla \Theta_p) - \gamma_p - 3f_{gp}^v \Theta_p \quad (2.18)$$

donde los términos en el lado derecho de la ecuación representan la producción de energía granular por rozamiento, el flujo difusivo, la disipación debida a colisiones inelásticas γ_p , y la disipación debida a la fricción con el fluido. Para este último término se ha introducido la formulación propuesta por Ding y Gidaspow [54] que la supone proporcional al coeficiente de arrastre.

El término de generación por fluctuaciones en el arrastre fluido-partícula (no expresado) se ha considerado despreciable [11, 133].

La deducción de la ecuación de transporte para la temperatura granular Θ_p proporciona las expresiones para el cálculo del coeficiente de conductividad de la temperatura granular ($\kappa_p = r_p \Gamma_p^\Theta$) y la disipación de energía granular γ_p .

El coeficiente de conductividad de la temperatura granular κ_p se compone de una parte diluida y otra densa:

$$\kappa_p = \frac{2\kappa_p^{dil}}{\frac{1}{N_s} \sum^{N_s} (1 + e_{pq}) g_{pq}} \left(1 + \frac{6}{5} \sum_s (1 + e_{pq}) g_{pq} r_q \right)^2 + 2r_p \rho_p d_p \sqrt{\frac{\Theta_p}{\pi}} \sum^{N_s} (1 + e_{pq}) g_{pq} r_q \quad (2.19)$$

siendo la conductividad diluida:

$$\kappa_p^{dil} = \frac{225}{32} r_p l_p \sqrt{\frac{2m_p \bar{\Theta}_p}{\pi}} \quad (2.20)$$

donde, para asegurar que la conductividad diluida κ_p^{dil} es finita conforme la fracción de sólido tiende a cero, el recorrido libre medio de las partículas l_p se acota como en el cálculo de la viscosidad diluida μ_p^{dil} (ver Ecuación 2.16).

La disipación de energía granular γ_p se expresa como:

$$\gamma_p = \sum_{N_s} \frac{3}{4} p_{pq}^{col} (1 - e_{pq}) \left[\frac{4}{d_{pq}} \sqrt{\frac{2m_{pq}^2 \Theta_p \Theta_q}{\pi(m_p^2 \Theta_p + m_q^2 \Theta_q)}} - m_{pq} \frac{m_p \Theta_p + m_q \Theta_q}{m_p^2 \Theta_p + m_q^2 \Theta_q} \nabla \mathbf{v}_p \right] \quad (2.21)$$

2.3.2. Modelo friccional

El flujo denso se produce cuando la fracción volumétrica de sólidos es suficientemente alta para que las partículas mantengan un contacto continuo entre ellas. En estas condiciones los esfuerzos entre las partículas se generan por la interacción friccional en puntos donde se produce este contacto ininterrumpido. La descripción mediante leyes constitutivas de los esfuerzos friccionales bajo condiciones de flujo lento casi-estático suele estar basada en la teoría del estado crítico de la mecánica de suelos. Los modelos reológicos formulados para describir este flujo se denominan modelos friccionales y juegan un importante papel en el modelo constitutivo para el sólido.

En el modelado del régimen diluido no se necesita este tipo de modelo, o se aplican aproximaciones sencillas que evitan que se produzca localmente un empaquetamiento superior al máximo teórico. Estas aproximaciones no son capaces de reproducir todas las características del flujo denso, como las variaciones del comportamiento en función de la velocidad de deformación o la lenta relajación de la superficie del conjunto de partículas [200].

Srivastava y Sundaresan [201] parten del modelo reológico planteado por Schaeffer [176], y deducen expresiones para la la presión y viscosidad en función de la velocidad de deformación a partir del valor de presión en el estado crítico, donde el conjunto de sólidos se deforma sin cambio de volumen.

Para calcular el valor crítico para la presión utilizan la expresión propuesta por Johnson y Jackson [111]:

$$p_c^{fri} = \begin{cases} Fr \frac{(\sum_s r_s - r_s^{mf})^r}{(\sum_s r_s - r_s^{Me})^s} & \text{si } r_p^{Me} \geq \sum r_p > r_p^{mf} \\ 0, & \text{si } \sum r_p \leq r_p^{mf} \end{cases} \quad (2.22)$$

donde los valores de Fr , r y s se suelen tomar como 0,05, 2 y 5 respectivamente. r_p^{mf} es el valor de fracción volumétrica a partir del que se considera flujo denso (mf , mínimo

friccional), que habitualmente se suele considerar 0,5. Algunos autores consideran que el sólido se halla en estado crítico y, despreciando la compresibilidad de la fase sólida, utilizan esta expresión para el cálculo de la presión friccional.

Srivastava y Sundaresan consideran esta contribución y proponen las siguientes expresiones en función de la presión crítica y la velocidad de deformación.

La presión friccional se calcula como:

$$\frac{p_p^{fri}}{p_c^{fri}} = 1 - \frac{\nabla \cdot \mathbf{v}_p}{z_p \sqrt{2} \operatorname{sen}(\Phi^f) \sqrt{\xi_p :: \xi_p + \Theta_p/d_p^2}} \quad (2.23)$$

donde Φ^f es el ángulo de fricción interna o ángulo de rozamiento interno⁸. z_p y ξ_p se definen como:

$$z_p = \begin{cases} \frac{\sqrt{3}}{2 \operatorname{sen}(\Phi^f)}, & \text{si } \nabla \cdot \mathbf{v}_p \geq 0 \\ 1,03, & \text{si } \nabla \cdot \mathbf{v}_p < 0 \end{cases} \quad (2.24)$$

$$\xi_p = \frac{1}{2} [\nabla \mathbf{v}_p + (\nabla \mathbf{v}_p)^T] - \frac{1}{3} (\nabla \cdot \mathbf{v}_p) \mathbf{I} \quad (2.25)$$

El primer y segundo coeficiente de viscosidad se expresan como:

$$\mu_p^{fri} = \frac{\sqrt{2} p_p^{fri} \operatorname{sen}(\Phi^f)}{\sqrt{\xi_p :: \xi_p + \Theta_p/d_p^2}} \left(z_p - (z_p - 1) \left(\frac{p_p^{fri}}{p_c^{fri}} \right)^{\frac{1}{z_p-1}} \right) \quad (2.26)$$

$$\xi_p^{fri} = -\frac{2}{3} \mu_p^{fri} \quad (2.27)$$

Estas expresiones para flujo de un sólido monodisperso han sido modificadas en esta Tesis para tener en cuenta la presencia de varias fases sólidas mediante términos de sumatorio y de reparto que tienen en cuenta la contribución de las distintas fases sólidas. Las expresiones modificadas son las siguientes:

$$\frac{p_p^{fri}}{p_c^{fri}} = \left(1 - \frac{\nabla \cdot \mathbf{v}}{z_p \sqrt{2} \operatorname{sen}(\Phi^f) \sqrt{\xi :: \xi + \frac{\sum_s r_s \Theta_s/d_s^2}{\sum_s r_s}}} \right) \frac{r_p}{\sum r_p} \quad (2.28)$$

$$\mu_p^{fri} = \frac{\sqrt{2} p_p^{fri} \operatorname{sen}(\Phi^f)}{\sqrt{\xi :: \xi + \frac{\sum_s r_s \Theta_s/d_s^2}{\sum_s r_s}}} \left(z_p - (z_p - 1) \left(\frac{p_p^{fri}}{p_c^{fri}} \right)^{1/z_p-1} \right) \frac{r_p}{\sum_s r_s} \quad (2.29)$$

$$\xi_p^{fri} = -\frac{2}{3} \mu_p^{fri} \quad (2.30)$$

⁸ Es decir, el ángulo máximo que forman la pendiente de la mezcla de sólidos amontonados en reposo

donde z_p , y ξ_p mantienen las expresiones anteriores pero en su cálculo se utiliza la velocidad promedio \mathbf{v} , que se define como:

$$\mathbf{v} = \sum_s r_s \mathbf{v}_s \quad (2.31)$$

La formulación presentada se reduce en el caso de una única fase sólida a la formulación original para flujo monosólido de Srivastava y Sundaresan [201] (Ecuaciones 2.23 a 2.25). Estos términos se han introducido de forma análoga a los presentados por otros autores para otros modelos friccionales [209].

El modelo algebraico expuesto causa la respuesta inmediata de la presión friccional a cambios en la velocidad de deformación. En su aplicación en la simulación numérica esta velocidad de respuesta puede generar oscilaciones (inestabilidades) en los resultados. En esta Tesis se ha implementado la solución sugerida por Srivastava y Sundaresan [201] que complementa el modelo con la resolución de una ecuación de transporte para el cociente de presión friccional y presión crítica:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{p_p^{fri}}{p_c^{fri}} \right) - \nabla \cdot \left(\mathbf{v} \frac{p_p^{fri}}{p_c^{fri}} \right) = \frac{\left(p_p^{fri}/p_c^{fri} \right)^* - \left(p_p^{fri}/p_c^{fri} \right)}{\tau^{fri}} \quad (2.32)$$

donde * indica el valor calculado según la Ecuación 2.23, \mathbf{v} es la velocidad promedio, y τ^{fri} es un tiempo característico de relajación.

2.3.3. Modelo combinado friccional-cinético

El grado de concentración de las partículas (la fracción volumétrica en la descripción euleriana) marca en gran medida el régimen del flujo granular: viscoso en el caso de flujo diluido o plástico (denso).

Ambos regímenes pueden aparecer a la vez en distintas zonas en flujos de importancia industrial. Por ejemplo, para el caso de lechos fluidos, en la parte superior del lecho (*freeboard*) el flujo es diluido dominando los esfuerzos cinéticos, mientras que en la parte inferior el lecho es denso. En esta parte inferior pueden existir zonas donde dominen los esfuerzos friccionales debido a la alta concentración de partículas. En la zona de transición los dos tipos de esfuerzos son de magnitud comparable. Es necesario, por tanto, utilizar modelos que puedan predecir el comportamiento reológico en estas zonas.

Debido a la distinta naturaleza de las teorías que describen ambos regímenes no existe una teoría unificadora que describa el régimen intermedio. De forma eminentemente práctica se suelen combinar los modelos viscosos y friccionales, en lo que se conoce como aproximación friccional-cinética, principalmente mediante dos formas alternativas.

La más sencilla consiste en aplicar los dos tipos de modelos alternativamente estableciendo una fracción volumétrica crítica de empaquetamiento, a través de una fracción de vacío mínima r_g^{mf} . Cuando las concentraciones de sólido son mayores que el valor crítico fijado se utiliza el modelo friccional, y cuando es menor el modelo cinético. Es decir:

$$\tau_s = \begin{cases} \tau_s^{vis} & r_g \geq r_g^{mf} \\ \tau_s^{fri} & r_g < r_g^{mf} \end{cases} \quad (2.33)$$

Aunque esta aproximación es utilizada habitualmente (por ejemplo, es la implementada en el código MFIX [209] o en los trabajos de Tesis de Syamlal [205] y Sun [203]), presenta la desventaja principal de no poder capturar la transición entre regímenes.

Una estrategia alternativa propuesta por Savage [175], consiste en calcular el tensor de esfuerzos como la suma de los esfuerzos viscosos y friccionales. Es decir, la presión y la viscosidad (los dos coeficientes) de una fase sólida s se expresan:

$$p_s^s = p_s^{vis} + p_s^{fri} \quad (2.34)$$

$$\mu_s = \mu_s^{vis} + \mu_s^{fri} \quad (2.35)$$

$$\xi_s = \xi_s^{vis} + \xi_s^{fri} \quad (2.36)$$

Se ha comprobado que esta aproximación aditiva identifica adecuadamente los dos comportamientos extremos del flujo granular y permite, además, capturar la transición entre ambos regímenes [147]. Se ha utilizado con éxito para predecir el comportamiento cualitativo de un amplio rango de flujos como el flujo descendente en canales inclinados, el flujo entre dos placas paralelas, y el flujo a través de poros [201].

2.4. Modelos de transferencia de cantidad de movimiento entre fases

El coeficiente de intercambio de cantidad de movimiento entre las fases, gas-sólido y sólido-sólido, es un parámetro clave en la simulación de la hidrodinámica en un lecho fluido. El intercambio de cantidad de movimiento en flujos sólido-gas, donde las partículas son relativamente pequeñas y su densidad es mucho mayor que la del gas, está dominado por las fuerzas de arrastre despreciándose la contribución de otras fuerzas como la de sustentación o la de masa virtual [222].

La fuerza de arrastre de un fluido sobre una partícula aislada ha sido ampliamente estudiada y correlacionada para un amplio rango de número de Reynolds [31, 43]. Sin embargo, cuando la partícula se desplaza en una mezcla gas-sólido, el intercambio de

cantidad de movimiento es afectado por la presencia de otras partículas, debiéndose postular nuevas correlaciones que tengan en cuenta estas interacciones.

Se han propuesto diversos modelos para el coeficiente de arrastre gas-sólido (f_{gp}^v en la Ecuación 2.4). Dichos modelos proponen expresiones basadas (típicamente) en datos de sedimentación de partículas (*e.g.* [208]), de experimentación en lechos empacados (*e.g.* [57]) o del funcionamiento de lechos fluidos (*e.g.* [228]). La configuración experimental utilizada en su formulación determina su rango de aplicación.

En presencia de varias fases sólidas es además necesario cuantificar el intercambio de cantidad de movimiento entre ellas debido a las colisiones partícula-partícula, mediante un término adicional en su ecuación de cantidad de movimiento f_{mn}^v .

En el marco euleriano-euleriano, la Teoría Cinética del Flujo Granular proporciona herramientas para el tratamiento adecuado del coeficiente de transferencia sólido-sólido. Sin embargo, la formulación de expresiones equivalentes para el arrastre gas-sólido no es un problema cerrado. Se continúa investigando cómo afecta a la solución el proceso de promediado volumétrico de los términos de arrastre [25, 101] y se siguen postulando nuevos modelos que cuantifican el efecto sobre el arrastre de las estructuras de partículas no resueltas (por ser su tamaño menor al de la celda computacional; ver, por ejemplo [26] o [237]).

Los modelos de arrastre fluido-sólido y sólido-sólido utilizados en esta Tesis son descritos en las secciones siguientes.

2.4.1. Modelos de arrastre gas-sólido

La transferencia de cantidad de movimiento gas-sólido suele ser cuantificada mediante el uso de modelos semi-empíricos que extienden para flujo denso los modelos obtenidos para flujo muy diluido o considerando una partícula esférica aislada. Los modelos así obtenidos han de ajustarse para predecir adecuadamente la fluidodinámica del flujo fluidizado (*e.g.* la velocidad mínima de fluidización).

Además, con objeto de contabilizar el efecto en la fluidodinámica de la forma de las partículas (*i.e.* partículas no esféricas) o de incluir el efecto de clústeres de partículas que afectan al arrastre (muy importante en el tratamiento de sólidos cohesivos), estos modelos suelen utilizar un diámetro aparente de la partícula o un diámetro equivalente para el clúster de partículas.

La aplicación en modelos eulerianos de los modelos desarrollados para una partícula aislada requiere la integración de las fuerzas de arrastre para cada volumen de control,

habitualmente como el sumatorio aplicado sobre las partículas en él contenidas. El uso de valores promedio de partícula en la celda computacional necesita especial cuidado.

Estos modelos son capaces de capturar las estructuras observadas experimentalmente que se producen en el flujo gas-sólido (*e.g.* burbujas o agrupaciones de partículas). Para ello, la discretización espacial utilizada ha de resolver las estructuras del tamaño de partícula ($\approx 10 - 100$ veces su tamaño) [4, 9].

Sin embargo, algunas configuraciones requieren el uso de mallas gruesas para que su simulación sea computacionalmente abordable (*e.g.* equipos industriales). En estos casos para capturar las estructuras no resueltas se han propuesto distintas soluciones como la introducción de términos de filtrado (ver, por ejemplo, [25, 101]), la modificación de los coeficientes de arrastre en función de la presencia de partículas a partir de modelos complementarios [237], o el uso de un diámetro equivalente para los clústeres de partículas [68]. Para las simulaciones llevadas a cabo en esta Tesis es viable utilizar un refinado suficiente no requiriendo la aplicación de este tipo de submodelos.

De los distintos modelos que se pueden encontrar en la literatura para flujo bifásico gas-sólido sólo algunos son extensibles de forma consistente al modelado del flujo con varias fases sólidas. Para que el modelo sea consistente, la fuerza de arrastre para una fase p , de fracción volumétrica r_p , debe ser la misma independientemente que la fase se represente como una única o mediante la agregación de N_s fases idénticas r_q (donde $r_p = \sum_s r_q$).

En esta sección se indican los modelos de arrastre aplicados en esta Tesis, expresados de manera consistente (en el sentido del párrafo anterior). Las definiciones siguientes utilizan el número de Reynolds basado en la velocidad relativa entre fases:

$$Re_{sg} = \frac{\rho_s d_s |\mathbf{u}_s - \mathbf{u}_g|}{\mu_g} \quad (2.37)$$

Modelo de Syamlal y O'Brien [208] Este modelo se basa en las mediciones para la velocidad terminal de una partícula aislada. Los autores postulan la siguiente correlación, donde el coeficiente de arrastre es sólo función de la fracción volumétrica de las fases y el número de Reynolds relativo [172]:

$$f_{gs}^v = \frac{3r_s r_g}{4d_s} \rho_g C_D \frac{Re_{sg}}{V_{rs}^3} |\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_s| \quad (2.38)$$

donde el coeficiente de arrastre, C_D , se toma de Dalla Valle [50]:

$$C_D = \left(0,63 + 4,8 \sqrt{\frac{V_{rs}}{Re_{sg}}} \right)^2 \quad (2.39)$$

Para la velocidad terminal de la fase sólida V_{rs} se utiliza la correlación planteada por Garside y Al-Dibouni [69]:

$$V_{rs} = 0,5(-A + \sqrt{A^2 + 0,24BRe_{sg}}) \quad (2.40)$$

siendo:

$$A = 0,06Re_{sg} - r_g^{4,14} \quad (2.41)$$

$$B = \begin{cases} 0,8r_g^{1,28} & r_g < 0,85 \\ r_g^{2,65} & r_g \geq 0,85 \end{cases} \quad (2.42)$$

Modelo de Wen y Yu [228] El coeficiente de intercambio de cantidad de movimiento entre el fluido y sólido propuesto por estos autores para sistemas diluidos ($0,001 \leq r_g < 0,63$) es:

$$f_{gs}^v = \frac{3}{4}C_D \frac{r_s r_g \rho_g}{d_g} |\mathbf{v}_s - \mathbf{v}_g| r_g^{-2,65} \quad (2.43)$$

donde

$$C_D = \begin{cases} \frac{24,0}{r_g Re_{sg}} (1,0 + 0,15(r_g Re_{sg})^{0,687}) & r_g Re_{sg} < 1000 \\ 0,44 & r_g Re_{sg} > 1000 \end{cases} \quad (2.44)$$

Modelo de Ergun [57] Ergun propone una correlación empírica para la caída de presión en lechos empaquetados ($r_g \leq 0,8$). A partir de dicha expresión se puede obtener⁹ igualando la pérdida de presión y la fuerza de arrastre, una expresión para el coeficiente de arrastre:

$$f_{gs}^v = 150 \frac{r_s(1-r_g)\mu_g}{r_g d_s^2} + 1,75 \frac{r_s \rho_g |\mathbf{v}_s - \mathbf{v}_g|}{d_s} \quad (2.45)$$

Modelo de Gidaspow et al. [74] El modelo de Gidaspow [74] es una combinación de los dos modelos anteriores, utilizando cada uno de ellos para el régimen para el que ha sido propuesto.

$$f_{gs}^v = \begin{cases} 150 \frac{r_s(1-r_g)\mu_g}{r_g d_s^2} + 1,75 \frac{r_s \rho_g |\mathbf{v}_s - \mathbf{v}_g|}{d_s} & \text{para } r_g \leq 0,8 \\ \frac{3}{4}C_D \frac{r_s r_g \rho_g}{d_s} |\mathbf{v}_s - \mathbf{v}_g| r_g^{-2,65} & \text{para } r_g > 0,8 \end{cases} \quad (2.46)$$

donde C_D se expresa según la ecuación 2.44.

⁹Si, como es habitual en la deducción de expresiones para el coeficiente de arrastre, se supone el estado estacionario y se desprecia la aceleración, la gravedad y la fricción con las paredes.

Esta expresión, aunque utilizada frecuentemente en la literatura, presenta una discontinuidad en el coeficiente de transferencia en $r_g = 0,8$ que puede llevar a inestabilidades numéricas. Para evitarlas Huilin y Gidaspow [95] proponen el uso de una función de suavizado:

$$f_{gs}^v = \beta_g f_{gs}^v|_{r_g \leq 0,8} + (1 - \beta_g) f_{gs}^v|_{r_g > 0,8} \quad (2.47)$$

donde

$$\beta_g = \arctan \left(150 \frac{1,75(r_g - 0,8)}{\pi} \right) + 0,5 \quad (2.48)$$

2.4.2. Modelos de arrastre sólido-sólido

Los modelos de arrastre sólido-sólido cuantifican el intercambio de cantidad de movimiento debido a las colisiones y rozamiento entre partículas de distintas fases.

En la aproximación euleriana este coeficiente puede obtenerse mediante un cálculo estadístico de estas interacciones para el conjunto de partículas en el volumen de control. La Teoría Cinética del Flujo Granular permite cuantificar estas interacciones y la deducción de expresiones para este término.

Modelo de Syamlal [206] Estos autores deducen la siguiente expresión para el arrastre sólido-sólido entre partículas esféricas y suaves:

$$f_{qp}^v = \frac{3 r_p \rho_p r_q \rho_q (d_p + d_q)^2}{4 (\rho_p d_p^3 + \rho_q d_q^3)} \left(1 + C_{fr} \frac{\pi}{4} \right) g_{0pq} (1 + e_{pq}) |\mathbf{v}_p - \mathbf{v}_q| \quad (2.49)$$

donde C_{fr} es el coeficiente de fricción, que tiene en cuenta el intercambio de cantidad de movimiento por el rozamiento entre partículas (ley de Coulomb). Este término habitualmente se desprecia ($C_{fr} = 0$).

Modelo de Manger [131] Este autor propone un coeficiente de arrastre sólido-sólido en función de la presión colisional y de la temperatura granular de ambas fases, evaluadas de acuerdo con la formulación de la Teoría Cinética del Flujo Granular de Mathiesen et al. [133].

$$f_{qp}^v = p_{pq}^{col} \left\{ \frac{3}{d_{pq}} \sqrt{\frac{2 (m_p^2 \Theta_p + m_q^2 \Theta_q)}{\pi m_{pq}^2 \Theta_p \Theta_q}} + \frac{1}{|\mathbf{v}_p - \mathbf{v}_q|} \left[\nabla \left| \ln \frac{r_p}{r_q} \right| + \frac{\Theta_p \Theta_q}{\Theta_p + \Theta_q} \left| \frac{\nabla \Theta_p}{\Theta_p^2} - \frac{\nabla \Theta_q}{\Theta_q^2} \right| + 3 \nabla \left| \frac{\ln(m_p \Theta_p)}{\ln(m_q \Theta_q)} \right| \right] \right\} \quad (2.50)$$

2.5. Modelado de la transferencia de calor gas-sólido

En esta Tesis se considera una única fase gaseosa g , que intercambia calor con múltiples fases granulares s , despreciando el intercambio directo entre estas últimas. La transferencia de calor entre la fase gaseosa y cada una de las fases sólidas se asume (en su formulación) proporcional a la diferencia de temperatura. Estos términos de transferencia de calor se introducen en la ecuación para la temperatura de la fase gas y de las fases sólidas (Ecuación 2.6), respectivamente de la siguiente forma:

$$Q_g = \sum_s Q_{gs} \quad ; \quad Q_{gs} = f_{gs}^h (T_s - T_g) \quad (2.51)$$

$$Q_s = Q_{sg} \quad ; \quad Q_{sg} = f_{sg}^h (T_s - T_g) \quad (2.52)$$

siendo $f_{gs}^h = f_{sg}^h$ (y por tanto $Q_s = -Q_{gs}$).

La transferencia de calor entre la fase gaseosa y las fases sólidas ocurre a través de la película de gas que rodea a la partícula. Para evaluar el coeficiente de transferencia de calor f_{gs}^h se recurre a leyes físicas o a correlaciones empíricas, normalmente a través del número adimensional de Nusselt Nu_{gs} asociado a la partícula:

$$f_{gs}^h = \frac{6r_g r_s}{d_s^2} \Gamma_g^T Nu_{gs} \quad (2.53)$$

donde Γ_g^T es la conductividad térmica del gas y d_s es el diámetro de partícula.

La presencia en la expresión anterior de la fracción volumétrica de ambas fases anula el flujo de calor cuando la fase sólida no está presente. En esta Tesis se utiliza esta expresión, sin embargo en otros códigos (ver, por ejemplo, [209]) no se incluye en esta la cantidad de materia de la fase sólida pudiéndose predecir la existencia fuerzas de arrastre en ausencia de sólido.

Entre las correlaciones empíricas disponibles en la literatura para el número de Nusselt Nu_{gs} en lechos fluidos (ver, por ejemplo, [205] o [177]), se ha optado por la propuesta de Gunn [83], válida para flujos granulares en un rango de fracción volumétrica de gas $r_p = 0,35 - 1,00$ y un número de Reynolds $Re_{gs} < 1,0 \times 10^5$, que es la opción utilizada como base en los códigos comerciales MFIX [209] y Fluent [64], y su formulación es la siguiente:

$$Nu_{gs} = \left(7 - 10r_g + 5r_g^2\right) \left(1 + 0,7Re_{gs}^{0,2} Pr_g^{1/3}\right) + \left(1,33 - 2,4r_g + 1,2r_g^2\right) Re_{gs}^{0,7} Pr_g^{1/3} \quad (2.54)$$

donde Re_{gs} es el número de Reynolds, basado en el diámetro de las partículas de la fase s y la velocidad relativa (definido en la Ecuación 2.37); y Pr_g es el número de Prandtl

de la fase gaseosa:

$$Pr_g = \frac{Cp_g \mu_g}{\Gamma_p^T} \quad (2.55)$$

2.6. Modelado de la conductividad de las fases sólidas

El modelado de la transferencia de calor por conducción entre las partículas no es sencilla. Como señala Syamlal [205], el coeficiente de conducción térmica (Γ_s^T) no debe igualarse a la del propio material ($\Gamma_s^T \neq \Gamma_{en\ el\ sólido}^T$) puesto que la distribución granular reduce considerablemente la conducción de calor (especialmente en lechos diluidos). Evidencias experimentales, sin embargo, indican que la presencia de fases sólidas incrementan considerablemente la transferencia de calor lecho-pared, y este fenómeno no se puede reproducir si se desprecia el flujo de calor entre partículas ($\Gamma_s^T = 0$).

Los mecanismos de transferencia de calor de partícula a partícula son complejos. Existen correlaciones empíricas que tienen en cuenta las distintas contribuciones al flujo por conducción:

- la que se produce a través del área de *contacto directo* entre las partículas,
- aquella que se produce a través del fluido atrapado entre las partículas,
- el *flujo radiante* entre las partículas,
- la resistencia a la transferencia de calor debido a la inhibición del movimiento de las moléculas de gas entre las partículas (efecto Smoluchowski).

En este trabajo se ha optado, entre los modelos disponibles en la literatura, por el utilizado por Syamlal y Gidaspow [207]. Es un modelo sencillo, aplicable a lechos fluidos y que, basado en datos experimentales, supone que el coeficiente de transferencia de calor entre sólidos es proporcional al del gas. Es decir, que la conductividad térmica de la fase granular es un múltiplo del de la fase gas. Para valores típicos de Γ_s^T y r_g el valor del cociente Γ_s^T/Γ_g^T está comprendido en el intervalo 1,0 – 5,0.

2.7. Densidades de la fase gas y sólidas

El cierre de las ecuaciones de transporte requiere una expresión que determine la densidad en función, en su caso, del resto de propiedades termodinámicas.

La densidad de la fase gaseosa se calcula como la correspondiente a una mezcla de gases ideales. Se calcula como la siguiente función de la presión, temperatura y composición química:

$$\rho_g = \frac{p}{R_c T_g} \sum_{\alpha} \frac{y_g^{\alpha}}{W^{\alpha}} = \psi_g p \quad (2.56)$$

donde W^{α} es el peso molecular de la especie química α . La densidad del gas ρ_g en ocasiones se expresa (última igualdad) en función del coeficiente de compresibilidad adiabático ψ_g .

La densidad de las fases sólidas se calcula a partir de la densidad de sus componentes ρ^{α} como:

$$\frac{1}{\rho_s} = \sum_{\alpha} \frac{y_s^{\alpha}}{\rho^{\alpha}} \quad (2.57)$$

CAPÍTULO 3

Modelado de la reacción química y de la transferencia de materia entre fases

Las fases presentes en un lecho fluido reactivo experimentan procesos de transferencia de masa y de reacción química. En este capítulo se presentan los modelos necesarios para la descripción numérica de estos fenómenos, tanto de forma general, como de forma específica para la combustión de carbón. Se discute también el tratamiento necesario de los modelos para su utilización en la simulación euleriana-euleriana del flujo multifásico como términos fuente en las ecuaciones de transporte.

El modelado de los procesos químicos y de transferencia de masa comienza con la descripción numérica de la estructura y composición de la partícula combustible (Sección 3.1). Cada uno de estos procesos (típicamente secado, devolatilización, y reacción química), que se introducen en la Sección 3.2, se modela habitualmente de forma independiente, y se incluye en las ecuaciones de transporte resueltas como un nuevo término fuente. El tratamiento de este término fuente de transferencia de masa en las ecuaciones de transporte se describe en la Sección 3.3.

La transferencia de masa puede modificar el tamaño de la partícula de carbón. El cambio de tamaño de carbón en modelos eulerianos puede modelarse mediante la resolución de una nueva ecuación de transporte como se describe en la Sección 3.4.

La parte final del capítulo describe, en distintas secciones, los modelos específicos para los distintos procesos que tienen lugar en la partícula: secado (Sección 3.5), reacción química (Sección 3.6) y devolatilización (Sección 3.7).

3.1. Modelado de la partícula de carbón

La descripción del modelado de la partícula de carbón se ha dividido en dos apartados. En el primero se estudia la descripción numérica de la composición de la partícula de carbón (Sección 3.1.1). En el segundo se trata el modelado de la estructura interna de la partícula (Sección 3.1.2).

3.1.1. Modelado de la composición del carbón

El carbón es una estructura macromolecular heterogénea mayoritariamente orgánica. Esta estructura comprende una gran variedad de compuestos orgánicos e inorgánicos. La mayor parte de compuestos son orgánicos; además de C, H, N, y O, se encuentran (entre otros) S, Fe, Ca, Al, Si, Zn, Na, K, o Mg [193].

La composición en especies químicas y la composición atómica de carbón se determina mediante dos tipos de análisis: inmediato y elemental.

El análisis inmediato se realiza en cuatro etapas, en las que se somete al carbón a distintas temperaturas y atmósferas. La pérdida de peso medida en cada etapa se atribuye a una componente:

- Humedad: Peso perdido en atmósfera inerte a 378K.
- Volátiles: Peso perdido en atmósfera inerte a 1300K.
- Carbono fijo: Peso perdido en atmósfera oxidante (O_2).
- Cenizas: Peso restante.

El análisis elemental se realiza por distintas técnicas analíticas, en las que se determina su composición en C, O, H, N, y S. Además es común incluir, como un elemento adicional, las cenizas, que están formadas principalmente por una mezcla de diversos óxidos (*e.g.* MgO_2).

En función de su composición elemental (de mayor a menor contenido en carbono y relación elemental entre hidrógeno y carbono) los carbones se suelen clasificar como [193]: antracita, bituminoso, subbituminoso, y lignito. Estudios detallados sobre la estructura y composición de distintos carbones se pueden encontrar en [100].

La partícula de carbón puede modelarse como diversas cadenas de polímero que se rompen (despolimerizan) y reaccionan químicamente [148]. Sin embargo este tratamiento

está limitado, por su alta demanda computacional, a partículas aisladas de carbón y a ciertos procesos (*e.g.* devolatilización [150]).

Para que el modelado de la partícula en cálculos de Fluidodinámica Computacional sea viable, con los recursos computacionales habitualmente disponibles, a menudo se considera que cada partícula está compuesta únicamente por las fracciones resultantes del análisis inmediato: carbón bruto o *coal*, carbono fijo o *char*, humedad y cenizas. Los compuestos de azufre y nitrógeno, no considerados explícitamente, se pueden tener en cuenta en las sustancias volátiles liberadas (en forma de compuestos como NH_3 , H_2S o HCN).

En esta Tesis el carbón se modela como una fase multicomponente formada por las cuatro pseudo-especies químicas medidas en el análisis inmediato.

3.1.2. Modelado de la estructura de la partícula reactiva

Una partícula reactiva experimenta a medida que avanza la reacción química cambios en su composición química, densidad y/o tamaño. Estos cambios pueden generar variaciones espaciales internas a la partícula. El modelo de partícula permite considerar cómo afectan estos perfiles a las tasas totales de reacción química y de transferencia de masa que aparecen en las ecuaciones de transporte.

Se presentan a continuación tres modelos clásicos para representar la partícula reactiva que describen comportamientos extremos [85, 86, 121, 193]:

- El ‘modelo uniforme’ (UM, del inglés *Uniform Model*) considera que la reacción se produce uniformemente de forma distribuida en toda la partícula, siendo su composición química y temperatura uniforme. La suposición es válida cuando la difusión de los reactantes dentro de la partícula es suficientemente rápida comparada con la tasa de reacción química.

En este modelo el tamaño de la partícula se mantiene constante y, debido a la pérdida de masa, la densidad disminuye.

- El ‘modelo de núcleo decreciente’ (UCM o SCM, del inglés respectivamente *Unexposed core model* o *Shrinking core model*) describe la partícula como un núcleo no reaccionado, limitado por el frente de reacción y rodeado por una capa de material reaccionado (y por tanto inerte). La reacción se produce cuando los reactantes gaseosos atraviesan esta capa y se ponen en contacto con el núcleo reactivo.

En este modelo el tamaño de la partícula y la composición de su núcleo se man-

tienen constantes. La densidad de partícula varía por el cambio de la composición química promedio (causada por el cambio de tamaño de la capa reaccionada). Un ejemplo de su aplicación para la combustión de carbón puede encontrarse en Wen, C. Y. et al. [229].

- El ‘modelo de partícula decreciente’ (SPM, ECM, o ASM del inglés respectivamente *Shrinking Particle Model*, *Exposed Core Model* o *Ash-Segregated Model*) describe la partícula como un núcleo no reaccionado donde se produce la reacción. El modelo considera que los productos de la reacción formados en la superficie de la partícula se desprenden. El núcleo no reaccionado de la partícula está por tanto constantemente expuesto al gas del entorno.

El tamaño de la partícula se reduce por acción de la reacción química, manteniéndose, en cambio, la densidad constante.

En lechos fluidos esta situación ocurre habitualmente por efecto de la atrición entre las partículas [193] o de la alta velocidad relativa entre el gas y las partículas [19].

La aplicación de estos modelos a una partícula aislada permite deducir expresiones para calcular su cinética química global. En su deducción se suelen realizar las siguientes aproximaciones [193]:

- Las partículas se suponen homogéneas en todas las direcciones excepto en la que se produce la transferencia de masa. Por ejemplo, para partículas esféricas solo hay variación en la dirección radial.
- La velocidad del gas en el interior de la partícula es despreciable.
- Las partículas son isotermas.
- Las concentraciones (de cualquier componente químico) se suponen iguales a cada lado de una interfaz (gas-partícula o núcleo-cenizas).
- Las transferencias de calor y de masa son independientes.
- Los poros de la partícula no se bloquean debido a que no se producen cambios en la estructura de la partícula.
- Los procesos de transporte y reacción química que ocurren en la partícula pueden tratarse independientemente.

En esta Tesis se aplica el ‘modelo uniforme’ de tamaño constante, y un ‘modelo de partícula decreciente’ que considera variable, además de su tamaño, la densidad del

núcleo en aquellos casos en los que se considera un cambio de tamaño de la partícula de sólido.

El cálculo de las tasas de reacción química heterogénea se presenta en la Sección 3.6.2.

3.2. Procesos de la partícula de carbón en el lecho fluido

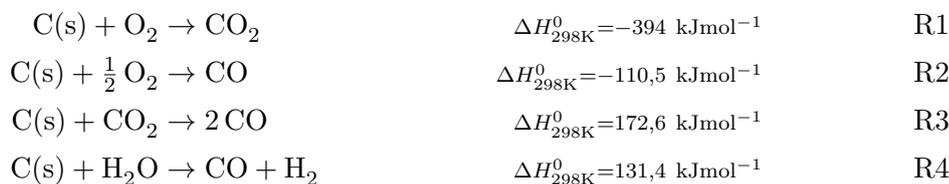
La partícula de carbón sufre una serie de procesos en el lecho fluido que suelen clasificarse en tres (Figura 3.1):

1. Secado, que consiste en la evaporación del agua condensada en la partícula (que pasa a la fase gaseosa).
2. Devolatilización o pirólisis, que es la descomposición del carbón (en gases ligeros, *tar*¹ y *char*) por la acción térmica.
3. Gasificación (reacción química entre el carbono de la partícula sólida y los gases que la rodean) y combustión².

La evaporación requiere el calor necesario para el cambio de fase, y la devolatilización la energía necesaria para la ruptura de enlaces de la estructura macromolecular del carbón. Esta ruptura causa la liberación de las sustancias volátiles contenidas en el carbón (que incluyen especies químicas como CH₄, C₂H₆, CO₂, H₂, H₂O, NH₃, H₂S o HCN). La devolatilización se inicia cuando se alcanza suficiente temperatura ($\approx T > 750\text{K}$).

El carbono fijo o *char*, remanente en la partícula tras la devolatilización, reacciona químicamente con los compuestos presentes en la corriente del gas formando productos gaseosos (combustión heterogénea y gasificación) y dejando cenizas (material inerte) como residuo.

En el modelado de la oxidación y gasificación del *char* las reacciones químicas que se deben tener en cuenta son, al menos:



¹ El *tar* esta compuesto de compuestos orgánicos e inorgánicos relativamente pesados que escapan de la matriz de sólido como gases y líquidos en forma de niebla[193].

² Habitualmente la reacción se denomina combustión, en lugar de gasificación, cuando el reactante es oxígeno O₂.

Algunos autores combinan estas reacciones químicas en distintas proporciones o incluyen la reacción química del *char* con otros gases, como el hidrógeno (*e.g.* [193]).

Los productos de la devolatilización, gasificación y combustión heterogénea pueden seguir reaccionando en la fase gas, por reacción química homogénea; ésta se trata más adelante en la Sección 3.6.1.

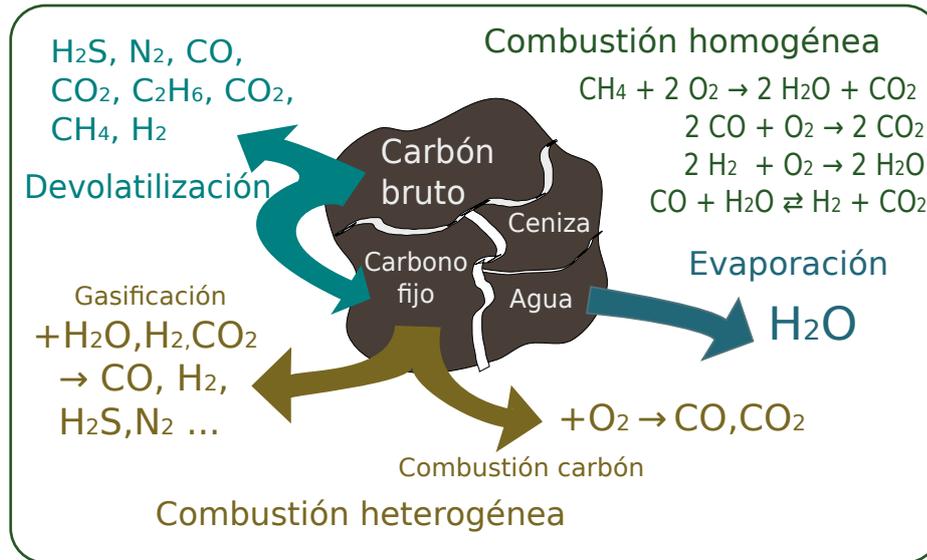


Figura 3.1: Procesos en la combustión de una partícula de carbón

3.3. Modelado de la transferencia de masa

Los modelos de transferencia de masa dan cuenta del intercambio de especies químicas entre fases. En los flujos considerados en esta Tesis, los procesos que dan lugar a intercambio de masa entre fases son:

- El secado de la partícula;
- La devolatilización de la partícula;
- La reacción heterogénea.

En la presente Tesis, en los procesos de transferencia de masa se modela la masa transfe-

rida de cada especie química. Esta tasa de transferencia de masa de una especie química α (por ejemplo, agua) en un proceso de transferencia x dado (por ejemplo, secado de la partícula) de la fase q a la fase p será representada como $\dot{m}_{qp}^{\alpha,x}$. La masa recibida por la fase p es la donada por la fase q ; es decir, $\dot{m}_{qp}^{\alpha,x} = -\dot{m}_{pq}^{\alpha,x}$.

La masa total recibida por transferencia por la fase p de la fase q debido al proceso de transferencia x es:

$$\dot{m}_{qp}^x = \sum_{\alpha} \dot{m}_{qp}^{\alpha,x} \quad (3.1)$$

En los modelos eulerianos-eulerianos la transferencia de masa se representa, haciendo uso de estas tasas, mediante un término fuente en la ecuación de transporte para la fracción másica de la especie α en la fase p (Ecuación 2.2) y en la ecuación de conservación de la masa de fase (Ecuación 2.3):

$$M_p^{\alpha} = \sum_x M_p^{\alpha,x} = \sum_x \sum_q \dot{m}_{qp}^{\alpha,x} \quad (3.2)$$

$$M_p^m = \sum_x M_p^{m,x} = \sum_x \sum_q \dot{m}_{qp}^x \quad (3.3)$$

donde M^{ϕ} y $M^{\phi,x}$ se han introducido aquí para representar de forma compacta el término fuente por transferencia global de masa y el debido a cada proceso x en la ecuación de transporte de ϕ .

La materia transferida a la fase p transporta consigo otras de las propiedades de las fases donantes q tales como cantidad de movimiento o energía. El transporte entre fases de estas propiedades se incluye como un término fuente en las respectivas ecuaciones de conservación (Ecuaciones 2.4 y 2.6):

$$M_p^{\mathbf{v}} = \sum_x M_p^{\mathbf{v},x} = \sum_x \sum_q \dot{m}_{qp}^x \mathbf{v}_x \quad (3.4)$$

$$M_p^T = \sum_x M_p^{T,x} = \sum_x \sum_q \sum_{\alpha} \dot{m}_{qp}^{\alpha,x} C_p^{\alpha} T_x \quad (3.5)$$

donde el superíndice x indica proceso, y el subíndice x señala el valor de la propiedad (*e.g.* \mathbf{v}) en la masa que se transfiere en ese proceso. Para evaluar este valor, se considera habitualmente que la masa transferida tiene las mismas propiedades que la fase donante [64, 123, 209]. Esta consideración es aplicada en esta Tesis. En consecuencia en esta memoria el subíndice x señala el valor de la propiedad en la fase donante.

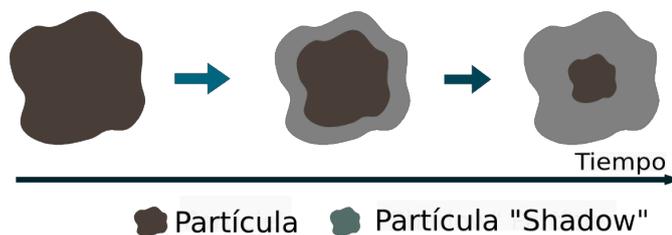


Figura 3.2: Esquema del método "shadow" para el transporte del tamaño de partícula

3.4. Modelado del cambio del tamaño de partícula

El tamaño de partícula varía en el lecho debido a procesos físicos y químicos, tales como aglomeración, atrición, fragmentación por gradientes térmicos, o consumo por reacción química.

Para representar este cambio de tamaño, en los modelos eulerianos, se puede representar una fase sólida como varias fases con un tamaño distinto, y tratar el cambio de tamaño como una transferencia entre estas. Ejemplos de modelos para el cálculo de las tasas de transferencia en estos esquemas se pueden encontrar en los trabajos de Loschkin [128] y Pikkarainen [167] (tomados de [145]).

Otra opción, utilizada en esta Tesis y compatible con la anterior, es considerar que el tamaño de la partícula en la fase, aunque localmente único, evoluciona con el tiempo y utilizar una ecuación de transporte para su cálculo en cada punto. Esta ecuación se puede deducir utilizando una generalización de la técnica *shadow* de Spalding [197]. El nombre *shadow* hace referencia en la propuesta original al uso de una fase adicional, denominada *shadow phase*, que sigue exactamente ("*shadows*") a la fase sólida pero sin intercambio de masa. La generalización del modelo *shadow* ha sido usada anteriormente con éxito para el modelado euleriano-euleriano de la combustión de carbón [66, 67].

En la generalización, la idea es comparar el volumen real de la partícula sólida local, V_p , con el volumen de una partícula imaginaria que hubiera sufrido los mismos procesos (y en particular los convectivos y de dispersión turbulenta) pero sin modificar su volumen inicial V_p^0 . Para ello se define y transporta una nueva variable, que es el ratio del volumen inicial de la partícula de la fase al volumen local: $s_p = V_p^0/V_p$. La cantidad transportada (en la Ecuación 3.6 más adelante) es el producto $r_p s_p$, que tiene el sentido físico de fracción volumétrica de fase *shadow*; es por tanto la fase *shadow* en la formulación original de Spalding [197].

Esta variable s_p se define para cada fase sólida p cuyo tamaño puede cambiar; en la correspondiente ecuación de transporte se incluyen términos fuente correspondientes a todos los procesos x_n que *no* contribuyen a una disminución de tamaño:

$$\frac{\partial}{\partial t} (r_p \rho_p s_p) + \nabla \cdot (r_p \rho_p \mathbf{v}_p s_p) = \sum_{x_n} \sum_q \dot{m}_{qp}^{x_n} \quad (3.6)$$

La solución de la ecuación anterior proporciona $r_p s_p$, que es la fracción volumétrica local que habría si las partículas no cambiaran de tamaño por los procesos x de transferencia de masa distintos de x_n .

En cada punto, el tamaño d_p de la partícula en la fase p se calcula a partir de la variable transportada s_p y el tamaño inicial d_p^0 :

$$d_p = d_p^0 / (s_p)^{1/3} \quad (3.7)$$

3.5. Modelado del secado de la partícula de sólido

El secado del carbón consiste en la evaporación del agua condensada en la partícula. Existen varios tipos de modelos para la descripción de este proceso, en función de que el mecanismo controlante sea la transferencia de calor, la transferencia de masa o una combinación de ambas.

Este cambio de estado está gobernado por la temperatura del sólido, la transferencia de calor hacia la partícula, la transferencia de masa hacia la superficie del sólido y la concentración de vapor de agua en la fase receptora. Debido a que las condiciones de un lecho fluido provocan un rápido calentamiento de las partículas, a que la humedad se encuentra principalmente en la superficie de la partícula, y a que la concentración de agua en la fase gaseosa (aire) suele ser pequeña respecto a los valores de saturación habitualmente se considera que el proceso gobernante es el de transferencia de calor.

Para su modelado se suelen realizar dos suposiciones. La primera es que las partículas liberan su contenido en agua al gas cuando su temperatura alcanza la de ebullición (típicamente³, $T_{eb} = 373\text{K}$). La segunda es que la temperatura de la partícula se mantiene constante mientras dura el proceso de evaporación, puesto que todo el calor que recibe del gas se invierte en el proceso de cambio de estado de agua líquida a vapor.

³ Este valor varía con las condiciones del ambiente y puede ser función de las propiedades de la partícula (*e.g.* de su porosidad [233]).

La tasa de transferencia de calor desde la fase gaseosa (disponible para el secado) es:

$$Q_{gs} = \begin{cases} f_{gs}^T(T_g - T_s) & T_g > T_s \\ 0 & T_g \leq T_s \end{cases} \quad (3.8)$$

donde f_{gs} es el coeficiente de transferencia de calor gas-sólido (ver Sección 2.5).

La tasa de evaporación (*i.e.* transferencia de masa) se expresa, en consecuencia, en función de este calor como:

$$M_s^{\text{H}_2\text{O,Secado}} = -\dot{m}_{sg}^{\text{H}_2\text{O,Secado}} = -\frac{Q_{gs}}{\Delta h_L} \quad (3.9)$$

donde Δh_L es el calor latente de evaporación.

Este tipo de modelo es habitualmente empleado en la simulación del flujo gas-sólido, aunque su uso en modelos eulerianos puede dar lugar a resultados incongruentes. En particular, puede predecir la existencia de partículas a una temperatura superior a la de saturación que, sin embargo, contienen todavía humedad.

La razón de este comportamiento no físico es el tratamiento euleriano de las partículas. Un celda computacional puede recibir de celdas vecinas partículas con una historia diferente, y sus características son entonces promediadas. A modo de ejemplo, el resultado de la mezcla en la celda de partículas húmedas a baja temperatura y de partículas secas a alta temperatura puede dar lugar a partículas (promedio) húmedas con una temperatura superior a la de ebullición.

El modelo propuesto en esta Tesis [48], que remedia las deficiencias antes señaladas, postula que el agua líquida puede evaporarse utilizando la energía extra disponible debida al sobrecalentamiento (respecto a la temperatura de evaporación) de la fase granular. Dicha energía se calcula mediante la siguiente expresión:

$$Q_{gs} = \begin{cases} \frac{r_s \rho_s C p_s (T_s - T_{eb})}{\Delta t} & T_s > T_{eb} \\ 0 & T_s \leq T_{eb} \end{cases} \quad (3.10)$$

donde Δt es el intervalo de tiempo (el paso temporal en la simulación).

El modelo de secado propuesto en esta Tesis considera que la energía disponible para la evaporación es el calor recibido por convección desde la fase gaseosa (Ecuación 3.8) más la energía disponible debido al sobrecalentamiento (Ecuación 3.10). El modelo evalúa la masa de agua transferida a la fase gaseosa como el cociente entre la energía total disponible y el calor latente de evaporización (Δh_L), siempre que no exceda el contenido de agua de la fase granular. La expresión final para el término fuente en las ecuaciones

de conservación de la fase gas debida al proceso de secado es:

$$M_s^{\alpha,Secado} = -\dot{m}_{sg}^{\text{H}_2\text{O},Secado} = -\min\left(\frac{Q_s + Q_{gs}}{\Delta h_L}, \frac{r_s \rho_s y_s^{\text{H}_2\text{O}}}{\Delta t}\right) \quad (3.11)$$

$$M_s^m,Secado = -\dot{m}_{sg}^{Secado} = -\dot{m}_{sg}^{\text{H}_2\text{O},Secado} \quad (3.12)$$

$$M_s^v,Secado = -\dot{m}_{sg}^{Secado} \mathbf{v}_s \quad (3.13)$$

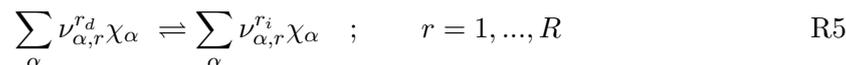
$$M_s^T,Secado = -\dot{m}_{sg}^{Secado} C p_s^{\text{H}_2\text{O}} T_s \quad (3.14)$$

Los términos fuente de la fase gaseosa, para el proceso de secado de la fase sólida s , son de la misma magnitud y signo contrario ($M_g^{\phi,Secado} = -M_s^{\phi,Secado}$).

Una discusión detallada del modelo presentado puede consultarse en [48].

3.6. Modelado de la reacción química

En general, un sistema químico con R reacciones puede expresarse como:



donde χ_{α} es el símbolo químico de la especie α , ν_{α} son los coeficientes estequiométricos, r es la r -ésima reacción química, el superíndice r_d indica reacción directa y el superíndice r_i reacción inversa.

Cada reacción química en el lecho fluido puede ser homogénea (todos los reactantes en fase gaseosa) o heterogénea (reactantes en fase gaseosa y en fase sólida). Los modelos para las tasas de reacción heterogéneas deben incluir las limitaciones que impone la transferencia de masa a que los reactivos se pongan en contacto.

Las leyes que definen la tasa de reacción química homogénea y heterogénea y su aplicación al tratamiento euleriano de las partículas se describen en los apartados siguientes.

3.6.1. Modelado de la reacción química homogénea

Cuando las reacciones químicas R5 gaseosas son elementales⁴, la tasa de reacción neta $\dot{\omega}_r$ de la reacción química r es:

$$\dot{\omega}_r = k_{r_d} \prod_{\alpha} [X_{\alpha}]^{\nu_{\alpha,r}^{r_d}} - k_{r_i} \prod_{\alpha} [X_{\alpha}]^{\nu_{\alpha,r}^{r_i}} \quad (3.15)$$

⁴ Una reacción elemental es una reacción en la que no se han detectado compuestos intermedios o no necesitan ser postulados para describir la reacción a nivel molecular. La reacción elemental, en consecuencia, se asume que ocurre en un único paso y a través de un único estado de transición [135].

donde $[X_\alpha]$ es la concentración molar de la especie α ; k_{r_d} y k_{r_i} son respectivamente las constantes de reacción directa e inversa de la reacción r .

La constante de reacción directa k_{r_d} se expresa mediante la ley de Arrhenius:

$$k_{r_d} = A_r T^{b_r} \exp\left(-\frac{E_r}{R_c T}\right) \quad (3.16)$$

donde A_r es el factor pre-exponencial, b_r es el exponente de la temperatura, E_r es la energía de activación y R_c es la constante universal de los gases.

La constante de reacción inversa k_{r_i} se relaciona con la constante de reacción directa, k_{r_e} mediante la constante de equilibrio k_{r_e} :

$$k_{r_i} = \frac{k_{r_d}}{k_{r_e}} \quad ; \quad k_{r_e} = \exp\left(-\frac{\Delta Z^o}{R_c T}\right) \quad (3.17)$$

donde ΔZ^o es el cambio de la energía libre de Helmholtz en el estado estándar.

Los sistemas químicos presentados en la literatura no suelen estar compuestos únicamente por reacciones químicas elementales, cuya cinética se ha descrito. Frecuentemente en estos se incluyen reacciones químicas que sintetizan en una expresión única la combinación de varias reacciones químicas elementales, o las representan mediante ecuaciones globales cuyos parámetros se ajustan experimentalmente. El cálculo de la tasa de las reacciones químicas no elementales suele mantener la expresión de Arrhenius (Ecuación 3.16), pero pueden aparecer exponentes que no coinciden con los coeficientes estequiométricos, o puede ser función de especies que no aparecen explícitamente en la expresión de la reacción química.

La tasa de producción de una especie α , $\dot{\omega}_\alpha$, es:

$$\dot{\omega}_\alpha = \sum_r \underbrace{(\nu_{\alpha,r}^{r_i} - \nu_{\alpha,r}^{r_d})}_{\nu_{\alpha,r}} \dot{\omega}_r \quad (3.18)$$

El calor generado por la reacción homogénea se calcula a partir de las tasas de reacción como:

$$\dot{\omega}_T = \sum_\alpha \sum_r \nu_{\alpha,r} \dot{\omega}_r h^\alpha = \sum_\alpha \dot{\omega}_\alpha h^\alpha = \sum_r -\Delta h_r \dot{\omega}_r \quad (3.19)$$

donde h^α es la entalpía específica de la especie química α , y $-\Delta h_r$ es el calor de reacción específico ($-\Delta h_r = \sum_\alpha \nu_{\alpha,r} h^\alpha$).

En las ecuaciones eulerianas de conservación presentadas, el término fuente debido a la tasa de reacción homogénea $\dot{\omega}_\alpha^{hom}$ se expresa por unidad de volumen físico utilizando la

fracción de volumen que ocupa la fase gas (r_p):

$$S_g^\alpha = \dot{\omega}_\alpha^{hom} \left[\frac{kg_\alpha}{m^3 s} \right] = \dot{\omega}_\alpha \left[\frac{kg_\alpha}{m_p^3 s} \right] r_g \left[\frac{m_p^3}{m^3} \right] \quad (3.20)$$

y análogamente en la ecuación de conservación de energía:

$$S_g^T = \dot{\omega}_T^{hom} = \dot{\omega}_{T,g} r_g \quad (3.21)$$

La resolución del sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias formado por las tasas de reacción química homogénea de las Ecuaciones R5 requiere, por las diversas escalas de tiempo involucradas, el uso de pasos temporales pequeños y métodos de integración especiales [35, 90]. Estos métodos habitualmente están disponibles en paquetes de *software* específico dedicados a la resolución de estos sistemas (*e.g.* [79, 114, 115]). En esta Tesis, para su resolución, se utiliza el *software Cantera*, diseñado con el propósito de resolver de una manera eficiente este tipo de sistemas químicos (Sección 4.4.2).

3.6.2. Modelado de la reacción química heterogénea

La tasa de reacción química $\dot{\omega}_\alpha$ (Ecuación 3.18) puede ser utilizada para calcular la tasa cinética de reacciones químicas homogéneas $\dot{\omega}_\alpha^{hom}$ y heterogéneas $\dot{\omega}_\alpha^{het}$. No obstante, el tratamiento de las reacciones químicas heterogéneas puede incluir en esta tasa la limitación impuesta por la transferencia de masa. De esta manera, se distingue entre la ‘tasa de reacción intrínseca’, que no incluye los efectos de transferencia de masa, y la ‘tasa de reacción química global’, que los incluye.

La forma concreta de la tasa de reacción depende del modelo de la partícula utilizado (ver Sección 3.1.2), aunque las expresiones resultantes pueden reducirse a una expresión general que tiene en cuenta tres resistencias a la reacción [193]:

$$\dot{\omega}_\alpha^{sup} = \frac{p_g^{\alpha^{reac}}}{1/k_c + 1/k_l + 1/k_n} = k_T p_g^{\alpha^{reac}} \quad (3.22)$$

donde el superíndice *sup* indica que se trata de una tasa superficial (por unidad de área), la concentración del reactante gaseoso se ha expresado en función de su presión parcial $p_g^{\alpha^{reac}}$ (que es habitual en reacción heterogénea), y $1/k_i$ representan las distintas resistencias a la reacción presentes:

- k_l a la difusión a través de la capa límite gaseosa;
- k_c a la difusión a través de productos que rodean el núcleo;

- k_n en el núcleo, a la reacción química.

En general, la forma de las expresiones para las resistencias k_i depende del modelo de partícula utilizado, y su magnitud determina el proceso que controla la tasa de reacción global. Una deducción detallada de las expresiones para distintos modelos de partícula (y geometrías) se puede consultar en la literatura [85, 121, 193]. Un ejemplo de la aplicación de uno estos modelos en la obtención de las tasas cinéticas a partir de datos experimentales para una partícula de carbón puede consultarse en [17].

La tasa de reacción química (intrínseca) $\dot{\omega}_{\alpha,n}^{sup}$ se expresa habitualmente según la ecuación de Arrhenius (en función de la presión parcial del reactivo gaseoso α_g^{reac}). En este caso la expresión para la resistencia a la reacción química k_n es:

$$\dot{\omega}_{\alpha,n}^{sup} = A_r T^{b_r} \exp(T_a/T_s) p_g^{\alpha_{reac}} \quad (3.23)$$

$$k_n = A_r T^{b_r} \exp T_a/T_s \quad (3.24)$$

La tasa de difusión en la capa gaseosa $\dot{\omega}_{\alpha,l}^{sup}$ puede expresarse a través de un coeficiente de difusión efectivo multiplicado por una diferencia de concentraciones:

$$\dot{\omega}_{\alpha,l}^{sup} = \nabla(\Gamma^{y^\alpha} \nabla y^\alpha) = k_p^\alpha (\rho_g^\alpha - \rho_{sup}^\alpha) = k_p^\alpha (p_g^\alpha - p_{sup}^\alpha) \quad (3.25)$$

donde se ha expresado en función de la diferencia de la densidad efectiva o de la presión parcial. El subíndice *sup* se refiere al valor en la superficie y *g* al valor en la fase gaseosa.

El coeficiente de difusión efectivo k^α se calcula a través de correlaciones empíricas o semi-empíricas para el número de Sherwood *Sh* de la partícula:

$$Sh = \frac{\Gamma_{gs}^{y^\alpha} d_p}{k_p^\alpha} = \frac{\Gamma_{gs}^{y^\alpha} d_p}{k_p^\alpha} \frac{W_\alpha}{R_c T_g} \quad (3.26)$$

Habitualmente, en la literatura, se considera que la concentración en la superficie o de equilibrio es nula, pudiéndose expresar en función de una resistencia a la difusión k_l como:

$$\dot{\omega}_{\alpha,l}^{sup} = k_p^\alpha p_g^\alpha \quad (3.27)$$

$$k_l = k_p^\alpha = \frac{\Gamma_{gs}^{y^\alpha} d_p}{Sh^\alpha} \frac{W_\alpha}{R_c T_g} \quad (3.28)$$

De forma análoga a la resistencia en la capa límite gaseosa k_l se puede tratar la resistencia a la difusión interna k_c .

Expresiones concretas para calcular los valores de estas resistencias para las reacciones químicas de oxidación y gasificación del carbón pueden consultarse en [11, 19, 85, 86, 226, 240].

La tasa de reacción de las reacciones químicas heterogéneas $\dot{\omega}_\alpha^{het}$ en modelos eulerianos requiere expresarse por unidad de volumen. La conversión se realiza utilizando el cociente entre el área y el volumen de partícula, que para partículas esféricas es:

$$\frac{A_p}{V_p} \left[\frac{m_s^2}{m_s^3} \right] = \frac{\pi d_p^2}{\frac{1}{6} \pi d_p^3} \left[\frac{m_s^2}{m_s^3} \right] = \frac{6}{d_p} \left[\frac{m_s^2}{m_s^3} \right] \quad (3.29)$$

En función de este, la tasa de reacción por unidad de área $\dot{\omega}_\alpha^{het}$ es:

$$\dot{\omega}_\alpha^{het} \left[\frac{kg_\alpha}{m_s^3 s} \right] = \dot{\omega}_\alpha^{sup} \left[\frac{kg_\alpha}{m_s^2 s} \right] \frac{6}{d_s} \left[\frac{m_s^2}{m_s^3} \right] r_s \left[\frac{m_s^3}{m_s^3} \right] \quad (3.30)$$

Esta tasa de reacción será la utilizada en el tratamiento euleriano para el cálculo de los términos fuente en las ecuaciones de transporte.

En esta Tesis se considera que las reacciones químicas heterogéneas se producen (en fase gas) sobre la superficie de la fase sólida, y que el calor de reacción se retiene en la partícula. La descripción numérica de una reacción química heterogénea se realiza mediante dos procesos que se consideran simultáneos:

1. El primer proceso es la transferencia del reactivo sólido $\alpha^{reac,s}$ a la fase gaseosa g (sobre la superficie de la fase sólida s). En este proceso la magnitud de la tasa de transferencia se iguala a la de su consumo por reacción química ($\dot{m}_{sg}^{\alpha^{reac,s}} = -\dot{\omega}_{\alpha^{reac,s}}^{het,r}$). Esta transferencia se representa en las ecuaciones eulerianas de conservación de especies químicas mediante los siguientes términos fuente:

$$M_s^{\alpha^{reac,s},het,r} = -\dot{m}_{sg}^{\alpha^{reac,s}} \quad (3.31)$$

$$M_g^{\alpha^{reac,s},het,r} = \dot{m}_{sg}^{\alpha^{reac,s}} = -\dot{\omega}_{\alpha^{reac,s}}^{het,r} = -S_g^{\alpha^{reac,s}} \quad (3.32)$$

Esta transferencia de masa se considera en el resto de ecuaciones de conservación utilizando los términos fuente correspondientes:

$$M_g^{m,het,r} = M_g^{\alpha^{reac,s}} \quad (3.33)$$

$$M_g^{v,het,r} = \dot{m}_{sg}^{\alpha^{reac,s}} \mathbf{v}_s \quad (3.34)$$

$$M_g^{T,het,r} = \dot{m}_{sg}^{\alpha^{reac,s}} C p_s^{\alpha^{reac,s}} T_s \quad (3.35)$$

Los términos de transferencia para la fase sólida son de la misma magnitud y cambiados de signo $M_s^\phi = -M_g^\phi$.

2. La reacción química en fase gas (en la superficie de la partícula) se representa mediante los correspondientes términos fuente en las ecuaciones de conservación de especies químicas⁵:

$$S_g^{\alpha,het,r} = \dot{\omega}_\alpha^{het,r} \quad (3.36)$$

⁵ $S_p = \sum_r S_p^r$, análogamente al término de transferencia de masa, en las ecuaciones correspondientes de conservación

y de conservación de energía, donde el calor generado $\dot{\omega}_T^{het,r}$ se asume que es absorbido por el sólido:

$$S_s^{T,het,r} = \dot{\omega}_T^{het,r} = -\Delta h_r \dot{\omega}_r^{het} \quad (3.37)$$

$$S_g^{T,het,r} = 0 \quad (3.38)$$

3.7. Modelado de la devolatilización del carbón

El proceso de devolatilización o pirólisis⁶ es la liberación de sustancias volátiles por descomposición de carbón que se produce a altas temperaturas.

Para que el modelado de la combustión del carbón proporcione resultados cuantitativamente satisfactorios es necesario que la devolatilización del carbón sea adecuadamente predicha, tanto en la composición de los productos como en las tasas de producción. Estos valores son una función de la estructura y composición del carbón, y también de las condiciones en las que se produce la devolatilización.

Entre los factores que controlan la devolatilización el más importante es el proceso de calentamiento de la partícula de carbón [19, 36, 231]. El calentamiento del carbón produce, cuando se alcanza una cierta temperatura, la liberación de productos gaseosos. Esta liberación normalmente se divide en dos fases, que son conocidas como devolatilización primaria y secundaria.

En la primera de ellas el carbón pierde el 80 – 90 % en peso de la materia volátil que contiene. En esta etapa se liberan fundamentalmente *tar*, hidrocarburos alifáticos, CO₂ y H₂O.

En la devolatilización secundaria, la materia volátil restante se libera del carbón mayoritariamente en forma de CO y H₂, incluyendo pequeñas cantidades de benceno y HCN, entre otros productos [36].

Los modelos que describen la devolatilización pueden dividirse en dos tipos: básicos y estructurales.

Los primeros de ellos son los llamados de dos componentes en los que el carbón bruto o *coal* de la partícula se descompone dando lugar a volátiles que forman productos gaseosos y un residuo sólido, *char* o carbono fijo que permanece en la partícula. Estos modelos se basan normalmente en ajustes empíricos o semi-empíricos a partir de medidas termogravimétricas en laboratorio.

⁶ El término pirólisis se suele reservar para el tratamiento del carbón en atmósfera inerte

Los modelos del segundo tipo representan la descomposición del carbón a través de la ruptura de su estructura molecular, por lo que requieren conocer la estructura química del mismo.

Dentro de la primera categoría se han propuesto modelos con distinto número de pasos de reacción, por ejemplo: de un paso de reacción (SFOR, del inglés *Single First Order Reaction*) [13], de dos reacciones competitivas [119, 216], o el de energías de activación distribuidas (DAE, del inglés *Distributed Activation Energies*) que supone que la devolatilización ocurre a través de varias reacciones químicas de primer orden [149]. Entre estos modelos por su relativa sencillez y buena capacidad de predicción el más utilizado es el modelo de dos reacciones competitivas

El segundo tipo de modelos parte del conocimiento de la descripción estructural del carbón que proveen técnicas analíticas. Estos combinan el modelado de tipo DAE para la liberación de volátiles, la despolimerización y el entrecruzamiento del metaplasto, con modelos de redes estadísticas para predecir la formación de *tar* y con relaciones de peso molecular y presión de vapor para modelar la liberación del mismo [231].

Basados en esta metodología se han desarrollado distintos modelos que predicen la velocidad de producción de volátiles y la distribución de los productos de mayor interés generados en la devolatilización de carbón. Estos modelos están disponibles en distintos paquetes comerciales de *software*: FG-DVC (del inglés, *Functional Group-Depolymerization Vaporization Cross Linking*) [190], FLASHCHAIN [148], o CPD (del inglés, *Chemical Percolation Devolatilization*) [62, 63, 81]. Según Williams et al. [231] estos modelos predicen aproximadamente la misma distribución de productos pero las tasas de devolatilización pueden variar significativamente para el mismo carbón.

Actualmente en simulaciones de CFD la aplicación de modelos estructurales se limita, por su elevado coste computacional, a su uso como preproceso. Es decir, se usan para ajustar en las condiciones de operación los modelos del primer tipo, SFOR o de dos reacciones competitivas (ver, por ejemplo, Niksa et al. [150] o Williams et al. [232]).

En esta Tesis se ha optado por la implementación de modelos del primer tipo. En la aplicación de estos modelos la devolatilización suele representarse mediante dos pseudo-reacciones, una propiamente de devolatilización y otra de descomposición de los volátiles:



Estos modelos expresan la tasa de la primera reacción química (Reacción R6) mediante una expresión de la ley de Arrhenius y de forma proporcional a la cantidad de volátiles

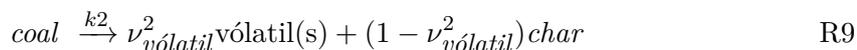
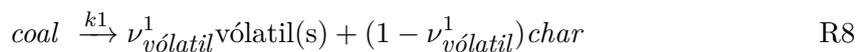
que quedan retenidos en el material carbonoso:

$$\dot{\omega}^{dev} = A_{dev} \exp(-E_{dev}/R_c T_s) (y_s^{v\acute{o}latil_s^\infty} - y_s^{v\acute{o}latil_s}) \quad (3.39)$$

donde los superíndices $v\acute{o}latil_s$ y $v\acute{o}latil_s^\infty$ indican respectivamente la cantidad de volátiles que se han liberado y la cantidad máxima de volátiles que pueden liberarse.

Además, para su uso en modelos realistas, se requiere conocer la composición de la materia volátil. Este requerimiento se expresa matemáticamente en la formulación de la Reacción R7, que suele considerarse instantánea. La estequiometría de esta reacción se define mediante modelos que predicen la distribución de los productos de devolatilización. Estos modelos suelen estar basados en resultados experimentales y se presentan en el siguiente apartado.

Específicamente, entre los modelos del primer tipo, se ha optado por el uso del modelo de dos etapas de reacción de Kobayashi et al. [119] y Ubhayakar et al. [216]. El modelo de dos etapas plantea la existencia de dos energías de activación, que controlan el proceso de devolatilización a distintas temperaturas. En este caso, la Reacción R6 se descompone en dos pasos de reacción competitivos:



cuya cinética se describe mediante la Ecuación 3.39. De ambas reacciones la primera domina a temperaturas relativamente bajas, mientras que la segunda lo hace a altas temperaturas⁷. Los valores de los coeficientes estequiométricos se pueden estimar como la fracción de carbón que se devolatiliza en el análisis inmediato $\nu_{v\acute{o}latil}^1$ y la fracción que lo hace a altas temperaturas $\nu_{v\acute{o}latil}^2$, que suele estar próxima a la unidad⁸.

Las constantes A_i y E_i de la ecuación de Arrhenius y la fracción de volátiles ν_i dependen no sólo del tipo de carbón, sino también de la historia térmica de la partícula tras su inyección en la caldera [189]. A modo ilustrativo, los valores de los parámetros propuestos por Kobayashi et al. [119], frecuentemente usados en la literatura, se muestran en la Tabla 3.1. Usos recientes de este modelo en simulaciones de lechos fluidos mediante técnicas de CFD se pueden encontrar en [11, 187, 226].

⁷ Es decir, la constante de activación E_2 es (mucho) mayor que E_1 [188].

⁸ En este caso $y^{v\acute{o}latil_s^\infty} \approx 1$ la expresión cinética (Ecuación 3.39), tiene la forma utilizada por algunos autores (e.g. [136]): $\dot{\omega}^{dev} \approx k_i (1 - y_s^{v\acute{o}latil}) \approx k_i y_s^{char} = A_i \exp(E_i/R_c T_s) y^{char}$

	A_{dev}^r/s^{-1}	$E_{dev}^r/kJ\ kmol^{-1}$	$\nu_{v\acute{o}latil}^{dev}/-$
Reacción R8	2×10^5	104,6	0,3
Reacción R9	$1,3 \times 10^7$	167,4	1,0

Tabla 3.1: Parámetros cinéticos del modelo de devolatilización de dos pasos según Kobayashi et al. [119]

3.7.1. Distribución de los productos de la devolatilización de carbón

En esta sección se presenta el modelo utilizado para la predicción de la distribución de productos en la devolatilización de carbón (*i.e.* coeficientes estequiométricos de la Reacción R7).

Los modelos utilizados pueden clasificarse en dos tipos: los primeros se basan en los análisis de la composición del carbón [165] y los segundos realizan correlaciones partiendo de colecciones de datos experimentales [127].

El primer tipo de modelos, basado en el balance atómico requiere disponer de información adicional al análisis inmediato y elemental (por ejemplo, el análisis de los volátiles). Un estudio de alternativas de modelos del segundo tipo para predecir esta distribución puede encontrarse en Byung-Ho Song et al. [36].

En esta Tesis se utiliza la correlación propuesta por Loison y Chauvin [127], que considera la descomposición de los volátiles en sus principales productos:

$$v\acute{o}latil(s) \rightarrow \sum_{\alpha} \nu_{\chi_{\alpha}}^{v\acute{o}latil} \chi_{\alpha} \quad \chi_{\alpha} = H_2, CO, H_2O, CH_4, CO_2, tar \quad R10$$

Para estimar estos coeficientes estequiométricos (expresados en fracción másica) dichos autores propusieron las siguientes correlaciones:

$$\nu_{H_2}^{v\acute{o}latil} = 0,157 - 0,868y_{v\acute{o}latil,daf} + 1,338y_{v\acute{o}latil,daf}^2 \quad (3.40)$$

$$\nu_{CO}^{v\acute{o}latil} = 0,423 - 2,653y_{v\acute{o}latil,daf} + 4,845y_{v\acute{o}latil,daf}^2 \quad (3.41)$$

$$\nu_{H_2O}^{v\acute{o}latil} = 0,409 - 2,389y_{v\acute{o}latil,daf} + 4,554y_{v\acute{o}latil,daf}^2 \quad (3.42)$$

$$\nu_{CH_4}^{v\acute{o}latil} = 0,201 - 0,469y_{v\acute{o}latil,daf} + 0,241y_{v\acute{o}latil,daf}^2 \quad (3.43)$$

$$\nu_{CO_2}^{v\acute{o}latil} = 0,135 - 0,900y_{v\acute{o}latil,daf} + 1,906y_{v\acute{o}latil,daf}^2 \quad (3.44)$$

$$\nu_{tar}^{v\acute{o}latil} = -0,325 + 7,279y_{v\acute{o}latil,daf} - 12,884y_{v\acute{o}latil,daf}^2 \quad (3.45)$$

donde $y_{volatil,daf}$ es la fracción másica de volátiles en el carbón en base seca y libre de cenizas (*daf*, de sus siglas en inglés).

Esta correlación requiere un único parámetro de entrada $y_{volatil,daf}$ que puede obtenerse del análisis inmediato del carbón, y no tiene en consideración variaciones en la composición de los productos con la temperatura. Cabe señalar que algunos trabajos en la literatura presentan erratas en los coeficientes que hacen que la suma de las fracciones másicas de los productos formados sea distinta de la unidad [11, 36].

CAPÍTULO 4

Algoritmo de resolución

En este capítulo se presenta el método numérico desarrollado para resolver el modelo euleriano-euleriano del flujo multifásico reactivo descrito en los Capítulos 2 y 3.

Para obtener una solución a las ecuaciones planteadas en derivadas parciales se utiliza un método de volúmenes finitos, presentado en la Sección 4.1.

Este método, en el proceso de discretización de las ecuaciones de transporte, utiliza los flujos calculados en las caras. La obtención de estos flujos por interpolación puede dar lugar a oscilaciones no realistas del campo de presión. Para evitar fluctuaciones en estos campos se utiliza una técnica que se conoce como Interpolación del Momento¹.

En esta Tesis se propone una extensión de esta técnica para su aplicación a flujos multifásicos de densidad variable [47, 48]. Esta extensión, denominada CMIm (*Compact Momentum Interpolation, multiphase*), se describe en la Sección 4.2.

Las características específicas de las ecuaciones que modelan el comportamiento de los sistemas multifásicos exigen la adaptación de los algoritmos estándar (tipo SIMPLE) diseñados para flujo monofásico. Spalding [195] propuso como adaptación el método IPSA (*Inter-Phase Slip Algorithm*) para mallas decaladas (*staggered*). En esta Tesis se propone la adaptación de este algoritmo a mallas colocalizadas, aplicando la técnica CMIm y su extensión para el tratamiento de flujo reactivo con transferencia de masa entre fases.

Este algoritmo, que denominamos CIPSA (de la contracción de CMIm e IPSA), se presenta en la Sección 4.3. Los detalles computacionales de su implementación se presentan en la Sección 4.4.

¹*Momentum Interpolation*. Estrictamente, debería traducirse por Interpolación de Cantidad de Movimiento; pero es habitual referirse a ella en español como Interpolación del Momento, y este nombre será retenido en esta Tesis.

4.1. Discretización

Las ecuaciones de transporte que gobiernan el flujo multifásico forman un sistema de ecuaciones en derivadas parciales que no puede resolverse, en general, de una forma analítica. Para su resolución, este sistema se aproxima por un sistema de ecuaciones algebraicas que evalúan las variables en puntos discretos en el espacio y el tiempo. Este procedimiento se conoce como discretización.

En esta Tesis se utiliza el método de Volúmenes Finitos, descrito extensivamente por diversos autores (*e.g.* [61, 107]). En esta sección se resumen las bases del método.

4.1.1. Discretización del espacio y del tiempo

La discretización del espacio en volúmenes finitos consiste en la división del dominio en un conjunto de celdas o volúmenes de control. Estas celdas deben ser contiguas (*i.e.* no deben solaparse) y deben cubrir completamente el dominio espacial. Los límites del dominio estarán, en consecuencia, formados por caras conectadas a la celda más próxima. En el método desarrollado en esta Tesis no se impone una limitación en el número de caras en cada celda². La malla puede además ser ‘no estructurada’.

En problemas transitorios, como los que se tratan en este estudio, el tiempo se divide también en una serie de pasos temporales.

Para resolver el sistema discretizado de ecuaciones las variables resueltas deben suponerse conocidas (o ‘almacenarse’) en localizaciones seleccionadas del dominio. Las opciones más usadas son almacenar las variables en el centro de las caras de la malla computacional, o almacenarlas en el centro de las celdas. El almacenamiento colocalizado consiste en utilizar la segunda opción para todas las variables. Alternativamente, la malla se denomina decalada cuando se utiliza la primera opción para las componentes de la velocidad, y la segunda para el resto de variables dependientes.

El almacenamiento colocalizado tiene ciertas ventajas algorítmicas. Por ejemplo, todas las variables utilizan la misma discretización, minimizando el número de coeficientes a calcular; y facilitando la implementación de geometrías complejas, especialmente cuando el contorno presenta discontinuidades [61]. Sin embargo, presenta dificultades numéricas en el acoplamiento de los campos de velocidad y presión, dando lugar a oscilaciones no realistas en el campo de presión [46, 171]. Para evitar estas oscilaciones en mallas

²La librería de *software* utilizada sí impone que las celdas deben ser convexas (el centro de la celda debe estar en su interior)

colocalizadas Rhie y Chow [171] propusieron la técnica conocida como Interpolación del Momento.

En este trabajo se utilizará la alternativa colocalizada y se presentará una extensión de la técnica de Interpolación del Momento que trata adecuadamente flujos multifásicos con gradientes fuertes de densidad efectiva (definida como el producto de la densidad y la fracción volumétrica de la fase $\rho_p r_p$). Los detalles de este nuevo algoritmo se presentan en la Sección 4.2.

4.1.2. Discretización de las ecuaciones

El objeto de la discretización de las ecuaciones es transformar las ecuaciones en derivadas parciales que gobiernan el flujo en un sistema algebraico.

Se considera la ecuación de transporte para la variable genérica ϕ_p de una fase p :

$$\frac{\partial}{\partial t} (r_p \rho_p \phi_p) + \nabla \cdot (r_p \rho_p \mathbf{v}_p \phi_p) = \nabla \cdot (r_p \Gamma_p^\phi \nabla \phi_p) + S_\phi \quad (4.1)$$

La discretización de la Ecuación 4.1 se realiza a partir de su forma integral, que se obtiene integrando la ecuación diferencial para un volumen de control dV y paso de tiempo dt :

$$\int_{\Delta t} \int_V \frac{\partial}{\partial t} (r_p \rho_p \phi_p) dV dt + \int_{\Delta t} \int_V \nabla \cdot (r_p \rho_p \mathbf{v}_p \phi_p) dV dt = \int_{\Delta t} \int_V \nabla \cdot (r_p \Gamma_p^\phi \nabla \phi_p) dV dt + \int_{\Delta t} \int_V S_\phi dV dt \quad (4.2)$$

Aplicando el teorema de Gauss a las integrales con divergencias, y haciendo una serie de hipótesis, puede obtenerse una forma discretizada de las ecuaciones de transporte.

A modo de ilustración, si P es la celda discretizada, y f es un índice que denota cara, la ecuación anterior discretizada espacialmente se expresa como:

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} (r_p \rho_p \phi_p) \right]_P + \sum_f [r_p \mathbf{v}_p]_f [\phi_p]_f \mathbf{S}_f = \sum_f [r_p \Gamma_p^\phi]_f \mathbf{S}_f \cdot \left[\nabla_f \phi_p \right]_P + S_{\phi_p} V_P \quad (4.3)$$

donde $\left[\phi \right]_P$ denota discretización, y $[\phi]_f$ interpolación a la cara f de la variable ϕ . V_P es el volumen de la celda P , \mathbf{S}_f es el vector normal a la cara f , y en el sumatorio f se extiende a todas las caras que limitan la celda P .

En la Ecuación 4.3 intervienen tanto valores de las variables en la propia celda (que son el resultado del cálculo) como en las caras f (que se obtienen habitualmente por interpolación).

La forma de cálculo de estos términos en las caras, que representan flujos convectivos o difusivos, ha resultado ser un factor clave en la resolución de flujos multifásicos; esto se discute en la sección siguiente.

Las ecuaciones discretizadas con las distintas aproximaciones pueden ser escritas para cada celda P como una ecuación algebraica, de forma genérica:

$$A_P \phi_P + \sum_N A_N \phi_N = R_P \quad (4.4)$$

Los valores de ϕ_P dependen de los valores en las celdas vecinas N (que han entrado en la ecuación debido a la interpolación a las caras). El conjunto de estas relaciones (Ecuación 4.4) constituye un sistema de ecuaciones algebraicas, con una ecuación por cada celda y por cada paso temporal. El sistema puede expresarse en notación matricial:

$$\mathbf{A}\phi = \mathbf{R} \quad (4.5)$$

donde \mathbf{A} es la matriz de coeficientes y \mathbf{R} es el vector de términos independientes.

La matriz de coeficientes \mathbf{A} es una matriz hueca (*i.e.* la mayor parte de sus elementos son nulos). El sistema de ecuaciones (Ecuación 4.5) se suele resolver, en Fluidodinámica Computacional, aprovechando esta característica utilizando métodos iterativos optimizados para la resolución de matrices huecas [65, 89, 107, 218].

4.2. Interpolación del Momento en flujos multifásicos

En esta Tesis se utiliza un almacenamiento colocalizado de las variables dependientes, en el que todas se suponen conocidas en el centro de la celda.

Una desventaja de este arreglo es que puede causar un desacoplamiento en el nodo entre las soluciones de la presión y velocidad, debido a que en la ecuación de cantidad de movimiento la presión interviene sólo como un gradiente. Un efecto bien conocido de este desacoplamiento es la obtención de un patrón con forma de damero en el campo de presión.

La técnica de Interpolación del Momento, originalmente propuesta por Rhie y Chow [171], se aplica normalmente para asegurar el acoplamiento de presión y velocidad en mallas colocalizadas.

Para ello, esta técnica introduce como nueva variable a calcular la velocidad normal a las caras, denominada velocidad convectiva, que es la utilizada para calcular el flujo a través de estas. El acoplamiento se consigue calculando (*i.e.* resolviendo) estas velocidades a

partir de las ecuaciones de cantidad de movimiento discretizadas, y no a través de la simple interpolación a la cara de los valores de la velocidad en los nodos.

La aplicación de esta técnica no es trivial y puede dar lugar a inconsistencias en las ecuaciones discretizadas. Por ejemplo, la solución obtenida en el estado estacionario puede depender del paso temporal utilizado, o del coeficiente de relajación [46, 113]. Por este motivo se han propuesto diversas mejoras para su aplicación a flujo monofásico (ver, por ejemplo, [42, 180]), aunque algunos de estos métodos siguen presentado estas inconsistencias [113].

En la aplicación de estas técnicas a flujo multifásico se ha detectado que las inconsistencias son mayores a las que se producen en flujo monofásico, y se ha señalado la necesidad de mejorar los métodos disponibles para modelar este tipo de flujo [42, 122, 139, 154].

La técnica de Interpolación del Momento Compacta CMI, propuesta por Cubero y Fueyo [46], es un método para flujo monofásico que evita estas inconsistencias. En esta Tesis se presenta una extensión de este método a un flujo multifásico con un número arbitrario de fases presentes.

Se plantea que la técnica propuesta para flujos multifásicos ha de ser consistente en cuatro aspectos:

- (i) la solución en estado estacionario ha de ser independiente del paso temporal;
- (ii) cuando las dos fases son idénticas, se ha de recuperar la formulación CMI para flujo monofásico;
- (iii) el término de fuerza de arrastre ha de ser de igual magnitud y de signo contrario para las fases p y q ;
- (iv) y la fuerza de presión global (que actúa conjuntamente sobre todas las fases) ha de ser proporcional al gradiente de presión.

En esta sección se presentan los métodos de Interpolación del Momento que se aplican habitualmente al flujo monofásico, incluyendo la técnica de Interpolación del Momento Compacta, y a continuación se introduce la extensión propuesta a flujos multifásicos.

4.2.1. Interpolación del Momento para flujos monofásicos

La ecuación de conservación de la cantidad de movimiento (Ecuación 2.4) discretizada se puede expresar para una celda P como:

$$A_P u_P = H'_P + G_P + S_P \quad (4.6)$$

donde u_P es la velocidad en la celda; A_P son los términos en la diagonal y H'_P los de fuera de la diagonal debidos a los flujos convectivos y difusivos; G_P es la fuerza de presión, que está relacionada con el gradiente de presión, e involucra los valores de presión de los nodos vecinos; y S_P incluye todos los demás términos (*e.g.* fuerza gravitacional).

La velocidad en el nodo u_P se descompone (despejando de la ecuación anterior) como un término de fuerza de presión y un término llamado pseudo-velocidad \hat{u}_P que agrupa el resto de términos:

$$u_P = \frac{H'_P + S_P}{A_P} + \frac{G_P}{A_P} = \hat{u}_P + A_P^{-1}G_P \quad (4.7)$$

La técnica original de Interpolación del Momento (OMI, del inglés *Original Momentum Interpolation*³) se basa en enunciar una ecuación equivalente para una celda imaginaria centrada en la cara f :

$$[u_P^{\text{OMI}}]_f = [\hat{u}_P]_f + [A_P^{-1}]_f [G_P]_f \quad (4.8)$$

donde $[G_P]_f = \nabla_f \phi_p$ es la fuerza de presión en la celda imaginaria centrada en la cara f . Este término, fundamental en las técnicas de Interpolación del Momento, relaciona los valores de presión en el nodo P y en los nodos vecinos N forzando así el acoplamiento de los valores de velocidad u_P y presión p_P .

La técnica OMI aproxima la pseudo-velocidad \hat{u}_f mediante una interpolación lineal (Ecuación 4.9) y, haciendo uso de la ecuación discretizada en los nodos adyacentes (Ecuación 4.7), obtiene la velocidad en la cara u_f^{OMI} :

$$\begin{aligned} [\hat{u}_P]_f &= [\hat{u}_P]_f & (4.9) \\ &= [u_P - A_P^{-1}G_P]_f = [u_P]_f - [A_P^{-1}G_P]_f \\ [u_P^{\text{OMI}}]_f &= [u_P]_f + [A_P^{-1}]_f [G_P]_f - [A_P^{-1}G_P]_f \\ &= [u_P]_f + \langle A_P^{-1}G_P \rangle_f & (4.10) \end{aligned}$$

donde el símbolo $[\phi]_f$ expresa de una forma compacta la interpolación lineal de una variable ϕ , y el símbolo $\langle c\phi \rangle_f$ indica la corrección a la interpolación lineal del producto de dos variables⁴.

³ *Original Momentum Interpolation*, y su acrónimo OMI, se usan en lo que sigue para distinguir la formulación original de Rhie y Chow de las otras formulaciones que se presentan.

⁴ La evaluación de la interpolación lineal en la cara del producto $c\phi$ se expresa como la suma del producto de las variables interpoladas por separado y un término de corrección: $[c\phi]_f = [c]_f [\phi]_f + \langle c\phi \rangle_f$.

Con la nomenclatura anterior, la corrección de velocidad puede denotarse de una forma compacta como:

$$\langle u_P^{\text{OMI}} \rangle_f = [u_P^{\text{OMI}}]_f - [u_P]_f = \langle A_P^{-1} G_P \rangle_f \quad (4.11)$$

4.2.2. Interpolación del Momento para flujos monofásicos transitorios

La técnica de interpolación OMI puede presentar oscilaciones no físicas en el campo de presión cuando se aplica a flujos no estacionarios, o cuando se usa relajación [113, 239].

Para evitarlas, Choi [42] propone una modificación de la técnica OMI para el tratamiento del término temporal. Esta técnica, que denominaremos SMI del inglés *Standard Momentum Interpolation*, es la formulación para flujos transitorios utilizada habitualmente en códigos de Fluidodinámica Computacional.

La mejora propuesta por el método SMI consiste en considerar explícitamente el término temporal en las contribuciones fuera de la diagonal principal a la matriz de coeficientes de la ecuación discretizada⁵:

$$A_P u_P = H_P + A_P^{T,n} u_P^n + G_P \quad (4.12)$$

donde H_P representa las contribuciones que se obtienen de la ecuación sin término temporal ni gradiente de presión, $A^T = \rho V / \Delta t$ corresponde al término temporal y n indica que las variables son evaluadas en el paso temporal anterior.

La velocidad en el nodo formulada en estos términos es:

$$\begin{aligned} u_P &= \frac{H_P}{A_P} + \frac{A_P^{T,n}}{A_P} u_P^n + A_P^{-1} G_P \\ &= \hat{u}_P^{\text{SMI}} + a_P^{T,n} u_P^n + a_P G_P \end{aligned} \quad (4.13)$$

donde, por conveniencia, se ha definido una pseudo-velocidad no estacionaria \hat{u}^{SMI} , y se han introducido los coeficientes: $a_P = A_P^{-1}$ y $a_P^{T,n} = A_P^{T,n} / A_P$.

Si se aplica el mismo procedimiento de la OMI (*i.e.* interpolación lineal para la pseudo-velocidad en la cara: $\langle \hat{u}_P \rangle_f = 0$), la corrección a la velocidad en la cara según la SMI es:

$$\langle u_P^{\text{SMI}} \rangle_f = [u_P^{\text{SMI}}]_f - [u_P]_f = \langle a_P G_P \rangle_f + \langle a_P^{T,n} u_P^{\text{SMI},n} \rangle_f \quad (4.14)$$

⁵ Por simplicidad, se asume un esquema de discretización temporal de primer orden tipo Euler.

El último término representa la corrección temporal para evitar las oscilaciones de presión. Sin embargo, esta aproximación no es completamente satisfactoria cuando se utilizan pasos temporales intermedios, debido a que el coeficiente temporal $a_P^{T,n}$ retiene el tamaño del paso temporal y, en consecuencia, la solución depende del paso temporal utilizado [46, 113, 239].

La Interpolación del Momento Compacta (CMI, del inglés *Compact Momentum Interpolation*) propuesta por Cubero y Fueyo [46] es una alternativa que evita estrictamente la dependencia de la solución con el paso temporal. Esta formulación es analíticamente consistente y puede tratar de una forma compacta términos de relajación lineal o inercial y diversos esquemas temporales.

La Interpolación del Momento Compacta CMI considera los términos temporales explícitamente no sólo en el término con las contribuciones fuera de la diagonal H_P , sino también en el que incluye las contribuciones a la diagonal principal A_P :

$$(A_P + A_P^T) u_P = (H_P + A_P^{T,n} u_P^n) + G_P \quad (4.15)$$

La velocidad en el nodo y en la cara se pueden expresar, introduciendo los coeficientes definidos anteriormente, como:

$$(1 + a_P^T) u_P = \hat{u}_P^{\text{CMI}} + a_P G_P + a_P^{T,n} u_P^n \quad (4.16)$$

$$(1 + [a_P^T]_f) [u_P^{\text{CMI}}]_f = [\hat{u}_P^{\text{CMI}}]_f + [a_P]_f [G_P]_f + [a_P^{T,n}]_f [u_P^{\text{CMI},n}]_f \quad (4.17)$$

La expresión para la corrección de velocidad se obtiene, análogamente a las técnicas anteriores, al aproximar la pseudo-velocidad en la cara por una interpolación lineal ($\langle \hat{u} \rangle_f = 0$):

$$\langle u_P^{\text{CMI}} \rangle_f = [u_P^{\text{CMI}}]_f - [u_P]_f = \langle a_P G_P \rangle_f + \left\{ \langle a_P^{T,n} u_P^{\text{CMI},n} \rangle_f - \langle a_P^T u_P^{\text{CMI}} \rangle_f \right\} \quad (4.18)$$

donde el término entre llaves representa la corrección a la OMI debido a la presencia del término temporal en la ecuación de conservación de cantidad de movimiento. Al contrario que la formulación SMI, esta formulación es consistente en el estado estacionario: el tamaño del paso temporal aparece únicamente en los coeficientes temporales a^T que se cancelan en estado estacionario ($a^T = a^{T,n}$ y $u^{\text{CMI}} = u^{\text{CMI},n}$); y además en estado estacionario se recupera la formulación original de la técnica de Interpolación del Momento OMI (Ecuación 4.8). La forma de cálculo de los coeficientes (*e.g.* a^T) en el cálculo de la corrección se describe en la Sección 4.2.4.

4.2.3. Propuesta de Interpolación del Momento Compacta para flujos multifásicos

En esta sección se expone la propuesta realizada en esta Tesis para la aplicación de la técnica de Interpolación del Momento CMI a flujos multifásicos.

Para el tratamiento de este tipo de flujos conviene expresar la ecuación de conservación de cantidad de movimiento para la fase p (Ecuación 2.4) de forma que aparezcan de forma explícita la fracción volumétrica r_p en el término de gradiente de presión y la velocidad en el término de fuerza de arrastre. Esta ecuación discretizada se expresa como:

$$\left(A_P + A_P^T\right) u_P = H_P + A_P^{T,n} u_P^n + r_P G_P + \sum_q f_P^{pq,\mathbf{v}} (u_{q,P} - u_P) \quad (4.19)$$

donde los subíndices para la fase p se omiten por brevedad. El último término, de fuerza de arrastre (gas-sólido o sólido-sólido), acopla fuertemente las ecuaciones de cantidad de movimiento de las fases. Además, cuando es dominante en la ecuación, este término puede causar una convergencia lenta de los algoritmos de resolución segregados, como el que se propone en esta Tesis.

Para evitar este problema se utiliza a veces un tratamiento parcialmente implícito de la fuerza de arrastre [198], que aproxima su valor como $f_P^{pq,\mathbf{v}} (u_{q,P} - u_P) \approx f_P^{pq,\mathbf{v},k} (u_{q,P}^k - u_P)$, donde k indica la evaluación en la iteración anterior de resolución.

Debido a que el término de arrastre involucra la velocidad, en esta Tesis se propone aplicar el mismo método que se utiliza para el término temporal en la técnica CMI explicitando sus contribuciones a los coeficientes de la diagonal A_P y de fuera de esta H_P :

$$\left(A_P + A_P^T + A_P^D\right) u_P = H_P + r_P G_P + A_P^{T,n} u_P^n + \sum_q A_P^{D_{pq},k} u_{q,P}^k \quad (4.20)$$

donde el coeficiente de arrastre es $A^{D_{pq}} = f^{pq}$, de la misma magnitud y de signo contrario para las fases p y q ($A^{D_{pq}} = -A^{D_{qp}}$).

Utilizando para el término de arrastre la notación $a^{D_{pq}} = A^{D_{pq}}/A$, análoga a las ya introducidas para los cocientes de los otros términos, se obtienen las siguientes expresiones para la velocidad según la Interpolación del Momento Compacta para flujos multifásicos

CMIm:

$$(1 + a_P^T + \sum_q a_P^{D_{pq}})u_P = \widehat{u}_P^{\text{CMIm}} + a_P r_{p,P} G_P + a_P^{T,n} u_P^n + \sum_q a_P^{D_{pq,k}} u_{q,P}^k \quad (4.21)$$

$$(1 + [a_P^T]_f + \sum_q [a_P^{D_{pq}}]_f) [u_P^{\text{CMIm}}]_f = [\widehat{u}_P^{\text{CMIm}}]_f + [a_P]_f [r_P]_f [G_P]_f \\ + [a_P^{T,n}]_f [u_P]_f^{\text{CMIm},n} + \sum_q [a_P^{D_{pq,k}}]_f [u_{q,P}^{\text{CMIm},k}]_f \quad (4.22)$$

Aproximando la pseudo-velocidad en la cara mediante una interpolación lineal ($\langle \widehat{u}_P \rangle_f = 0$), la corrección CMIm de la velocidad de la fase es:

$$\langle u_P^{\text{CMIm}} \rangle_f = [u_P^{\text{CMIm}}]_f - [u_P]_f = \langle a_P r_P G_P \rangle_f \quad (4.23) \\ + \left\{ \langle a_P^{T,n} u_P^{\text{CMIm},n} \rangle_f - \langle a_P^T u_P^{\text{CMIm}} \rangle_f \right\} \\ + \sum_q \left\{ \langle a_P^{D_{pq,k}} u_{q,P}^{\text{CMIm},k} \rangle_f - \langle a_P^{D_{pq}} u_P^{\text{CMIm}} \rangle_f \right\}$$

La forma de cálculo de los coeficientes (*e.g.* $a_P^{D_{pq}}$) en el cálculo de la corrección se describe en la Sección 4.2.4.

Por tanto, la corrección de la velocidad en la CMIm para flujo multifásico es formalmente idéntica a la formulación CMI para flujo monofásico (Ecuación 4.18, ver [46]), excepto por la aparición de la fracción volumétrica r_P en el término de presión y del último término entre llaves con la contribución de las fuerzas de arrastre.

La Ecuación 4.23 cumple que:

- (i) la solución estacionaria es independiente del paso temporal, porque el primer término entre parentesis se anula; y
- (ii) se recupera la formulación CMI cuando una única fase está presente (*i.e.* $r_P = 1$ y $a_P^{D_{pq}} = 0$).

La formulación CMIm propuesta puede extenderse para contabilizar coeficientes de relajación y esquemas temporales de mayor orden fácilmente, aplicando un procedimiento análogo al presentado para flujos monofásicos por Cubero y Fueyo [46]. Del mismo modo, pueden tenerse en cuenta otro tipo de fuerzas en las que también intervenga la velocidad de la fase como las de masa virtual o de sustentación.

4.2.4. Interpolación de los coeficientes de la CMIm

Las expresiones para el cálculo de la velocidad interpolada en la cara según las distintas técnicas de Interpolación del Momento contienen diversos coeficientes no cerrados. Estos son la interpolación a la cara de los términos de la diagonal invertidos $[a_P]_f$, la fracción volumétrica $[r_P]_f$, y los cocientes temporal $[a_P^T]_f$ y de arrastre $[a_P^{Dpq}]_f$.

La forma de interpolación de estos es crítica para que el método sea consistente en dos aspectos adicionales a los listados en la sección anterior:

- (iii) la fuerza de arrastre debe ser de igual magnitud y signo contrario para las dos fases involucradas;
- (iv) y la fuerza de presión debe ser proporcional al gradiente de presión (compartida por todas las fases).

Aunque las ecuaciones presentadas para los nodos cumplen exactamente estas condiciones, en las caras su cumplimiento depende de la forma de interpolación.

En esta Tesis para su aplicación a la CMIm propuesta, como en la formulación original de Rhie y Chow [171], el inverso de los términos en la diagonal se calcula por interpolación lineal:

$$[a_P]_f = [a_P]_f = \left[\frac{1}{A_P} \right]_f \quad (4.24)$$

Además, también se propone una interpolación lineal para la fracción volumétrica:

$$[r_P]_f = [r_P]_f \quad (4.25)$$

El coeficiente del término de presión, el cociente temporal y el cociente de arrastre se calculan descomponiéndolos, de forma análoga a la técnica CMI para flujos monofásicos [46], como:

$$[r_P G_P]_f = [r_P]_f [G_P]_f \quad (4.26)$$

$$[a_P^T]_f = [a_P^T]_f = [A_P^T]_f \left[\frac{1}{A_P} \right]_f \quad (4.27)$$

$$[a_P^{Dpq}]_f = [a_P^{Dpq}]_f = [A_P^{Dpq}]_f \left[\frac{1}{A_P} \right]_f \quad (4.28)$$

Si se utilizan estas interpolaciones, se pueden dividir por el inverso de los términos de la diagonal principal $[a]_f$ las ecuaciones para la velocidad en el nodo y en la cara

(Ecuaciones 4.21 y 4.22), y la corrección propuesta en la cara para la ecuación de cantidad de movimiento en estado estacionario se puede expresar como:

$$\left\langle \frac{1}{a_P} u_P \right\rangle_f = \left\langle \frac{1}{a_P} \hat{u}_P^{\text{CMIm}} \right\rangle_f + \langle r_P G_P \rangle_f + \sum_q \left\{ \left\langle A_P^{D_{pq}} u_{q,P}^{\text{CMIm}} \right\rangle_f - \left\langle A_P^{D_{pq}} u_P^{\text{CMIm}} \right\rangle_f \right\} \quad (4.29)$$

Como $A_P^{D_{pq}} = -A_P^{D_{qp}}$, la fuerza de arrastre se anula cuando se suman todas las ecuaciones de cantidad de movimiento; y como, además, $\sum r_p = 1$ el sistema queda gobernado por la presión compartida por todas las fases:

$$\left\langle \sum \frac{1}{a_P} u_P \right\rangle_f = \left\langle \sum \frac{1}{a_P} \hat{u}_P^{\text{CMIm}} \right\rangle_f + \langle G_P \rangle_f \quad (4.30)$$

Con estas provisiones, la técnica propuesta de Interpolación del Momento Compacta para flujos multifásicos es analíticamente consistente en los cuatro aspectos requeridos:

- (i) la solución es independiente del paso temporal,
- (ii) se recupera la formulación CMI si todas las fases son idénticas (y el flujo es, por tanto, monofásico),
- (iii) el término de fuerza de arrastre es de igual magnitud y de signo contrario para las fases p y q (*i.e.* se anula en la ecuación conjunta para la mezcla), y
- (iv) la fuerza de presión global es proporcional al gradiente de presión.

4.3. Método de resolución

Las características específicas de las ecuaciones de conservación que resultan del modelado euleriano-euleriano del flujo multifásico con fases granulares exigen la adaptación de los algoritmos de resolución diseñados para flujo monofásico.

Las principales dificultades asociadas a su aplicación para la resolución de un flujo multifásico gas-sólido son:

1. Las fases presentes compiten por ocupar el espacio disponible.
2. La fracción volumétrica de las fases no es constante y:
 - a) En el caso de fases sólidas, su valor está acotado superiormente por el límite físico impuesto por su grado de máximo empaquetamiento.

- b) Puede ser nula, resultando indeterminadas la velocidad, temperatura, y especies químicas de la fase.
3. Los distintos términos de transferencia entre fases presentes en flujo reactivo acoplan fuertemente todas las ecuaciones de transporte.
 4. Las ecuaciones de conservación de cantidad de movimiento de las fases están fuertemente acopladas por el término de arrastre.
 5. Se tienen varias ecuaciones de continuidad (una para cada fase) a partir de las cuales hay que deducir una ecuación para la (corrección de la) presión (compartida entre todas las fases).

A continuación se describen las estrategias que se proponen, en la literatura y en esta Tesis, para solucionar estas dificultades.

Como se ha reseñado, en los modelos eulerianos-eulerianos, el espacio físico es compartido por todas las fases presentes en el sistema (punto 1), y el reparto de este volumen compartido por todas las fases relaciona (implícitamente) las ecuaciones de conservación de fracción volumétrica de las fases. El tratamiento realizado para la resolución de estas ecuaciones se presenta en la Sección 4.3.2. En presencia de fases sólidas (punto 2a) la fracción volumétrica máxima de estas está acotada superiormente por el límite de máximo empaquetamiento (ver Sección 2.3). Para evitar alcanzar este grado de empaquetamiento se puede usar un tratamiento numérico adecuado del modelo constitutivo viscoso-friccional del sólido (*i.e.* de la transición viscoso-friccional, ver Sección 2.3), combinado con una elección adecuada del paso temporal.

El tratamiento conocido como α -intensivo⁶ se introduce con el objetivo de evitar la indeterminación en los valores de la velocidad, temperatura y especies químicas cuando la concentración de una fase tiende localmente a cero (punto 2b). Este método consiste en extraer de las derivadas de las ecuaciones de conservación la fracción volumétrica de la fase resuelta, y dividir la ecuación por ella.

La aparición como denominador de la fracción volumétrica de fase, como consecuencia de la división, hace necesario truncar el valor de esta cuando es menor que un valor mínimo, $r_p < r_p^{min}$. La elección de dicho valor puede afectar a los resultados, como por ejemplo a la consistencia del método en presencia de reacción química o de transferencia de masa.

La aplicación del tratamiento α -intensivo presenta ventajas tanto en el cálculo y aco-

⁶Se denomina α -intensivo porque α es a menudo el símbolo utilizado para la fracción volumétrica, r en esta Tesis.

tamiento de la fracción volumétrica como en el tratamiento numérico de las ecuaciones (ver, por ejemplo, [154, 174]). Su principal desventaja es que la formulación no conservativa de las ecuaciones no es apropiada para el método de volúmenes finitos, y puede dar lugar a soluciones que no cumplen conservación (véanse los ejemplos numéricos en Park et al. [158]). En esta Tesis se ha optado por resolver las ecuaciones en su forma conservativa, a pesar de su mayor dificultad numérica, para asegurar la conservación de las variables transportadas.

La no linealidad e interdependencia de las ecuaciones a resolver (puntos 3 y 4) requiere utilizar para su resolución un método iterativo. Entre los algoritmos desarrollados para flujo multifásico, el propuesto en esta Tesis se basa en el método segregado conocido como IPSA (Inter-Phase Slip Algorithm) propuesto para mallas decaladas por Spalding [195]. El procedimiento IPSA original es similar al método SIMPLE para flujo monofásico [161], que resuelve el flujo mediante la predicción y posterior corrección de los campos de presión y velocidad [196]. La diferencia radica en el cálculo del campo de presión (y de velocidad) a partir de una ecuación global de conservación de masa. Con distintas variaciones, este algoritmo se ha aplicado con éxito para el modelado de varios tipos de flujo multifásico (*e.g.* [14, 196]).

En esta Tesis se ha adaptado el algoritmo IPSA a mallas colocalizadas, resolviéndose implícitamente las ecuaciones del flujo transitorio utilizando para el acoplamiento entre las ecuaciones un esquema tipo PISO [103, 107].

La ecuación de conservación global de masa, utilizada para la resolución del campo presión, se construye evaluando las velocidades convectivas mediante la técnica de Interpolación del Momento CMIm desarrollada (ver Sección 4.3.1, puntos 4 y 5).

El algoritmo resultante, denominado CIPSA, es un algoritmo consistente para resolver en su forma conservativa las ecuaciones de transporte no estacionarias que gobiernan cada una de las fases en el flujo multifásico gas-sólido reactivo. Este procedimiento de resolución tiene las siguientes características:

- Las ecuaciones se resuelven en forma conservativa asegurando (frente a métodos α -intensivos) que la solución convergida cumple los principios de conservación.
- Se aplica el método conocido como paso dual para resolver el flujo transitorio. Este método consiste en realizar, dentro de cada paso temporal, un bucle de iteraciones para asegurar que la solución para el tiempo correspondiente ha convergido.
- Incluye un cálculo riguroso de los flujos convectivos, utilizando la adaptación propuesta de la técnica de Interpolación del Momento para flujos multifásicos transitorios.

- La densidad de cualquier fase puede ser variable.
- El algoritmo se ha desarrollado para el tratamiento de una fase gaseosa y un número arbitrario de fases sólidas.
- Se permiten procesos de transferencia de masa entre las distintas fases y procesos de reacción química.

El algoritmo propuesto para la resolución del flujo reactivo multifásico se describe a continuación. El núcleo del algoritmo consiste en la resolución de una ecuación para la presión compartida por todas las fases. La construcción de esta ecuación aplicando la técnica propuesta de Interpolación del Momento Compacta multifásica se describe en la Sección 4.3.1. La resolución y acotamiento de la fracción volumétrica de fase se presenta en la Sección 4.3.2. El procedimiento completo de resolución para el flujo multifásico reactivo y transitorio propuesto se describe en la Sección 4.3.3.

4.3.1. Resolución de la ecuación de presión

El método IPSA para flujos multifásicos se basa en la construcción de una ecuación para la presión a partir de una ecuación de conservación de masa global. Para deducir esta ecuación se puede utilizar una combinación de las ecuaciones de conservación de masa de cada fase. La opción más sencilla es sumarlas.

En flujos gas-sólidos, las fases sólidas tienen una densidad mucho mayor que la fase gas. Debido a la resolución en forma conservativa, la ecuación (suma) para la corrección de la presión es dominada por los coeficientes de las fases (sólidas) más densas. En este caso la fase menos densa es débilmente conservada [37, 146] (tomados de [174]).

Una opción es formular esta ecuación dividiendo la ecuación de conservación de masa de cada fase (Ecuación 2.3) por una densidad característica constante ρ^{ref} antes de ser sumadas:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_p \frac{r_p \rho_p}{\rho_p^{ref}} \right) + \nabla \cdot \left(\sum_p \frac{r_p \rho_p \mathbf{v}_p}{\rho_p^{ref}} \right) = \sum_p \frac{1}{\rho_p^{ref}} \sum_x \sum_q \dot{m}_{qp}^x \quad (4.31)$$

El término del lado derecho aparece cuando hay transferencia de masa debido al ponderado con la densidad. Es nulo si no hay transferencia de masa entre las fases (como es frecuentemente el caso en los estudios publicados en la literatura); y también cuando la densidad característica utilizada es la misma para todas las fases.

El término convectivo de la Ecuación 4.31 para la fase p en forma discretizada se expresa

en función de la velocidad en la cara interpolada según la CMIm $[\mathbf{v}_{p,P}^{CMIm}]_f$ (implícitamente definida en la Ecuación 4.22):

$$\begin{aligned}
\lrcorner \nabla \cdot \left(\frac{r_p \rho_p \mathbf{v}_p}{\rho_p^{ref}} \right) \lrcorner &= \sum_f \mathbf{S}_f \left[\frac{r_{p,P} \rho_{p,P}}{\rho_p^{ref}} \right]_f [\mathbf{v}_{p,P}^{CMIm}]_f \\
&= \sum_f \mathbf{S}_f \left[\frac{r_{p,P} \rho_{p,P}}{\rho_p^{ref}} \right]_f \left(\frac{[\widehat{\mathbf{v}}_{p,P}^{CMIm}]_f + [a_{p,P}^{T,n-1}]_f [\mathbf{v}_{p,P}^{CMIm,n-1}]_f}{1 + [a_{p,P}^{T,n}]_f + \sum_q [a_{p,P}^{Dpq}]_f} \right. \\
&\quad \left. + \frac{\sum_q [a_{p,P}^{Dpq}]_f [\mathbf{v}_{q,P}^{CMIm,k-1}]_f + [a_{p,P}]_f [r_{p,P}]_f \lrcorner \nabla_f p \lrcorner}{1 + [a_{p,P}^{T,n}]_f + \sum_q [a_{p,P}^{Dpq}]_f} \right) \\
&= \sum_f \mathbf{S}_f \left[\frac{r_{p,P} \rho_{p,P}}{\rho_p^{ref}} \right]_f \left([\widetilde{\mathbf{v}}_{p,P}^{CMIm}]_f + [a_{p,P}^{G,CMIm}]_f [r_{p,P}]_f \lrcorner \nabla_f p \lrcorner \right)
\end{aligned} \tag{4.32}$$

donde $\lrcorner \nabla_f p \lrcorner = [G_P]_f$ en la formulación de la Interpolación del Momento (ver Ecuación 4.8). En la última igualdad, para simplificar la notación, se han definido dos nuevas variables $[\widetilde{\mathbf{v}}_{p,P}^{CMIm}]_f$ y $[a_{p,P}^{G,CMIm}]_f$, como:

$$[\widetilde{\mathbf{v}}_{p,P}^{CMIm}]_f = \frac{1}{1 + [a_{p,P}^{T,n}]_f + \sum_q [a_{p,P}^{Dpq}]_f} \tag{4.33}$$

$$\begin{aligned}
&([\widehat{\mathbf{v}}_{p,P}^{CMIm}]_f + [a_{p,P}^{T,n-1}]_f [\mathbf{v}_{p,P}^{CMIm,n-1}]_f + \sum_q [a_{p,P}^{Dpq}]_f [\mathbf{v}_{q,P}^{CMIm,k-1}]_f) \\
[a_{p,P}^{G,CMIm}]_f &= \frac{[a_{p,P}]_f [r_{p,P}]_f}{1 + [a_{p,P}^{T,n}]_f + \sum_q [a_{p,P}^{Dpq}]_f} \tag{4.34}
\end{aligned}$$

Las nuevas variables son el coeficiente del gradiente de presión $[a_{p,P}^{G,CMIm}]_f$, y $[\widetilde{\mathbf{v}}_{p,P}^{CMIm}]_f$, que agrupa el resto de términos. Si se introduce este término convectivo en la Ecuación 4.31 semi-discretizada, la ecuación a resolver para la presión es:

$$\begin{aligned}
\lrcorner \frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_p \frac{r_p \rho_p}{\rho_p^{ref}} \right) \lrcorner + \sum_p \sum_f \mathbf{S}_f \left[\frac{r_{p,P} \rho_{p,P}}{\rho_p^{ref}} \right]_f \left([\widetilde{\mathbf{v}}_{p,P}^{CMIm}]_f + [a_{p,P}^{G,CMIm}]_f [r_{p,P}]_f \lrcorner \nabla_f p \lrcorner \right) \\
= \lrcorner \sum_p \frac{1}{\rho_p^{ref}} \sum_x \sum_q \dot{m}_{qp}^x \lrcorner
\end{aligned} \tag{4.35}$$

En flujos con fases gaseosas de densidad variable es conveniente expresar esta en función del coeficiente de compresibilidad adiabático $\rho = \psi p$ (ver Ecuación 2.56 en Sección 2.7)

e incluirla de forma implícita en la ecuación. En esta Tesis, este tratamiento se hace en los términos temporal y convectivo correspondientes a la fase gaseosa de la ecuación de conservación global. Con ello, esta ecuación es:

$$\begin{aligned}
& \sum_p \sum_f \mathbf{S}_f \left[\frac{r_{p,P} \rho_{p,P}}{\rho_p^{ref}} \right]_f \left[a_{p,P}^{G,CMIm} \right]_f [r_{p,P}]_f \left[\nabla_f p \right]_f \\
& + \left[\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{r_g \psi_g}{\rho_g^{ref}} p_P \right) \right]_f + \sum_f \mathbf{S}_f \left[\frac{r_{g,P} \psi_{g,PPP}}{\rho_g^{ref}} \right]_f \left[\tilde{\mathbf{v}}_{g,P}^{CMIm} \right]_f \\
& + \left[\frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_s \frac{r_s \rho_s}{\rho_s^{ref}} \right) \right]_f + \sum_s \sum_f \mathbf{S}_f \left[\frac{r_{s,P} \rho_{s,P}}{\rho_s^{ref}} \right]_f \left[\tilde{\mathbf{v}}_{s,P}^{CMIm} \right]_f \\
& = \left[\sum_p \frac{1}{\rho_p^{ref}} \sum_x \sum_q \dot{m}_{qp}^x \right]_f
\end{aligned} \tag{4.36}$$

La expresión del término convectivo utilizada (Ecuación 4.32) contiene términos no cerrados que requieren interpolación. Para que la resolución sea consistente⁷ es fundamental evaluar estos términos utilizando un método apropiado de interpolación.

En esta Tesis se utiliza una interpolación por separado, análoga a la realizada en la técnica de Interpolación del Momento CMIm utilizada (ver Sección 4.2.4):

$$\left[\frac{r_{g,P} \psi_{g,PPP}}{\rho_g^{ref}} \right]_f = \frac{[r_{g,P}]_f [\psi_{g,P}]_f}{\rho_g^{ref}} [p_P]_f \tag{4.37}$$

$$\left[\frac{r_{s,P} \rho_{s,P}}{\rho_s^{ref}} \right]_f = \frac{[r_{s,P}]_f [\rho_{s,P}]_f}{\rho_s^{ref}} \tag{4.38}$$

La ecuación para la presión (o conservación de masa global) se obtiene sustituyendo por

⁷ Es decir, para que el término sea idéntico si se describe una fase física como una única fase o como un número arbitrario de fases iguales.

su valor $[\widehat{\mathbf{v}}_P^{\text{CMIm}}]_f$ y $[a_P^{G,\text{CMIm}}]_f$ y utilizando la interpolación descrita:

$$\begin{aligned}
& \sum_p \sum_f \mathbf{S}_f \left[\frac{r_{p,P} \rho_{p,P}}{\rho_p^{\text{ref}}} \right]_f \frac{[a_{p,P}]_f [r_{p,P}]_f}{1 + [a_{p,P}^{T,n}]_f + \sum_q [a_{p,P}^{D_{pq}}]_f} \lrcorner \nabla_f p \lrcorner \\
& + \lrcorner \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{r_g \psi_g}{\rho_g^{\text{ref}}} p \right) \lrcorner + \sum_f \mathbf{S}_f \frac{[r_{g,P}]_f [\psi_{g,P}]_f}{\rho_g^{\text{ref}}} \\
& \frac{[\widehat{\mathbf{v}}_{g,P}^{\text{CMIm}}]_f + [a_{g,P}^{T,n-1}]_f [\mathbf{v}_{g,P}^{\text{CMIm},n-1}]_f + \sum_{q \neq g} [a_{g,P}^{D_{pq}}]_f [\mathbf{v}_{q,P}^{\text{CMIm},k-1}]_f}{1 + [a_{g,P}^{T,n}]_f + \sum_{q \neq g} [a_{g,P}^{D_{pq}}]_f} [p_P]_f \\
& + \lrcorner \frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_s \frac{r_s \rho_s}{\rho_s^{\text{ref}}} \right) \lrcorner + \sum_s \sum_f \mathbf{S}_f \frac{[r_{s,P}]_f [\rho_{s,P}]_f}{\rho_s^{\text{ref}}} \\
& \frac{[\widehat{\mathbf{v}}_{s,P}^{\text{CMIm}}]_f + [a_{s,P}^{T,n-1}]_f [\mathbf{v}_{s,P}^{\text{CMIm},n-1}]_f + \sum_{q \neq s} [a_{s,P}^{D_{pq}}]_f [\mathbf{v}_{q,P}^{\text{CMIm},k-1}]_f}{1 + [a_{s,P}^{T,n}]_f + \sum_{q \neq s} [a_{s,P}^{D_{pq}}]_f} \\
& = \lrcorner \sum_p \frac{1}{\rho_p^{\text{ref}}} \sum_x \sum_q \dot{m}_{qp}^x \lrcorner
\end{aligned} \tag{4.39}$$

donde la presión, que es la variable dependiente a resolver, aparece explícitamente en los tres primeros términos. En esta ecuación aparecen los valores de la presión y la velocidad evaluados en el nodo⁸ P y en las caras f según la CMIm, acoplando ambos campos.

4.3.2. Resolución de la ecuación de la fracción volumétrica de fase

La fracción volumétrica de cada una de las fases se obtiene a partir de la ecuación de conservación de masa de la fase (Ecuación 2.3). Esta ecuación se debe resolver asegurando la conservación de la masa y que las fracciones de fase están acotadas. La forma de resolución no es única y es objeto de debate. Una discusión entre algunas de estas aproximaciones se puede consultar, por ejemplo, en [91], [153] o [174].

La forma directa de resolución es obtener la fracción volumétrica de cada fase mediante la resolución de su ecuación de continuidad (Ecuación 2.3). Sin embargo, esta resolución no acota el valor de la fracción volumétrica⁹ r_p , y no tiene en cuenta la interacción entre las fases presentes en el sistema¹⁰.

⁸ La velocidad en los nodos interviene explícitamente en la evaluación de $[\widehat{\mathbf{v}}]_f$.

⁹ Se puede acotar fácilmente inferiormente (a cero), pero el tratamiento del término convectivo de la ecuación de transporte (Ecuación 2.3) hace difícil su acotamiento superior [174].

¹⁰ Es decir, cómo el flujo de cada fase afecta, por compartir el volumen, al resto de ellas.

Spalding [196] plantea para un flujo bifásico la renormalización de las soluciones obtenidas (*i.e.* $r_p^* = r_p/(r_p + r_q)$). La nueva fracción de fase r_p^* estará acotada sólo si cada fracción volumétrica solución r_p es mayor que cero. Además, las nuevas fracciones r_p^* no cumplirán continuidad. Para asegurar la conservación de masa de fase, Spalding propone un proceso de resolución iterativo hasta que la corrección no sea necesaria $r_p^* = r_p$ (*i.e.* $\sum_q r_q = 1$) [196].

Weller [227] plantea un método para su acotamiento en la resolución de flujos bifásicos de densidad constante y sin intercambio de materia entre fases. En este caso sugiere formular la ecuación de conservación de masa de fase como:

$$\frac{\partial}{\partial t} (r_p) + \nabla \cdot (r_p \mathbf{v}_p) = \frac{\partial}{\partial t} (r_p) + \nabla \cdot (r_p \mathbf{v}) + \nabla \cdot (r_p(1 - r_p) \mathbf{v}_{pq}^r) = 0 \quad (4.40)$$

expresión que acota inferior y superiormente el valor de r_p , y donde la velocidad de la mezcla y la velocidad relativa son respectivamente:

$$\mathbf{v} = r_p \mathbf{v}_p + r_q \mathbf{v}_q \quad (4.41)$$

$$\mathbf{v}_{pq}^r = \mathbf{v}_p - \mathbf{v}_q \quad (4.42)$$

La Ecuación 4.40 acopla la resolución de la fracción volumétrica de ambas fases a través del flujo volumétrico (total y relativo). En su segundo término, donde interviene el flujo volumétrico de la mezcla (\mathbf{v}), la fracción volumétrica está acotada porque cumple exactamente la ecuación de continuidad (de la mezcla) resuelta. En su tercer término, que contiene la velocidad relativa entre las fases (\mathbf{v}_{pq}^r), la fracción volumétrica r_p sólo está acotada si se utiliza un esquema convectivo apropiado¹¹ para su interpolación en función de la velocidad relativa \mathbf{v}_{pq}^r . Debido que la ecuación propuesta es no lineal respecto a la fracción de mezcla, en la resolución numérica el acotamiento sólo se asegura cuando se resuelven implícitamente ambas fracciones volumétricas r_p y r_q , y en consecuencia su resolución mediante *solver* lineales requiere iteración. Para mejorar la convergencia se suele utilizar en conjunción con el método de normalización propuesto por Spalding [174].

En esta Tesis se ha planteado una extensión de esta aproximación a flujos multifásicos con un número arbitrario de fases de densidad variable y para una formulación extensiva de la ecuación de conservación. Para ello se propone la siguiente expresión para resolver la ecuación de conservación de masa (Ecuación 2.3):

$$\frac{\partial}{\partial t} (r_p \rho_p) + \nabla \cdot (r_p \rho_p^{ref} \mathbf{v}) + \nabla \cdot (r_p \rho_p^{ref} \sum_q r_q \mathbf{v}_{pq}^r) = \sum_x \sum_q \dot{m}_{qp}^x \quad (4.43)$$

¹¹ El valor interpolado de los flujos relativos ha de ser el mismo y de signo contrario $r_p(1 - r_p) \mathbf{v}_{pq}^r = -r_q(1 - r_q) \mathbf{v}_{qp}^r$

donde la velocidad de la mezcla, y la velocidad relativa se definen como:

$$\mathbf{v} = \sum_p r_p \frac{\rho_p}{\rho_p^{ref}} \mathbf{v}_p \quad (4.44)$$

$$\mathbf{v}_{pq}^r = \frac{\rho_p}{\rho_p^{ref}} \mathbf{v}_p - \frac{\rho_q}{\rho_q^{ref}} \mathbf{v}_q \quad (4.45)$$

La Ecuación 4.43 acopla, análogamente a la planteada por Weller, la resolución de la fracción volumétrica de ambas fases a través del flujo másico (total y relativo). El término del flujo total contiene el término convectivo de la ecuación de continuidad global resuelta (Ecuación 4.36). De forma análoga, la resolución consistente exige que en su interpolación el flujo relativo de cada pareja de fases tomen el mismo valor cambiado de signo.

La expresión planteada, aunque no acota la fracción volumétrica, mejora la convergencia de la solución y el tratamiento de flujos cercanos al máximo empaquetamiento debido al acoplamiento que proporciona entre las fases. La ecuación generalizada propuesta se reduce a la ecuación planteada por Weller [227] para el caso particular de dos fases y densidad constante¹² (Ecuación 4.40).

Esta extensión propuesta en esta Tesis (Ecuación 4.43) se combina con un método iterativo de resolución similar al planteado por [196]. Tras resolver una ecuación de conservación para la fracción volumétrica de cada una de las fases, se introduce un paso de truncado ($r_s \in [0, r_s^{max}]$; $r_f \in [0, 1]$), antes de normalizar las variables ($r_s^* = r_s / \sum_q r_q$; $r_f^* = 1 - \sum_s r_s^*$). Se realizan las iteraciones necesarias hasta que se alcanza la convergencia, $r_p^* = r_p$.

4.3.3. Algoritmo de resolución del sistema de ecuaciones

En esta sección se presenta el algoritmo propuesto para la resolución del sistema de ecuaciones en derivadas parciales que conforma el modelo euleriano-euleriano del flujo multifásico reactivo (descrito en los Capítulos 2 y 3). Para su resolución, debido a la no linealidad e interdependencia de las ecuaciones (*e.g.* a través de los términos de transferencia o de arrastre), se utiliza un método iterativo.

El método utilizado en esta Tesis se basa en el método conocido como IPSA (Inter-Phase Slip Algorithm) propuesto para mallas decaladas por Spalding [195]. El procedimiento IPSA original es similar al método SIMPLE propuesto para flujo monofásico por Patankar y Spalding [161] que resuelve el flujo mediante la predicción y posterior corrección de los campos de presión y velocidad [196]. La diferencia radica en el uso para el cálculo del campo de presión de una ecuación global de conservación de masa.

¹² Si la densidad de referencia para cada fase es la de la propia fase.

El algoritmo numérico de resolución IPSA se ha adaptado a su uso en mallas colocalizadas mediante la aplicación de la técnica CMIm propuesta en esta Tesis (ver Sección 4.3.1), que utiliza para el acoplamiento entre las ecuaciones un esquema tipo PISO [103, 107]. En esta propuesta el paso de corrección utiliza la ecuación para la presión deducida aplicando la técnica CMIm (Ecuación 4.36). Con la presión resuelta, el campo estimado de velocidad en el paso de predicción se corrige para que cumpla continuidad.

El núcleo del algoritmo propuesto incluye la resolución de las ecuaciones de continuidad, en el mismo nivel de iteración k , en el que se realizan los pasos de predicción y corrección. Esta resolución se realiza de la forma descrita en la Sección 4.3.2.

Este núcleo se ha extendido para considerar el transporte de energía y especies químicas. La resolución de estas ecuaciones se realiza en un segundo nivel de iteración j . Este doble bucle permite alcanzar la convergencia en la solución de las variables fluidodinámicas para cada campo predicho de especies y temperatura, mejorando así la convergencia global del algoritmo.

En este nivel el tratamiento de la reacción química se realiza mediante el método de pasos fraccionados, que separa en el cálculo las contribuciones de la reacción química y el transporte. La evolución del estado termoquímico se calcula en ausencia de transporte. El paso de transporte se realiza a continuación, una vez actualizado el nuevo estado del sistema (ver Sección 4.4.2).

El tratamiento del flujo transitorio se realiza con el método del paso dual. Este método asegura la convergencia de la solución de todas las ecuaciones de conservación para cada paso temporal antes de avanzar el tiempo de simulación.

El algoritmo resultante con estas características se ha denominado CIPSA (de la contracción de CMIm e IPSA). Este resuelve, en resumen, las variables dependientes de una forma segregada en un proceso iterativo de tres niveles anidados:

n de avance en la discretización temporal,

j de resolución del problema reactivo (completo) para un paso de tiempo, y

k de convergencia de la solución fluidodinámica para el mismo paso de tiempo.

El hecho de construir las ecuaciones para todas las fases y para cada variable conservada antes de resolverlas hace que aumente la robustez del algoritmo. Este tratamiento en el nivel más interno k permite que la construcción de la ecuación para la presión, fundamental para el buen comportamiento del algoritmo, sea lo más consistente posible.

Con el mismo objeto, en cada iteración se realiza, previa a la construcción de las ecuaciones de conservación, la evaluación de los coeficientes de los modelos de transferencia correspondientes (*e.g.* modelo de arrastre) y de las propiedades constitutivas de las fases granulares.

El procedimiento de solución completo es:

- Iteración temporal en n . Variables a obtener: $\Phi^{n+1}, \Phi = \mathbf{p}, \mathbf{u}_p, \mathbf{r}_p, \mathbf{d}_p, \mathbf{Y}_p^\alpha, \mathbf{T}_p$

1. Almacenar los términos dependientes de los valores de iteraciones temporales anteriores Φ^n .

2. Iteración en j . Variables a obtener: $\Phi^{j+1}, \Phi = \mathbf{p}, \mathbf{u}_p, \mathbf{r}_p, \mathbf{d}_p, \mathbf{Y}_p^\alpha, \mathbf{T}_p$

- 2.1 Almacenar los términos dependientes de los valores de iteraciones temporales anteriores Φ^j .

- 2.2 Cálculo de los términos de reacción química basados en los valores de la iteración anterior Φ^n .

- 2.3 Iteración en k . Variables a obtener: $\Phi^{k+1}, \Phi = \mathbf{p}, \mathbf{u}_p, \mathbf{r}_p, \mathbf{d}_p$

- 2.3.1 Cálculo de las propiedades constitutivas del sólido con la teoría cinética del flujo granular y el modelo friccional, usando los valores de la iteración anterior Φ^k .

- 2.3.2 Resolución: Velocidades de las fases \mathbf{v}_q :

- a) Cálculo de los coeficientes de arrastre basados en los valores de la iteración anterior Φ^k . Para la velocidad de cada fase q construir el sistema algebraico discretizado a resolver para la Ecuación 2.4 basado en los valores de la iteración anterior k de fracción volumétrica \mathbf{r}_q^k , de velocidades convectivas y transportadas ($\mathbf{u}_q^{\text{CMI},k}, \mathbf{u}_q^k$) y presión \mathbf{p}^k

$$[A_q^u] \mathbf{u}_q^{*,k+1} = \mathbf{B}_q^u \quad (4.46)$$

- b) Para cada fase resolver estas ecuaciones para obtener el campo predicho $\mathbf{u}_q^{*,k+1}$.

- c) Para cada fase calcular las pseudo-velocidades de convección y transportadas totales según el esquema CMI (Ecuacio-

nes 4.16 y 4.17, sin términos de presión) basadas en los valores de velocidad predichos.

2.3.3 Resolución: Presión \mathbf{p} :

- a) Construir el sistema algebraico para una ecuación de conservación de masa total discretizada utilizando la técnica de Interpolación del Momento multifásica (Ecuación 4.36):

$$[A^p]\mathbf{p}^{*,k+1} = \mathbf{B}^p \quad (4.47)$$

- b) Resolver la ecuación construida para obtener \mathbf{p}^{k+1} .
- c) Corregir las pseudo-velocidades utilizando el valor calculado para la fuerza de presión, obteniendo: $\mathbf{u}^{\text{CMI},k+1}$ y \mathbf{u}^{k+1} .

2.3.4 Resolución: Fracción volumétrica de las fases \mathbf{r}_p^{k+1} .

- a) Para la fracción volumétrica de cada fase q construir el sistema algebraico discretizado a resolver para la Ecuación 2.3:

$$[A_q^r]\mathbf{r}_q^{*,k+1} = \mathbf{B}_q^r \quad (4.48)$$

- b) Resolver el sistema para cada una de las fases y calcular el valor de las fracciones volumétricas.
- c) Cálculo del error ($= 1,0 - \sum_q \mathbf{r}_q^{*,k+1}$). Truncado y posterior normalización de las fracciones volumétricas (obteniendo \mathbf{r}_q^{k+1}).
- d) $\mathbf{r}_q^k = \mathbf{r}_q^{k+1}$. Volver al paso a) hasta que se alcanza la convergencia ($\mathbf{r}_q^{k+1} = \mathbf{r}_q^*$).

2.3.5 Resolución: Diámetro de las fases sólidas \mathbf{d}_s^{k+1} .

- a) Para la fracción de volumen *shadow* de cada fase s construir el sistema algebraico discretizado a resolver para la Ecuación 3.6:

$$[A_s^{s_s}]\mathbf{s}_s^{k+1} = \mathbf{B}_s^s \quad (4.49)$$

- b) Resolver el sistema para cada una de las fases y calcular el

valor del diámetro \mathbf{d}_s a partir del volumen *shadow* resuelto (Ecuación 3.7).

2.3.6 $\Phi^k = \Phi^{k+1}$, $\Phi = \mathbf{p}$, \mathbf{u}_p , \mathbf{r}_p , \mathbf{d}_p Volver al paso 2.3.1 hasta que se alcanza la convergencia para todas las variables.

2.4 $\Phi^j = \Phi^{k+1}$, $\Phi = \mathbf{p}$, \mathbf{u}_p , \mathbf{r}_p , \mathbf{d}_p Actualización de las variables con los valores resueltos en el bucle interno.

2.5 Resolución: Fracciones másicas de especies químicas de las fases $\mathbf{Y}_p^{\alpha, j+1}$:

a) Para cada especie química de cada fase q construir el sistema algebraico discretizado a resolver para la Ecuación 2.2 basado en los valores de la iteración anterior Φ^j

$$[A_q^{Y^\alpha}] \mathbf{Y}_q^{\alpha*, j+1} = \mathbf{B}_q^{Y^\alpha} \quad (4.50)$$

b) Para cada fase resolver estas ecuaciones para obtener: $\mathbf{Y}_q^\alpha, j+1$.

2.6 Resolución: Temperatura de las fases \mathbf{T}_q^{j+1} :

a) Cálculo de los coeficientes de transferencia de calor entre fases basados en los valores de la iteración anterior Φ^j .

b) Para cada especie química de cada fase q construir el sistema algebraico discretizado a resolver para la Ecuación 2.6 basado en los valores de la iteración anterior Φ^j

$$[A_q^T] \mathbf{T}_q^{*, j+1} = \mathbf{B}_q^T \quad (4.51)$$

c) Para cada fase resolver estas ecuaciones para obtener: \mathbf{T}^{j+1} .

2.7 Actualizar las propiedades termoquímicas de las fases.

2.8 $\Phi^j = \Phi^{j+1}$, $\Phi = \mathbf{Y}_p^\alpha$, \mathbf{T}_p . Volver al paso 2.1 hasta que se alcanza la convergencia para todas las variables.

3. En su caso ajustar el paso temporal.

4. $\Phi^{n+1} = \Phi^{j+1}$, $\Phi = \mathbf{p}$, \mathbf{u}_p , \mathbf{r}_p , \mathbf{d}_p , \mathbf{Y}_p^α , \mathbf{T}_p

4.4. Diseño e implementación del Solver CIPSA n PhaseEulerReactFoam

Entre los *solver* eulerianos multifásicos disponibles al comienzo de esta Tesis, ninguno, libre o comercial, permitía el tratamiento de flujos reactivos, con densidad variable, con un número arbitrario de fases y con tamaño de partícula variable. En consecuencia, en esta Tesis se optó por construir un nuevo *solver* utilizando la *toolbox* *OpenFOAM* (ver Sección 1.4), que incorpora las mejoras numéricas detalladas anteriormente en este capítulo.

El código computacional desarrollado se denomina *CIPSA n PhaseEulerReactFoam*, aunque, por brevedad, en el texto se menciona como *nPhaseFoam*. El nombre indica que el *solver* se ha desarrollado en *OpenFOAM* (Foam) para el tratamiento euleriano-euleriano (Euler) de las ecuaciones de conservación con reacción química (React), que puede tratar múltiples fases granulares (nPhase), y que incorpora el nuevo algoritmo CIPSA (CIPSA) presentado anteriormente en este Capítulo.

La estructura de este *solver* se detalla en la Sección 4.4.1. El tratamiento de la reacción química homogénea en la fase gaseosa se ha implementado a través del *software* externo *Cantera*, y se describe en la Sección 4.4.2.

4.4.1. Estructura del *solver* nPhaseFoam

En esta sección se presenta el diseño de la estructura del *solver* *nPhaseFoam*. Este se ha desarrollado sobre el *software* *OpenFOAM* que, es un conjunto de librerías y utilidades que contiene los modelos generales necesarios para la simulación de distintos flujos típicos (más detalles en [155–157]).

Aunque algunas de estas librerías están relacionadas con el flujo multifásico, *OpenFOAM* no contiene, hasta la fecha, ni los modelos necesarios ni los algoritmos apropiados para el modelado y resolución del flujo gas-sólidos multifásico reactivo y con densidad variable, que es el objeto de esta Tesis.

El núcleo del *solver* *nPhaseFoam* es el algoritmo de resolución general (que se incluye en el programa principal *CIPSA n PhaseEulerReactFoam.C*). Este *solver* se basa en nuevas librerías desarrolladas *ad hoc* en esta Tesis, que contienen todos los modelos necesarios para la simulación numérica del flujo multifásico reactivo (que se han presentado en los Capítulos 2 y 3).

Un diseño óptimo de las librerías debe agrupar estos modelos jerárquicamente, evitando

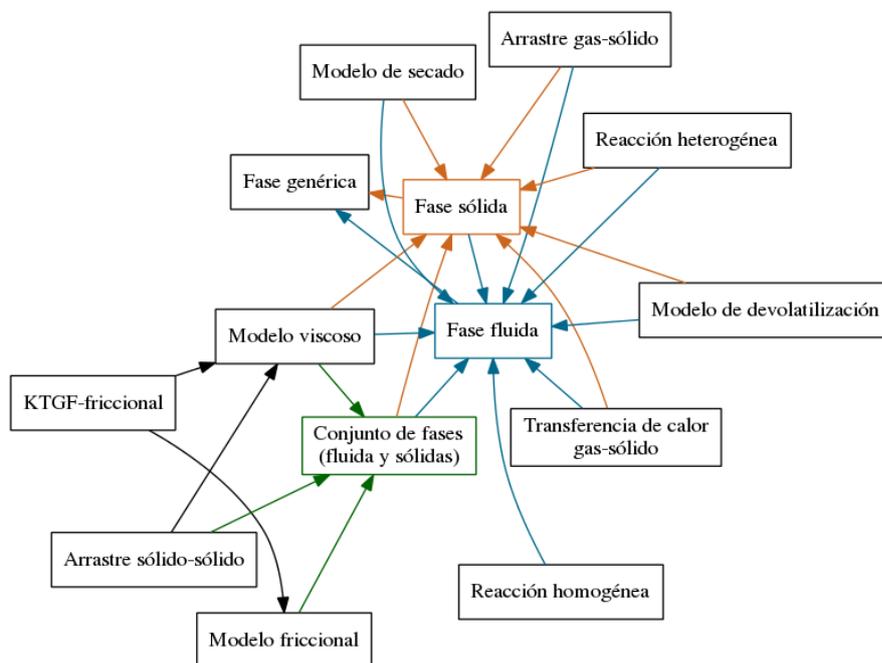


Figura 4.1: Diagrama de dependencia de los modelos y de las propiedades de las fases

duplicidades, en función de su relación con las distintas fases y su interdependencia. Estas relaciones se muestran en la Figura 4.1.

El esquema muestra tres núcleos centrales: la fase sólida, la fase fluida, y el conjunto de fases. El diseño planteado usa cada uno de estos como base para una librería, junto a la que se agruparán los modelos que de ellas dependen.

Sobre esta estructura, en el diseño del algoritmo, se incluyen tres librerías adicionales: Una primera codifica las propiedades y cálculos comunes entre las fases, una segunda contiene los modelos relativos a la ley constitutiva del sólido y una tercera contiene la implementación de condiciones de contorno específicas para el flujo multifásico. Un esquema de la agrupación de realizada para los modelos y fases se muestra en la Figura 4.2.

La programación utiliza una estructura de datos que se conoce en C++ como clase. Cada clase contiene valores de propiedades y/o parámetros, junto con una provisión de métodos para realizar cálculos relacionados. Las librerías diseñadas agrupan, en general, distintas clases (*e.g.* modelos) en torno a una clase principal (*e.g.* que describe la fase).

Estas librerías, en orden jerárquico, son las siguientes:

libCIPSAPhaseModel La librería `phaseModel` contiene la clase homónima donde se de-

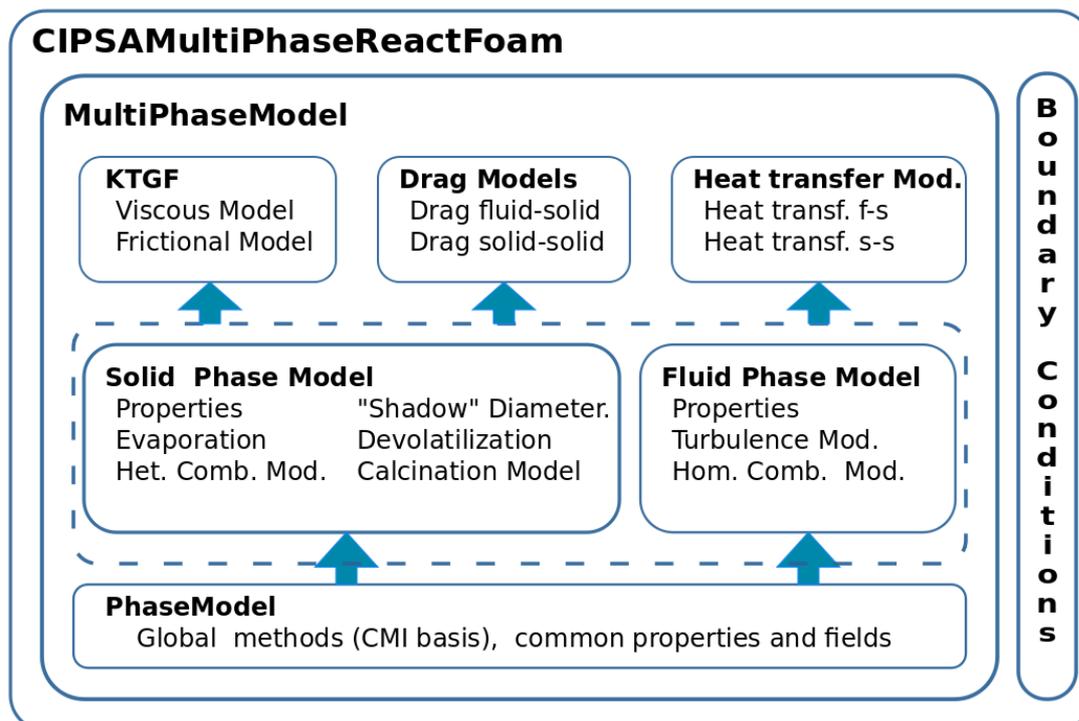


Figura 4.2: Esquema de la estructura del solver CIPSA n PhaseEulerReactFoam

claran las propiedades y campos comunes a todas las fases (por ejemplo, densidad o términos fuente).

libCIPSAFluidPhaseModel La nueva clase `fluidPhaseModel` diseñada para la fase fluida hereda¹³ la clase anterior y contiene los métodos específicos de la fase fluida y los submodelos asociados a esta fase. Esta clase incluye el acoplamiento con la librería externa *Cantera* [80] para el tratamiento de mecanismos detallados de combustión homogénea.

libCIPSASolidPhaseModel Derivada de la primera librería mencionada (`libCIPSAPhaseModel`) y relacionada con la segunda (`libCIPSAFluidPhaseModel`), la librería `solidPhaseModel` contiene el modelado de los procesos asociados a la fase sólida (como, por ejemplo, devolatilización o combustión heterogénea), además de la clase para la declaración de las propiedades específicas de las fases granulares.

libCIPSAMultiPhaseModels La librería `multiPhaseModels` contiene la declaración de los términos relacionados con la transferencia entre fases y, también, de las ecuaciones de conservación del flujo multifásico y multicomponente. Esta librería incluye los modelos para el intercambio de calor (gas-sólido) y de cantidad de movimiento (gas-sólido y sólido-sólido).

libCIPSAKTGFmodels Los modelos constitutivos para el sólido, la Teoría Cinética del Flujo Granular y el modelo friccional, se agrupan en la librería `KTGFmodels`. Estos modelos, en general, requieren en su aplicación contabilizar la interacción de todas las fases presentes (*i.e.* no dependen de una única fase sólida).

libCIPSAderivedBCs La librería `derivedBCs`, independiente de las anteriores, contiene las condiciones de contorno específicas que se han implementado para el flujo multifásico.

Los modelos integrados en cada librería (ver Tabla 4.1) se han implementado de forma modular, flexible y extensible. Dentro de cada tipo de modelo (*e.g.* modelo de arrastre) se incluyen de forma independiente las distintas opciones (*e.g.* modelos de Gidaspow y Syamlal-OBrien). Estos modelos se implementan como clases derivadas de un tipo base o genérico que contiene la estructura fundamental. Esta metodología permite elegir en tiempo de ejecución el modelo concreto a aplicar (*e.g.* el mecanismo químico concreto).

El programa principal `CIPSA n PhaseEulerReactFoam` contiene los bucles de solución (en el orden determinado por el algoritmo), tras una primera fase de inicialización.

¹³En terminología de C++, significa que comparte las propiedades y funciones de la clase de la que hereda, que puede modificar y (normalmente) extender.

Solver

<code>IPSAnMultiPhaseEulerFoam</code>	<i>solver</i>	Algoritmo resolución (<i>Main</i>) Control de residuos Adaptación de paso temporal
--	---------------	--

Librerías

<code>libCIPSAnPhaseModel</code>	Fase genérica	Propiedades comunes Algoritmia de resolución CMI m
<code>libCIPSAnFluidPhaseModel</code>	Fase fluida	Propiedades fase fluida Modelo de turbulencia Modelo de reacción homogénea
<code>libCIPSAnSolidPhaseModel</code>	Fase sólida	Propiedades fase sólida Modelo de secado Modelo de devolatilización Modelo de reacción heterogénea Modelo de tamaño de partícula
<code>libCIPSAnMultiPhaseModels</code>	Fase fluida N_s fases sólidas	Resolución segregada ecuaciones Modelo de arrastre fluido-sólido Modelo de arrastre sólido-sólido Modelo de transferencia de calor fluido-sólido
<code>libCIPSAnKTGFModels</code>	Leyes constitutivas de (los) sólido(s)	Modelo Teoría Cinética del Flujo Granular Modelo friccional
<code>libCIPSAnderivedBCs</code>	Condiciones de contorno	<i>e.g.</i> Condición de entrada de flujo másico de fase constante

Tabla 4.1: Distribución de los modelos contenidos en el *solver* `CIPSA n PhaseEulerReactFoam`

La fase de inicialización contiene la generación de la malla computacional y la lectura de parámetros de control, según la metodología usada en *OpenFOAM* [156]. Además incluye la inicialización de las clases necesarias, formalmente utilizando la función de construcción, mediante llamadas a clases de las librerías implementadas. La inicialización de toda la estructura desarrollada para el modelado multifásico del flujo se realiza mediante una llamada al constructor de `multiPhaseModels`. Este constructor crea las clases miembro¹⁴ correspondientes para la fase fluida y las N_s fases sólidas (definidas en las librerías `fluidPhaseModels` y `solidPhaseModels`).

¹⁴*i.e.* perteneciente a la estructura de la clase superior.

Las propiedades y métodos comunes a ambas se definen en la clase básica para una fase genérica (definida en `phaseModel`), de las que estas dos clases dependen (*i.e.* heredan sus propiedades). En función del número de fases definidas se crean los modelos necesarios para la evaluación de los términos de intercambio de cantidad de movimiento y energía, y se construyen los modelos que definen las leyes constitutivas del sólido (`KTGFmodels`, inicializando la Teoría Cinética del Flujo Granular y el modelo friccional). Además, en la inicialización de cada una de estas clases miembro se especifica, en tiempo de ejecución, el modelo a utilizar (*e.g.* mecanismo concreto de combustión heterogénea).

La solución del sistema de ecuaciones consiste en un bucle donde se resuelven de forma segregada las ecuaciones de transporte (ver Sección 4.3). Estas resoluciones se realizan mediante llamadas, en el orden adecuado, a distintas funciones incluidas en la librería `multiPhaseModels`. Estas llamadas se utilizan también para la actualización de las propiedades de las fases y de los términos fuente en las ecuaciones (ver Sección 4.3.3). El cálculo de las variables necesarias en la resolución (*e.g.* fuerzas de arrastre), mediante la llamada a los modelos correspondientes, se realiza donde es apropiado en el ciclo de solución (*e.g.* previo a la resolución del campo de velocidad).

El núcleo del código (*i.e.* la Interpolación del Momento Compacta Multifásica `CMIm`) se ha implementado a nivel de fase (clase `phaseModel`). Las funciones necesarias para calcular los términos necesarios para la fase (*e.g.* pseudo-velocidad, término temporal o de arrastre) son llamadas desde la función que resuelve la ecuación correspondiente (clase `multiPhaseModels`). Estos términos se calculan (y almacenan) tras la resolución de la ecuación de velocidad para su uso en la ecuación de transporte para la presión donde intervienen (ver Sección 4.3.1).

En resumen, la estructura desarrollada se basa en asociar los modelos en librerías en función de sus dependencias. La taxonomía jerárquica utilizada para las fases permite, utilizando la programación orientada a objetos, evitar la redundancia y generalizar la estructura para modelar un número arbitrario de fases sólidas. Además la implementación modular de los submodelos, dependiendo (*i.e.* heredando) de un modelo tipo, y su activación a través de archivos de configuración¹⁵ permite su fácil extensión y la implementación de modelos nuevos.

4.4.2. Implementación de la reacción homogénea: *Cantera*

En esta sección se describe la implementación del modelo de combustión homogénea, que modela las reacciones que se producen en la fase gaseosa (ver Capítulo 3).

¹⁵ *i.e.* En terminología de *OpenFOAM*, diccionarios.

El modelado de la combustión homogénea (en la fase gaseosa) consiste, principalmente, en la elección de un mecanismo de reacción apropiado y en la evaluación de los términos fuente debidos a la reacción química que aparecen en las ecuaciones de transporte de las especies (Ecuación 2.2) y temperatura (Ecuación 2.6).

La evolución del estado termoquímico en ausencia de transporte, viene dada por un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (ODEs) acoplado, no lineal y, en general, con escalas temporales muy diferentes (*stiff*). Cuando hay transporte entre celdas, es habitual utilizar el método de pasos fraccionados, en el que primero se resuelve para cada celda computacional un problema de valor inicial que evoluciona el estado termoquímico a lo largo del paso temporal. Después se introduce el cambio en las concentraciones químicas de las especies y en la temperatura en la celda computacional, antes de resolver el transporte.

La resolución precisa del problema de valor inicial es crucial en el modelado de flujos reactivos, y es, en general, compleja; por ello, existen librerías de *software* que la tratan específicamente.

La implementación del solver *nPhaseFoam* no permite el uso directo de los modelos termoquímicos reactivos disponibles en la distribución estándar de *OpenFOAM*, diseñados para flujo monofásico. Una alternativa a la adaptación de estos modelos es la utilización de un *software* externo.

Entre las librerías disponibles para la resolución de sistemas químicos, el estándar *de facto* es CHEMKIN [114]. CHEMKIN es una librería propietaria programada en FORTRAN, de código abierto pero de pago (al menos en versiones recientes). Una alternativa gratuita de código libre es *Cantera* [79, 80].

Este *software*, que ha sido evaluada con éxito en comparación con CHEMKIN (ver, por ejemplo, [51]), cuenta entre sus capacidades el cálculo de propiedades termodinámicas, propiedades de transporte, química de equilibrio y reacción química homogénea y heterogénea. Como puntos fuertes para su interacción con *OpenFOAM* se puede destacar que está también escrita en C++ utilizando programación orientada a objetos. Además es compatible con la descripción de mecanismos químicos y propiedades físicas en el formato de CHEMKIN. Otros autores [22] han utilizado *Cantera* en *OpenFOAM* para flujo monofásico, en una adaptación conocida como `alternateChemistryLibrary`. Ésta, sin embargo, tampoco es compatible con *nPhaseFoam* debido a su fuerte acoplamiento con los modelos monofásicos estándares de *OpenFOAM*.

El objetivo del modelo de combustión homogénea es integrar, para cada paso temporal, el término fuente de reacción química (ver Ecuación 3.15). La implementación consiste,

en esencia, en incluir en el *solver* `nPhaseFoam` la llamada a la función correspondiente de *Cantera* para el cálculo de las tasas de reacción, de acuerdo con el mecanismo de reacción seleccionado, con los argumentos necesarios para definir el estado termoquímico del gas: concentración de especies químicas, temperatura y presión. En concreto, se emplea la función propia `advance` de la clase `reactorNet` encargada de llevar a cabo, para un tamaño de paso temporal determinado, la integración del sistema químico asumiendo un reactor cero dimensional, adiabático, y a presión constante (definido mediante las clases `IdealGasMix` y `ConstPressureReactor`).

Para hacer *nPhaseFoam* lo más independiente posible de la versión de *Cantera*¹⁶, se ha desarrollado una capa de abstracción que permite separar las variables y funciones propias de cada librería.

Así, se han creado dos nuevas clases:

- `CanteraWrapperGas`, que contiene el procedimiento de cálculo de la evolución de la termoquímica, y engloba las clases de *Cantera* mencionadas arriba;
- y `CanteraReaction` para acceder a ella desde el *solver* `CIPSA nPhaseEulerReactFoam`.

El procedimiento para el cálculo de los términos fuente debidos a la reacción química es, por tanto:

1. En cada paso temporal del bucle de resolución (ver algoritmo en la Sección 4.3), se realiza el cálculo del término fuente debido a la reacción homogénea para cada volumen de control o celda.
2. Los valores iniciales de fracciones másicas de especies, temperatura y presión de la fase gaseosa en cada celda se envían a la clase `CanteraWrapperGas` a través de la clase `CanteraReaction`¹⁷.
3. En la clase receptora se lleva a cabo la comunicación con las funciones propias de *Cantera* para el cálculo de la evolución de la concentración de las especies y de la temperatura, según el mecanismo de reacción elegido y en el intervalo de tiempo determinado.
4. Los valores finales obtenidos se devuelven a la clase `CanteraReaction` para la evaluación de los términos fuente en las ecuaciones de transporte de las especies

¹⁶ Y también para facilitar la re-utilización de la implementación en otros *solver*.

¹⁷ La llamada a la evaluación de la reacción homogénea `CanteraReaction` se realiza formalmente a través de la fase fluida, definida en la librería `fluidPhaseModels`, que es clase miembro de la clase modelo para el conjunto de fases `multiPhaseModels`.

químicas (las tasas de reacción) y en la de conservación de la energía de la fase gaseosa (variación de entalpía sensible).

La definición del mecanismo químico que se desea utilizar para calcular las tasas de reacción se realiza en un fichero externo de entrada, en el formato propio de *Cantera* [79], o en el de CHEMKIN. Para su utilización en el solver *nPhaseFoam*, el número y nombre de las especies químicas deben ser idénticos a los de las variables correspondientes de la fase fluida.

Validación del algoritmo

En este capítulo se presentan los resultados de la validación del algoritmo desarrollado. Se reporta en primer lugar la consistencia para un flujo bifásico compuesto por dos fases idénticas, para el que el algoritmo debe producir los mismos resultados que los de un flujo monofásico. A continuación, se valida para un flujo propiamente multifásico (gas-sólido).

Las predicciones que se obtienen con el algoritmo CMIm propuesto se compararán con las del algoritmo CMI original, con las del método de Interpolación del Momento Estándar SMI, y con las de su extensión natural a flujo multifásico SMIm¹ (ver Capítulo 4).

El caso seleccionado para el estudio es la convección neumática de sólidos en un flujo continuo de aire en un codo de 90°, donde los sólidos se introducen en dirección vertical en contra de la gravedad.

Esta configuración es apropiada para analizar y validar el comportamiento de los distintos algoritmos debido a las complejas estructuras gas-sólido que se producen tras el codo. La fenomenología involucrada incluye: la formación de 'cuerdas' de sólido por la acción de las fuerzas centrífugas; la estratificación y el depósito de sólidos debido a la acción de la gravedad; y la formación de zonas de recirculación (ver, por ejemplo, [5, 6, 238]). Además desde el punto de vista de su resolución numérica, este caso es complejo por la existencia de fuertes gradientes en la esquina interna del codo.

5.1. Descripción del experimento y configuración numérica

La configuración seleccionada para la validación consiste en un codo a 90°, que se muestra esquemáticamente en la figura 5.1. La altura y anchura del conducto vertical son $L_v =$

¹Que se formula a partir de la SMI de forma análoga a la CMIm a partir la CMI.

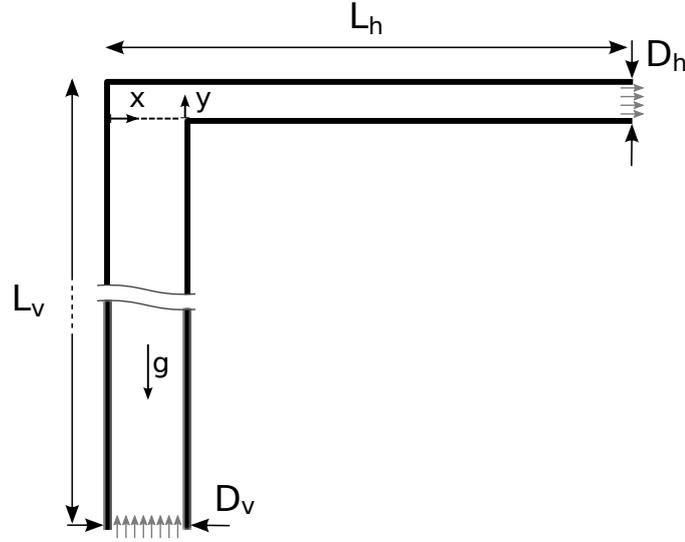


Figura 5.1: Esquema de la configuración en codo

6,285m y $D_v = 0,305\text{m}$; y del conducto horizontal $L_h = 3,220\text{m}$ y $D_h = 0,220\text{m}$. Las partículas se introducen por el lado inferior del conducto vertical.

Las densidades de ambas fases son constantes, con una relación baja ($\rho_s/\rho_g = 20$). El diámetro de partícula d_s es de $5,0 \mu\text{m}$.

A la entrada la velocidad del gas u_{IN} es constante, $u_{IN} = 0,62\text{m s}^{-1}$; y el flujo másico de la fase granular J_s es de $2,93 \times 10^{-6}\text{kg m}^{-2}\text{s}^{-1}$.

El modelo de arrastre gas-sólido utilizado es el propuesto por Syamlal y O'Brien [208] (ver Sección 2.4), y la viscosidad granular μ_s se ha fijado a un valor constante de $1,8 \times 10^{-7}\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$.

La discretización espacial consiste en un mallado bidimensional uniforme con un tamaño de celda de $\Delta x = \Delta y \approx 5\text{mm}$. La discretización temporal se ha realizado con un tamaño del paso temporal uniforme de $\Delta\tau = \Delta t/t_C$ donde t_C es el tiempo de residencia característico del aire en una celda del conducto vertical basado en la velocidad a la entrada.

En las paredes del conducto se ha impuesto condición de no deslizamiento para la velocidad de las fases, y de gradiente nulo para su fracción volumétrica y la presión. En la salida se utiliza condición de gradiente nulo para todas las variables, excepto para la presión que se fija a un valor constante.

El sistema lineal de ecuaciones para la presión se ha resuelto utilizando el método multimalla algebraico (GAMG, con un *smoother* de Cholesky). La resolución de la fracción volumétrica, y de las componentes de la velocidad de las fases se realiza con un *solver* de tipo gradiente biconjugado (BiCG, con un preconditionador LU incompleto). La solución se considera convergida, para cada paso de la discretización temporal, cuando el residuo normalizado² de todas las variables es menor que 10^{-10} .

5.2. Consistencia del algoritmo multifásico

En esta sección se evalúa la consistencia del algoritmo mediante su aplicación a un flujo monofásico que es calculado como multifásico. Con este propósito una única fase gaseosa se define para su modelado como dos fases numéricamente distintas, pero físicamente idénticas (*i.e.* con las mismas propiedades).

Los resultados obtenidos en el conducto vertical se muestran primero. La longitud de este conducto se ha extendido para conseguir un flujo completamente desarrollado, para el que existe solución analítica. La Figura 5.2a muestra el perfil desarrollado obtenido con los métodos de Interpolación del Momento Estándar SMI e Interpolación del Momento Compacto Multifásico CMIm³, con dos repartos impuestos en la entrada de fracción volumétrica de las dos fases que definen el gas: $r_{g,1} = r_{g,2} = 0,5$, y $r_{g,1} = 0,9; r_{g,2} = 0,1$. Las predicciones de los algoritmos concuerdan bien con la solución analítica.

El flujo en el conducto vertical es cuasi-unidireccional y suave. Sin embargo, tras el codo se producen fuertes gradientes y dos zonas de recirculación: una cercana al vértice (en el conducto horizontal) y otra en la esquina de la parte superior del conducto vertical. La Figura 5.2b muestra los perfiles transversales de la componente horizontal de la velocidad en una sección del conducto horizontal (situada a $x/D_v = 3$). La solución

² El residuo E^k en *OpenFOAM* se define como el error en la solución ϕ^k de la iteración k del proceso iterativo de resolución. Esta solución ϕ^k no cumple exactamente el sistema de ecuaciones (Ecuación 4.5). El residuo se define como:

$$[A]\phi^k - \mathbf{R} = E^k \quad (5.1)$$

El objetivo del proceso iterativo es que el residuo sea nulo. El proceso de solución acaba cuando el residuo para el vector solución ϕ es menor que una determinada tolerancia. Habitualmente este se expresa de forma normalizada utilizando una magnitud característica del sistema de ecuaciones. En *OpenFOAM* el residuo normalizado se calcula como:

$$E^{norm} = \frac{\|\mathbf{R} - [A]\phi\|_1}{\|[A]\phi - [A]\phi^{ref}\|_1 + \|\mathbf{R} - [A]\phi^{ref}\|_1} \quad (5.2)$$

donde $\|\phi\|_1$ indica la norma L1 del vector ϕ , y ϕ^{ref} es la solución de referencia.

³ No se considera término de arrastre entre las fases gaseosas, de forma que la formulación CMIm es idéntica a la CMI.

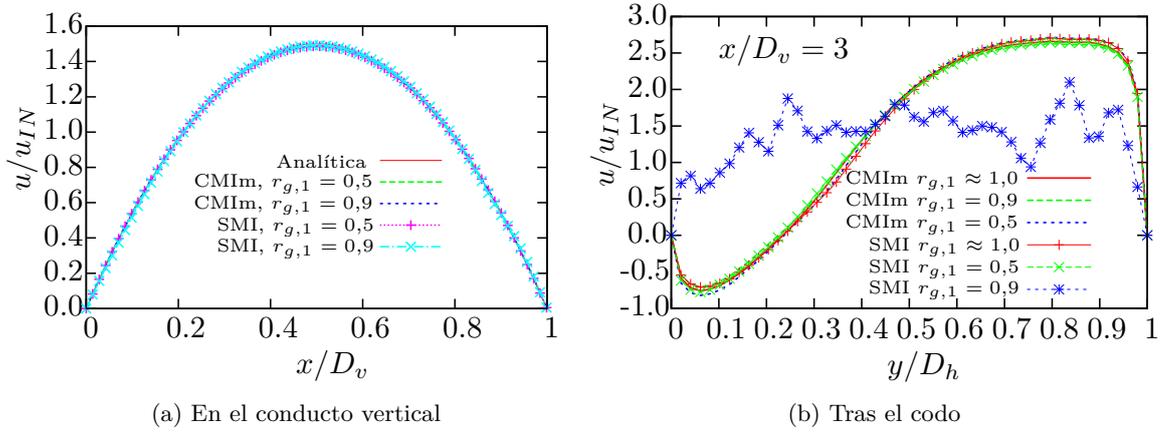


Figura 5.2: Perfiles transversales de la componente longitudinal de la velocidad para una única fase gaseosa representada como dos fases distintas. Comparación de las técnicas CMIm y SMI para varios repartos en la entrada de la fracción volumétrica de las fases

obtenida mediante ambos algoritmos coincide cuando las fases están equidistribuidas ($r_{g,1} = r_{g,2} = 0,5$) o una de ellas es muy minoritaria ($r_{g,1} \approx 1; r_{g,2} = 10^{-5}$). En estos casos se predice una zona de recirculación en la zona inferior del conducto (valores negativos de la componente vertical de la velocidad). Para un reparto intermedio ($r_{g,1} = 0,9; r_{g,2} = 0,1$) los resultados de la aplicación de la CMIm concuerdan con los anteriores, mientras que la formulación no consistente SMI produce fuertes oscilaciones espaciales en la solución y no predice la zona de recirculación.

Las oscilaciones observadas al aplicar la SMI al flujo monofásico para el reparto intermedio se producen incluso si se parte de una solución convergida y suave. Las inconsistencias del algoritmo provocan un rápido deterioro de la solución y la aparición de oscilaciones. La Figura 5.3 muestra la solución tras 4000 pasos temporales para un reparto en la entrada de $r_{g,1} = 0,9$ (derecha), donde se ha tomado como estado inicial la solución convergida para el reparto equidistribuido ($r_{g,1} = r_{g,2} = 0,5$, izquierda). Por el contrario, la aplicación de la CMIm elimina las oscilaciones casi inmediatamente (no mostrado en la figura).

5.3. Validación del algoritmo para flujo gas-sólido

Esta sección evalúa el comportamiento del algoritmo CMIm en la predicción de un flujo gas-sólido, comparándolo con el de la técnica de Interpolación del Momento Estándar

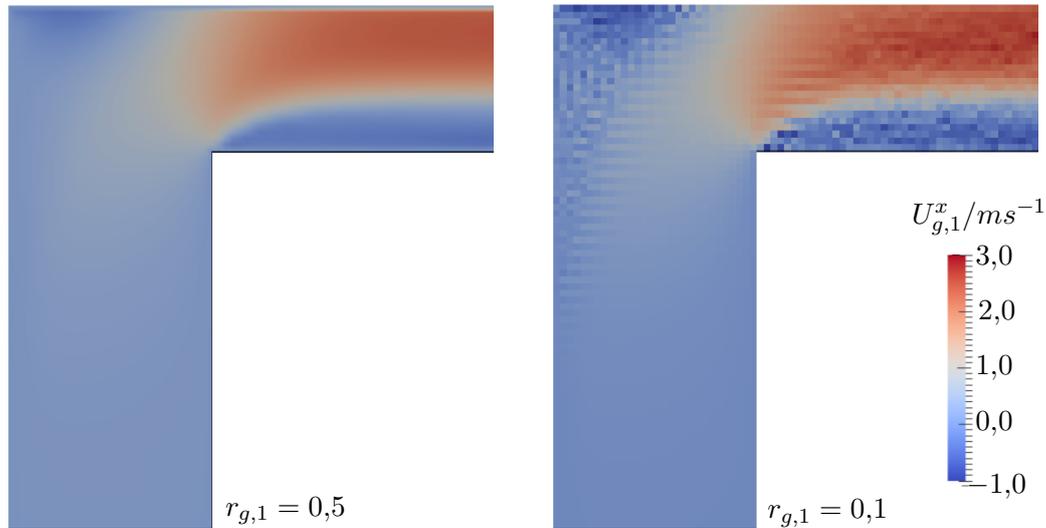


Figura 5.3: Campo de la componente horizontal de la velocidad de la fase gaseosa $g, 1$ aplicando la técnica SMI con $r_{g,1} = 0,5$ (izquierda) y oscilaciones cuando se reinicia con $r_{g,1} = 0,9$ (derecha)

SMI. En el primer apartado se estudia el efecto de las distintas formulaciones. En él se prestará especial atención al tratamiento del término de arrastre, y al comportamiento de la CMI multifásica (en comparación con la técnica estándar). Los apartados segundo y tercero muestran, respectivamente, los efectos que tiene sobre la solución la discretización espacial y temporal en función del algoritmo utilizado.

5.3.1. Estudio de la influencia en la solución de la técnica de Interpolación del Momento

Como se detalló en el Capítulo 4 la metodología de la CMI se diferencia fundamentalmente de la técnica SMI en el distinto tratamiento del término temporal. La CMI considera explícitamente en el tratamiento del término temporal no sólo los coeficientes de fuera de la diagonal principal como la SMI, sino también los coeficientes de la diagonal principal. Además para su aplicación a flujo multifásico en la CMIm se propone el tratamiento explícito del término de arrastre. Para comparar entre algoritmos, este último término se ha implementado de una forma análoga en la SMI, y el método resultante se ha denominado SMIm.

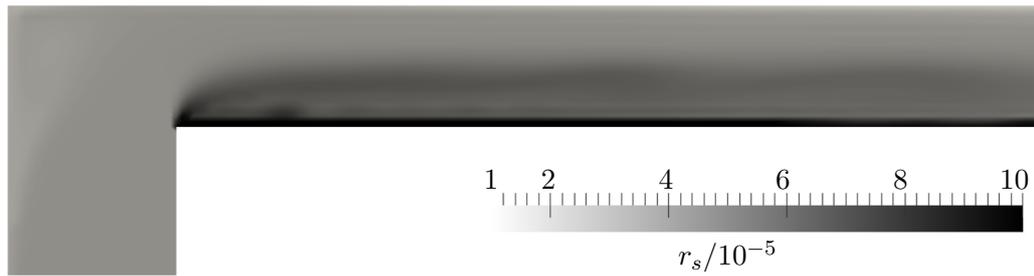
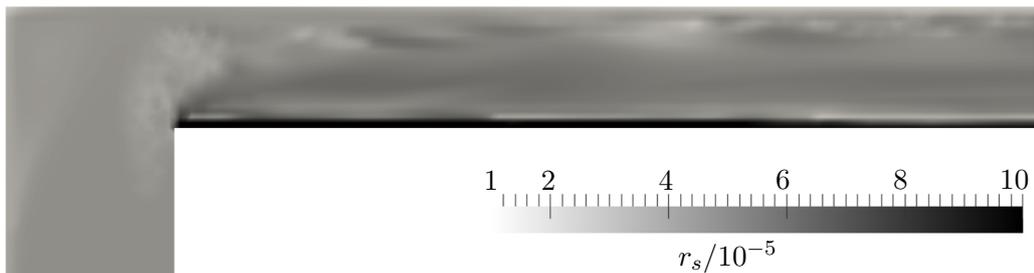
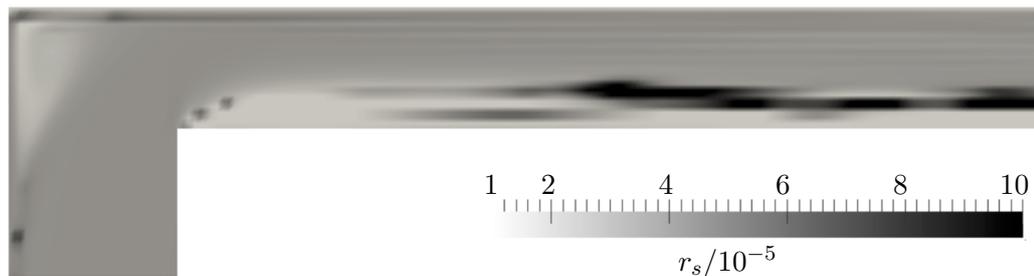
(a) Contorno de fracción volumétrica de sólido r_s aplicando la técnica CMIm(b) Contorno de fracción volumétrica de sólido r_s aplicando la técnica SMIm(c) Contorno de fracción volumétrica de sólido r_s aplicando la técnica CMI(d) Contorno de fracción volumétrica de sólido r_s aplicando la técnica SMI

Figura 5.4: Contornos de la fracción volumétrica de sólido r_s obtenidas con distintas técnicas de Interpolación del Momento. Las dos primeras figuras (a) y (b) muestran las técnicas que incluyen la corrección por el término de arrastre; en las dos últimas (c) y (d) no se incluye esta corrección

La Figura 5.4 muestra la influencia del tratamiento de estos términos en la solución del flujo multifásico en el codo.

Los resultados predichos con los dos métodos de interpolación son cualitativamente diferentes. En ambos métodos con una inclusión explícita del término de arrastre, SMIm y CMIm, se predice una deposición de sólidos en la zona inferior del conducto horizontal, y una concentración de sólido mayor y más uniforme en la zona de recirculación de la esquina superior.

La aplicación de la CMI, que no incluye este término, predice el depósito de sólido en la parte inferior aunque se producen oscilaciones espurias de la solución, fundamentalmente en la parte inferior del conducto. El método SMI no predice la deposición de sólido, y se observan algunas inestabilidades.

Aunque la técnica SMIm, que incluye de forma explícita el término de arrastre, sí predice el depósito de sólidos, las inestabilidades que se generan causan finalmente la divergencia del método de solución. Por este motivo en los siguientes apartados se usará para la comparación el método estándar sin término de arrastre SMI.

5.3.2. Estudio de la influencia en la solución estacionaria del tamaño del paso temporal

La solución en estado estacionario debe ser independiente del tamaño del paso temporal utilizado. Para evaluar esta independencia se comparan para dos tamaños del paso temporal las soluciones obtenidas con el nuevo algoritmo CMIm y las del algoritmo estándar SMI: $\Delta\tau = 3,6 \times 10^{-2}$ (caso base) y $\Delta\tau = 3,6 \times 10^{-3}$ (adimensionalizados con el tiempo de residencia característico en una celda del conducto vertical).

La Figura 5.5a muestra los valores promedio, en el estado estadísticamente estacionario, de fracción volumétrica de sólido en una sección transversal del conducto horizontal ($x/D_v = 3$).

Los perfiles obtenidos con el algoritmo CMIm planteado son idénticos para ambos tamaños del paso temporal, y predicen una acumulación de sólidos tras el codo.

En cambio, la aplicación de la técnica SMI presenta soluciones dependientes del tamaño del paso temporal utilizado y con fuertes oscilaciones.

La evolución temporal (en el estado estadísticamente estacionario) de la masa total de sólido del sistema (el llamado *inventario* de sólidos) se muestra en la Figura 5.5b.

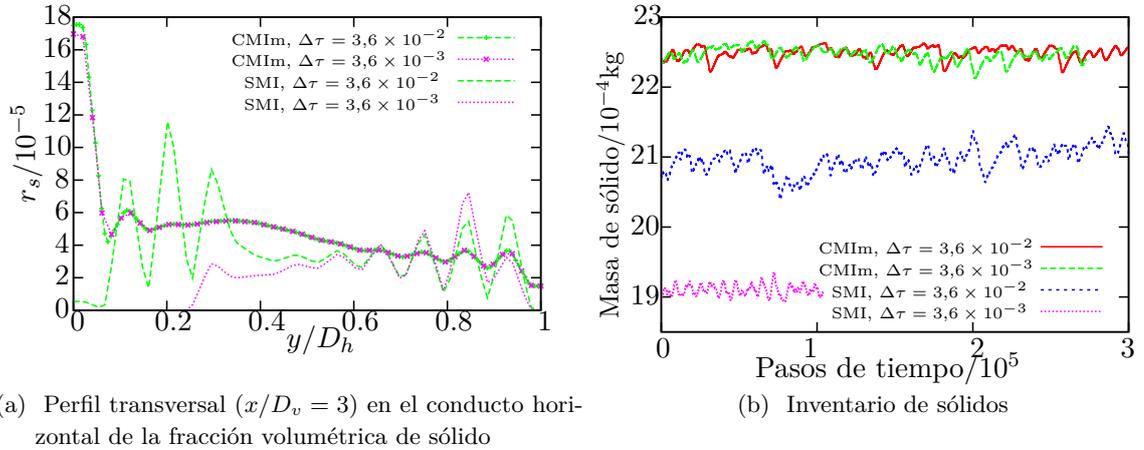


Figura 5.5: Comparación de las técnicas SMI y CMIm en el estado estadísticamente estacionario para dos tamaños del paso temporal (adimensionalizado)

El algoritmo CMIm desarrollado predice el mismo inventario de sólidos para todos los tamaños del paso temporal utilizados. (Las oscilaciones mostradas son debidas a los efectos no estacionarios del sólido depositado, que se desplaza formando dunas.)

Por el contrario, el inventario de sólidos predicho con el algoritmo estándar SMI depende significativamente del tamaño del paso temporal utilizado.

5.3.3. Estudio de la influencia en la solución de la discretización espacial

Las discontinuidades en el tamaño de la malla pueden afectar fuertemente al resultado del cálculo. Para comparar su efecto en los diversos algoritmos de Interpolación del Momento se han elegido tres tamaños de malla: la malla utilizada como base (25704 celdas); una malla más fina, refinada uniformemente en ambas direcciones con el doble de celdas por dirección (102816 celdas); y una malla no uniforme con un aumento repentino en el tamaño en el conducto horizontal tras el codo (ver Figura 5.6b).

La Figura 5.6a muestra los contornos de fracción volumétrica (promediada temporalmente) obtenidos utilizando los algoritmos SMI y CMIm para la malla más fina, que se toma como referencia.

La solución obtenida en el conducto horizontal con ambos métodos coincide fuera de la región de recirculación ($\approx y > 0,15$ m).

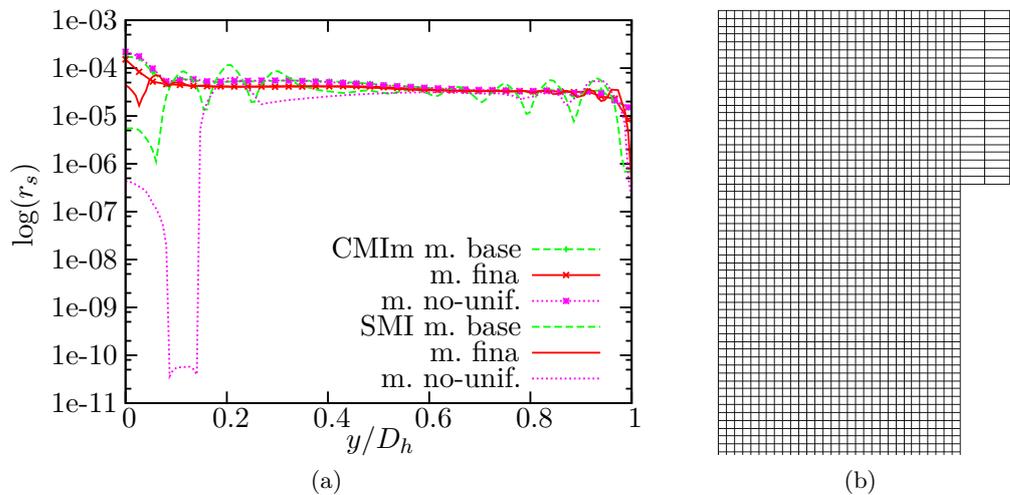


Figura 5.6: Izquierda. Perfil transversal en el conducto horizontal (en $x/D_v = 3$) de la fracción volumétrica de sólido promediada temporalmente, para las tres mallas utilizadas.

Derecha. Detalle del cambio del tamaño de discretización tras el codo en la malla no uniforme

Sin embargo, en la zona de recirculación la aplicación de la formulación SMI produce oscilaciones espurias que deterioran la solución y que aumentan con el tamaño de la celda. Por el contrario, la aplicación de la técnica CMIm produce resultados similares y sin oscilaciones para todas las discretizaciones.

La Figura 5.7 compara las soluciones de los dos métodos en la malla fina.

La SMI predice en ambas zonas de recirculación unos picos no realistas de sólido. El algoritmo CMIm propuesto produce perfiles suaves, en los que se puede apreciar la formación del flujo de dunas en la pared inferior del conducto horizontal.

En la parte inferior de la misma figura se muestra el valor de la suma de los coeficientes temporal y de arrastre (a^T y a^D en la expresión 4.23) obtenidos con la CMI. Las áreas con fuertes variaciones del coeficiente parecen coincidir con las oscilaciones espurias predichas por la formulación SMI inconsistente.

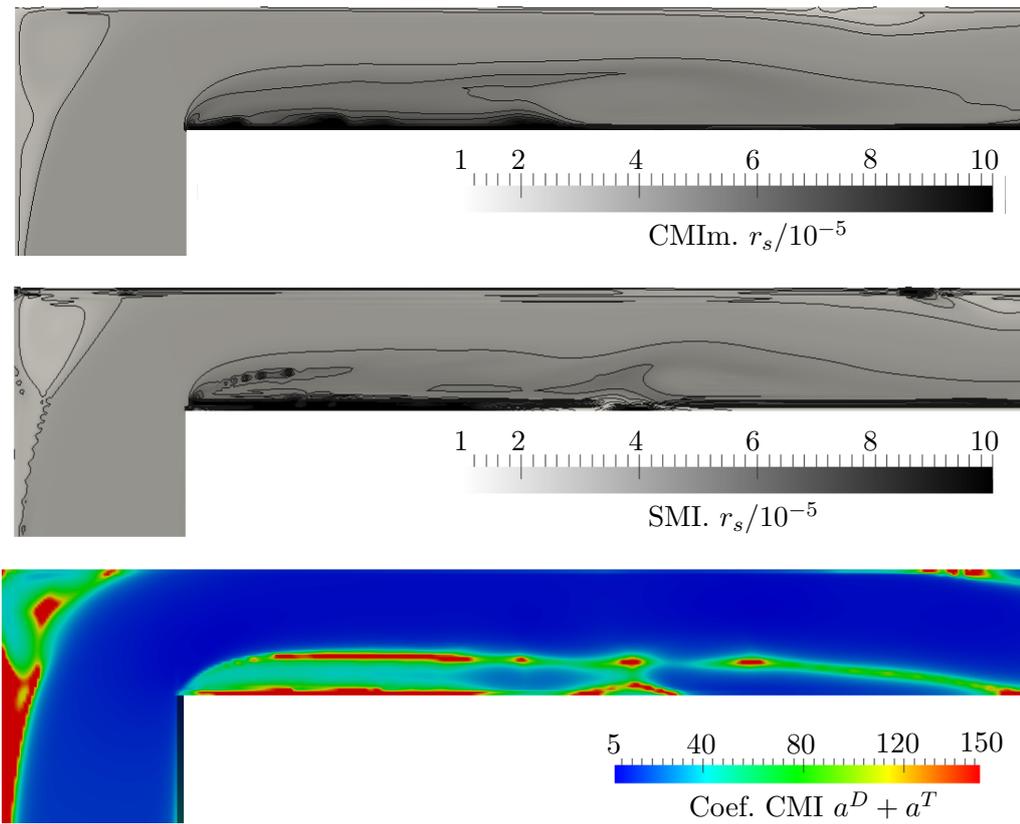


Figura 5.7: Contornos de la fracción volumétrica de sólido instantánea con las técnicas CMI (arriba) y SMI (centro); y de la suma de los coeficientes utilizados en la técnica CMI ($a^T + a^D$ en la Ecuación 4.23) en la malla fina

5.4. Conclusiones

El algoritmo CMIm propuesto se ha evaluado frente al algoritmo CMI, al algoritmo estándar SMI, y a la extensión de este último a flujo multifásico SMIm.

Primero se ha estudiado un flujo monofásico representado por dos fases gaseosas idénticas. La solución proporcionada por el algoritmo que utiliza la técnica de Interpolación del Momento Estándar SMI presenta oscilaciones de tipo damero en el campo de velocidad, excepto para los casos límite de fases equidistribuidas y una fase dominante. Por el contrario, la formulación CMIm se comporta correctamente en todos los casos.

Después se han aplicado los métodos a un flujo multifásico gas-sólido. Las soluciones obtenidas mediante el método SMI dependen significativamente del tamaño del paso temporal y de malla utilizado. Además su extensión directa a flujo multifásico SMIm presenta en la solución oscilaciones espurias temporales y espaciales.

Los resultados obtenidos indican que una predicción adecuada del flujo requiere la consideración explícita del término de arrastre en la técnica de Interpolación del Momento.

El algoritmo CMIm propuesto, que considera así este término, presenta una solución estadísticamente estacionaria que es independiente de la discretización temporal utilizada.

Simulación fluidodinámica del flujo inerte en lechos fluidos

En este capítulo se presenta la validación de los modelos y del algoritmo en un lecho fluido burbujeante, sin reacción química.

La configuración escogida es la propuesta en *2013 NETL Small Challenge Problem (SSCP)* [140]. Este problema fue inicialmente planteado como un *test* ciego de validación y comparación de modelos numéricos, con una participación abierta a grupos de investigación interesados en *testear* el comportamiento de sus propios códigos [141]. La configuración del problema es un lecho de partículas contenido en una estructura rectangular cuasi-bidimensional que se fluidiza introduciendo aire por la parte inferior. El lecho está formado por partículas de tipo Geldart D (ver Sección 1.2) y la predicción del flujo presenta un reto por el tamaño , y por su complicado régimen de burbujeo/*slugging*.

Entre las ventajas que presenta esta configuración está la disponibilidad de una descripción detallada de la configuración experimental, de datos descriptivos de la partícula, y de una colección de medidas.

Los fenómenos presentes de formación y ruptura de burbuja, circulación del gas a través de estas, la interacción del flujo con las paredes y el régimen cercano al de máximo empaquetamiento suponen retos numéricos que deben ser tratados de una forma adecuada.

6.1. Descripción del experimento y configuración numérica

La validación que se presenta en este capítulo corresponde al Caso 1 del mismo *2013 NETL Small Challenge Problem (SSCP)* [140]. El lecho de sólido está contenido en una

Propiedades de partícula	
Diámetro (Sauter)	3256 μm
Densidad	1131 kg/m^3
Velocidad mínima de fluidización	1,05 m/s
Esfericidad	0,94
Fracción de máximo empaquetamiento	0,60
Tipo Geldart	D
Parámetros fluidodinámicos	
Velocidad superficial del gas	2,19 m/s
Carga de sólido	1,9 kg
Presión de condición estándar	101325 Pa
Temperatura de condición estándar	20 $^{\circ}\text{C}$
Coefficiente de restitución partícula-partícula	0,84
Coefficiente de restitución partícula-pared	0,92
Ratio de velocidad (tangencial) partícula-pared	0,65

Tabla 6.1: Propiedades la partícula y condiciones experimentales

estructura rectangular cuasi-bidimensional de $H = 122\text{cm}$ de altura, $W = 23\text{cm}$ de anchura y $D = 0,075\text{cm}$ de profundidad (Figura 6.1).

El lecho esta formado por 1,9kg de sólido que inicialmente descansa sobre el distribuidor. El lecho se fluidiza introduciendo aire por la parte inferior, a una velocidad superior a la velocidad mínima de fluidización U_{mf} (aproximadamente 2,1 veces)

En los experimentos se utilizan partículas de Nylon de tamaño uniforme ($d_p = 3256\mu\text{m}$) y esfericidad elevada. Las partículas se clasifican como pertenecientes al grupo Geldart D. Los principales datos del material y fluidodinámicos se presentan en la Tabla 6.1.

Este problema fue planteado inicialmente por NETL [141] para la comparación abierta de diferentes modelos numéricos disponibles en diversos grupos de investigación. Los grupos interesados enviaron los resultados para su evaluación sin conocer los resultados experimentales. Sólo después de la presentación de las simulaciones numéricas se publicaron los resultados experimentales del campo de velocidades, de la pérdida de carga y de sus momentos estadísticos.

Las medidas de velocidad se toman a una altura h de 0,076m, en cinco localizaciones con distancias al centro w de 0,000m, $\pm 0,046\text{m}$, y $\pm 0,091\text{m}$. Se proporciona la caída de

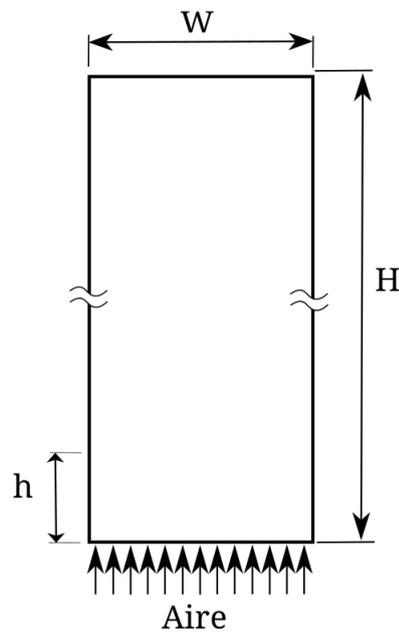


Figura 6.1: Esquema del lecho

presión en tres zonas: en el paso por el distribuidor (no modelado en este trabajo), desde la salida del mismo hasta una altura h de 0,3461m, y desde este punto a la salida.

La simulación numérica del lecho es bidimensional. La malla computacional utilizada está formada por 46×244 celdas ($W \times H$). El tamaño de malla utilizado, $\Delta_x = \Delta_y = 0,5\text{cm}$, es del orden del tamaño de partícula, y está en el límite de aplicación de los modelos eulerianos-eulerianos (ver Sección 1.3). La discretización espacial es del mismo tamaño que la utilizada por Hu et al. [94]. El paso temporal utilizado es de 0,5ms.

El sólido se modela como una única fase de tamaño constante. En el instante inicial de la simulación se considera depositado en reposo sobre el distribuidor con una fracción volumétrica r_s de $0,40\text{m}^3/\text{m}^3$.

El gas se introduce por la parte inferior del lecho, y sale por la parte superior. En la entrada se impone el flujo de gas (velocidad superficial de 2,19m/s), y en la salida se fija la presión a la atmosférica (*i.e.* 101325Pa).

En las paredes laterales se considera la condición de no deslizamiento para la velocidad del gas. Para el sólido se aplican las condiciones de pared de Johnson y Jackson [111], que determinan la magnitud de la velocidad tangencial a la pared (o de deslizamiento)

y la temperatura granular. La condición de gradiente nulo es utilizada para el resto de variables y condiciones de contorno.

El arrastre entre los sólidos se modela utilizando el modelo propuesto por Gidaspow et al. [74], que utiliza el modelo de Wen y Yu [228] para sólido diluido y el de Ergun [57] para alta concentración de sólido (ver Sección 2.4.1). La teoría cinética utilizada para describir las leyes constitutivas del sólido es la propuesta por Mathiesen et al. [133], que se reduce a la presentada por Gidaspow [73] para una única fase sólida (ver Sección 2.3).

El método de resolución es el propuesto en esta Tesis (ver Capítulo 4). La resolución de la fracción volumétrica de las fases se realiza utilizando en el cálculo el flujo global, que acopla (parcialmente) su resolución (ver sección 4.3.2).

El sistema lineal de ecuaciones para la presión se resuelve utilizando un método multi-malla algebraico (GAMG, con un *smoother* de Cholesky). El resto de sistemas lineales de ecuaciones utilizan un *solver* de tipo gradiente biconjugado (BiCG, con un preconditionador LU incompleto). La solución se considera convergida en cada paso temporal cuando el residuo normalizado¹ de todas las variables es menor que 10^{-8} .

La simulación se lleva a cabo durante 110s. En los primeros 20s se estabiliza el flujo, alcanzándose el estado estadísticamente estacionario (ver Figura 6.3). Las variables medias se calculan realizando un promedio temporal a partir de esta estabilización y durante 100s, con una frecuencia de $50Hz$ (igual que se realiza en el experimento). El tiempo total de simulación es de aproximadamente 36 horas, en un Intel Core i7 920 a 2,67GHz.

6.2. Descripción cualitativa del flujo

En este apartado se describe el régimen fluidodinámico en el lecho estudiado. El flujo evoluciona al avanzar el tiempo desde el estado inicial de reposo hasta un estado transitorio (pseudo-)periódico controlado por la formación y ruptura de las burbujas.

El gas atraviesa el distribuidor y se concentra en la parte central del lecho donde forma burbujas que comienzan su ascenso. Las partículas arrastradas por las burbujas de gas ascienden por la parte central. Cuando estas alcanzan la parte superior del lecho, el gas continúa su ascenso y las partículas se desplazan hacia las paredes, por donde descienden.

El ciclo de la evolución de una burbuja en el lecho se muestra en la Figura 6.2, a través de los contornos de fracción volumétrica de sólido en varios instantes. Las burbujas de gas formadas crecen hasta ocupar casi toda la anchura del lecho. La formación de una

¹ ver definición en la nota al pie de la página 101

única burbuja central de tamaño máximo próximo al del lecho indica que el régimen es cercano al de *slugging*.

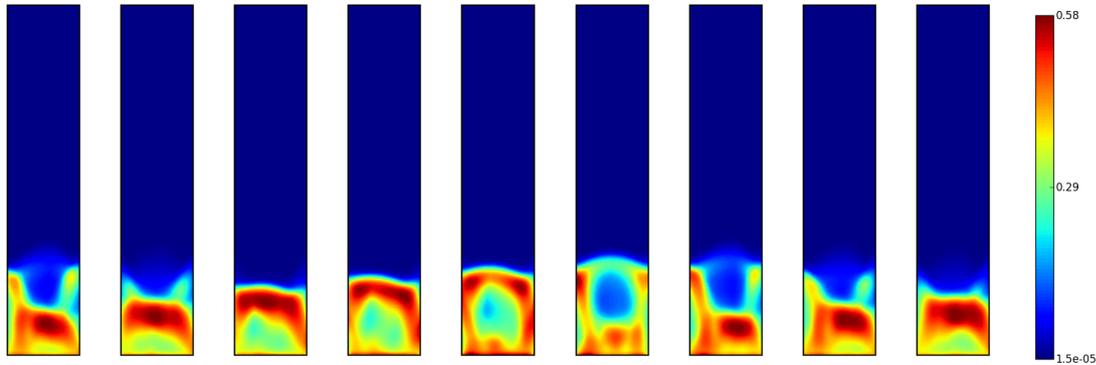


Figura 6.2: Evolución temporal de la fracción volumétrica de sólido en el lecho (de $t = 100,1s$ a $t = 100,8s$ en 9 pasos temporales de $0,1s$)

Los ciclos temporales de formación y destrucción de estas burbujas se pueden observar monitorizando, por ejemplo, el valor de la componente vertical de la velocidad del sólido en ciertos puntos del lecho. La Figura 6.3 muestra la evolución de sus valores en dos puntos.

Se alcanza un estado pseudo-estacionario tras un tiempo inicial de unos 20s. La fluidodinámica del lecho en este estado está dominada (principalmente) por dos ciclos superpuestos: uno de periodo corto ($\approx 1s$) relacionado con el ciclo de formación de burbujas comentado (y mostrado en la Figura 6.2), y otro de mayor periodo ($\approx 10s$). Este último se puede relacionar con un cambio cíclico en la distribución de sólido.

La Figura 6.4 muestra los contornos de velocidad media (sus componentes vertical y horizontal) y de fracción media de sólido. Los contornos (cuyo valor sólo tiene sentido físico en presencia de fase sólida), son prácticamente simétricos. El contorno de fracción volumétrica de sólido muestra una acumulación en la zona cercana a la pared donde se produce el flujo descendente, y una zona central donde el gas está presente predominantemente.

Los contornos de velocidad media muestran el ciclo de circulación de sólidos: estos se dirigen desde la parte inferior hacia la parte central del lecho, ascienden por la parte interior, y se mueven en la parte superior hacia los laterales, por los que descienden. Los valores máximos de la componente horizontal y vertical de la velocidad son del mismo orden de magnitud, y también lo son sus fluctuaciones (ver Figura 6.5).

Los contornos medios de la *skewness* de la fracción de sólido se muestran en la Figura 6.6. Los valores positivos tienen predominancia en (casi) toda la parte central del lecho. Estos valores indican una mayor separación respecto a la media de las fracciones de sólido superiores a esta que se pueden relacionar con el paso del sólido (denso) entre las burbujas de gas.

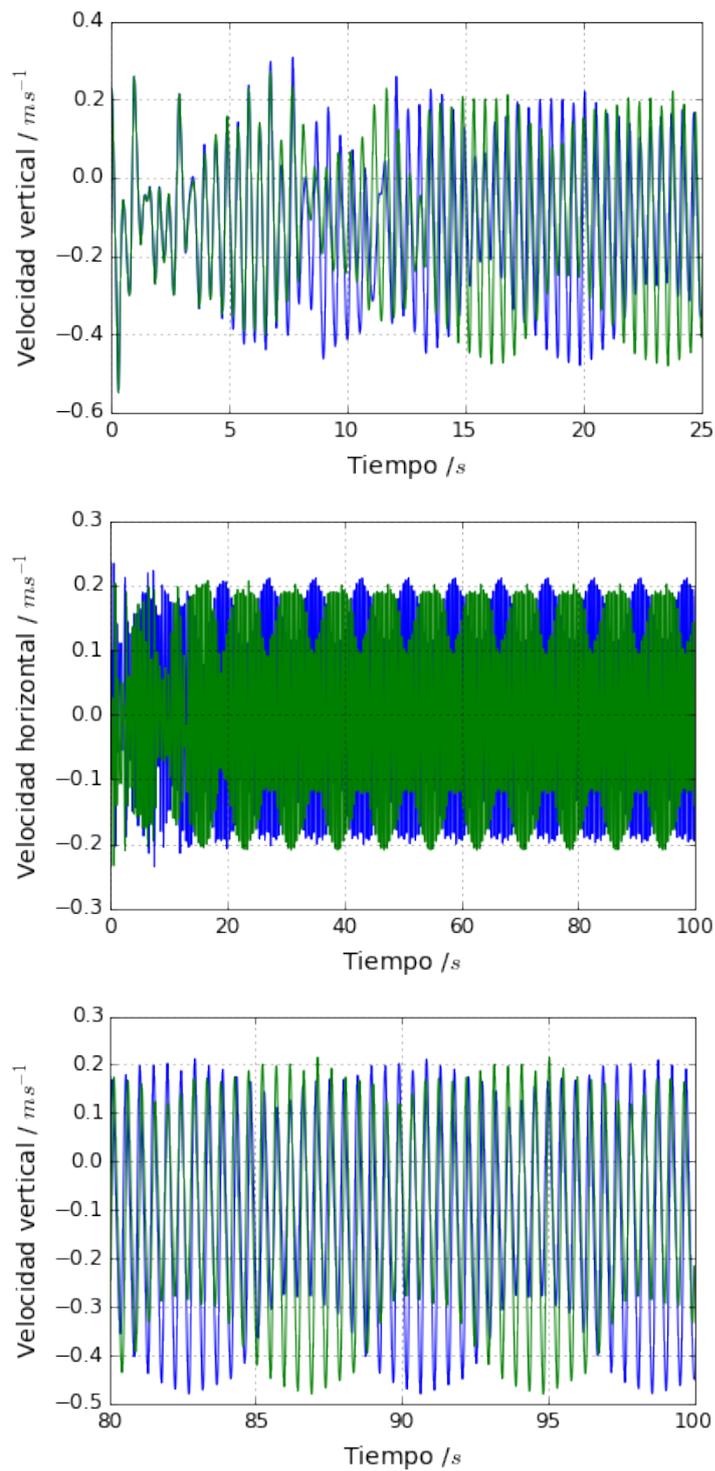


Figura 6.3: Evolución temporal de la componente vertical de la velocidad del sólido en dos puntos ($h = 0,076\text{m}$ y $w = \pm 0,091\text{m}$), para los primeros 25s (arriba), 100s (medio), y de 80 a 100s (debajo) de simulación.

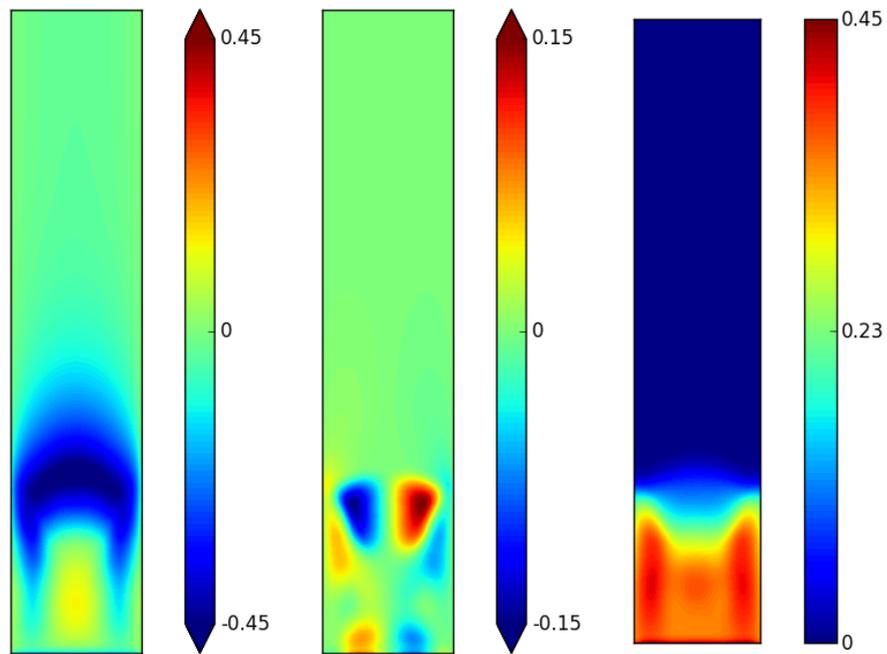


Figura 6.4: Contornos de la componente vertical de la velocidad media (izquierda), de la componente horizontal de la velocidad media (centro), y de la fracción de sólido media (derecha)

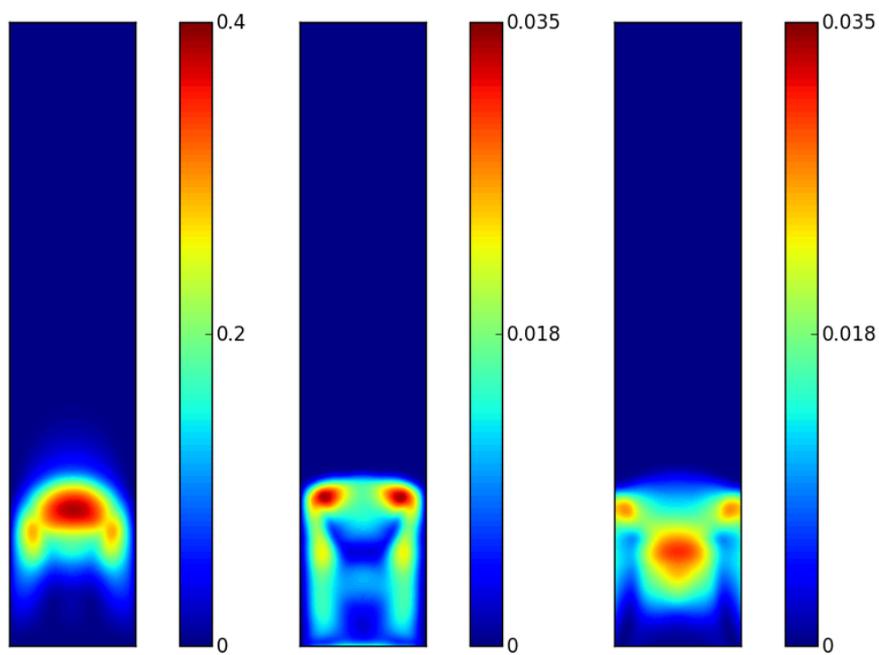


Figura 6.5: Contornos de la varianza de la componente vertical de la velocidad (izquierda), de la varianza de la componente horizontal de la velocidad (centro), y de la varianza de la fracción de sólido (derecha)

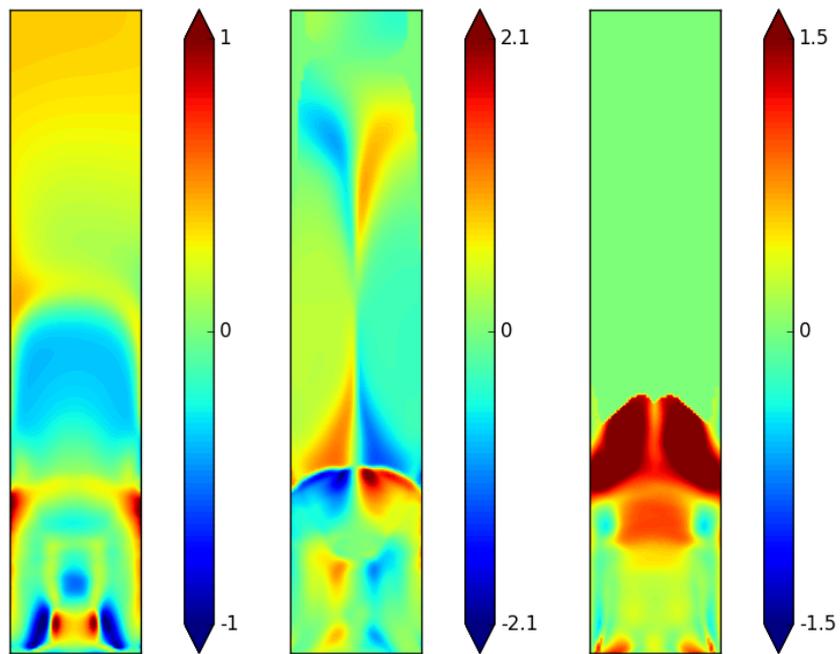


Figura 6.6: Contornos de la *skewness* de la componente vertical de la velocidad (izquierda), de la *skewness* de la componente horizontal de la velocidad (centro), y de la *skewness* de la fracción de sólido (derecha)

6.3. Validación con medidas experimentales

En esta sección se presenta la validación de los resultados de la simulación. Las predicciones de los campos obtenidas se comparan primero con los datos experimentales [140], y después con los resultados numéricos publicados por Hu et al. [94] y otros autores [140].

Los resultados medios del campo de velocidad se comparan en los cinco puntos de medición especificados en la Sección 6.1.

En todos puntos de medida los valores medios de velocidad concuerdan razonablemente bien con los experimentales (Figura 6.7). La desviación estándar de las componentes del velocidad, en cambio, se desvía de los resultados experimentales (Figura 6.8). Las simulaciones muestran en comparación con los datos experimentales un menor valor para la *rms* de la componente vertical de la velocidad del sólido en la parte central, y un mayor valor para la *rms* de la componente horizontal de la velocidad del sólido en las paredes. La *skewness* de la componente vertical de la velocidad del sólido se sobrepredice, en magnitud, de una forma similar a la *rms*. Sin embargo la *skewness* de componente horizontal de la velocidad del sólido concuerda adecuadamente con la experimental (Figura 6.9).

Las medidas presentadas tienen según sus autores dos principales fuentes de incertidumbre. La primera es que la humedad no se controla en los experimentos (*e.g.* mediante aditivos). La segunda es la incertidumbre en la velocidad superficial en la entrada, que se calcula a partir del flujo volumétrico a la presión y temperatura estándares.

A continuación, se comparan los resultados presentados en esta Tesis con otros resultados computacionales presentados primero, sin conocer las medidas realizadas, al *Small Scale Challenge Problem* y, posteriormente, con los presentados recientemente por Hu et al. [94]. Los casos procedentes del *Small Scale Challenge Problem*. (nombrados *A – K* [16]) han sido simulados y presentados por sus respectivos autores sin conocer los valores experimentales.

En la Figura 6.10 se observa una gran dispersión de los resultados, tanto en valor medio como en la desviación estándar. Los resultados de velocidad media (presentados en [16], donde se muestran como perfiles parabólicos²) muestran en general una buena capacidad de predicción de los modelos. La desviación estándar comparativamente presenta una peor predicción y en general es infraevaluada. La comparación muestra que los resultados el algoritmo presentado para la varianza de la velocidad (en forma de *rms*) concuerdan

² Obtenidos a partir de los datos de los cinco puntos proporcionados por los autores

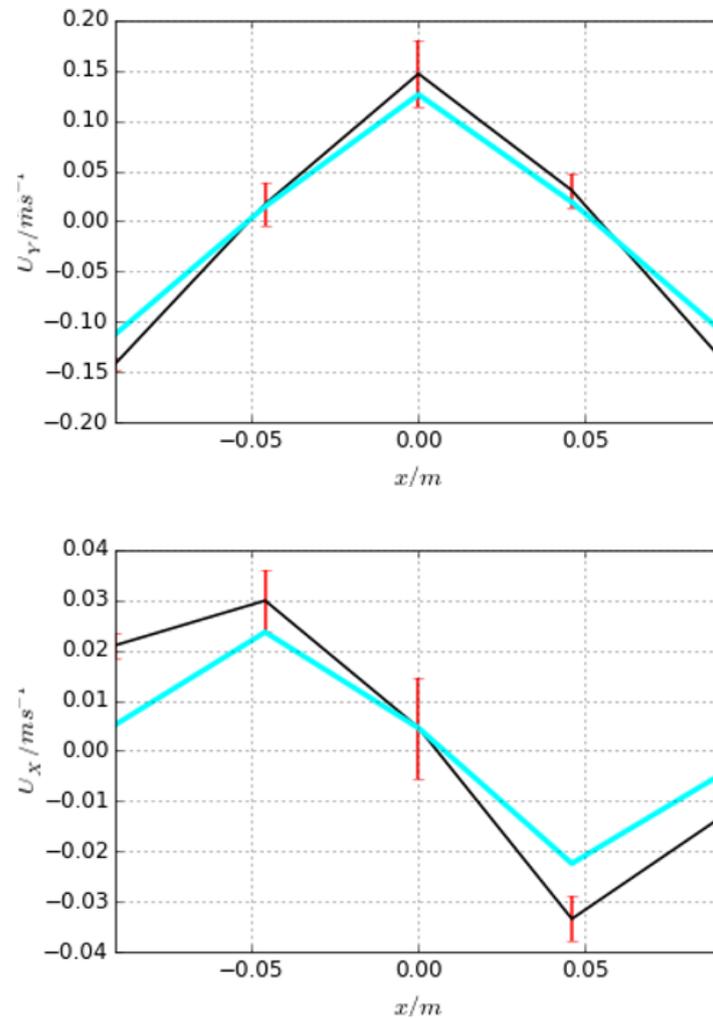


Figura 6.7: Comparación de la componente vertical de la velocidad media (izquierda) y de la componente horizontal de la velocidad media (derecha) de la simulación (—) con medidas experimentales (—)

aceptablemente en magnitud con los datos experimentales. Los datos de *skewness* no están accesibles.

Los resultados también se comparan con los recientemente publicados por Hu et al. [94] (ver Figura 6.11). Las predicciones del algoritmo de esta Tesis de los valores medios de velocidad ajustan mejor que las presentadas por este autor. Hu et al. [94] no muestra datos para los momentos de la distribución.

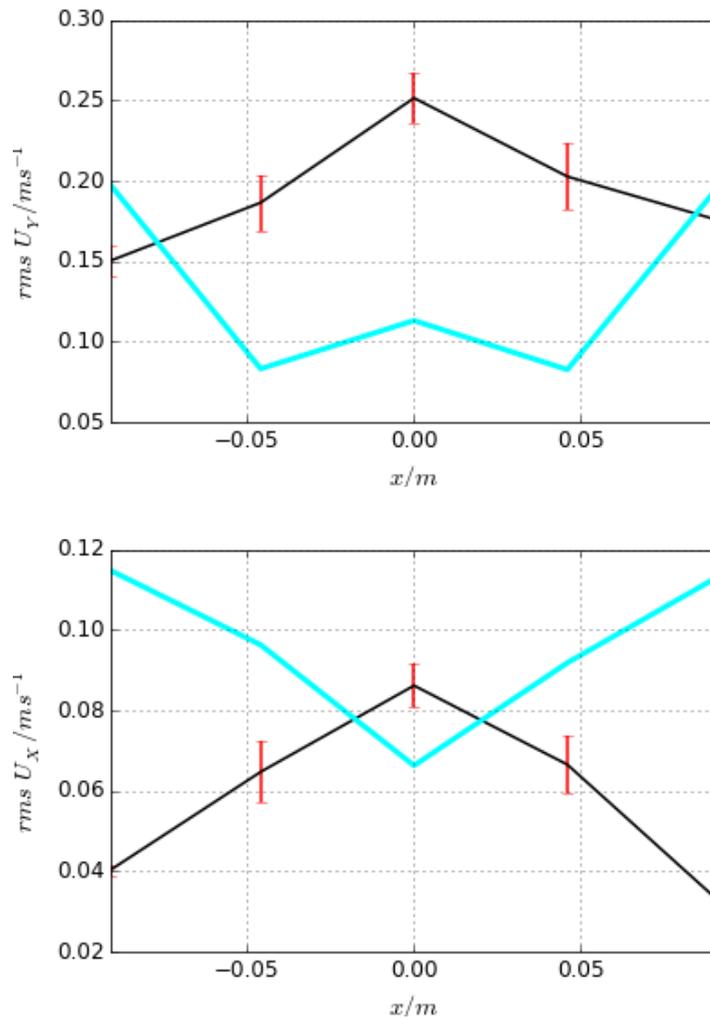


Figura 6.8: Comparación de la rms de la componente vertical de la velocidad (izquierda) y de la componente horizontal de la velocidad (derecha) de la simulación (—) con medidas experimentales (—)

La caída de presión en el lecho (entre una altura de 0,3461m y la salida del distribuidor) y su desviación estándar se muestran en la Figura 6.12. La presión media se sobrepredice ligeramente en línea con el resto de autores, siendo del mismo orden que la presentada por Hu et al. [94]. El ajuste de su desviación estándar es similar.

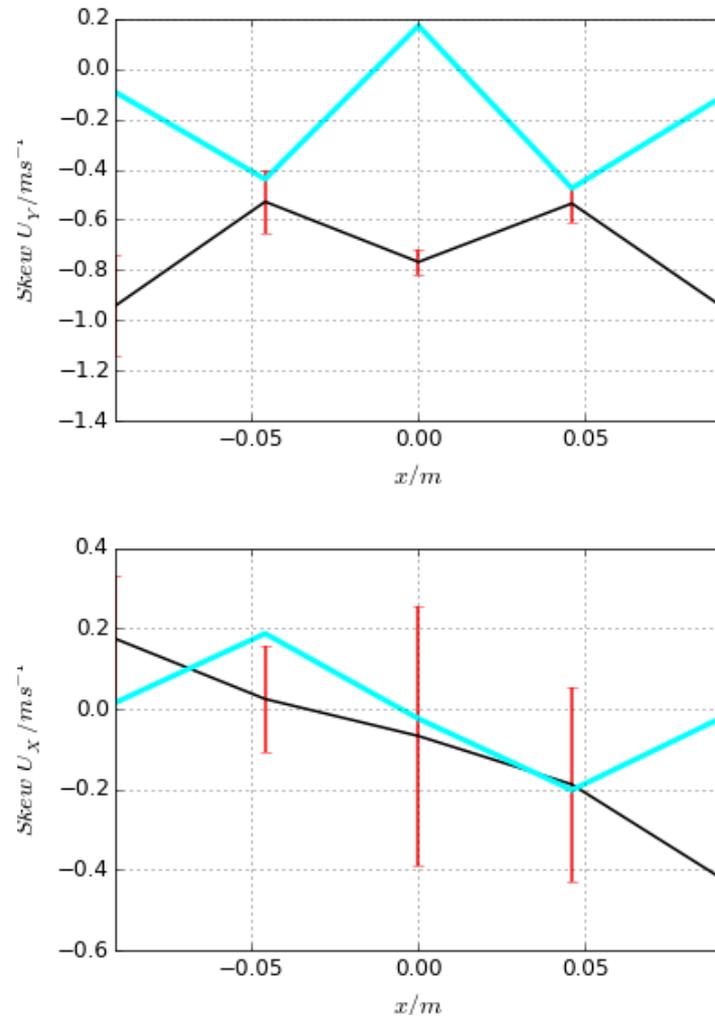


Figura 6.9: Comparación de la *skewness* de la componente vertical de la velocidad (izquierda) y de la componente horizontal de la velocidad (derecha) de la simulación (—) con medidas experimentales (—)

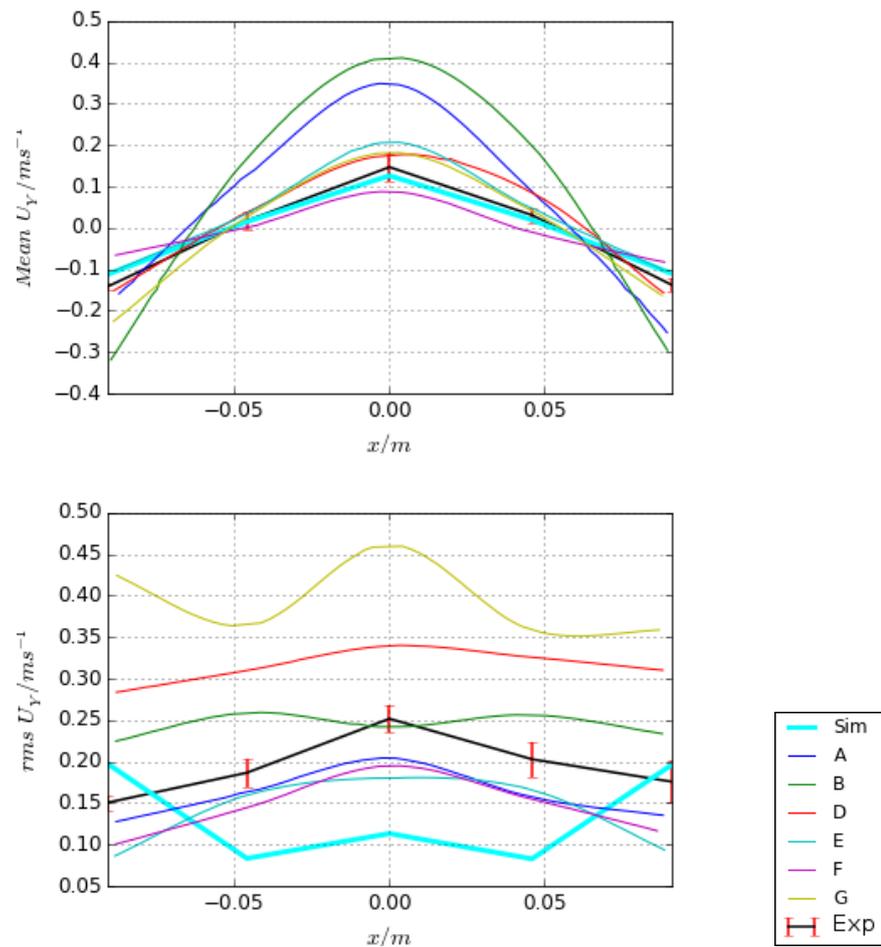


Figura 6.10: Componente vertical (arriba) y horizontal (abajo) de la velocidad media. Comparación de los resultados obtenidos en esta Tesis (—) con los resultados computaciones de otros autores (líneas A-G) y con medidas experimentales (—)

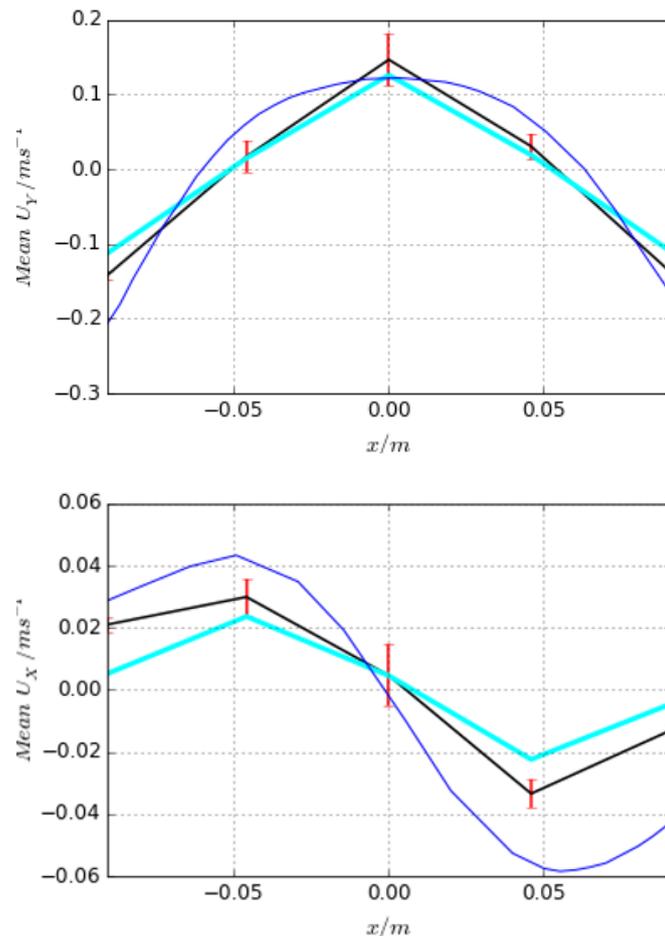


Figura 6.11: Comparación de la componente vertical de la velocidad media (arriba) y de la componente horizontal de la velocidad media (abajo) de la simulación (—) con los resultados de Hu et al. [94] (—) y con medidas experimentales (—)

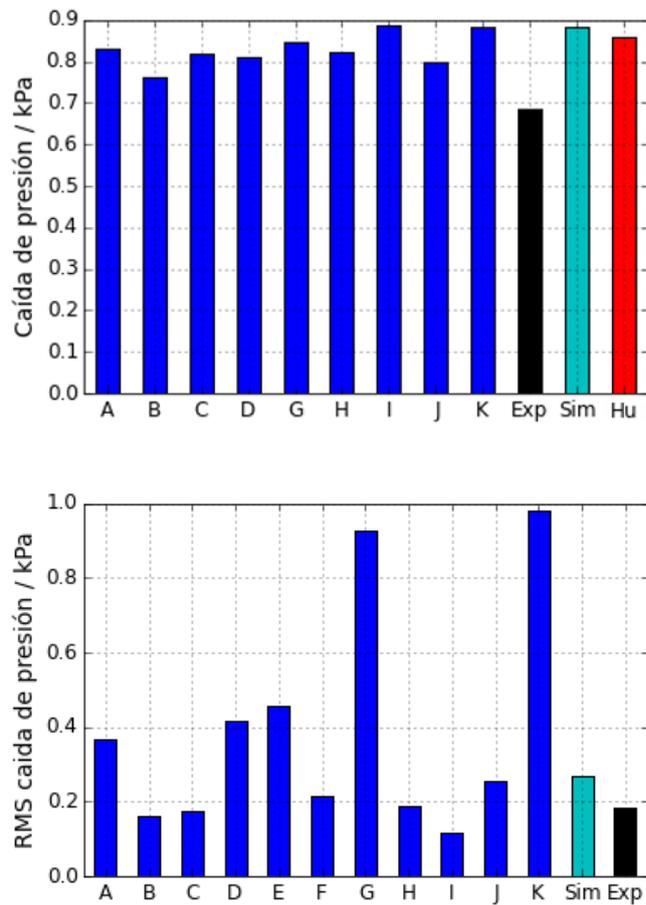


Figura 6.12: Comparación de la caída media de presión y su desviación estándar entre las alturas $h = 0,0413\text{m}$ y $h = 0,3461\text{m}$ de los resultados de la presente simulación (Sim) con los resultados de otros autores (participantes del SCCP-1 nombrados A-K, y Hu [94]), y con medidas experimentales (Exp)

6.4. Conclusiones

Los modelos y métodos de resolución propuestos en esta Tesis se han validado utilizando un lecho fluido burbujeante. El complicado régimen de burbujeo/*slugging* del lecho supone un reto para los modelos, como atestigua la dispersión de los resultados computacionales de otros autores presentados.

Teniendo en cuenta esta dispersión, los resultados presentados en esta Tesis concuerdan razonablemente bien con los experimentales, y predicen cualitativamente los principales fenómenos del flujo simulado (*e.g.* la circulación de sólido y el régimen de burbujeo).

Cuantitativamente, la velocidad y presión medias comparan bien con las medidas experimentales. Aunque la distribución de la desviación estándar de la velocidad no es capturada adecuadamente, su magnitud es correctamente representada, y su desviación global es similar a la obtenida por otros modelos computacionales. La *skewness* se ajusta bien a los datos experimentales, especialmente la de la componente horizontal de la velocidad del sólido.

Simulación de la combustión y gasificación en un lecho fluido

Este capítulo presenta la simulación numérica de un gasificador de carbón en lecho fluido. Su resolución numérica se utilizará para validar de forma más completa el algoritmo desarrollado.

Respecto al capítulo anterior, en el que se modela un flujo no reactivo, en éste se incorporan modelos para la transferencia de masa entre las fases y para la reacción química. Específicamente, la descripción del comportamiento del carbón precisa de modelos que describan el secado, la devolatilización, la reacción química heterogénea y homogénea, y, en su caso, el cambio del tamaño de partícula.

El gasificador experimental presentado por Ocampo et al. [151] y Chejne y Hernandez [40] es el seleccionado para la validación entre las configuraciones disponibles en la literatura.

Algunas de las ventajas que presenta esta configuración son la disponibilidad de datos suficientes para la descripción numérica del experimento, y de datos experimentales para distintas configuraciones. Además la existencia en la literatura de numerosos estudios que tratan su simulación numérica permitirá la comparación de los resultados obtenidos con los de otros autores.

La simulación numérica de este equipo presenta ciertas dificultades interesantes. Entre estas se pueden destacar: la necesidad de tratar condiciones de flujo cercanas a las de máximo empaquetamiento; el modelado de la interacción entre la transferencia de masa y la cinética química; la competición entre los diversos procesos químicos; y la presencia de varias fases sólidas.

Los resultados se presentan para distintas condiciones de operación, gastos máxicos y temperaturas de entrada [40, 151]. La validación del algoritmo se realiza mediante la simulación numérica de cuatro de los casos experimentales. Los resultados, además de

con los datos experimentales, se comparan con los de las simulaciones de cinco autores disponibles en la literatura [11, 53, 183, 226, 240]. La comparación permite la evaluación del algoritmo completo frente a otros modelos e implementaciones.

El modelo se aplica, tras su validación, al estudio de la influencia del tamaño de partícula en las características del lecho. La capacidad del algoritmo de tratar múltiples fases se utilizará para estudiar la influencia de la polidispersión en el tamaño de las partículas de carbón, y permitirá evaluar la segregación entre los sólidos. Se analizará el efecto provocado en la altura del lecho, en la distribución de los sólidos, y en las zonas de reacción.

7.1. Descripción del experimento y configuración numérica

La configuración simulada numéricamente es un gasificador de lecho fluido para el estudio experimental de carbón colombiano [151].

El reactor es cilíndrico de 0,22m de diámetro y con una altura de 2m, en el que reside un lecho de carbón y caliza de 1m de altura. La mezcla de los sólidos se alimenta lateralmente mediante un tornillo refrigerado situado a 0,3m sobre el distribuidor. La altura del lecho está regulada mediante un tubo de descarga a una altura de 1m.

La representación esquemática de la planta experimental, publicada por el autor, se muestra en la Figura 7.1.

El carbón utilizado es de tipo Tiribí, y su composición es la mostrada en la Tabla 7.1.

El aire y el vapor de agua se introducen por la parte inferior, en la parte izquierda de la figura. Previamente, los sólidos que forman inicialmente el lecho se calientan con productos de la combustión de propano. Cuando la temperatura es adecuada, comienza la inyección (y la combustión) del carbón, y se realiza el cambio de los gases de entrada a aire y vapor de agua. Una descripción detallada del arranque del lecho puede consultarse en Ocampo et al. [151].

Las condiciones de operación y las medidas de concentración de los gases a la salida para los experimentos considerados en esta Tesis se muestran en la Tabla 7.2. Los experimentos se definen por sus gastos máxicos y la temperatura de entrada.

El gasificador se modela en un dominio computacional bidimensional discretizado en

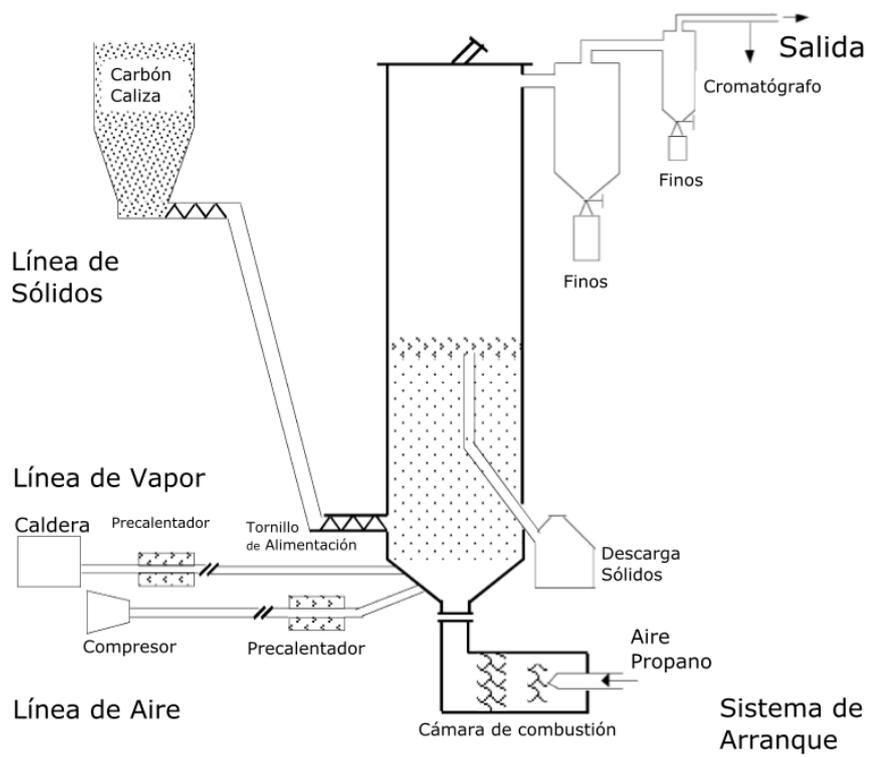


Figura 7.1: Configuración experimental de Ocampo et al. [151] (adaptada de la referencia citada)

Composición química del carbón en porcentaje en peso	
<i>Análisis inmediato</i>	
Humedad	2,6
Volátiles	41,8
Carbono fijo	54,1
Cenizas	1,5
<i>Análisis elemental</i>	
Carbón	75,3
Hidrógeno	5,4
Oxígeno	15,6
Nitrógeno	1,8
Azufre	0,4
Nitrógeno	1,5

Tabla 7.1: Análisis químico del carbón utilizado

2200 celdas, 100 en dirección vertical y 22 en dirección horizontal. El tamaño de la celda¹ es constante e igual a 0,02m en dirección vertical y a 0,01m en dirección horizontal (*i.e.* equivalente al de los estudios de [12, 226, 240]). El paso de tiempo utilizado es constante para cada caso y está comprendido en el rango 10 – 500 μ s.

La altura inicial del lecho se fija a 1m con una fracción volumétrica de carbón y caliza de 0,12 y 0,24 respectivamente. El lecho inicialmente se considera en reposo. La temperatura inicial se considera igual a la temperatura media experimental reportada (*e.g.* 855°C para el Experimento 1).

La velocidad del gas en la pared y la componente normal a la pared de la velocidad de sólido se fijan a un valor nulo. La componente tangencial a la pared de la velocidad de sólido se trata mediante la condición de deslizamiento propuesta por Johnson y Jackson [111]. La pared se considera adiabática debido a la baja conductividad de los materiales que la forman [53, 151, 182].

La presión a la salida se fija a la atmosférica (*i.e.* 101325Pa). En la salida, para el resto de variables se imponen condiciones de gradiente nulo.

Las entradas quedan definidas mediante la imposición para cada una de las fases de sus fracciones volumétricas, su temperatura, su flujo másico, y la concentración de las especies químicas que la componen.

¹ Un estudio del efecto del tamaño de discretización puede ser consultado en [182].

Experimento	1	2	3	4
Gasto de carbón/kg h ⁻¹	8,0	8,0	8,0	8,0
Gasto de aire/kg h ⁻¹	21,9	17,0	19,4	21,9
Gasto de caliza/kg h ⁻¹	0,8	0,8	0,8	0,8
Gasto de vapor/kg h ⁻¹	4,6	4,6	4,6	4,6
Temperatura de entrada de gases/°C	420	413	422	435
Resultados				
Temperatura del reactor/°C	855	812	841	866
H ₂ (% daf)	8,53	8,84	9,63	7,88
CO ₂ (% daf)	19,31	18,38	14,40	15,60
N ₂ (% daf)	60,37	61,10	64,62	64,52
CH ₄ (% daf)	0,84	1,07	1,34	1,01
CO (% daf)	10,94	10,59	9,97	10,94

Tabla 7.2: Condiciones experimentales extraídas de Chejne y Hernandez [40]

El combustor experimental es cilíndrico, mientras que geometría de la simulación es bidimensional y rectangular. Para mantener la estequiometría del experimento, es decir, el ratio de gasto másico de sólidos y gas, en la simulación se modifica apropiadamente el gasto másico de sólidos.

La ley constitutiva que se utiliza para modelar las fases sólidas es la teoría cinética de flujo granular propuesta por Mathiesen et al. [133] (ver Sección 2.3). Este modelo permite (en esta configuración) el tratamiento correcto del flujo incluso para condiciones cercanas a las de máximo empaquetamiento. El modelo de arrastre utilizado es el propuesto por Gidaspow et al. [74] (ver Sección 2.4.1).

Los sólidos se representan como dos fases: carbón y caliza. El carbón se considera formado por cuatro componentes (con su correspondiente densidad): carbón bruto, carbono fijo, cenizas y agua. La caliza es tratada como una fase monocomponente e inerte. El tratamiento numérico de la caliza como un inerte se justifica debido al bajo contenido en azufre del carbón [11].

Las propiedades de los sólidos utilizadas en la simulación se muestran en la Tabla 7.3. La fase gaseosa se considera formada por siete especies químicas (N₂, O₂, H₂O, CO, CO₂, H₂, y *tar*).

² Valor calculado (no proporcionado por los autores)

Características de las partículas		
	Caliza	Carbón
		(Carbón bruto/carbono fijo)
Tamaño medio de partícula / μm	600	620
Densidad aparente / kg m^{-3}	2700	1250/450
Calor específico / $\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$	840	1600
Conductividad térmica / $\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$	1,33	0,107
Velocidad mín. fluidización (calc ²) / m s^{-1}	0,33	0,055
Velocidad terminal (calc) / m s^{-1}	30,3	5,05

Tabla 7.3: Propiedades de los sólidos

Las transformaciones del carbón en el gasificador se representan mediante el uso de modelos de secado, devolatilización, reacción heterogénea y homogénea.

El secado se modela según lo desarrollado y expuesto en la Sección 3.5 [49].

La devolatilización se describe a través del modelo de dos etapas competitivas propuesto por Kobayashi et al. [119] (ver Sección 3.7). Este modelo es de los llamados de dos componentes, de forma que es necesario el uso de un modelo complementario que describa la distribución de los productos de devolatilización. El modelo de distribución utilizado es el propuesto por Loison y Chauvin [127] (ver Sección 3.7.1). El sistema de reacciones químicas utilizado está formado por cuatro reacciones homogéneas y tres heterogéneas. Los coeficientes para la reacción utilizados son los presentados por Chejne y Hernandez [40].

No obstante, la expresión exacta de la cinética química del carbón no es bien conocida y los resultados deben interpretarse con cierto cuidado [53, 182] (ver Sección 7.3).

La Tabla 7.4 resume las reacciones, y pseudo-reacciones, consideradas para las transformaciones del carbón. Utilizando el modelo de partícula uniforme, se considera que las reacciones heterogéneas tienen lugar en la superficie externa de la partícula y se expresa la tasa de reacción en función de dos resistencias: a la reacción química k_n y a la difusión externa k_l . Los factores pre-exponenciales y las energías de activación para determinar las tasas de reacción heterogénea k_n se muestran en la Tabla 7.5, junto con las de la reacción homogénea. La resistencia a la difusión en la capa gaseosa k_l se evalúa en función del número de Sherwood Sh_g que se calcula como:

$$Sh_g = 2,0 + 0,6Re_{gs}^{1/2} Sc_g^{1/3} \quad (7.1)$$

	$coal \rightarrow char + \text{volátil}(s) + H_2O(s) + \text{cenizas}$
	Secado
R0	$H_2O(s) \rightarrow H_2O(g)$
	Devolatilización
R0	$\text{volátil}(s) \rightarrow \sum \nu_{\chi_\alpha} \chi_\alpha ; \chi_\alpha = H_2, H_2O, CO, CO_2, CH_4, tar$
	Reacción heterogénea
R0	$C(s) + r O_2 \rightarrow (2r - 1) CO + 2(1 - r) CO_2 ; r = 0.8 (0.5 < r < 1)$
R1	$C(s) + H_2O \rightarrow CO + H_2$
R2	$C(s) + CO_2 \rightarrow 2CO$
	Reacción homogénea
R0	$CO + H_2O \leftrightarrow H_2 + CO_2$
R1	$CO + 0.5O_2 \rightarrow CO_2$
R2	$H_2 + O_2 \rightarrow H_2O$
R3	$CH_4 + 2O_2 \rightarrow 2H_2O + CO_2$

Tabla 7.4: Mecanismo de reacción química utilizado

siendo función de los números adimensionales de Reynolds Re_{sg} y Schmidt Sc_g ³.

El método de resolución del sistema de ecuaciones es el nuevo algoritmo CIPSA propuesto para flujo reactivo (ver Capítulo 4).

El sistema lineal de ecuaciones para la presión se resuelve utilizando un método multigrid algebraico (GAMG, con un *smoother* de Cholesky). El resto de los sistemas lineales de ecuaciones se resuelven mediante un *solver* de tipo gradiente biconjugado (BiCG, con un preconditionador LU incompleto).

La solución se considera convergida en cada paso temporal de resolución cuando el residuo normalizado⁴ de todas las variables es menor que 10^{-8} .

El tiempo total de ejecución es de aproximadamente 4 días, en un solo núcleo de un Intel Core i7 920 a 2,67GHz para un tiempo final de simulación de 120s, aunque la resolución puede realizarse en paralelo.

Para reducir el tiempo de computación, la reacción homogénea se activa en los últi-

³ El número de Reynolds se define como $Re_{gs} = d_p |v_g - v_s| / \nu_g$ (Ecuación 2.37) y el número de Schmidt como $Sc_g = \nu_g / \Gamma_g$.

⁴ Ver definición en la nota al pie de la página 101.

Reacción	Tipo	A_r	b_r	$T_a = E_r/R_c$	Conc.	Unidades
R0	Het.	17,9	0	-13750	p_{O_2}	$\text{kg m}^{-2}\text{s}^{-1}$
R1	Het.	$5,95 \times 10^5$	0	-13650	p_{H_2O}	$\text{kg m}^{-2}\text{s}^{-1}$
R2	Het.	3,92	0	-26927	p_{CO_2}	$\text{kg m}^{-2}\text{s}^{-1}$
R0 ^f	Hom.	$2,780 \times 10^3$	0	-1510	$C_{CO}C_{H_2O}$	$\text{kg m}^{-3}\text{s}^{-1}$
R0 ^b	Hom.	$1,049 \times 10^5$	0	-5478	$C_{CO_2}C_{H_2}$	$\text{kg m}^{-3}\text{s}^{-1}$
R1	Hom.	$1,0 \times 10^{15}$	0	-16000	$C_{CO}C_{O_2}^{0,5}$	$\text{kg m}^{-3}\text{s}^{-1}$
R2	Hom.	$2,196 \times 10^{12}$	0	-13127	$C_{H_2}C_{O_2}$	$\text{kg m}^{-3}\text{s}^{-1}$
R3	Hom.	$3,552 \times 10^{14}$	-1	-24343	$C_{CH_4}^{0,7}C_{O_2}^{0,8}$	$\text{kg m}^{-3}\text{s}^{-1}$

Tabla 7.5: Constantes de reacción y expresión del factor de concentración para las reacciones homogéneas y heterogéneas

mos 20s. El cálculo de este intervalo temporal corresponde aproximadamente al 70 % del tiempo total de cómputo.

En los primeros 100s el lecho se estabiliza fluidodinámicamente. Las variables temporales medias se obtienen utilizando los valores de los últimos 10s de simulación con una frecuencia de 50Hz.

7.2. Descripción cualitativa y cuantitativa del flujo

Los resultados obtenidos en la simulación de un caso típico se presentan en esta sección, que será considerado en los estudios posteriores como el caso base.

La configuración corresponde a las condiciones del Experimento 1 de la Tabla 7.2. En la simulación, las fases se consideran monodispersas (*i.e.* un único diámetro para la partícula), y los modelos utilizados son los descritos en el apartado anterior.

Esta sección se divide en cinco partes. En la primera se describe el comportamiento dinámico del lecho. En la segunda se estudia la segregación entre las fases de carbón y caliza. En la tercera parte se analizan las zonas donde se produce la devolatilización del carbón y la variación de la densidad de la partícula de sólido. La cuarta parte describe la reacción química y la composición del gas en el lecho. En la quinta y última se examina la temperatura media del lecho.

7.2.1. Descripción fluidodinámica del lecho

La Figura 7.2 muestra el comportamiento dinámico en un intervalo de tiempo de 2,25 s (con un salto temporal entre imágenes de 0,25 s). Esta secuencia permite describir la formación y evolución de las burbujas de gas.

La evolución de una burbuja de gas que asciende por la parte central del lecho se observa en las Figuras 7.2a-i. Tras entrar en el reactor, el carbón se calienta rápidamente y libera productos gaseosos por su descomposición térmica (devolatilización) y su reacción química (reacción del *char*).

El gas producido por estos procesos, junto con el del gas ascendente, se acumula y forma una burbuja cercana a la entrada de sólidos (Figura 7.2a). Después esta burbuja es arrastrada hacia el centro del lecho donde crece por colusión con las burbujas que ascienden desde la zona inferior (Figura 7.2b-d). En la zona cercana al distribuidor la formación de burbujas se produce por la concentración del gas de la entrada junto con la producción de gas en el lecho (*e.g.* Figura 7.2c). La burbuja situada en el centro del lecho continúa su ascenso hasta alcanzar la superficie del lecho donde colapsa (Figura 7.2c-i). Cuando se produce el colapso el sólido arrastrado se desplaza hacia las paredes por las que desciende. La ruptura de las burbujas en la superficie del lecho causa fuertes fluctuaciones.

La formación de otra burbuja junto a la pared de entrada con otra trayectoria se observa en las Figuras 7.2e-i. Esta burbuja de tamaño más reducido asciende por la pared a menor velocidad que la descrita anteriormente. En su ascenso desvía hacia el centro del gasificador los sólidos que por ella descienden (Figura 7.2g).

Los contornos en el reactor de fracción volumétrica media de gas, carbón y caliza se muestran en la Figura 7.3. La distribución media de sólido permite diferenciar tres secciones en el gasificador.

La primera de ellas se sitúa en la parte inferior del lecho desde el distribuidor y hasta, aproximadamente, la altura de la entrada lateral. Esta sección se diferencia por una alta concentración de sólidos, y es donde se produce la mezcla de las corrientes de entrada, una intensa combustión del carbón, y el principal consumo del oxígeno.

La segunda sección corresponde a la parte superior del lecho donde el flujo podría ser definido por la circulación de sólidos con una estructura similar a la de núcleo-anillo (descrita en la Sección 1.2, página 7). La presencia de la entrada de sólido produce la asimetría lateral observada en la parte inferior de esta sección (a una altura $< 0,5$ m).

La tercera sección es la situada sobre el lecho. Se caracteriza por estar constituida prin-

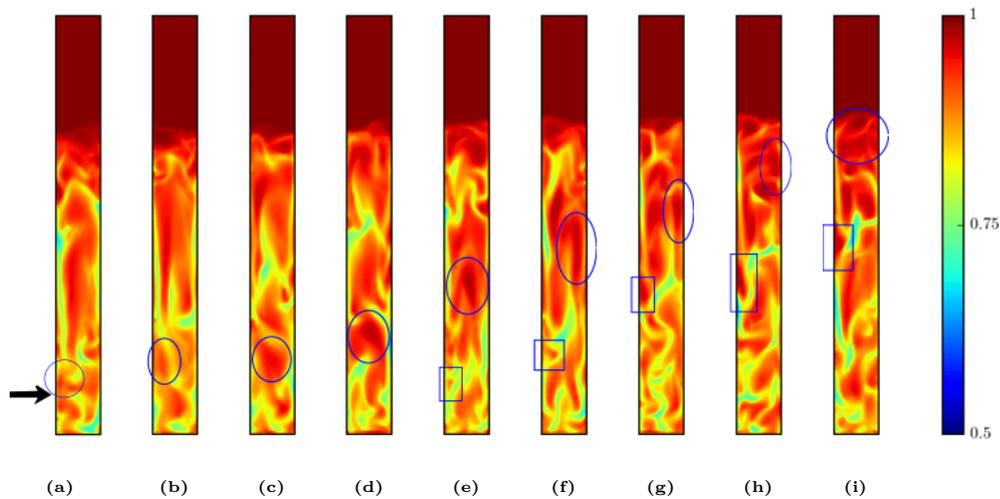


Figura 7.2: Evolución de los contornos de fracción volumétrica instantánea de gas durante 2s de simulación (de izquierda a derecha)

principalmente por gas. En esta sección se produce la elutriación, es decir, el arrastre y separación del lecho de las partículas de sólido por la corriente gaseosa, y continúa la combustión en la fase gaseosa.

7.2.2. Descripción de la segregación en el lecho

La utilización en la descripción del lecho de distintas fases para los sólidos permite estudiar su segregación. La distribución de los sólidos predicha no es uniforme. Las fases se segregan debido a las diferencias en su tamaño y densidad. La caliza (mas grande y pesada) se concentra en la parte baja del lecho (Figura 7.3). En esta sección cercana al distribuidor la concentración de carbón es baja debido a su consumo por la presencia de reactantes frescos.

Para analizar las inhomogeneidades laterales en el lecho se realizan promedios zonales. Se definen tres zonas de promediado: una zona vecina a la pared de entrada de sólidos, o pared frontal, otra vecina a la pared opuesta, y el núcleo central. Las zonas vecinas a las paredes de entrada y opuesta se extienden hasta el 4% de la anchura del gasificador.

Las diferencias cuantitativas en la distribución de fracción volumétrica de sólido entre estas zonas se muestran en la Figura 7.4.

El carbón se distribuye, en promedio, casi uniformemente con la altura, excepto en

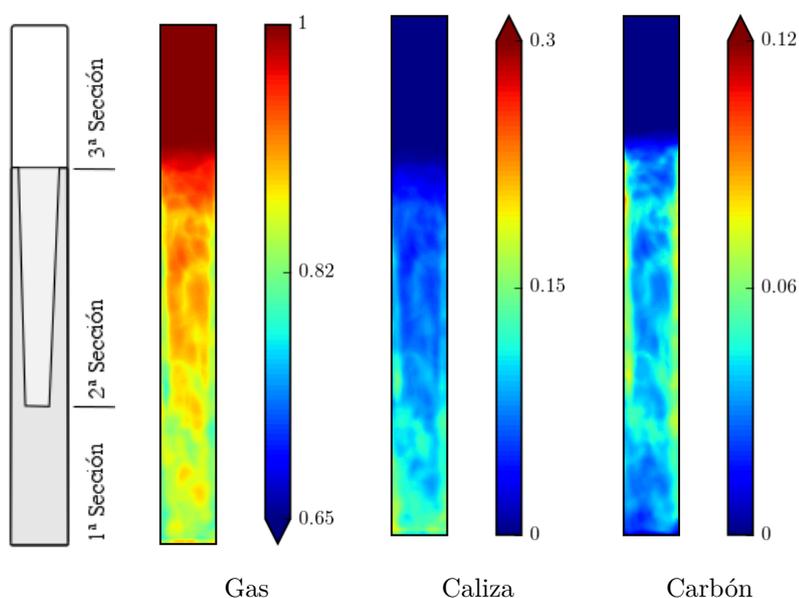


Figura 7.3: Contornos de fracción volumétrica media de gas, caliza, y carbón

la sección inferior, cercana al distribuidor, donde su concentración es baja. La fracción volumétrica de caliza tiene en esta sección inferior una distribución horizontal aproximadamente uniforme, y su concentración en el lecho disminuye con la altura. Las partículas de carbón, sin embargo, se concentran preferentemente en la pared opuesta a la entrada estando más diluidas en el núcleo central.

En la pared frontal el carbón tiene un comportamiento mixto, con una concentración diluida, como la del núcleo central, en la parte baja del lecho (aproximadamente a $< 0,5\text{m}$ de altura); y concentrada, como la de la pared opuesta, en su parte alta.

7.2.3. Densidad de sólido y tasa de devolatilización del carbón

El tratamiento del carbón como una fase multicomponente permite considerar en el modelado la variación de la densidad del sólido. La densidad de la partícula (modelada) depende únicamente de su composición (ver Sección 2.7). La evolución con la altura de la densidad media del carbón en las tres zonas laterales definidas en el apartado anterior se muestra en la Figura 7.5.

Las variaciones en la densidad del carbón pueden asociarse a sus transformaciones químicas. Los valores mínimos se predicen en la zona cercana a la entrada de sólido. La menor densidad corresponde con la mayor concentración de *char* en el carbón: la devolatiliza-

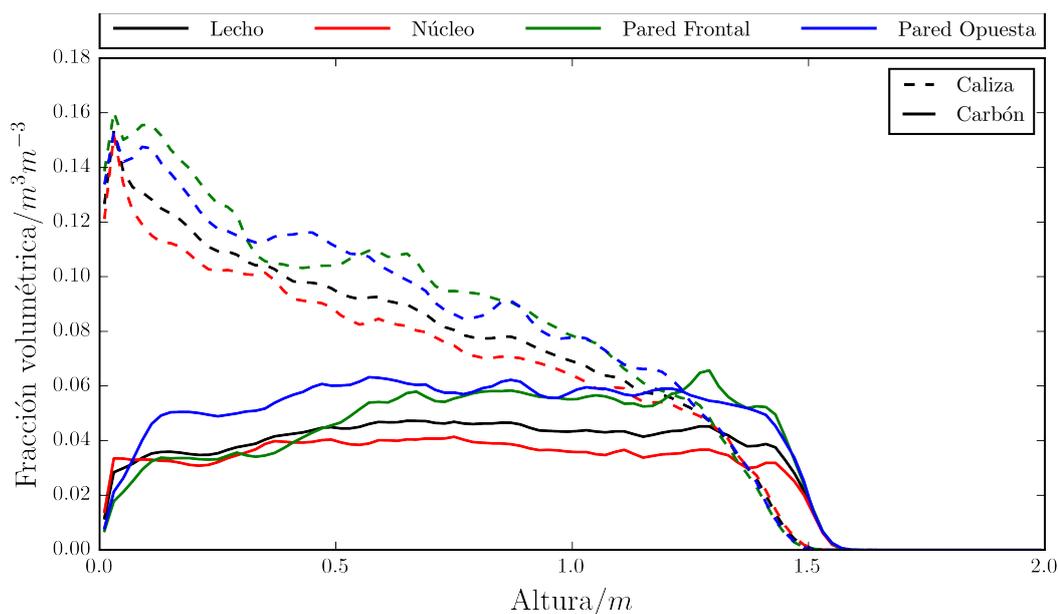


Figura 7.4: Evolución con la altura de la fracción volumétrica media de carbón y caliza

ción convierte el carbón bruto (*coal*) en volátiles y carbono fijo (*char*), disminuyendo la densidad de las partículas. El consumo posterior del *char* por combustión y gasificación causan el aumento de la densidad del sólido (debido a la presencia de componentes más densas).

La Figura 7.6 muestra la tasa de devolatilización promedio en todo el lecho y en las tres zonas del reactor descritas anteriormente. El máximo se sitúa a la altura de la entrada de sólidos. En la zona central del lecho éste se encuentra ligeramente más arriba.

En conclusión, el cambio de densidad de sólido es causado fundamentalmente por el cambio de su composición debido a la devolatilización. Un modelado preciso del comportamiento fluidodinámico de la zona de la entrada, donde se produce la devolatilización, podría requerir la consideración del efecto de los cambios en la densidad del sólido.

7.2.4. Composición química del gas en el gasificador. Reacción heterogénea y homogénea

Los contornos de fracción másica media de las principales especies en el lecho se muestran en la Figura 7.7. Se distinguen dos tipos de distribuciones: aquellas que presentan un penacho a partir de la entrada lateral (tales como CO , CH_4 , H_2) y los que tienen un fuerte

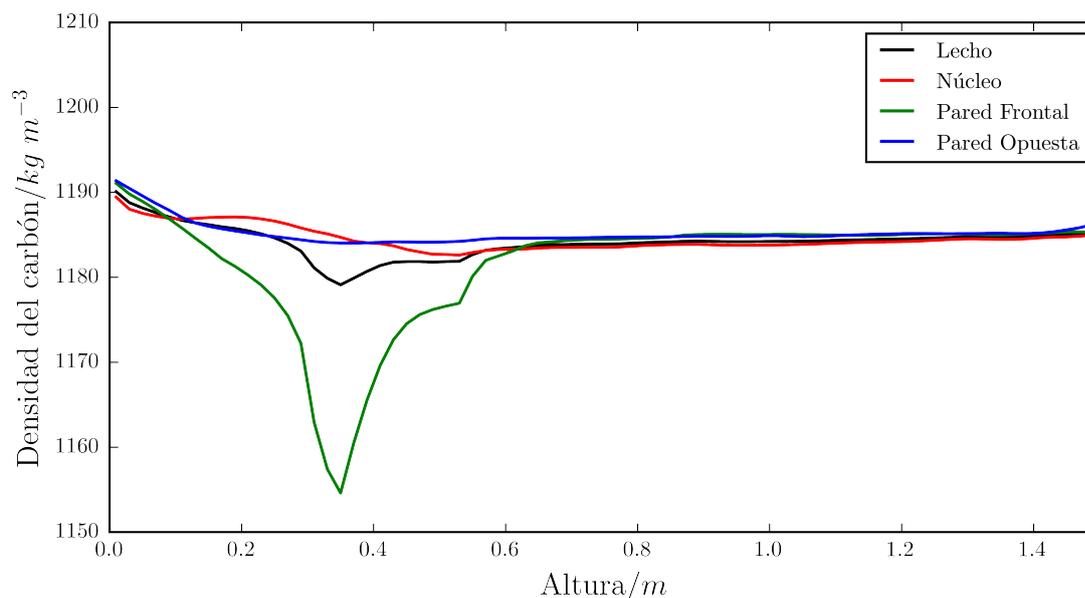


Figura 7.5: Evolución con la altura de la densidad media del carbón en el combustor y en tres zonas verticales

cambio cerca del distribuidor (CO_2 , O_2). La cantidad de los primeros está controlada por la devolatilización junto con la posterior reacción y transporte ascendente cerca de la pared frontal o de la entrada de sólido.

El oxígeno se consume en la parte inferior del lecho, mayoritariamente por combustión heterogénea (R0-Het en la Tabla 7.4). Su evolución con la altura, junto con la de otras especies químicas, se muestra en la Figura 7.8. El consumo de O_2 por la combustión heterogénea del *char* produce principalmente CO_2 , que aumenta su concentración rápidamente. Otras fuentes de CO_2 son la oxidación del monóxido de carbono CO y del metano CH_4 (ver Figuras 7.9 y 7.10), aunque las tasas de estas reacciones son varios ordenes de magnitud menores que la de combustión heterogénea.

La competencia entre la formación de metano por devolatilización y su consumo por oxidación se resuelve a favor de la primera a una altura de aproximadamente 0,15 m sobre el distribuidor. Esta altura señala el comienzo de la producción neta (media) de metano CH_4 y de su presencia en el lecho (Figura 7.10). A partir de esta altura su concentración aumenta en la pared frontal, para tener un máximo en la misma y difundirse hacia la zona central o el núcleo (Figura 7.8). La concentración de monóxido de carbono CO presenta el mismo comportamiento, aunque su producción neta media empieza a mayor altura.

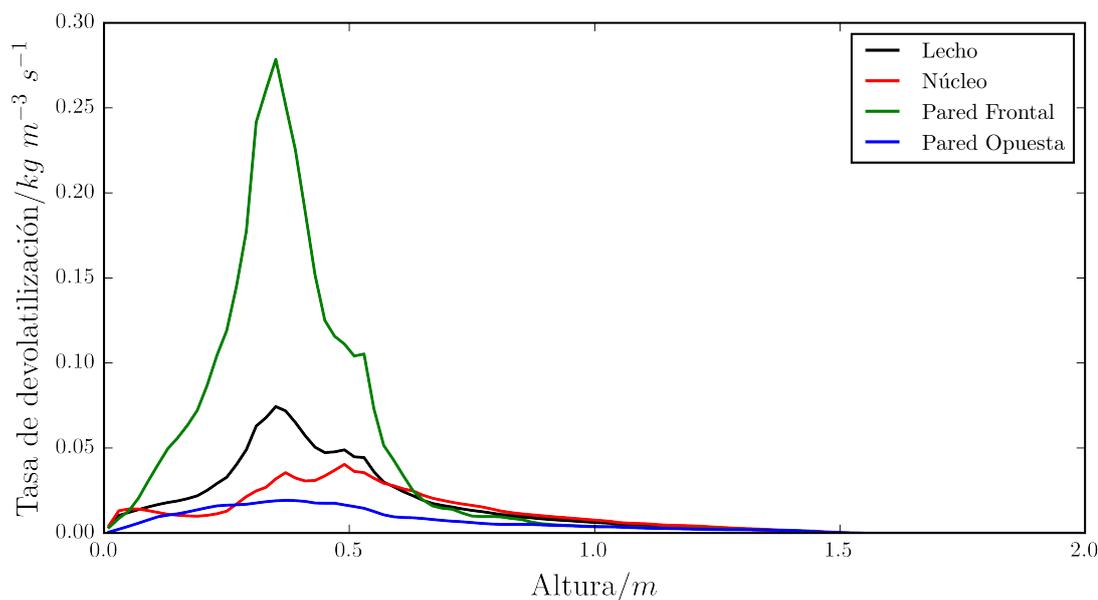


Figura 7.6: Evolución con la altura de la tasa media de devolatilización en el combustor y en las tres zonas verticales

La reacción Water-Gas Shift WGSR (R0-Hom en la Tabla 7.4) se activa en la parte inferior del lecho por la presencia de H_2O y CO . Esta reacción está desplazada hacia la formación neta de H_2 y CO_2 en casi todo el lecho.

El comienzo de la formación del H_2 muestra otra posible división en el lecho, relacionada con la altura donde comienza su formación media neta debido a las reacciones de gasificación (Figura 7.11). Este cambio a producción desde consumo neto de H_2 se produce cerca de la entrada de sólido, donde la producción por devolatilización comienza a ser mayor que el consumo por oxidación (R2-Hom). Los valores máximos de su concentración se alcanzan, como los de la concentración de CH_4 , en la zona cercana a la entrada lateral del sólido.

Los campos de las tasas medias de reacción heterogénea se muestran en la Figura 7.12. La formación de CO por gasificación del carbón (R2-Het) se distribuye por todo el lecho (excepto en la zona de la entrada de gas), y de acuerdo a la ley cinética su contribución al consumo de *char* es inferior a la del agua H_2O (R1-Het). El agotamiento del O_2 hace que estas reacciones sean dominantes en la parte superior del lecho.

El punto de agotamiento del O_2 controla el comportamiento químico del lecho. Mientras el O_2 está presente tiene lugar la oxidación de H_2 , CH_4 y CO . La acumulación de estos gases sólo se produce fuera de la zona de su oxidación. Respecto al sólido, el consumo

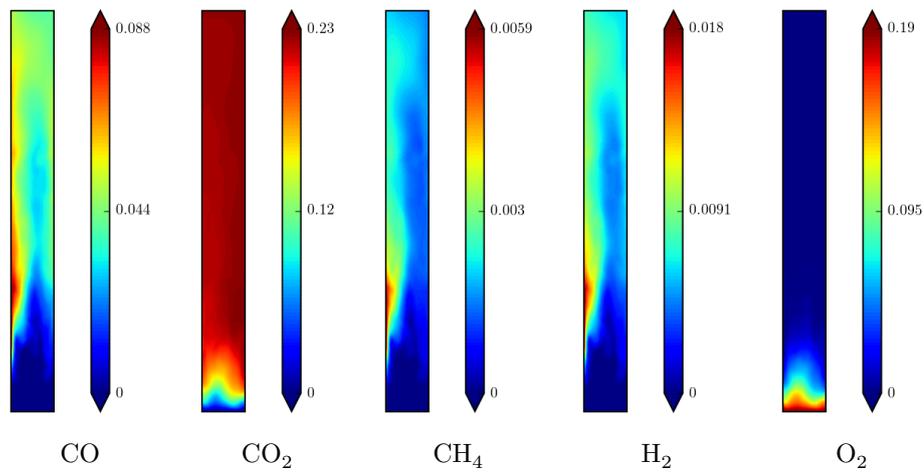
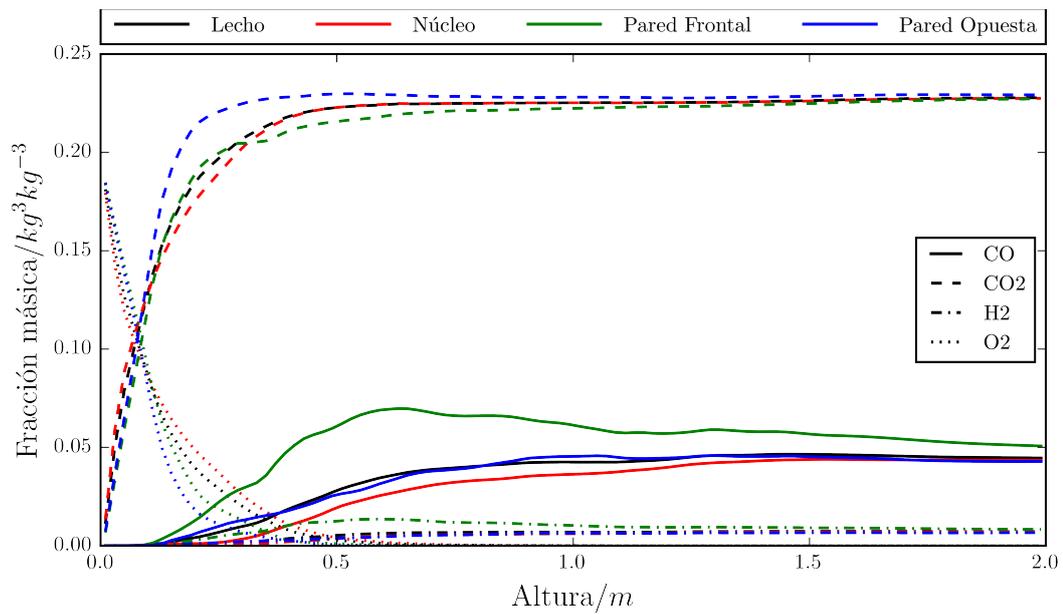
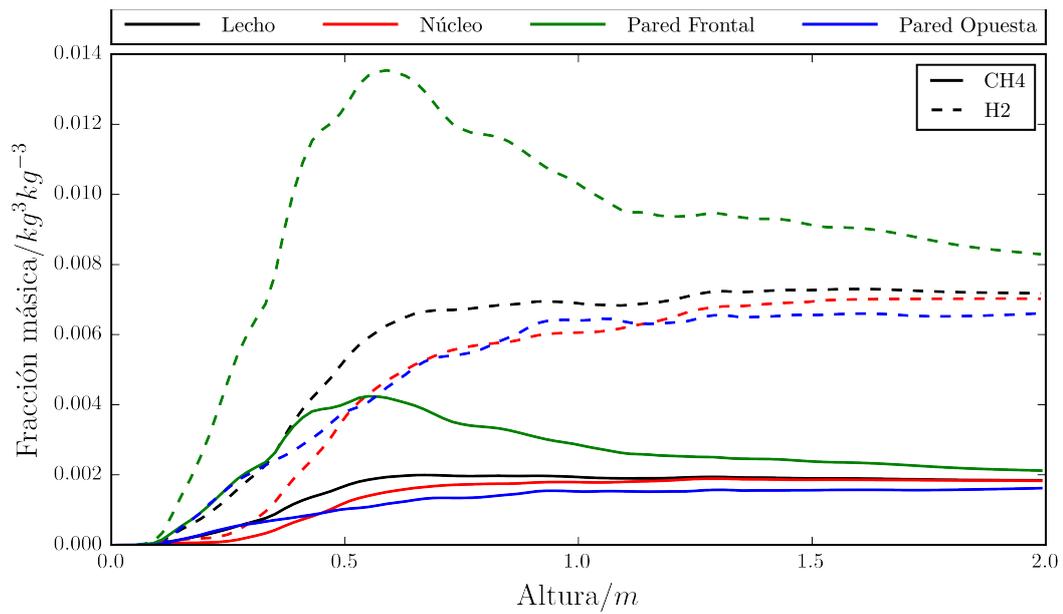


Figura 7.7: Contornos de fracción másica media de CO, CO₂, CH₄, H₂ y O₂

de *char* en la parte inferior del lecho es mayoritariamente por combustión, y al agotarse el oxígeno pasa a ser controlado por las reacciones, más lentas, de gasificación.



(a) Especies químicas mayoritarias



(b) Especies químicas minoritarias

Figura 7.8: Evolución con la altura de la fracción molar media de las especies químicas O₂, CO₂, CO, H₂ y CH₄ en la fase gaseosa

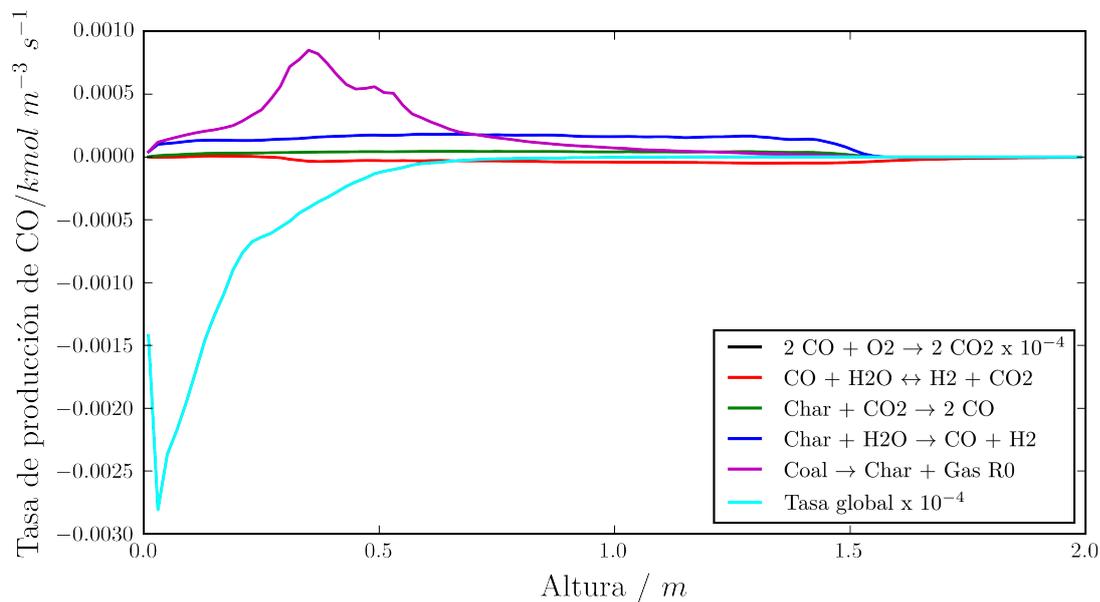
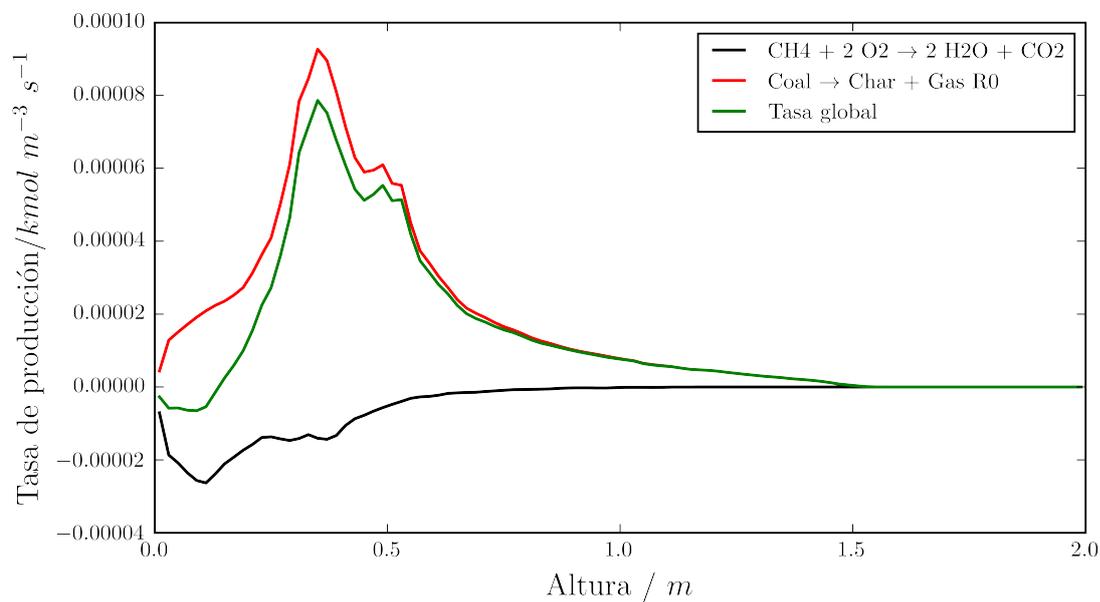


Figura 7.9: Evolución con la altura de las tasas medias de formación de CO

Figura 7.10: Evolución con la altura de las tasas medias de formación de CH₄

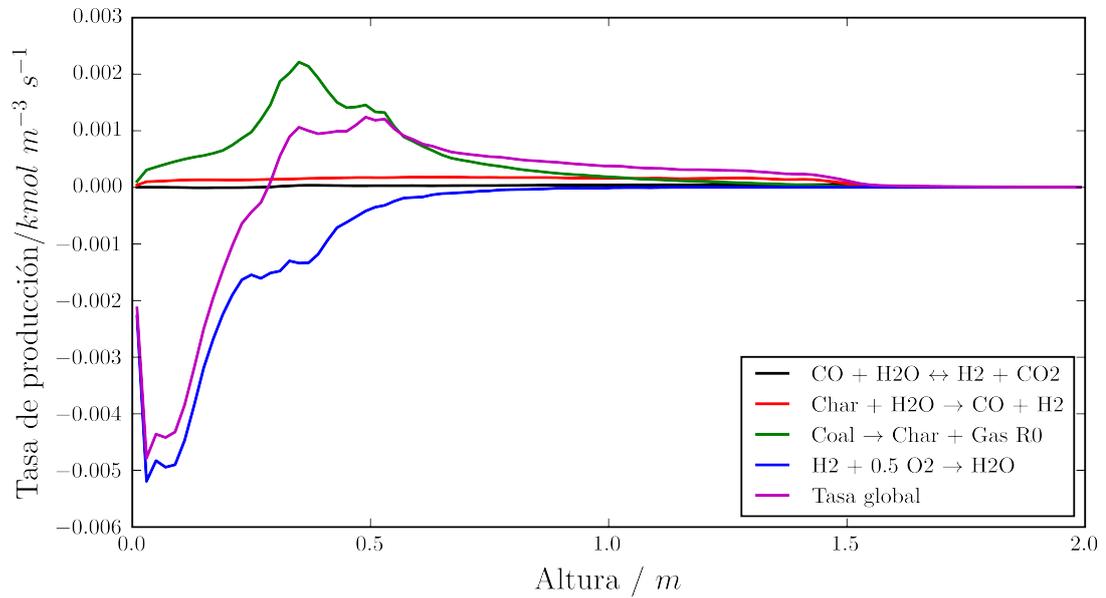


Figura 7.11: Evolución con la altura de las tasas medias de formación de H_2

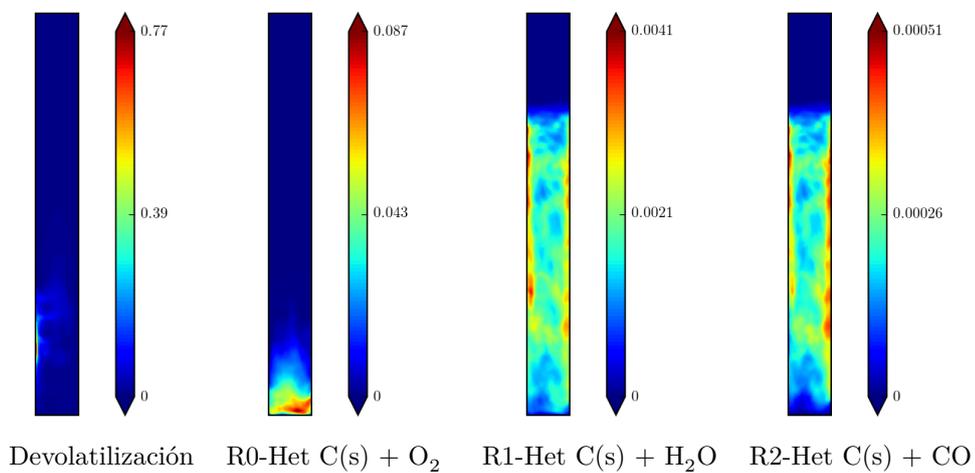


Figura 7.12: Contornos de la tasa de devolatilización media y de las tasas medias de reacción heterogénea (en $\text{kg/m}^3 \text{s}$)

7.2.5. Temperatura en el lecho

Los resultados indican que la temperatura es similar para todas las fases presentes en el lecho (ver Tabla 7.6). Estos resultados concuerdan con la evidencia experimental de una rápida homogeneización de la temperatura en los lechos fluidos. Los valores medios de temperatura predichos tienen un valor inferior al medido experimentalmente. Esta diferencia es de la misma magnitud que la reportada por otros autores [53, 182].

	Experimental	Gas	Caliza	Carbón
Temperatura / °C	855	795.63	795.75	794.78

Tabla 7.6: Temperatura en el reactor para el caso base

7.3. Validación con medidas experimentales

En esta sección se presenta la validación de los resultados obtenidos. Las predicciones de la simulación se evalúan usando las medidas de concentración de los gases a la salida para distintas condiciones de operación. Los resultados numéricos también se comparan cuantitativa y cualitativamente con resultados computacionales, disponibles en la literatura, de otros cinco autores.

En este trabajo se realizan simulaciones numéricas de cuatro de los casos presentados por Chejne y Hernandez [40], que se recogen en la Tabla 7.2. La comparación de los valores a la salida con las medidas experimentales se muestra en la Figura 7.13.

La concentración molar de CH_4 y CO en la salida es menor en la simulación que en los resultados experimentales, mientras que es mayor la de N_2 y H_2 . El CO_2 ajusta correctamente.

La concordancia entre valores experimentales y predichos a la salida es razonablemente buena, si se consideran los factores de incertidumbre, tanto experimental como computacional, que se indican a continuación.

La temperatura en el lecho no está bien definida. Los autores sólo proporcionan su valor medio en el lecho y en la entrada de gas. No se reporta la temperatura de las partículas de carbón en el momento de su entrada en el lecho. La temperatura tiene una influencia importante en la reacción química, especialmente en el equilibrio entre CO y CO_2 .

Además, existe incertidumbre en los parámetros cinéticos de las reacciones químicas

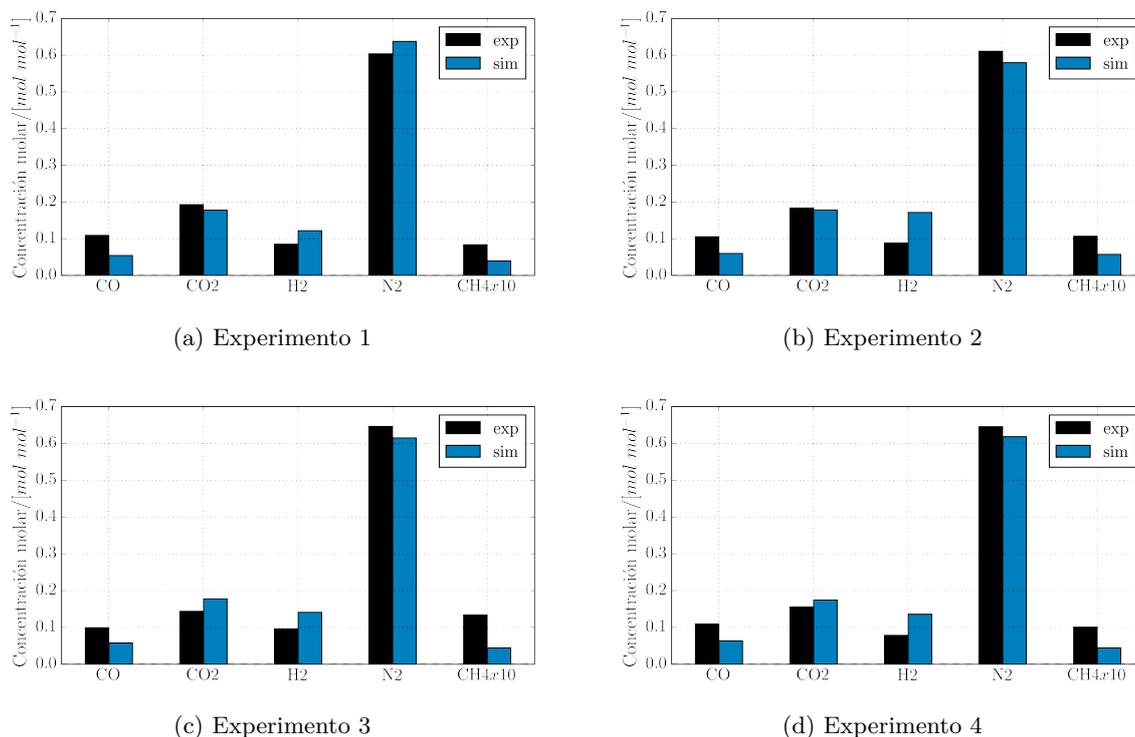


Figura 7.13: Comparación de valores experimentales con resultados computacionales para distintas configuraciones de operación

consideradas. Sus valores en la literatura no son únicos ni están generalmente admitidos para cada reacción química [53, 182]. En el modelado de este lecho, por ejemplo, los autores consultados utilizan distintos parámetros para la misma reacción química [11, 53, 182, 226, 240]. Alguno destaca la necesidad de modificar *ad hoc* una tasa de reacción para un correcto ajuste de los resultados [53]. En este trabajo los parámetros cinéticos se usan sin realizar ningún ajuste.

Además, en este trabajo, no se consideran los efectos en la cinética de la presencia de la caliza y de las cenizas. La caliza, a través de la calcinación, produce CO₂, que afecta al equilibrio de la WGSR promoviendo la reacción inversa e incrementando la fracción molar de CO y reduciendo la de H₂ (y de CO₂). Simultáneamente favorece la reacción de Boudouard (R2-Het) que desplaza el equilibrio de la WGSR en la dirección contraria [11, 182]. La presencia de cenizas en el lecho (que puede tener efectos catalíticos) influye en la reactividad del *char* modificando las tasas de reacción química [183, 193], sin embargo este fenómeno requiere un mayor estudio para su modelado.

Otra fuente de incertidumbre es el tamaño de partícula que se considera constante y único, mientras que puede existir una fuerte variación en el lecho. Los efectos de la polidispersión y los cambios en el tamaño serán tratados posteriormente en la Sección 7.4.1.

Los resultados obtenidos se comparan con los presentados por Armstrong [11], De Souza-Santos [53], Shuai et al. [182], Wang et al. [226] y Yu et al. [240]. Los autores citados simulan distintas configuraciones experimentales. De las configuraciones citadas Armstrong [11] presenta resultados para los Experimentos 1 y 2; Wang et al. [226] simula numéricamente los Experimentos 3 y 4; Yu et al. [240] modeliza los cuatro experimentos de la tabla; y De Souza-Santos [53] y Shuai et al. [182] estudian el Experimento 1.

La Tabla 7.7 presenta un resumen de los modelos utilizados por los distintos autores. Los autores citados, en su mayoría, utilizan códigos comerciales para la resolución fluidodinámica del flujo multifásico sobre los que implementan ciertos submodelos (*e.g.* los modelos de combustión por Armstrong [11]). Las simulaciones utilizadas para la comparación son bidimensionales, excepto las realizadas con el código unidimensional CSFMB de De Souza-Santos [53], y las tridimensionales de Wang et al. [226]. Las condiciones de pared para las fases sólidas utilizadas por estos son mayoritariamente las de no deslizamiento (estándar en los códigos de CFD). Los modelos de reacción química varían entre los autores, aunque las reacciones químicas básicas de los mecanismos son comunes.

Los límites impuestos por los códigos que utilizan como base obligan a algunos autores al tratamiento de las pseudo-especies del carbón como fases separadas. De los autores consultados sólo Wang et al. [226] modela el carbón como una fase multiespecie. Armstrong y De Souza-Santos [53] utilizan distintas fases con este propósito. En las simulaciones numéricas con el algoritmo presentado en esta Tesis se utilizan dos fases: caliza y carbón. Esta última se modela con cuatro componentes.

Los resultados obtenidos mediante estos modelos se comparan con los experimentales en la Figura 7.14. Las predicciones del modelo desarrollado en esta Tesis se encuentran en el rango del resto de autores. La mejor predicción, globalmente, es la presentada por Yu et al. [240]. La mayor diferencia podría ser el modelo de devolatilización *ad hoc* utilizado por este autor (basado en el análisis elemental), junto con su distinta elección de los parámetros cinéticos de las reacciones químicas.

El efecto del ajuste de los parámetros del modelo para la cinética química es grande. Por ejemplo, los resultados de De Souza-Santos [53] para el Experimento 1 etiquetados como *Souza* y *Souza Mod* muestran el cambio en la composición química a la salida con la modificación de la constante de reacción (directa) de una única reacción química: la WGSR. El autor modifica su valor reduciéndolo tres ordenes de magnitud (de $2,78 \times 10^3 \text{s}^{-1}$ a $8,5 \times 10^1 \text{s}^{-1}$). La modificación es justificada por la sospecha de la presencia de

	Yu et al. [240]	Wang et al. [226]	Armstrong [11]	De Souza-Santos [53]	Shuai et al. [182]	Esta tesis
Fases sólidas	1 fase - <i>char</i>	1 fase - Multiespecie	3 fases - Carbono <i>char</i> Caliza	3 fases Carbon Absorben- te Inerte de varios diámetros	1 fase - Carbon	2 fases - Carbon Caliza
Composición bón	car- Monoespecie	Arena bóno - bruto <i>char</i>	Car- - -	Monoespecie	Carbono <i>char</i>	Carbono bruto - - <i>char</i> - Genizas - Agua
Malla	2D (22x100)	3D (sin datos)	2D (22x100)	1D	2D 17x86 28x146	2D (22x100)
CC Salida Especies	Sólo cenizas	Gradiente nulo	Gradiente nulo	No especificado	Gradiente nulo	Gradiente nulo
CC Pared Velocidad sólido	No deslizamiento	No deslizamiento	Johnson y Jackson [111]	Sin especificar	No deslizamiento	No deslizamiento
KTGF	Gidaspow [73] Patil et al. [162]	Gidaspow et al. [75]	Lun et al. [129] Jenkins y Savage [109]	Sin especificar	Shuai et al. [182], 185] (KTRS)	Mathiesen et al. [133]
Modelo Friccional	No usa	Schaeffer [176]	Schaeffer [176]	No usa	Sin especificar	No usa
Código	Fluent 14	Sin especificar	Fluent	CSFMB ^a	(KTRS) PIX [185]	K- Propio
Densidad partícula	Constante	Constante	Variable (2 fases de distinta densidad)	Constante	Constante	Variable
Modelo de arrastre	Gidaspow	Huilin-Gidaspow	Gidaspow	Sin especificar	Huilin-Gidaspow	Gidaspow

Tabla 7.7: Comparación de los modelos utilizados por los distintos autores

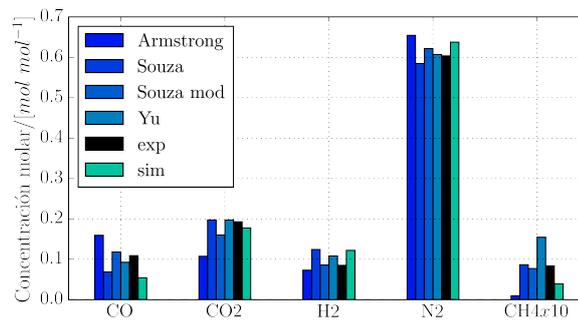
^a *Comprehensive Simulator for Fluidized and Moving Beds* [194]

substancias inhibidoras en los sólidos (debido a la predicción en la simulación de una alta concentración de H_2 y una baja concentración de CO). El cambio de la constante modifica considerablemente la predicción de la concentración de todas las especies químicas a la salida del gasificador. La corrección en los valores de CO y H_2 implica una peor predicción de CO_2 y de CH_4 . Otros tres de los autores presentados utilizan un límite para la reacción química en función de la tasa mezcla (*i.e.* *Eddy Break-Up*) [11, 226, 240]. Este límite basado en un tiempo característico de mezcla no es utilizado por Shuai et al. [182].

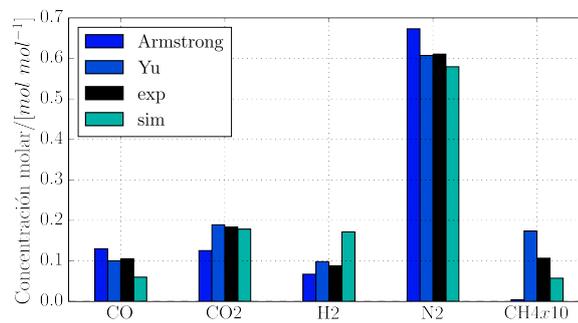
Existen diferencias importantes en el comportamiento del lecho que no son capturadas si se observan sólo los valores a la salida. La altura de lecho predicha varía entre los autores. El modelo de De Souza-Santos [53] fija estrictamente la altura a 1m. Los dos autores (Yu et al. y Armstrong) que utilizan el mismo *solver* comercial de base [64], predicen lechos estables con grandes burbujas que suben por los laterales. Wang et al. predice el mismo comportamiento. El gas predomina en la parte central, sin embargo, en las simulaciones presentadas por Shuai et al. [182] y en este trabajo. El modelado unidimensional de De Souza-Santos [53] no permite distinguir las variaciones laterales que se producen.

El modelado de la segregación entre los sólidos sólo es posible si estos se simulan como fases separadas de distinto diámetro/densidad. De los modelos considerados sólo tres, incluyendo el presente modelo, son capaces de considerar la segregación en el lecho. En el lecho modelado se puede esperar que exista segregación entre las fases de carbón y caliza por sus diferentes velocidades terminales y velocidades mínimas de fluidización (≈ 5 veces mayores para esta última; ver Tabla 7.3). Armstrong [11], único autor que la muestra, predice una segregación pequeña entre las fases consideradas. En este trabajo la segregación predicha es bastante mayor, con mayor acuerdo a lo esperado (ver Sección 7.2).

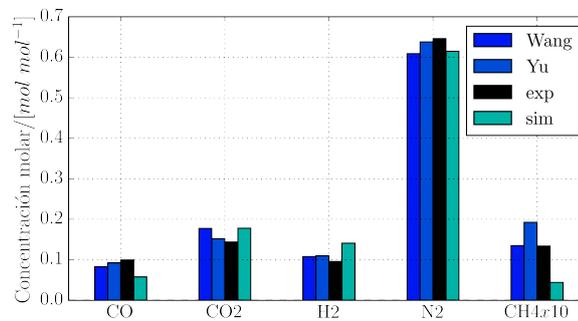
La distinta fluidodinámica en el lecho también afecta a la extensión de las zonas oxidante y reductora. El punto de agotamiento del oxígeno O_2 en el Experimento 1 para las simulaciones llevadas a cabo por Shuai et al. se produce a una altura sobre el distribuidor de aproximadamente 0,5m, como en este trabajo. Sin embargo en De Souza-Santos y Armstrong este se produce cerca del distribuidor. La discretización espacial muy detallada que De Souza-Santos [53] utiliza en esta zona lo sitúa a una altura inferior a 0,05m.



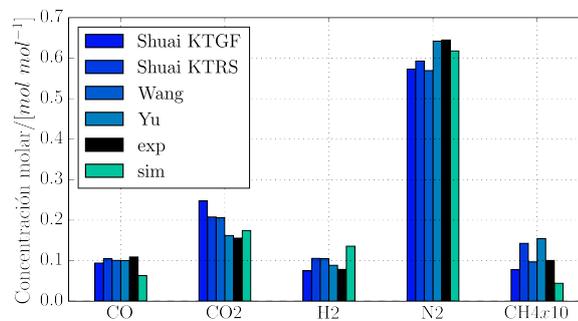
(a) Experimento 1



(b) Experimento 2



(c) Experimento 3



(d) Experimento 4

Figura 7.14: Comparación de valores experimentales con los resultados computacionales de esta Tesis y de otros autores para distintas condiciones de operación

7.4. Estudio de la influencia del tamaño de partícula de carbón

En esta sección se evalúa la influencia del tamaño de la partícula de carbón en el comportamiento fluidodinámico y químico del gasificador. En este análisis se consideran tres tipos de variación: el primero es un cambio en el diámetro de la partícula (monodispersa) de carbón; el segundo introduce polidispersión en su tamaño; y el tercero tiene en cuenta la variación del tamaño de la partícula.

Los datos de tamaño utilizados, presentados en la Tabla 7.8, son los proporcionados por Chejne y Hernandez [40].

Malla	Diámetro/mm	Análisis diferencial (%)
14	1,412	1,08
16	1,180	28,53
20	0,850	12,70
25	0,710	28,18
30	0,595	10,90
50	0,295	17,57
Colector	-	1,04
Diámetro medio	0,620	100

Tabla 7.8: Distribución de tamaño de la partícula de carbón (tomada de Chejne y Hernandez [40])

7.4.1. Estudio de la influencia del tamaño de partícula de carbón

En esta sección se presenta el efecto en el gasificador de cambiar el tamaño de partícula de carbón, siendo ésta monodispersa. Los tres diámetros utilizados se muestran en la Tabla 7.9.

El diámetro del caso base es el promedio de la distribución experimental reportado por sus autores⁵ (ver Tabla 7.8). Los tres diámetros elegidos para este análisis son representativos de tres zonas de esta distribución (ver Sección 7.4.2 y Figura 7.25a).

Los campos de la fracción volumétrica media de gas y de caliza correspondientes a cada tamaño se muestran en la Figura 7.15. La disminución del tamaño aumenta el ratio de

⁵ El tipo de promedio realizado por sus autores no se reporta, pero se puede considerar, por su valor, que se trata del promedio ponderado con la masa (d10)

	Base	1dp1	1dp2	1dp3
Diámetro / μm	620	520	780	1300
Área/Volumen normalizada	1.00	1.19	0.79	0.47

Tabla 7.9: Tamaños de partícula de carbón para el análisis de su efecto en el lecho, y su relación área/volumen relativa a la de la partícula de tamaño medio

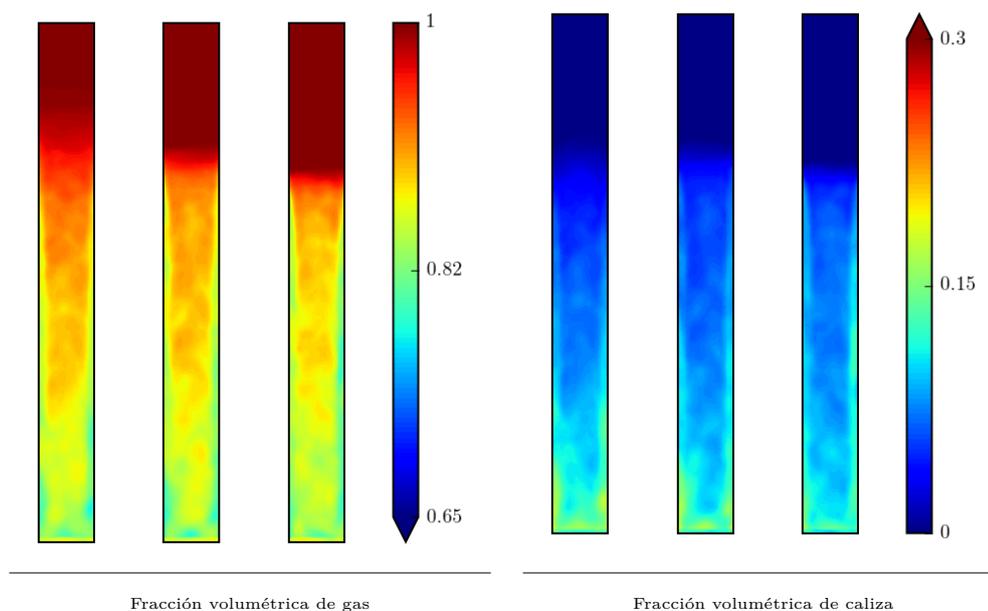


Figura 7.15: Contornos de fracción volumétrica media de gas para tres tamaños de partícula (de izquierda a derecha $520\mu\text{m}$, $780\mu\text{m}$, y $1300\mu\text{m}$)

área y volumen de las partículas favoreciendo su arrastre y, en consecuencia, se produce un aumento de la altura del lecho.

El cambio de tamaño también afecta al grado de segregación de los sólidos (Figura 7.16). Cuando el tamaño de las partículas de carbón disminuye, la concentración de ambas fases es menos uniforme con la altura y la segregación entre ellas aumenta. Además, en el lecho con un menor tamaño de carbón las fases se segregan totalmente en la parte superior, es decir, se observa una zona de partículas de carbón sobre el lecho de caliza.

La expansión (y segregación) del lecho también se ve afectada por la cantidad de gases liberados desde la partícula por los procesos de devolatilización y de reacción heterogénea. La tasa de reacción heterogénea aumenta al disminuir el tamaño de carbón debido al aumento del ratio área/volumen. Es decir, por el mismo motivo por el que se favo-

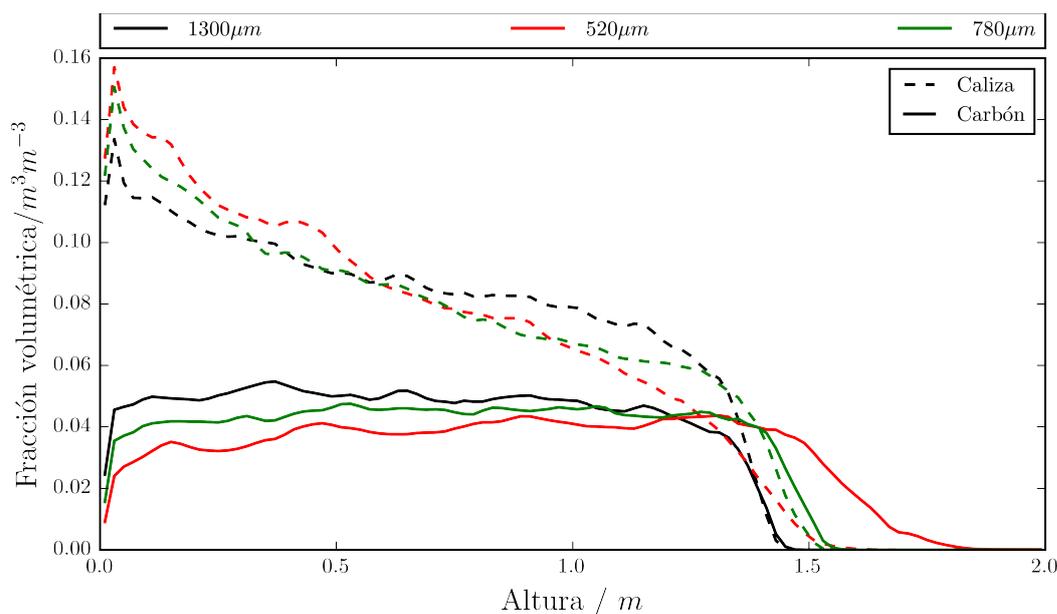


Figura 7.16: Comparación de los resultados de simulación para distintos tamaños de carbón con datos experimentales

rece el arrastre. En consecuencia, el aumento que se produce de las tasas de reacción heterogénea al disminuir el diámetro también contribuye a la expansión del lecho. La tasa media de reacción heterogénea para los tres tamaños de carbón se muestra en la Figura 7.17.

La tendencia predicha es distinta para la tasa media de devolatilización (Figura 7.18). Aunque la tasa total (integral) se puede considerar similar para todos los tamaños, el carbón con un tamaño intermedio presenta un tasa máxima mayor y una distribución más estrecha a la altura de la entrada. Para las partículas de menor y mayor tamaño la tasa máxima se encuentra a una mayor altura y sus distribuciones son más anchas. Esta variación es pequeña comparada con otras tasas de reacción (*e.g.* reacción heterogénea). La altura absoluta a la que se puede considerar que el carbón se termina de devolatilizar es similar (1,5 m) para los tres tamaños.

La devolatilización se produce principalmente en la pared frontal (y cerca de la entrada del sólido), y se ve afectada por la fluidodinámica de la zona. El menor arrastre en dirección vertical para el tamaño intermedio de carbón en la zona de entrada (Figura 7.19) favorece la mayor penetración hacia el núcleo del lecho y un máximo más pronunciado (ver Figura 7.20).

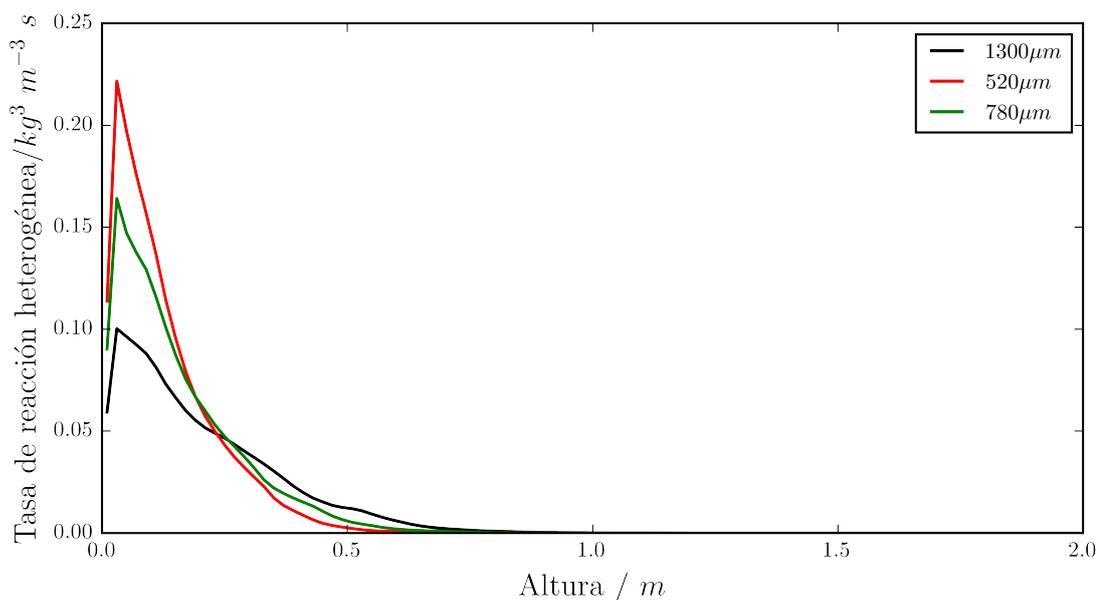


Figura 7.17: Evolución con la altura de la tasa media de reacción heterogénea

En la Figura 7.19 se muestran también contornos de la fracción másica media de algunas de las especies químicas de la fase gas (CH_4 , H_2 , CO_2 , CO , O_2). Los cambios más notables con el aumento del diámetro son los siguientes (ver Figura 7.21): aumenta la penetración de O_2 , la concentración de CO_2 y H_2 a la salida disminuye, y se eleva la zona de mayor concentración de CH_4 .

El efecto en en la reacción heterogénea del incremento del tamaño del carbón es que se aumenta la altura a la que se produce el agotamiento del oxígeno O_2 , y se retrasa la formación de CO_2 y de CO .

Las tasas de reacción de CH_4 permiten comparar la producción por devolatilización frente a su consumo por oxidación (ver Figura 7.22). El aumento del diámetro del carbón desplaza hacia la zona superior la producción por devolatilización de CH_4 y, en consecuencia, su consumo por oxidación. Como resultado, la altura a la que empieza la producción neta de CH_4 se desplaza (ligeramente) en la misma dirección.

El efecto del tamaño de carbón sobre la cantidad de CH_4 global es pequeña; sin embargo, la cantidad producida de H_2 varía apreciablemente (Figura 7.21b). Las reacciones de H_2 son su formación por devolatilización y su oxidación (que se comportan de forma similar a la descrita para las del CH_4), la reacción WGSR (que se mantiene cercana al equilibrio), y la gasificación por H_2O (cuya tasa muestra una fuerte reducción con el aumento del tamaño de partícula, ver Figura 7.23). En la variación de la concentración de H_2 con la

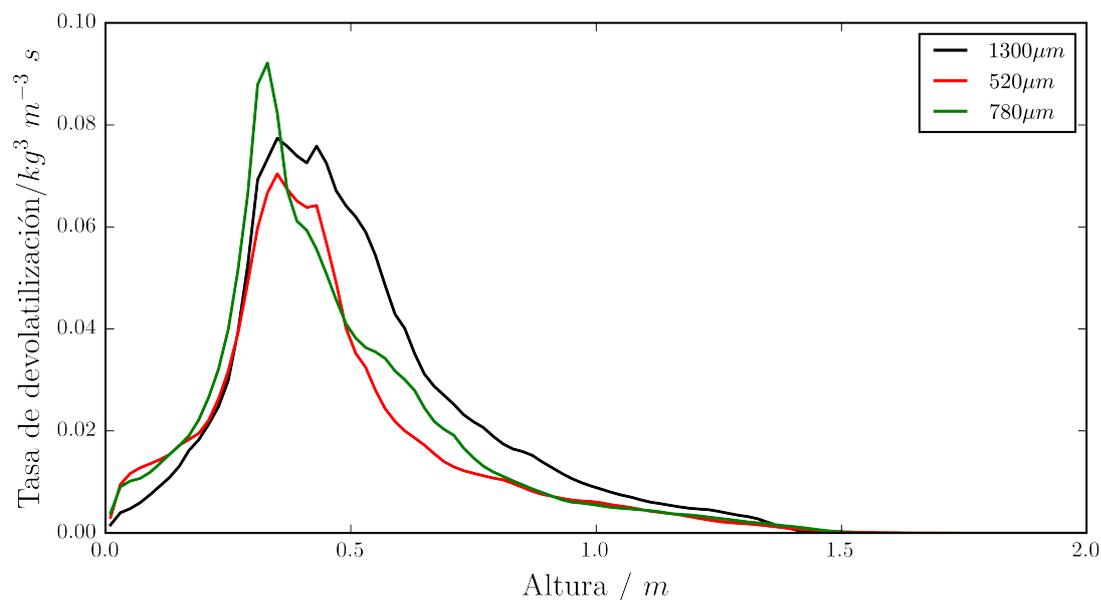


Figura 7.18: Evolución con la altura de la tasa media de devolatilización

altura para el menor tamaño de carbón se aprecia un (nuevo) segundo máximo local en su concentración ($\approx 0,9\text{m}$ de altura), que se añade al ya existente para el resto de los tamaños ($\approx 0,6\text{m}$ de altura).

La composición de los gases a la salida se presenta en la Figura 7.24. Las mayores diferencias se observan en CO , H_2 y N_2 entre el mayor tamaño y los dos diámetros menores (cuyos resultados son similares). El mayor nivel de N_2 indica una menor producción de gases en el lecho de partículas de mayor tamaño. Esta reducción se relaciona con la disminución observada en la tasa global de reacción heterogénea (Figura 7.17). El CO_2 y CH_4 no varían significativamente.

En conclusión una disminución del tamaño de la partícula incrementa su relación área-volumen, y con ella aumenta:

- La relación arrastre/peso,
- las tasas de las reacciones heterogéneas (y la cantidad de gases liberados),
- y, en consecuencia, el tamaño del lecho.

El aumento de las tasas de reacción heterogénea con la disminución del tamaño de la partícula reduce la penetración de O_2 en el lecho, que adelanta y aumenta la gasificación producida, e incrementa la cantidad de CO y de H_2 en los productos gaseosos a la salida.

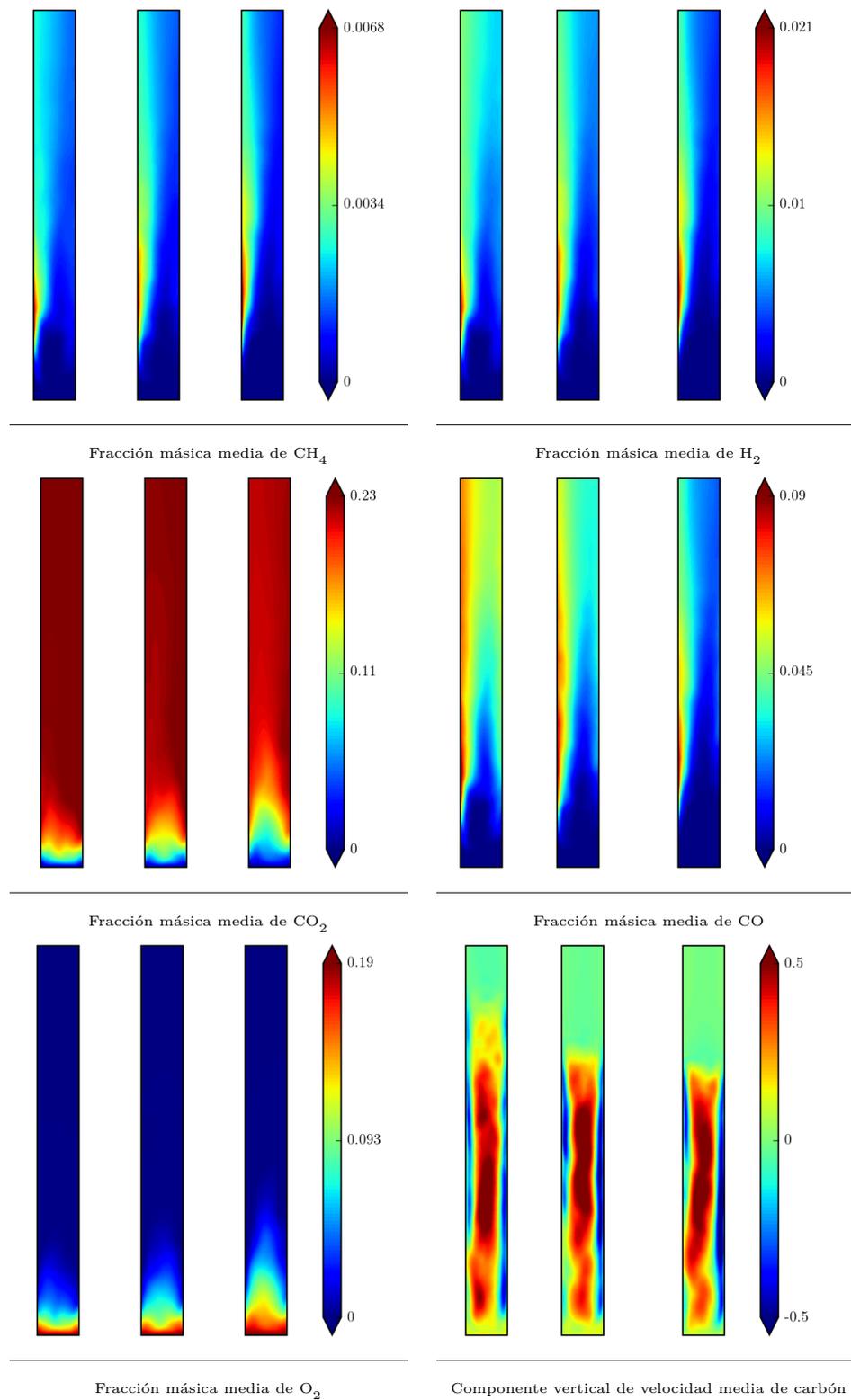


Figura 7.19: Contornos de fracción másica media de CH_4 , H_2 , CO_2 , CO y O_2 y de la componente vertical de la velocidad media de carbón (m/s) para tres tamaños de partícula (de izquierda a derecha 520 μm , 780 μm , 1300 μm)

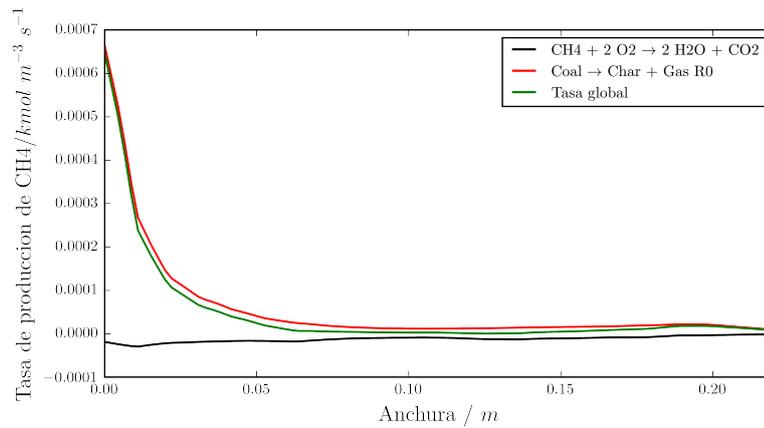
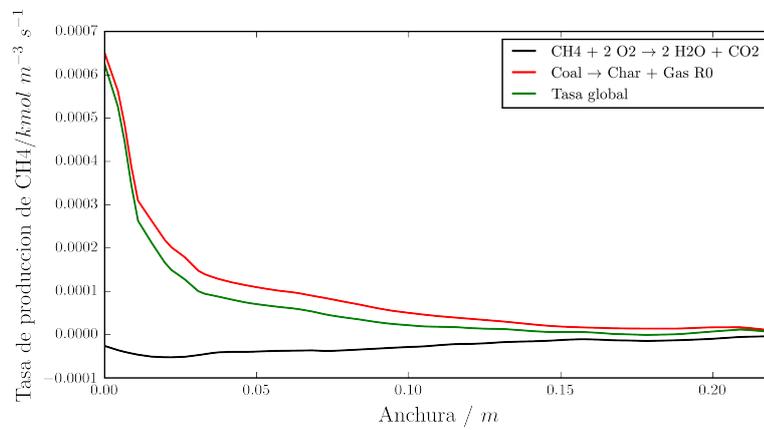
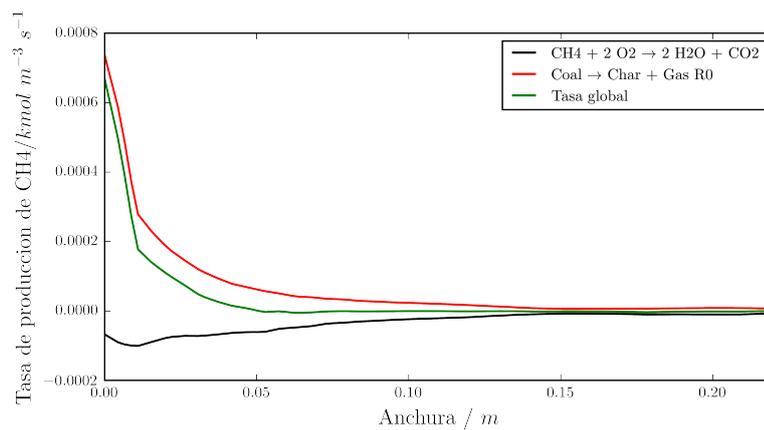
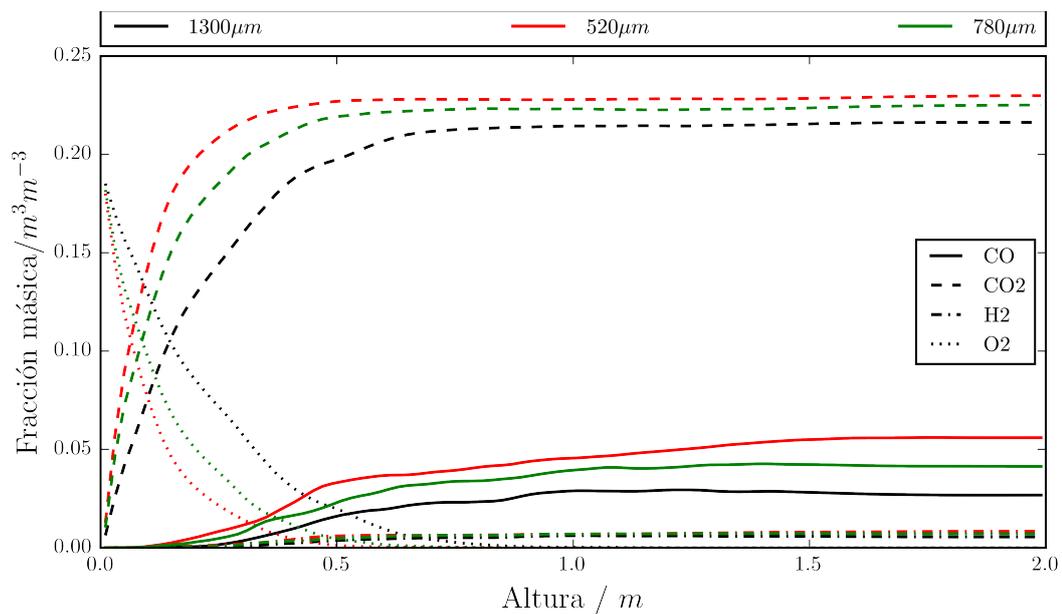
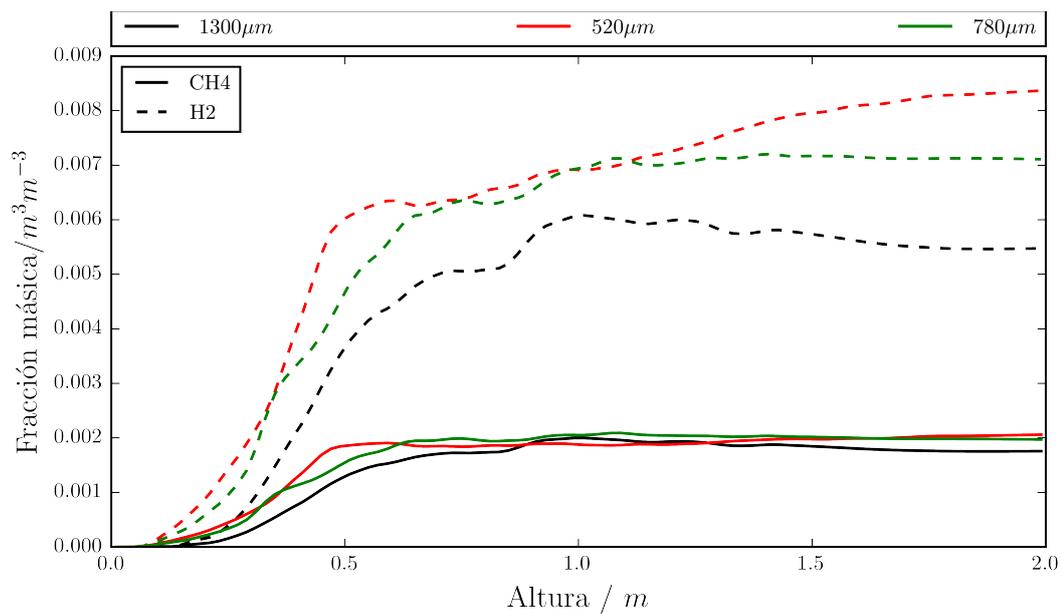
(a) $520\mu\text{m}$ (b) $780\mu\text{m}$ (c) $1300\mu\text{m}$

Figura 7.20: Perfil horizontal en la parte superior de la entrada de sólidos ($h = 0,36\text{m}$) de las tasas medias de reacción para el metano CH_4 para tres tamaños de partícula



(a) Especies químicas mayoritarias



(b) Especies químicas minoritarias

Figura 7.21: Evolución con la altura de la fracción molar de las especies químicas O₂, CO₂, CO, H₂ y CH₄ en la fase gaseosa

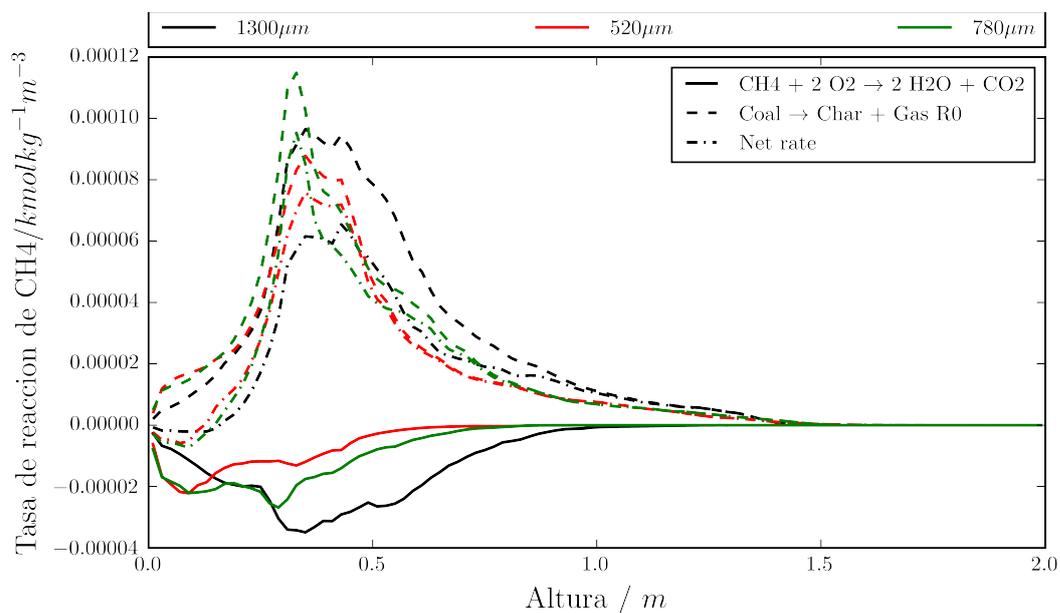


Figura 7.22: Evolución con la altura de las tasas medias de reacción del CH_4

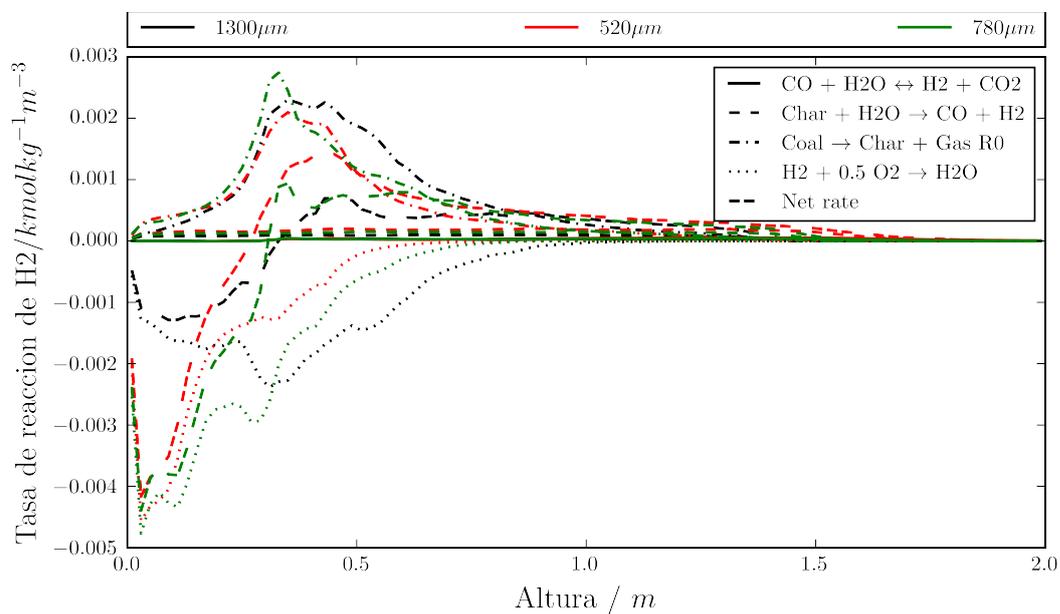


Figura 7.23: Evolución con la altura de las tasas medias de reacción del H_2

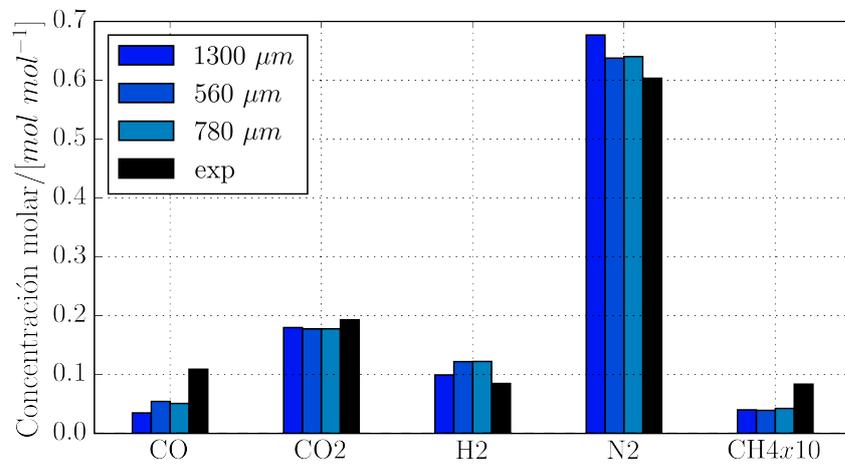


Figura 7.24: Comparación de valores experimentales con los resultados computacionales para distintos tamaños de carbón

7.4.2. Estudio de la influencia de la polidispersión de tamaño de partícula

Existen pocos estudios en la literatura que investiguen la influencia de la polidispersión del tamaño de partícula en flujos gas-sólido con reacción química. En este apartado se evalúa esta influencia.

La distribución granulométrica experimental del carbón utilizado en el gasificador presenta siete diámetros de partícula (reportada por Chejne y Hernandez [40]; ver Tabla 7.8). Partiendo de esta distribución, se han definido tres casos en los que el carbón se modela mediante una, tres y siete fases con tamaños distintos. En el estado inicial, estas fases se diferencian únicamente por su diámetro. Sea cual sea el número de fases usadas en el modelo, se mantiene el tamaño promedio del carbón experimental.

Los diámetros del caso con siete tamaños de partícula de carbón corresponden a la distribución experimental; para el caso de tres fases se usa la distribución representada en la Figura 7.25a. Los tamaños de la distribución con tres fases son los mismos que se han utilizado anteriormente para el estudio de la influencia del tamaño en la Sección 7.4.1.

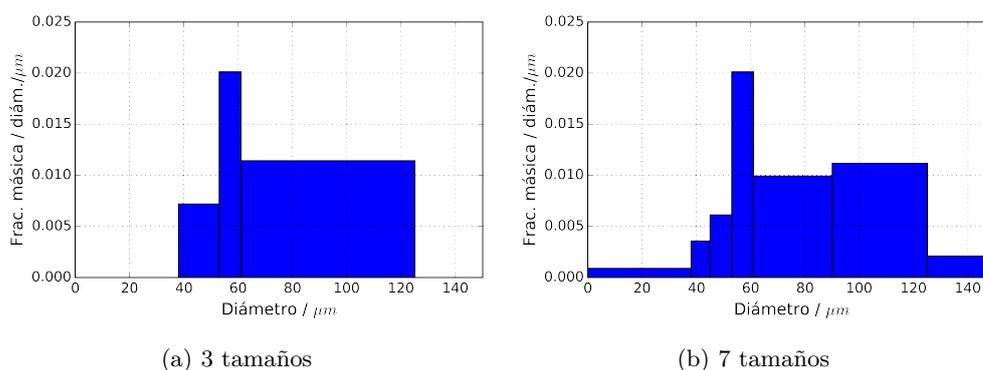


Figura 7.25: Distribuciones de diámetro de carbón para el análisis del efecto de la polidispersión

El diámetro medio y el resto de valores medios utilizados se definen en los casos con polidispersión como el promedio de los valores en cada fase ponderados con la fracción volumétrica de la fase.

El aumento del número de fases consideradas produce una disminución del tamaño del lecho (Figura 7.26). Los valores de fracción volumétrica media de gas y caliza muestran para todas las distribuciones de tamaño una variación con la altura similar (Figura 7.27) La segregación es completa en la parte alta del lecho cuando el modelado se realiza con

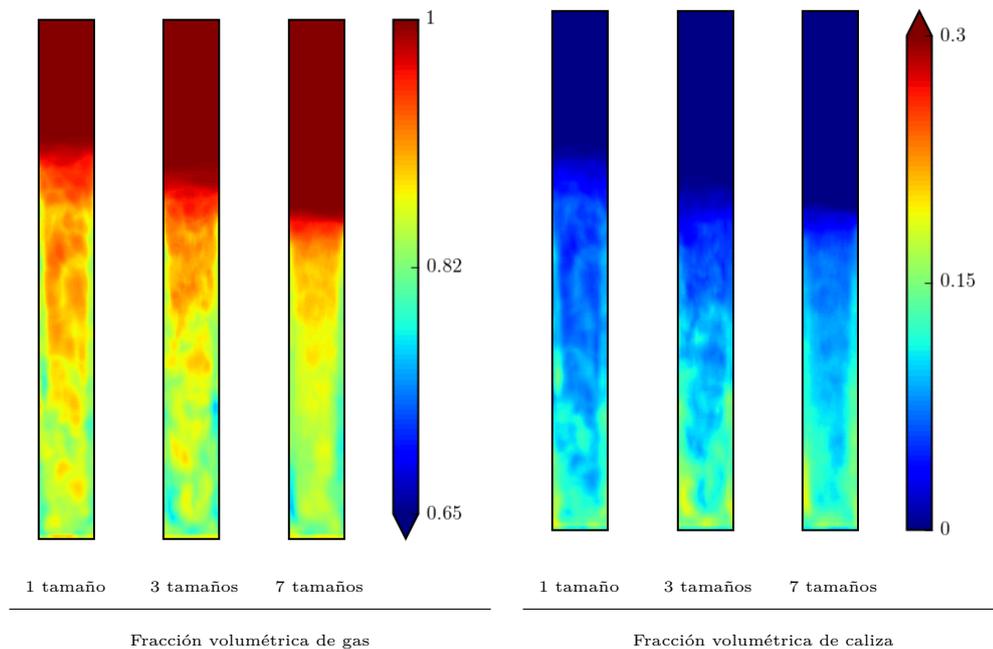


Figura 7.26: Contornos de fracción volumétrica media de gas y de caliza cuando la fase de carbón se modela con partículas de un tamaño, tres tamaños y siete tamaños

una distribución de carbón con un único tamaño y tres tamaños distintos, sin embargo la separación completa no se produce cuando se consideran siete tamaños.

La distribución de las fases sólidas correspondientes a los distintos tamaños del carbón se muestra en la Figura 7.28. Las partículas de menor tamaño se concentran en la parte superior del lecho, mientras que las de mayor tamaño se concentran en la parte inferior. Las dos fases con los menores tamaños de partícula de la distribución con siete tamaños presentan, debido a su consumo, una baja concentración (respecto a su valor en la entrada).

El aumento del número de tamaños en el modelado retrasa la formación de CO_2 (ver Figura 7.29); reduce la presencia de CH_4 , CO , y H_2 ; y el cambio a la zona reductora se produce a mayor altura (se eleva la altura de agotamiento del O_2). El penacho formado en el lateral de entrada de los sólidos es menos ancho en los casos que consideran polidispersión, y se observa una mayor asimetría.

El cambio en la reacción heterogénea modifica el comportamiento de la sección inferior del lecho. El modelo que utiliza una distribución de tamaños para la partícula de carbón reduce, respecto a un único tamaño, la tasa de reacción heterogénea (Figura 7.30). La

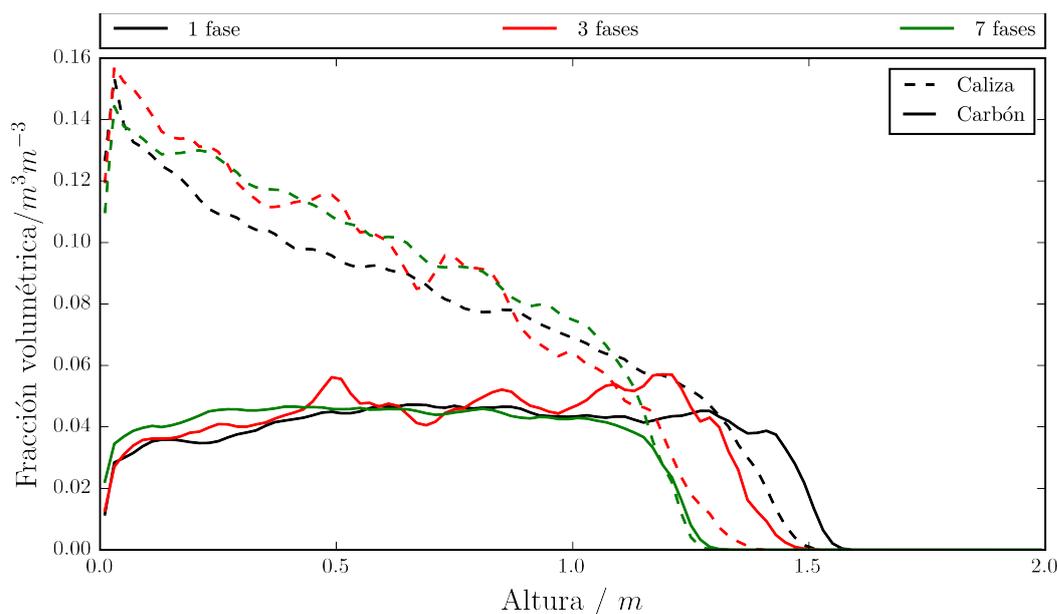


Figura 7.27: Evolución con la altura de la fracción volumétrica media del carbón, caliza, y gas

tasa global de la reacción heterogénea para el modelado con tres y siete tamaños es similar. La reducción de las tasas de reacción heterogénea y, por tanto, del gas liberado puede ser relacionada con la disminución observada del tamaño del lecho.

La tasa de devolatilización tiene distinto comportamiento (Figura 7.31). Este es similar para las distribuciones con uno y siete tamaños de partícula de carbón, pero la tasa máxima es menor y su dispersión es mayor para la de tres diámetros.

El valor de esta tasa, junto con las de otras reacciones donde interviene el H_2 , se muestra en las Figuras 7.32 y 7.33. La menor tasa de devolatilización para la distribución intermedia puede relacionarse con la menor penetración del sólido hacia el núcleo del lecho, que hace que los productos de devolatilización H_2 y CH_4 se concentren cerca de la pared frontal.

La concentración de H_2 es controlada por su formación por devolatilización y su consumo por oxidación. La distinta penetración del O_2 controla esta última. Los perfiles horizontales al nivel de la entrada muestran cómo la presencia de O_2 aumenta la tasa de oxidación para un mayor número de tamaños (Figuras 7.32). La Figura 7.33 captura este aumento de la tasa máxima media, y cómo el valor máximo se sitúa a mayor altura

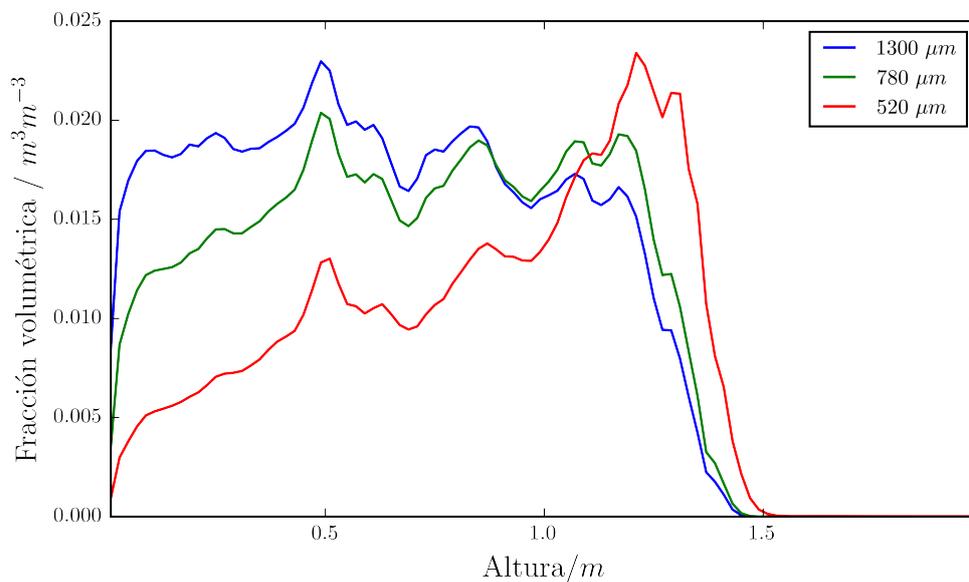
que la entrada de sólidos. Este retraso provoca que el cambio a producción neta de H_2 en el lecho se desplace en el mismo sentido.

La comparación de la composición del gas en la salida con datos experimentales se presenta en la Figura 7.34. La predicción de CO_2 y H_2 mejora progresivamente al aumentar el número de fases, desviándose la predicción del CO y del N_2 . Los valores de concentración predichos a la salida convergen al aumentar el número de fases (Figura 7.35). De esta convergencia se deduce que para una representación correcta de los productos a la salida del gasificador podría ser suficiente el uso tres tamaños para el carbón.

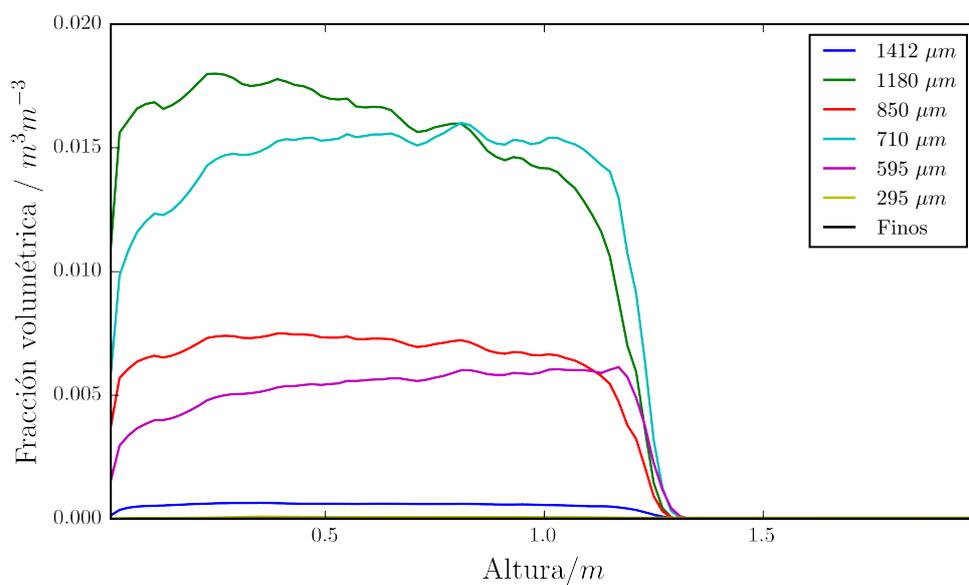
En resumen el modelo desarrollado es capaz de predecir la segregación de las distintas fases de carbón. El aumento de fases en la distribución reduce la tasa de reacción heterogénea y modifica la altura de penetración del O_2 . Este incremento reduce la cantidad de H_2 y CO a la salida.

Además entre los resultados para distribuciones con tres y siete tamaños de partícula de carbón se observa una convergencia en las tasas de reacción, en la composición del gas a la salida, y en los valores de la concentración de las especies químicas gaseosas en el lecho.

Las simulaciones realizadas sugieren que podría ser suficiente, para reducir el coste computacional, el utilizar únicamente tres fases (tamaños) para realizar el modelado del carbón. Sin embargo, esta reducción podría no ser adecuada para predecir adecuadamente el comportamiento fluidodinámico del lecho (la segregación de las fases y la altura del lecho).



(a) Tres tamaños



(b) Siete tamaños

Figura 7.28: Evolución de la fracción volumétrica media de cada fase de carbón para dos distribuciones con tres y siete fases de carbón con distinto tamaño de partícula

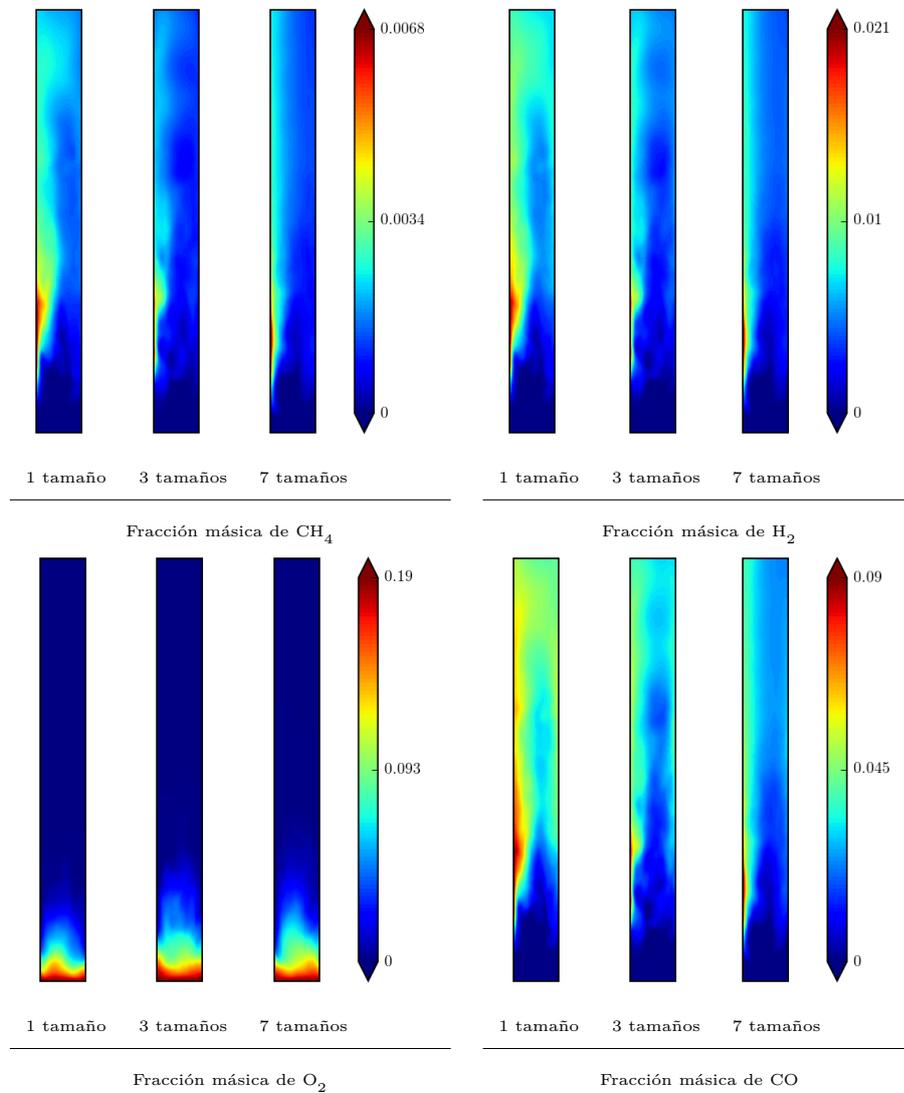


Figura 7.29: Contornos de fracción másica media de CH_4 , H_2 , O_2 y CO en el gas para distribuciones de carbón con partículas de un tamaño, tres tamaños y siete tamaños

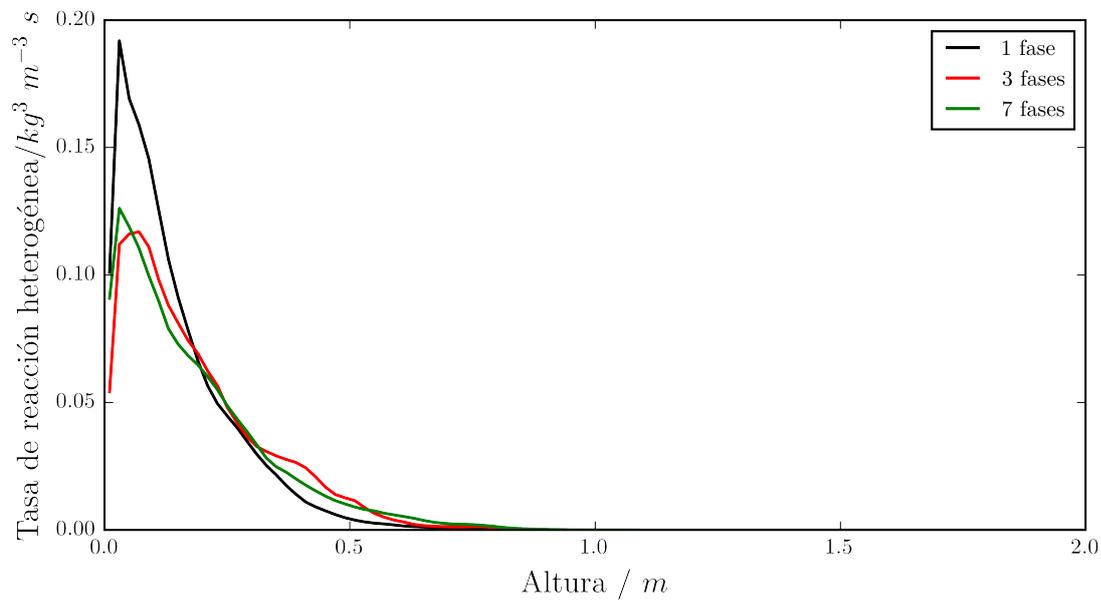


Figura 7.30: Evolución con la altura de la tasa media de reacción heterogénea

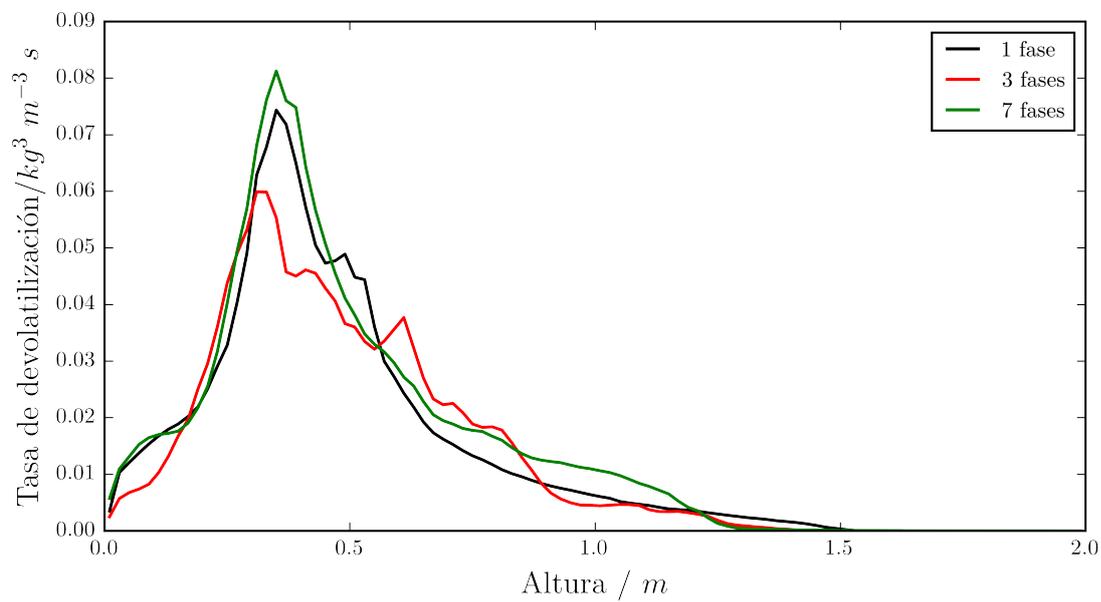
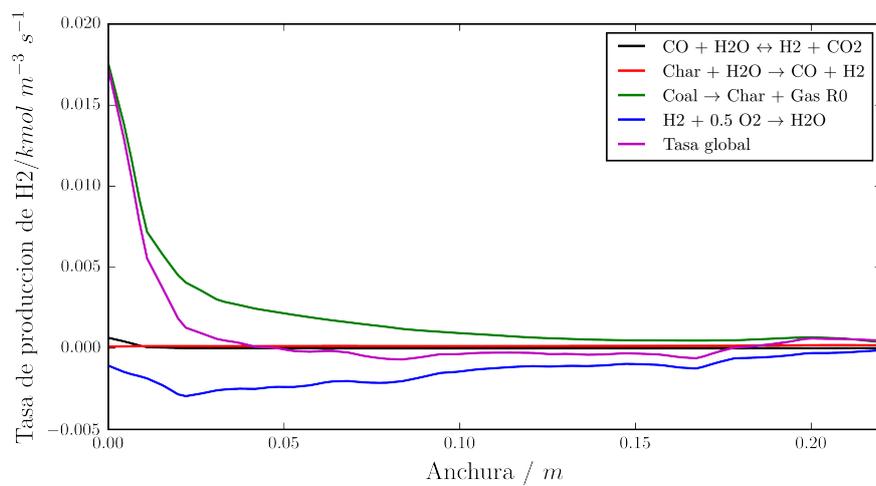
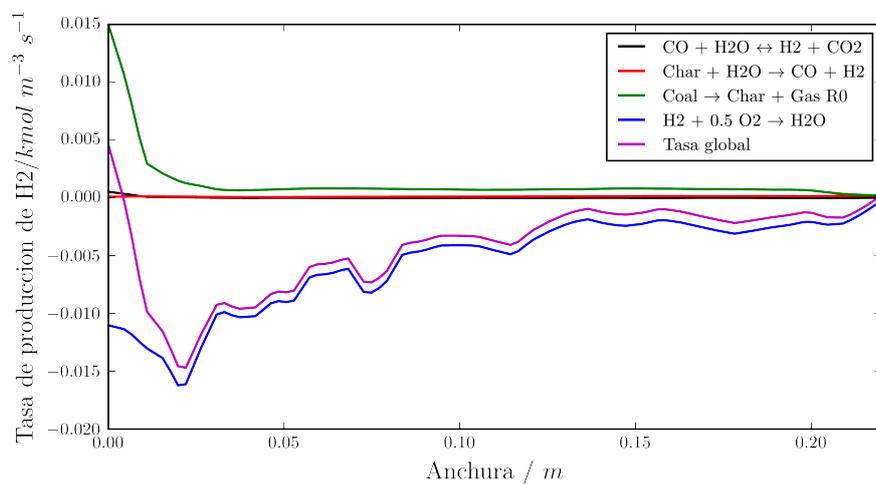


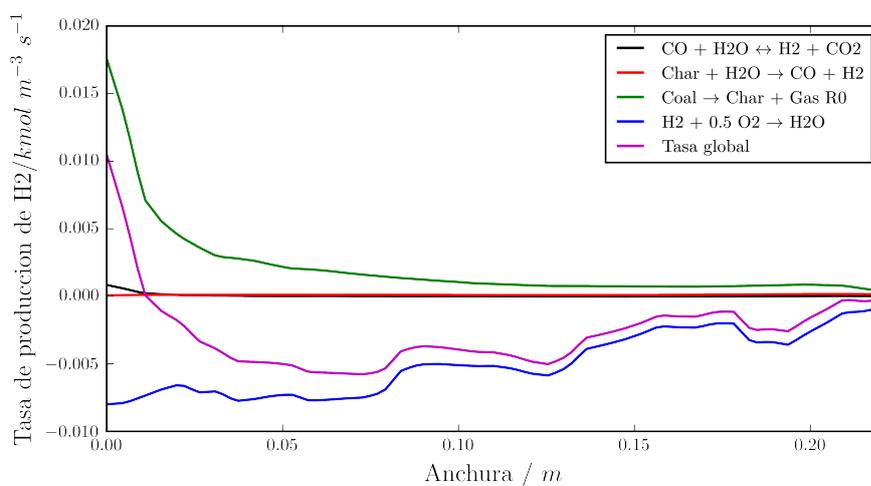
Figura 7.31: Evolución con la altura de la tasa media de devolatilización



(a) 1 tamaño



(b) 3 tamaños



(c) 7 tamaños

Figura 7.32: Perfil horizontal en la parte superior de la entrada de sólidos ($h = 0,36\text{m}$) de las tasas medias de reacción de H_2

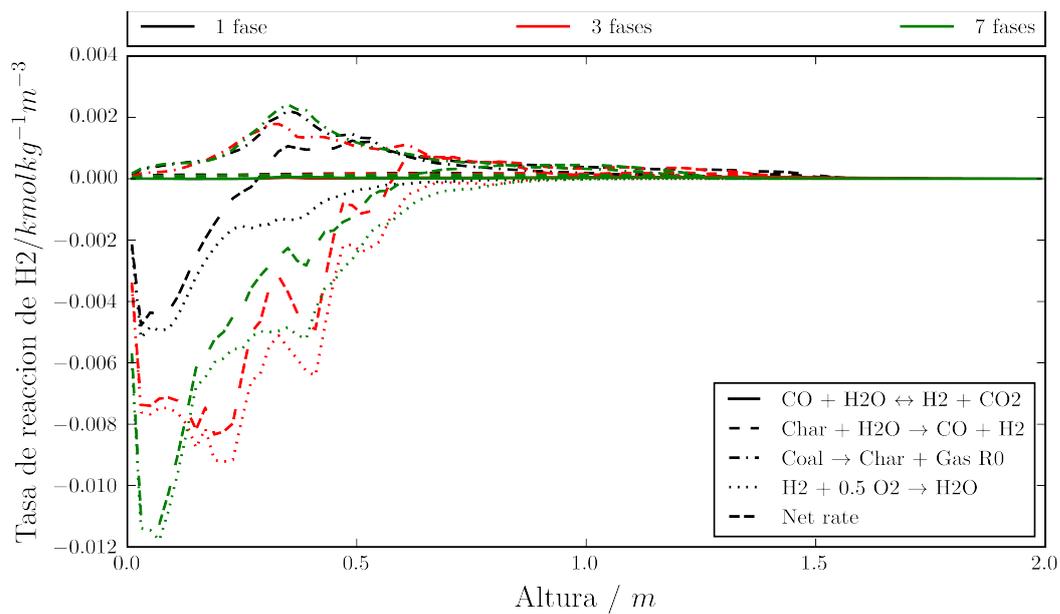


Figura 7.33: Evolución con la altura de las tasas medias de reacción de H₂

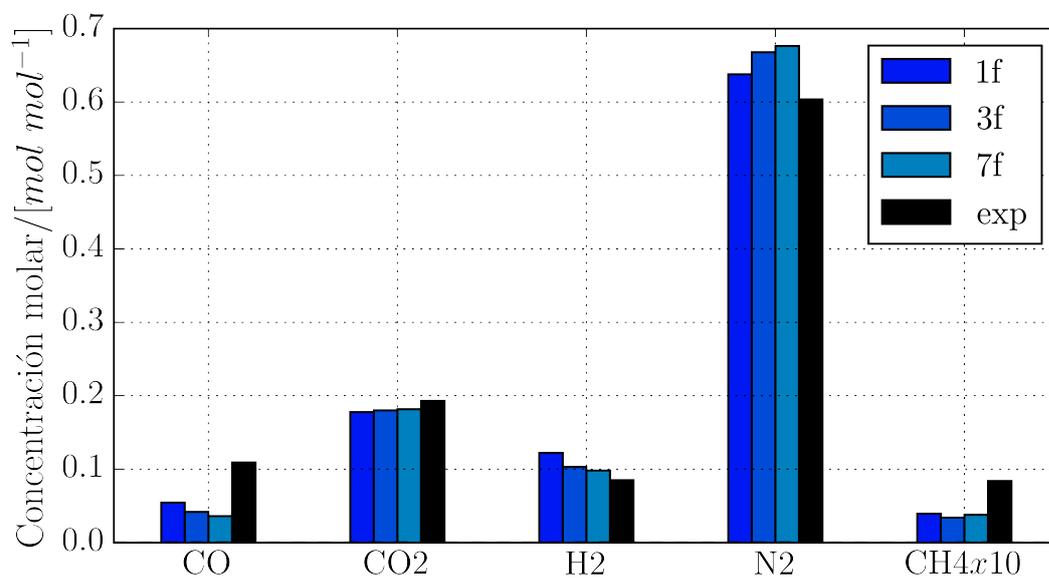
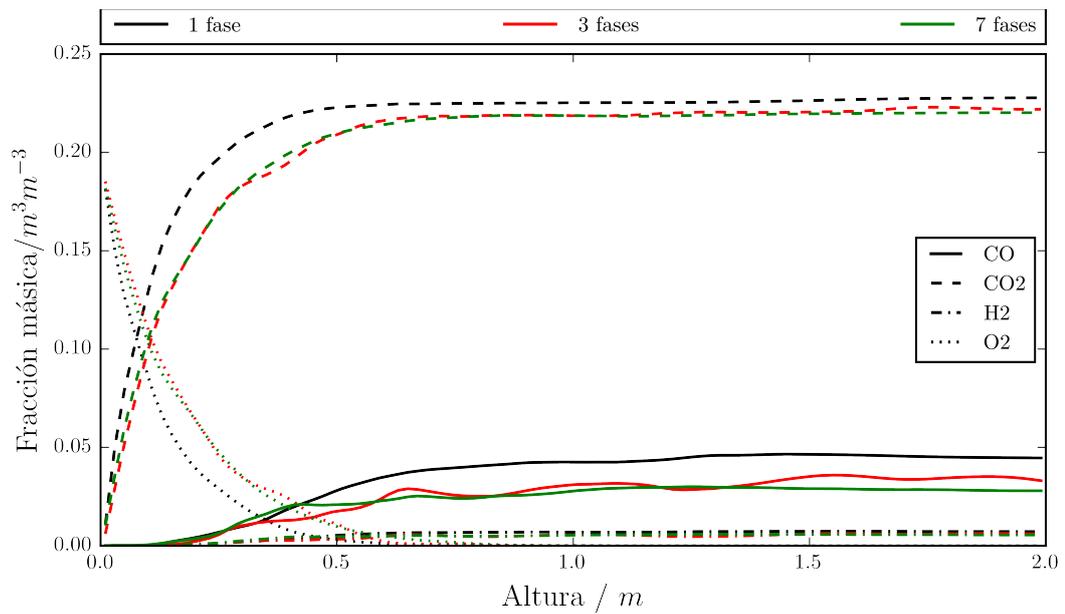
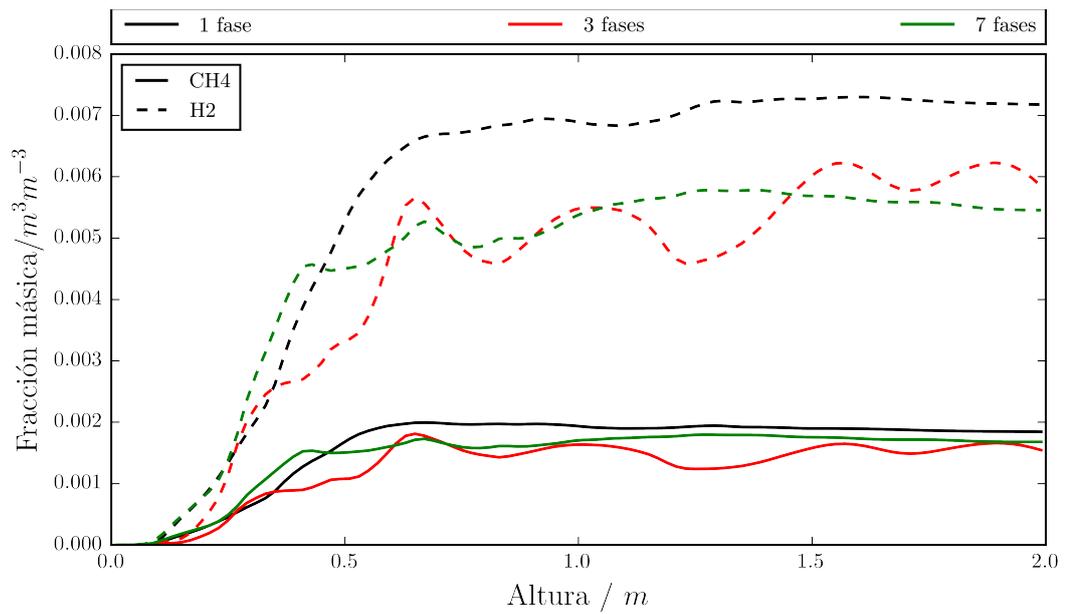


Figura 7.34: Comparación de valores experimentales con resultados computacionales para distintas distribuciones de tamaño de la partícula de carbón



(a) Especies químicas mayoritarias



(b) Especies químicas minoritarias

Figura 7.35: Evolución con la altura de la fracción molar media de las especies químicas O₂, CO₂, CO, H₂ y CH₄ en la fase gaseosa

7.4.3. Estudio de la influencia del modelado de la partícula carbón con tamaño variable

El tamaño de la partícula de carbón en un lecho fluido es variable, aunque habitualmente en su simulación numérica se suele considerar constante por simplicidad (o por la no disponibilidad de modelos adecuados). La transferencia de masa causada por la reacción heterogénea en la partícula puede reducir el tamaño de ésta.

En esta sección se considera que este proceso produce una reducción del tamaño de la partícula de carbón. Este cambio de tamaño se describe con el modelo *shadow* presentado en la Sección 3.4, y se analiza su efecto en el gasificador para las tres distribuciones de tamaño de la partícula presentadas en la Sección 7.4.2. El modelo usado para el tamaño en esta sección es, en consecuencia, un modelo de partícula decreciente (con densidad variable).

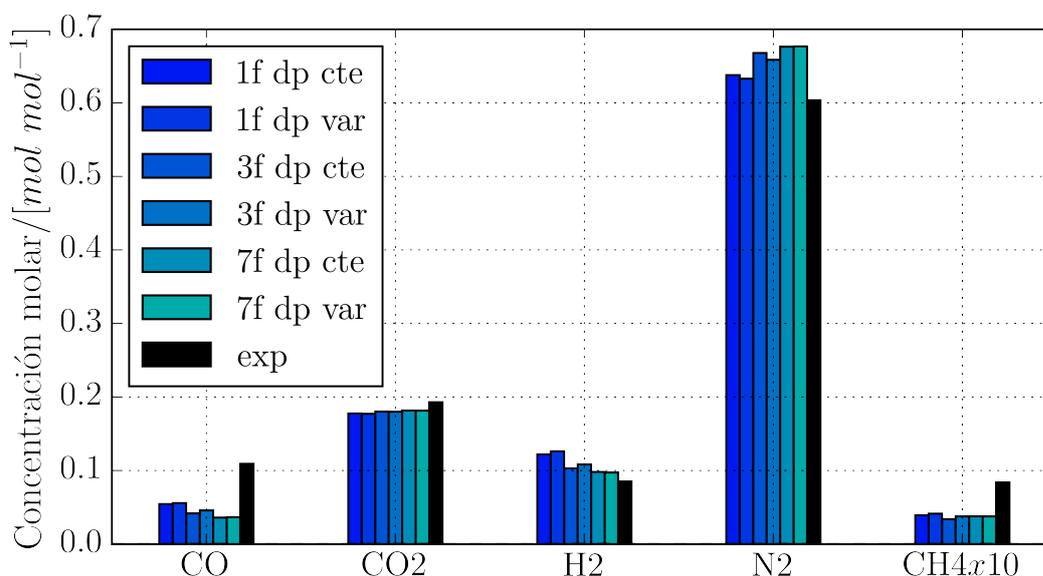


Figura 7.36: Comparación de valores experimentales con resultados computacionales para tamaño de partícula constante y variable

Los valores de las fracciones volumétricas promedio de las especies del gas a la salida, comparados con los casos de tamaño constante, se presentan en la Figura 7.36. La tendencia en la mejora de los resultados obtenidos no es concluyente, aunque la variación al incluir este modelo es significativa y mayor para una menor polidispersión del carbón. En

los resultados obtenidos para la distribución con siete tamaños de partícula de carbón la influencia del modelo es pequeña.

El consumo de la partícula de carbón reduce su tamaño al considerar que evoluciona con el tiempo. El menor tamaño favorece el arrastre de las partículas por el gas, y en consecuencia se produce una (ligera) expansión del lecho. El efecto en la segregación de los sólidos es, en general, pequeño (ver Figura 7.37). Las mayores diferencias se producen en la zona de la entrada de los sólidos (ver Figura 7.38). Entre estas destaca el aumento de la concentración de sólidos en la zona de la entrada al aplicarse el modelo de tamaño variable.

Las tasas de devolatilización y de reacción heterogénea aumentan ligeramente al considerar variación del tamaño de partícula (ver Figuras 7.39 y 7.40).

El cambio en la reacción química se refleja en la evolución con la altura de la fracción másica de CO_2 , donde para tamaño variable convergen los valores a la salida para las distribuciones con uno y tres tamaños (Figuras 7.41 y 7.42). El comportamiento de las especies minoritarias (CH_4 y H_2), en cambio, muestra una convergencia de las concentraciones en el gas a la salida para las distribuciones con tres y siete tamaños de partícula constantes y variables (ver Figura 7.43).

Las tasas medias de formación de las especies químicas CH_4 y H_2 se muestran en las Figuras 7.44 y 7.45. La oxidación media de CH_4 se produce en la parte más baja del lecho. Tras esta zona, en el ascenso, la disminución de la magnitud de la tasa de esta reacción es más rápida que la del caso de tamaño constante de la partícula. Las tasas medias de reacción para tres tamaños variables de partícula se aproximan a las de un único tamaño variable. La diferencia predicha entre las tasas obtenidas con tres y siete tamaños variables de partícula indica que podría no ser suficiente el uso de tres tamaños de partícula para una buena predicción de la reacción química.

En conclusión, el modelo de tamaño de partícula de carbón variable tiene mayor importancia cuando el carbón se modela utilizando un menor número de fases. La mayor influencia es en la zona de entrada, donde aumenta la concentración de carbón. El tamaño variable afecta a las reacciones de oxidación, y a la formación de CO_2 . Su aplicación produce cambios significativos, para las distribuciones con uno y tres tamaños de carbón, en la predicción de las especies químicas a la salida del gasificador.

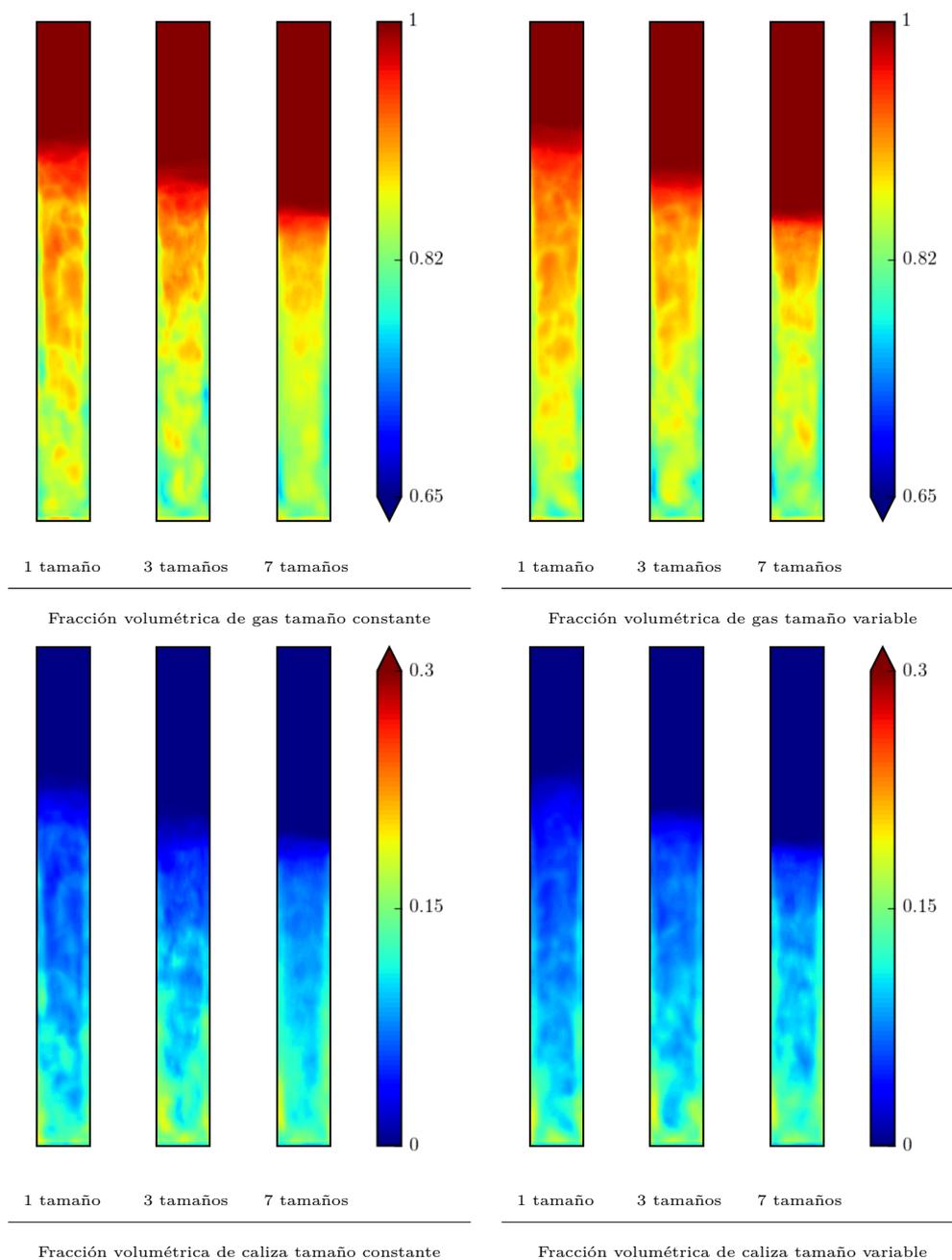
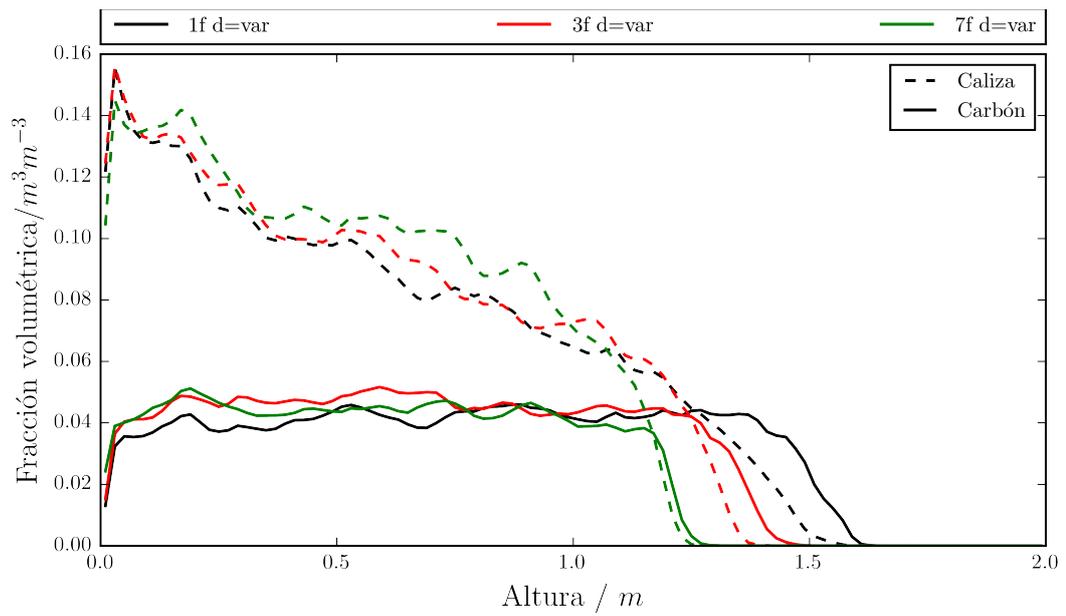
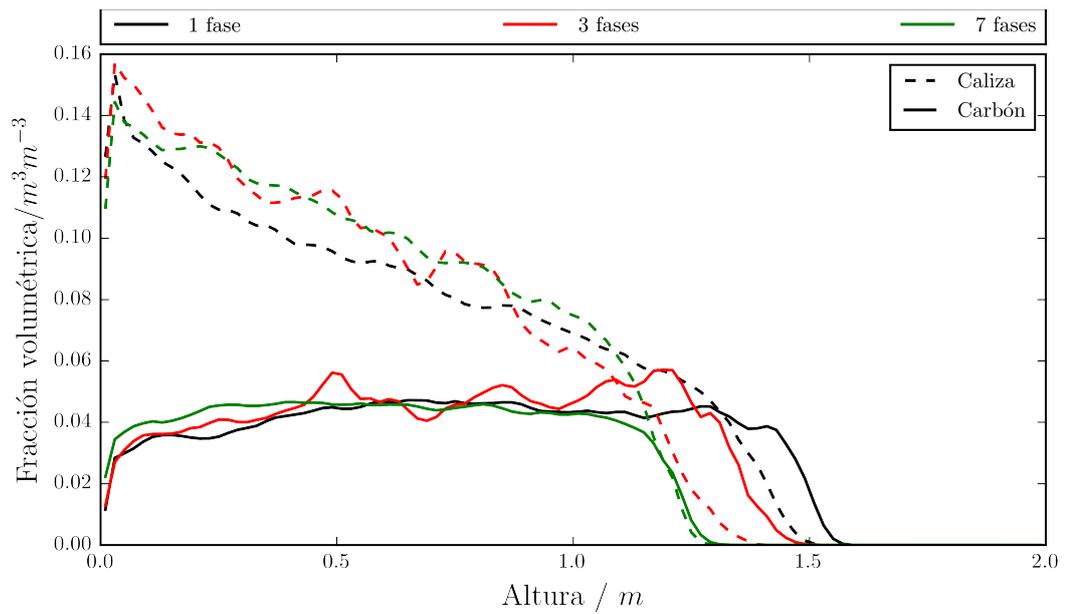


Figura 7.37: Contornos de fracción volumétrica media de gas. Comparación de tamaño de partícula de carbón constante y variable, para tres distribuciones de su tamaño: un único tamaño, tres tamaños y siete tamaños de partícula

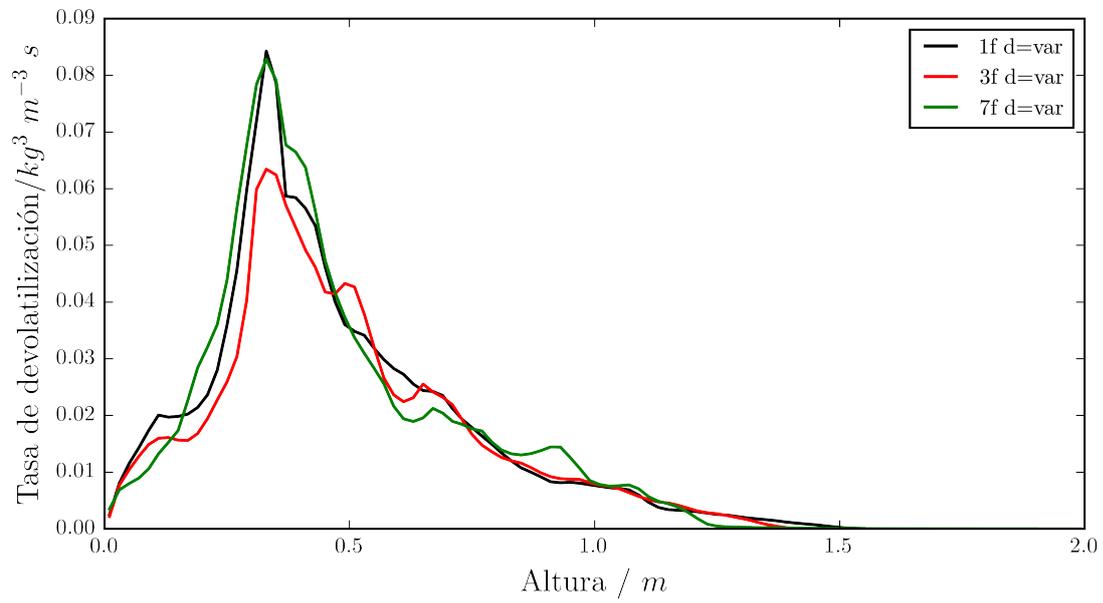


(a) Tamaño variable

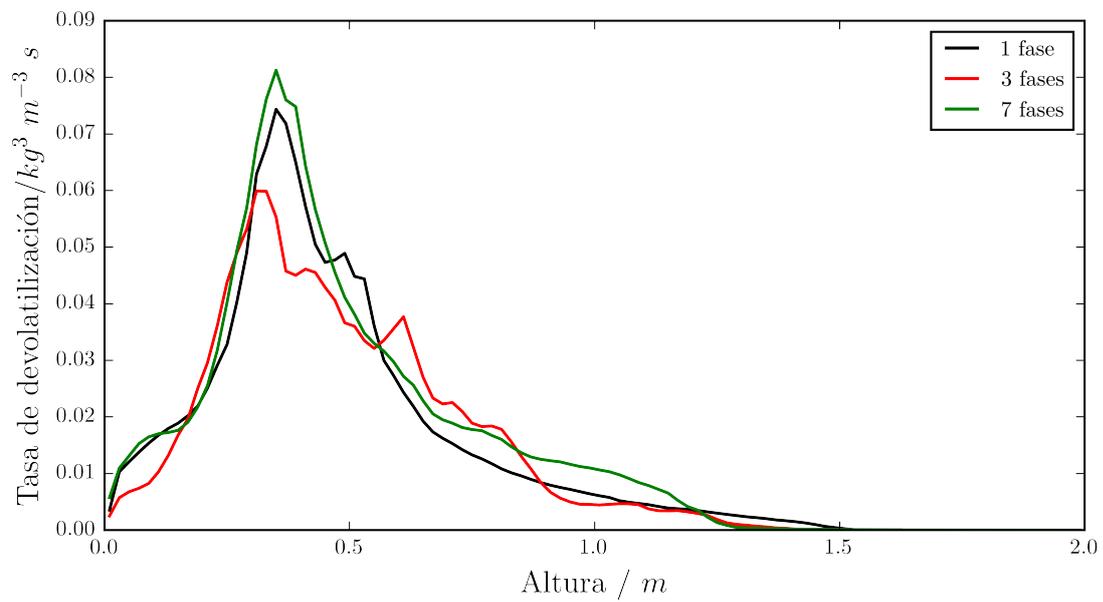


(b) Tamaño constante

Figura 7.38: Evolución con la altura de la fracción volumétrica media de carbón y caliza

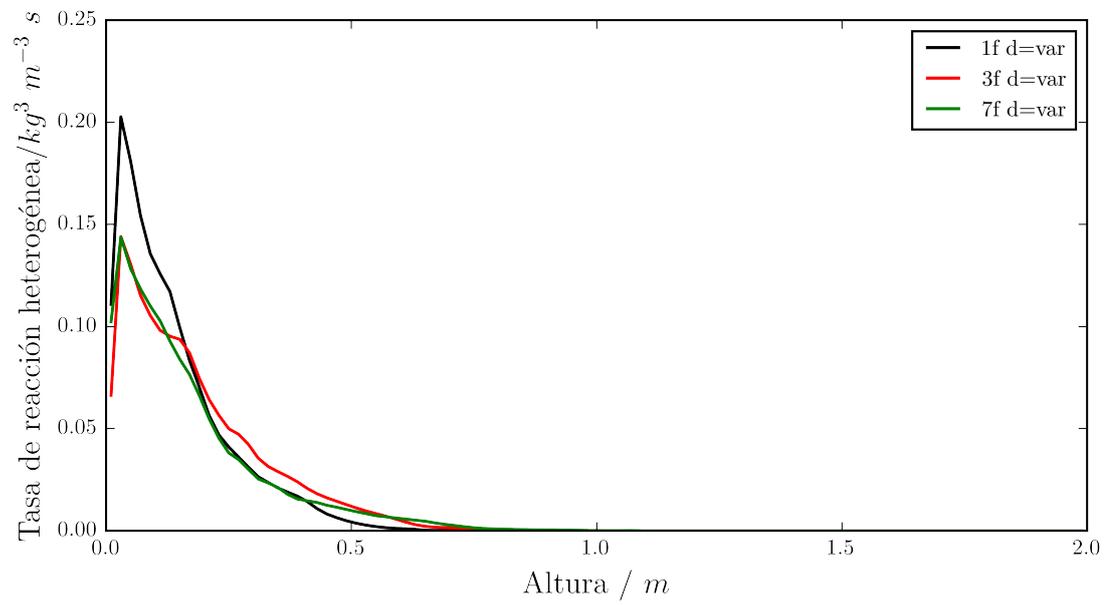


(a) Tamaño variable

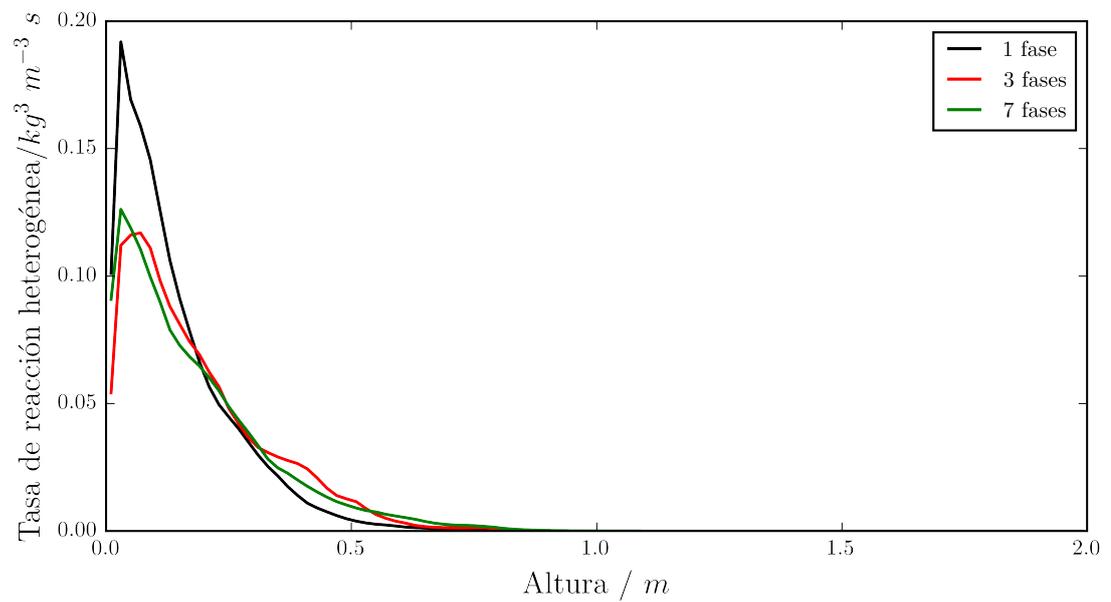


(b) Tamaño constante

Figura 7.39: Evolución con la altura de la tasa media de devolatilización



(a) Tamaño variable



(b) Tamaño constante

Figura 7.40: Evolución con la altura de la tasa media de reacción heterogénea

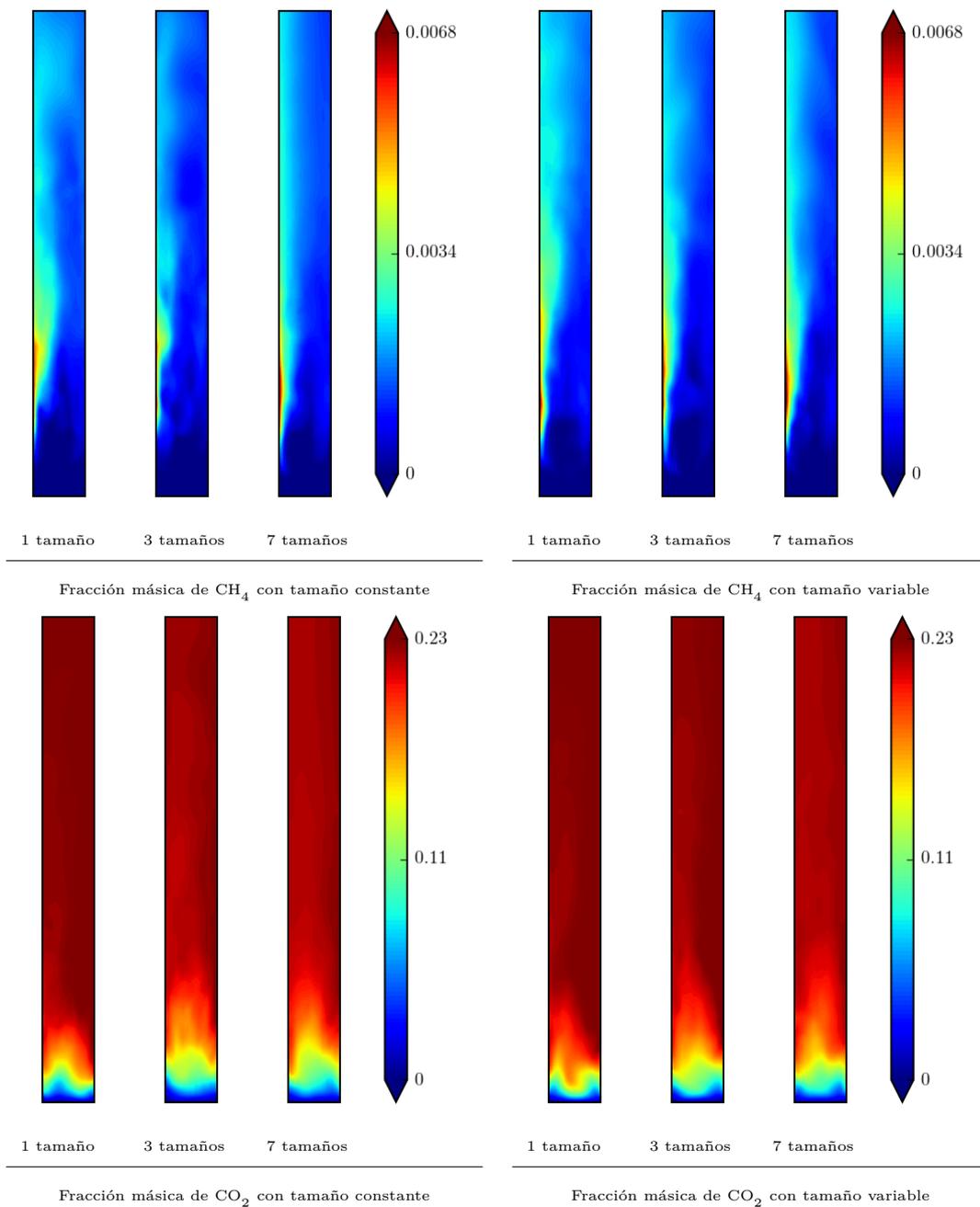
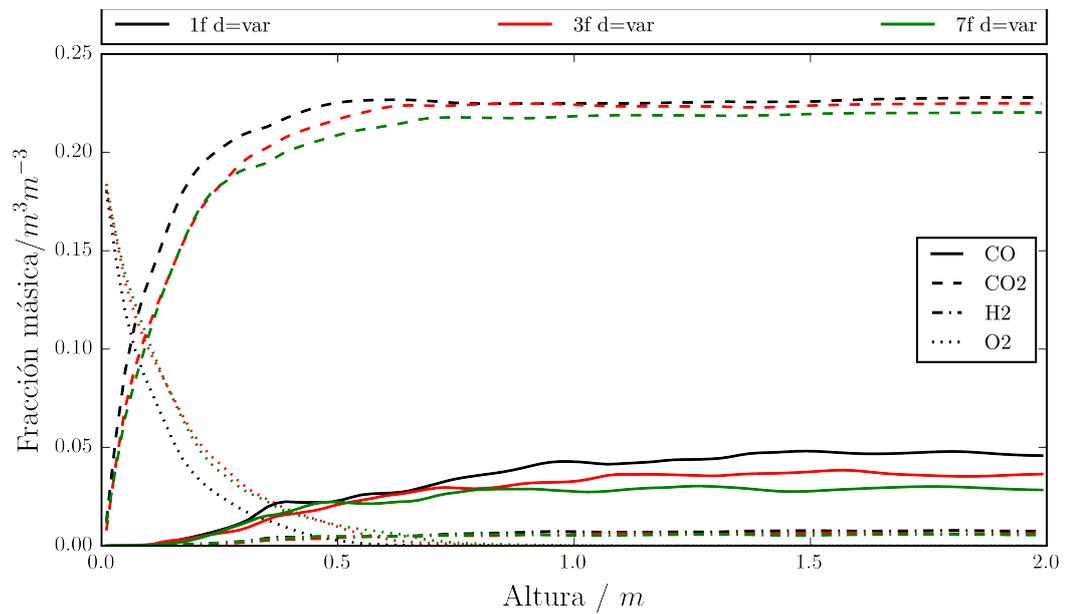
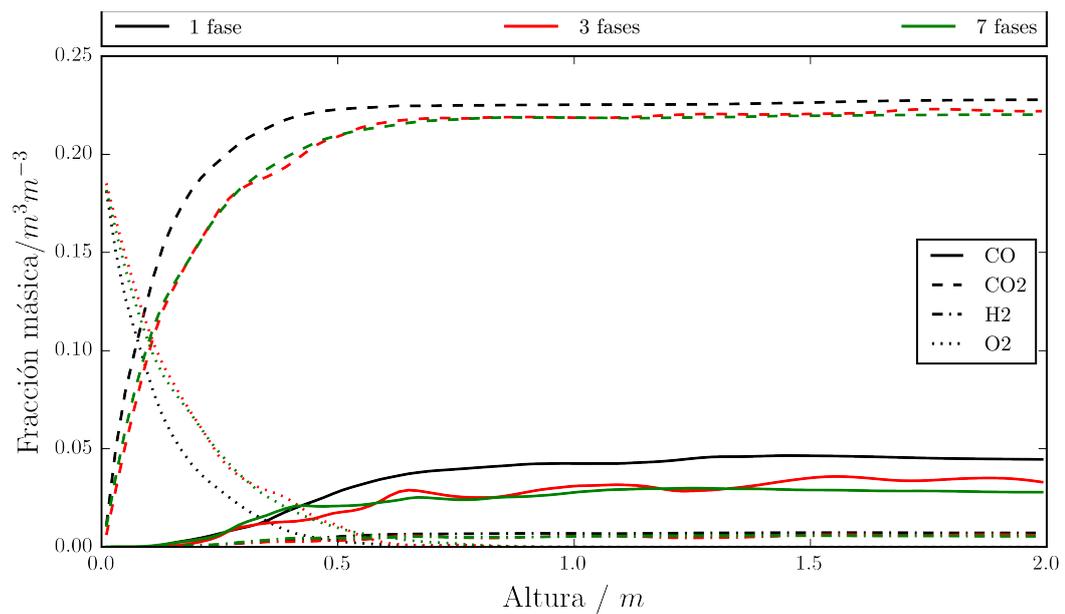


Figura 7.41: Contornos de fracción másica media de CH_4 y CO_2 . Comparación de tamaño de partícula de carbón constante y variable, para tres distribuciones de su tamaño: un único tamaño, tres tamaños y siete tamaños de partícula

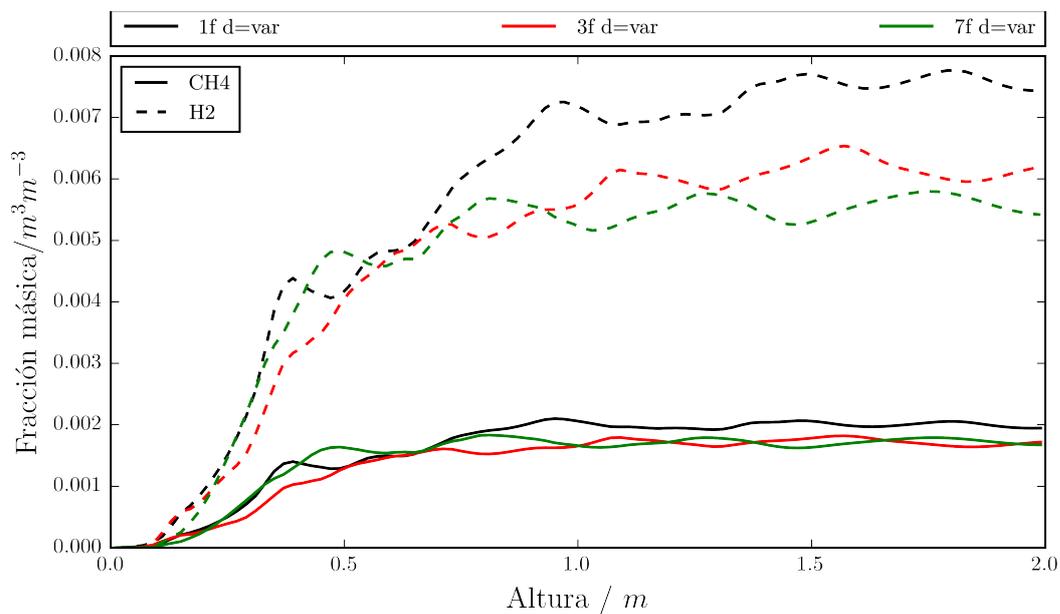


(a) Tamaño variable

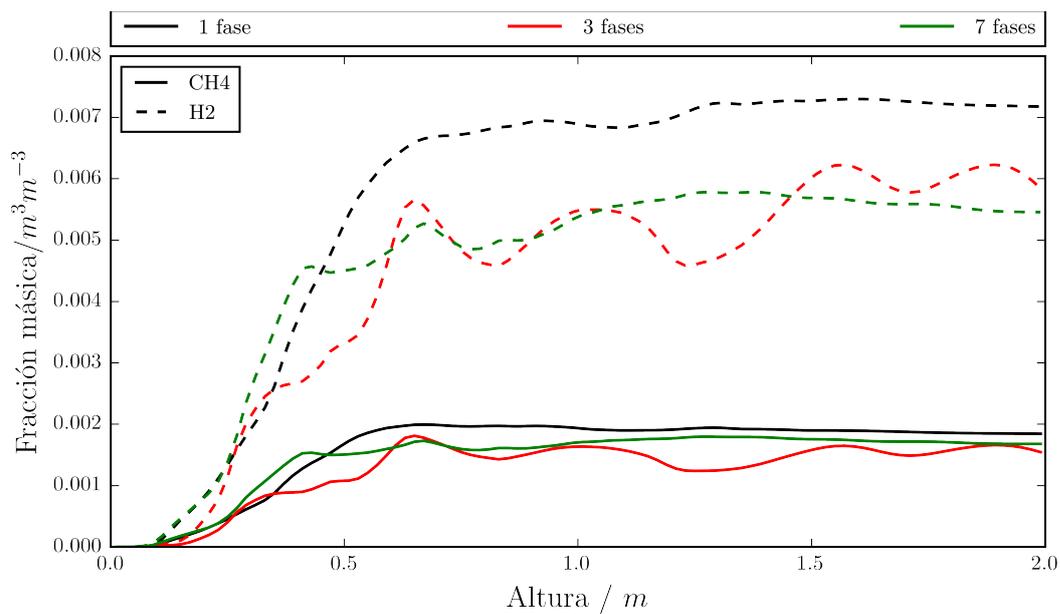


(b) Tamaño constante

Figura 7.42: Evolución con la altura de la fracción molar media de las especies químicas mayoritarias O₂, CO₂, CO, y H₂ en la fase gaseosa

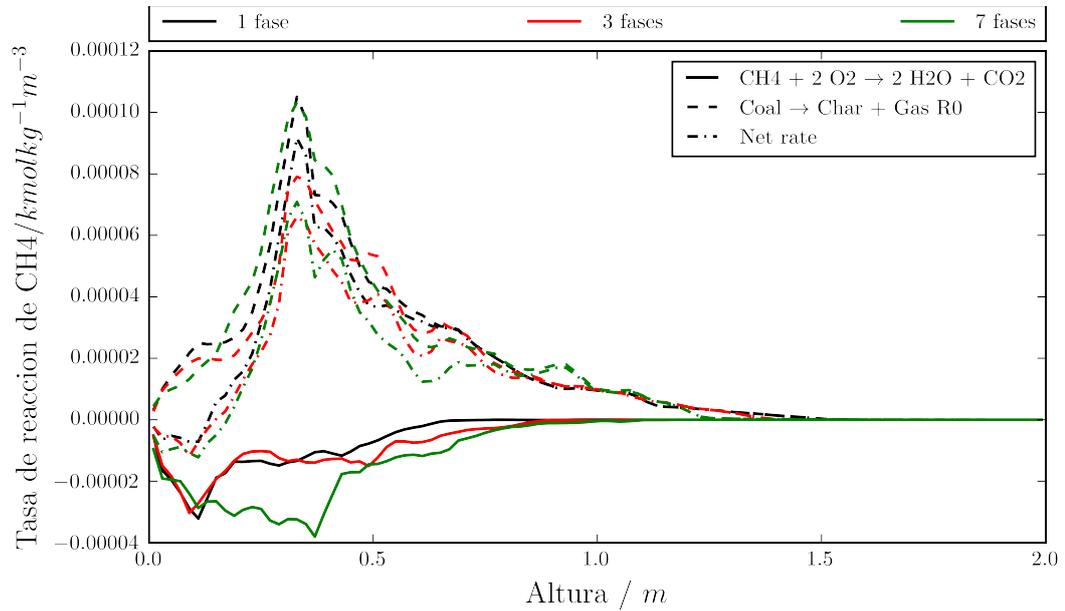


(a) Tamaño variable

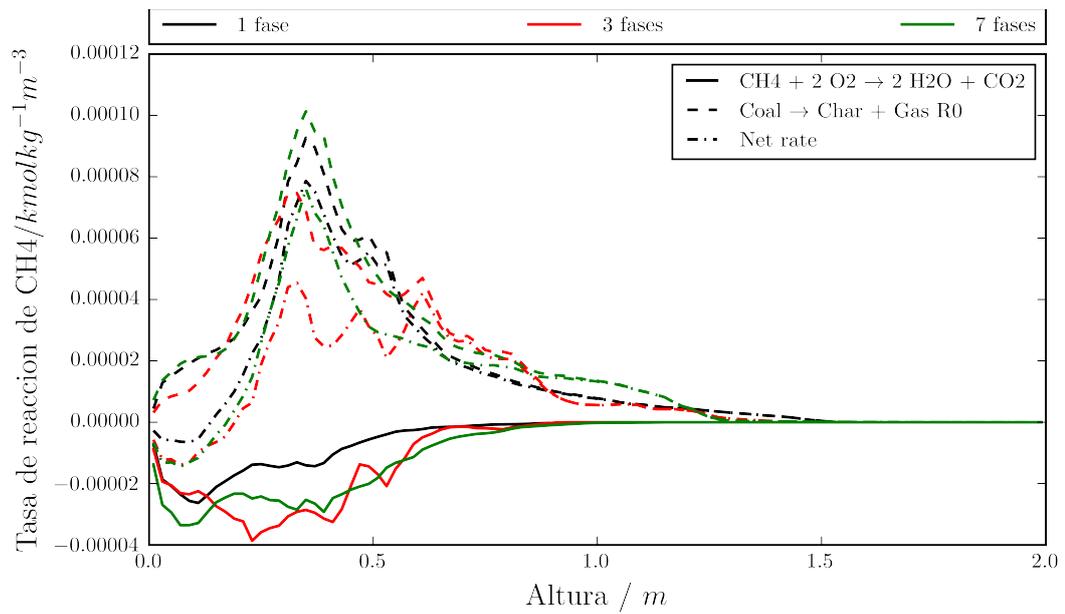


(b) Tamaño constante

Figura 7.43: Evolución con la altura de la fracción másica media de las especies químicas minoritarias CO , y CH_4 en la fase gaseosa

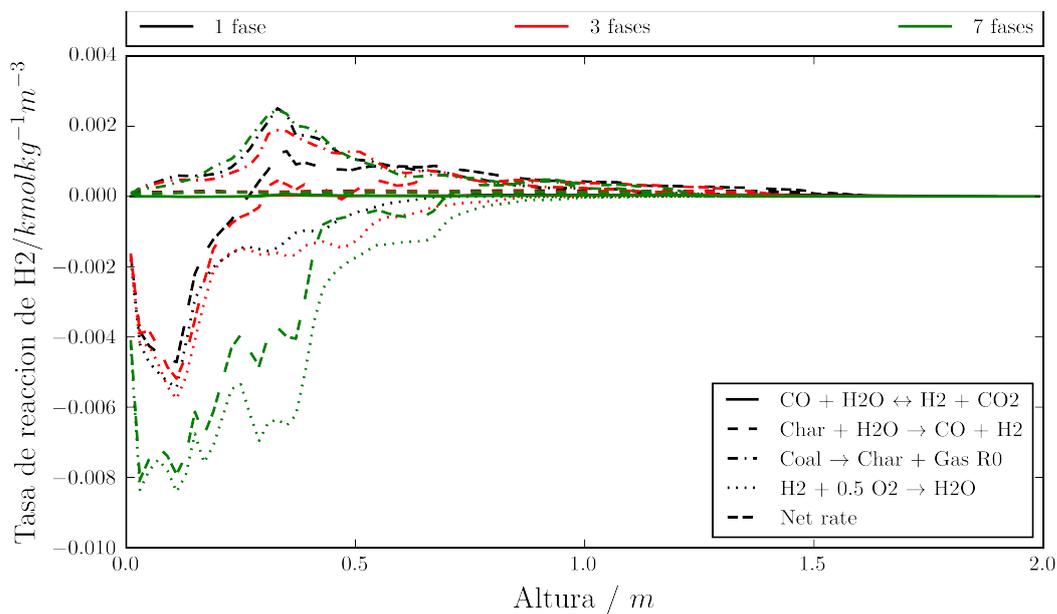


(a) Tamaño variable

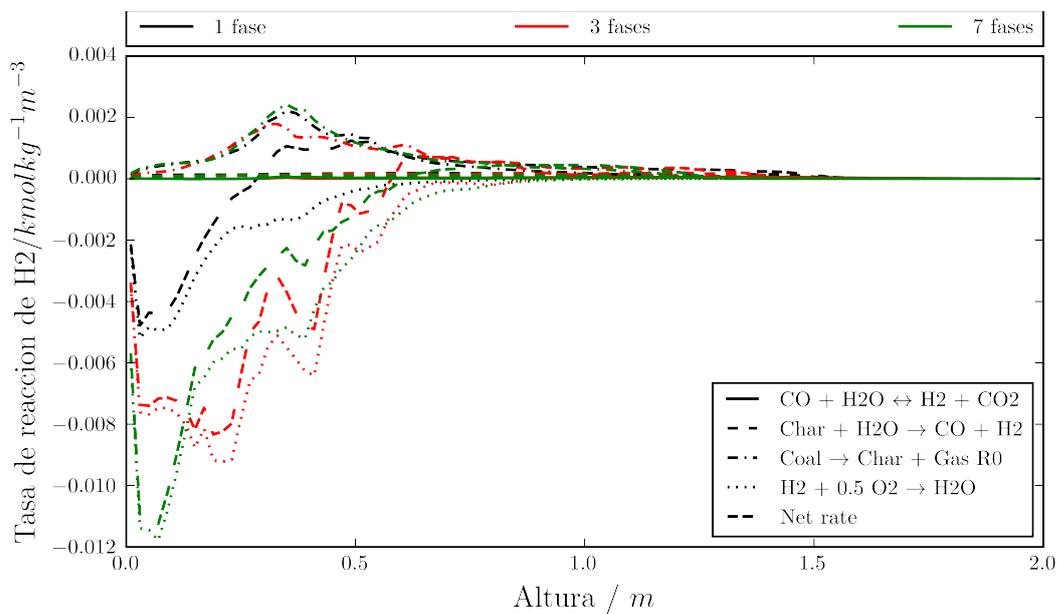


(b) Tamaño constante

Figura 7.44: Evolución con la altura de las tasas medias de reacción para el CH_4



(a) Tamaño variable



(b) Tamaño constante

Figura 7.45: Evolución con la altura de las tasas medias de reacción para el H_2

7.5. Estudio de la influencia de la presencia de la reacción química

En esta sección se analiza brevemente el efecto de la reacción química en el comportamiento fluidodinámico del lecho.

Para ello, se han llevado a cabo simulaciones con las tres distribuciones de tamaño de carbón presentadas en la Sección 7.4.2 tratando las partículas de carbón como inertes, es decir, sin considerar la reacción química.

A continuación se describe su efecto en los campos de fracción volumétrica y de velocidad.

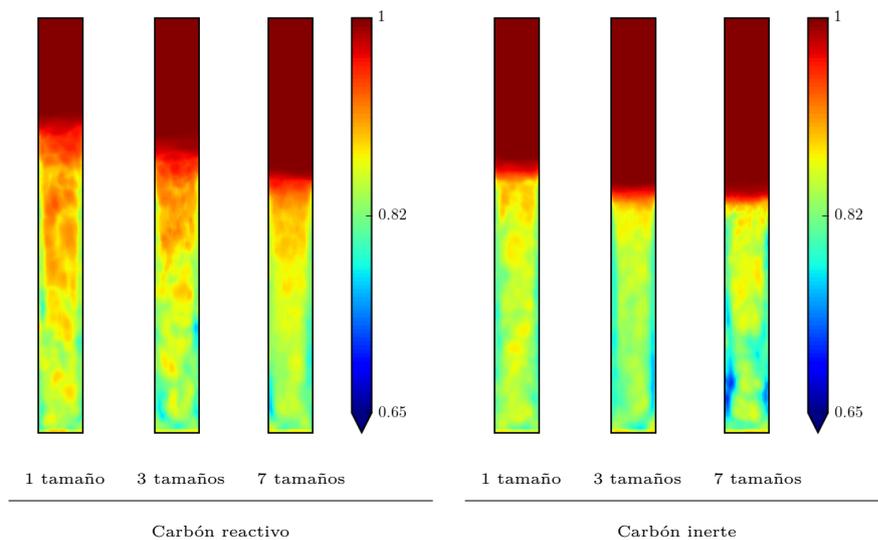


Figura 7.46: Contornos de fracción volumétrica media de gas para distribuciones de carbón con partículas de un tamaño, tres tamaños y siete tamaños

La Figura 7.46 muestra los contornos de fracción volumétrica media de gas y de caliza obtenidos en los casos reactivos e inertes para tres distribuciones de tamaño de carbón. Se observa que el tamaño del lecho es mayor cuando hay reacción química, debido principalmente al efecto de los gases liberados en la combustión de las partículas y al de la expansión térmica del gas causada por su calentamiento.

La mayor diferencia está en la concentración de sólido en la sección superior del lecho. En el caso reactivo la concentración de sólido en la zona central es más baja, y se forma un patrón similar al de núcleo-anillo. Además en la sección inferior, junto a la entrada lateral, se observa en los lechos reactivos una menor concentración de sólidos (y una mayor concentración de gas) debido al consumo de carbón.

La Figura 7.47 muestra la comparación para el lecho reactivo e inerte de la fracción volumétrica de las fases sólidas con la altura del lecho para las tres distribuciones de tamaño. La fracción volumétrica de carbón con la altura es aproximadamente uniforme y similar en los casos reactivo e inerte con la misma distribución de tamaño; sin embargo su valor es menor para el caso reactivo (debido a su consumo y al mayor tamaño del lecho).

El tamaño de la zona totalmente segregada sobre el lecho de caliza parece independiente de la distribución utilizada en el caso de carbón inerte, pero no es así en el caso reactivo (ver Sección 7.4.2).

El campo de velocidad presenta asimetrías laterales (ver Figura 7.48). Estas asimetrías son mayores para el caso reactivo, y para la sección superior del lecho. La zona de circulación en el caso no reactivo es más extensa y más simétrica. El flujo no reactivo es ascendente por la parte central y descendente por los laterales del reactor. Sin el efecto de la reacción química en la zona de la entrada de sólidos el flujo es descendente. En esta misma zona en presencia de la reacción química su dirección es ascendente.

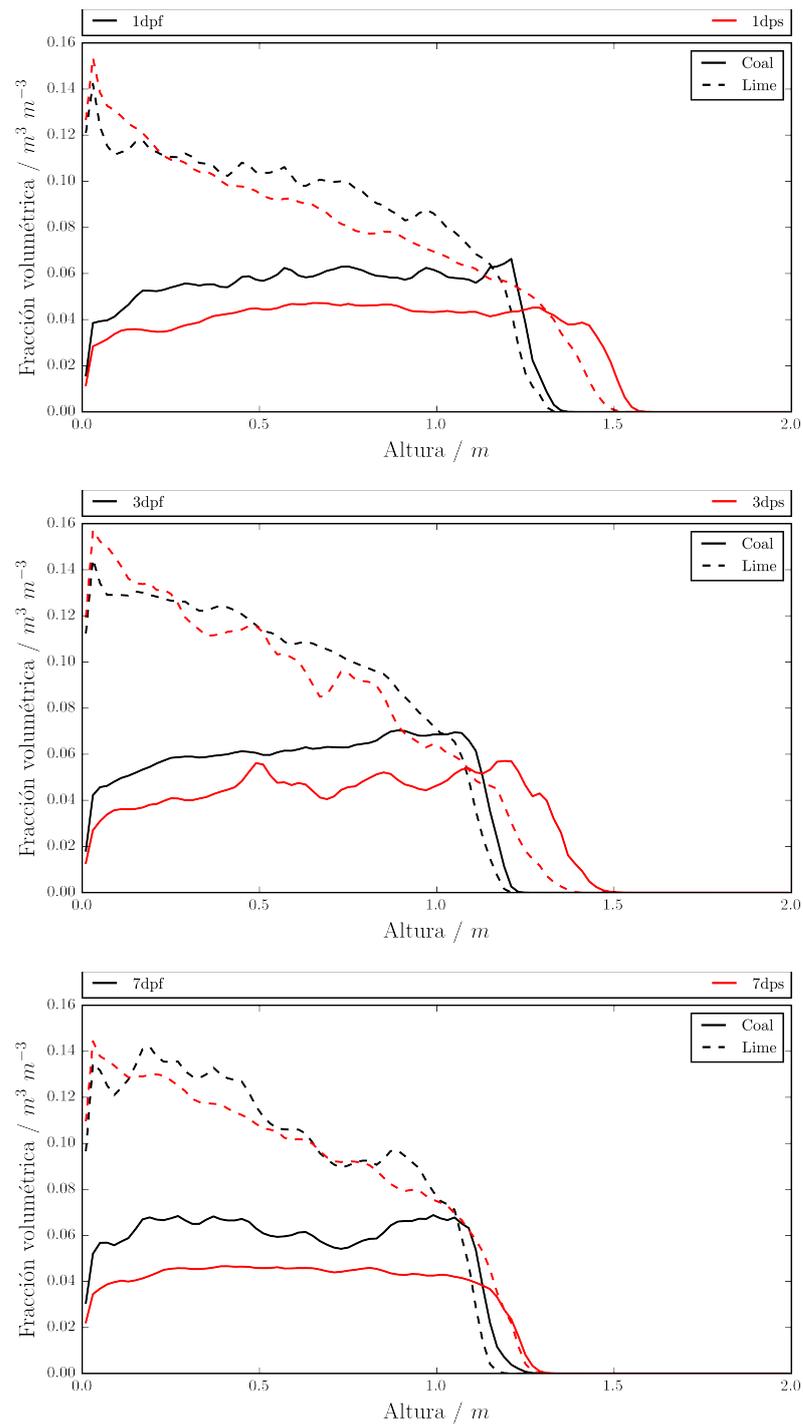


Figura 7.47: Evolución con la altura de la fracción volumétrica media de sólido para el lecho reactivo (—) y modelado como inerte (—) utilizando distribuciones de partículas de carbón con un único tamaño (arriba), tres tamaños (medio), y siete tamaños (debajo)

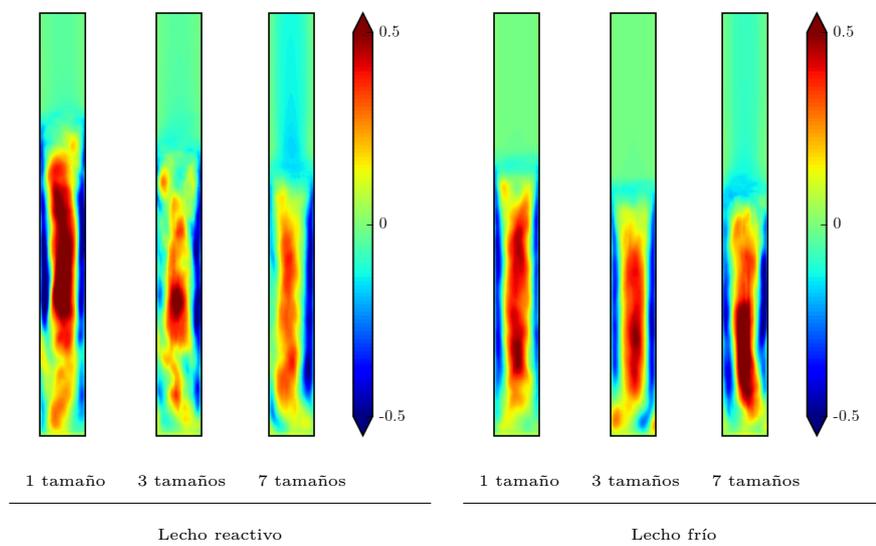


Figura 7.48: Contornos de la componente vertical de la velocidad media de caliza para distribuciones de carbón con partículas de un tamaño, tres tamaños y siete tamaños

7.6. Conclusiones

En este capítulo se ha aplicado el algoritmo completo propuesto en esta Tesis a la simulación del gasificador de carbón en lecho fluido presentado por Ocampo et al. [151]. La descripción del carbón reactivo se realiza mediante modelos para el calentamiento, el secado, la devolatilización, la combustión y la gasificación. El efecto de considerar un tamaño variable de la partícula de carbón se ha estudiado mediante la incorporación, a estos modelos usados habitualmente, del modelo *shadow* propuesto por Spalding [197] (Sección 3.4).

El modelo se ha validado comparando los resultados de la simulación para cuatro configuraciones de operación con las medidas disponibles a la salida del gasificador [40]. Los resultados numéricos de la simulación concuerdan razonablemente bien con los datos experimentales. Además en su validación se han comparado con los de la simulación numérica mediante distintos modelos de otros cinco autores disponibles en la literatura [11, 53, 183, 226, 240]. La comparación de las predicciones de los autores consultados muestra algunas diferencias en su comportamiento fluidodinámico y químico. Este trabajo presenta la mayor concordancia con la descripción presentada por Shuai et al. [182]. La precisión de la predicción realizada en esta Tesis, sin ningún ajuste en el modelado químico, es similar a la obtenida por el resto de autores.

La segregación entre los sólidos sólo puede modelarse si los sólidos se simulan como fases separadas de distinto diámetro/densidad. De los modelos utilizados por los otros autores considerados sólo dos son capaces de simularla. Además el modelado del carbón en esta Tesis como una fase multicomponente permite el modelado de la evolución de la densidad de la fase sólida, frente a los autores consultados que consideran su densidad constante. Los resultados obtenidos muestran que una predicción adecuada de zonas con presencia de devolatilización, como las entradas de sólido, puede requerir el considerar variable la densidad de sólido.

La división del gasificador en zonas ha permitido analizar las zonas de reacción en el lecho. Brevemente, la devolatilización se produce principalmente cerca de la entrada de sólidos y en la pared frontal. Las especies químicas que se producen principalmente por devolatilización, como CH_4 o H_2 , se concentran en la misma zona. En la parte inferior del lecho se produce la oxidación de las especies químicas gaseosas y la combustión heterogénea de *char*. A partir de la altura del agotamiento del oxígeno (principalmente) por estas reacciones, las reacciones de gasificación del sólido dominan la transformación del carbón.

La reducción del tamaño de partícula monodispersa aumenta el tamaño del lecho. El

aumento está causado por el doble efecto que tiene el incremento del ratio área volumen (que se produce con la disminución del tamaño): (i) incrementa la relación arrastre peso, y (ii) aumenta la cantidad de gases liberados por la reacción heterogénea. El aumento de las tasas de reacción heterogénea reduce el tamaño de la zona oxidante del lecho, aumenta la gasificación e incrementa la producción de CO y H₂

La capacidad del algoritmo de tratar múltiples fases se ha utilizado para estudiar la influencia de la polidispersión en el tamaño de las partículas de carbón. Las simulaciones realizadas con las distribuciones de varios tamaños de las partículas de carbón permiten capturar adecuadamente la segregación entre los distintos tamaños de partícula en un flujo multisólido (con cuatro y ocho sólidos).

El efecto más visible al añadir distintas fases es la variación en la altura de lecho, pero también se modifica el comportamiento cerca de la entrada de sólidos, disminuye la altura de penetración del O₂ y se reduce la tasa global de combustión heterogénea.

Los resultados del aumento del número de tamaños en la distribución muestra una convergencia de las tasas de reacción, y de los valores de la concentración de las especies químicas en el lecho y a la salida del gasificador. Estos resultados sugieren que es suficiente para una predicción adecuada del comportamiento químico del lecho el utilizar una distribución con tres tamaños para la partícula de carbón. Sin embargo, esta reducción puede no ser adecuada para predecir su fluidodinámica (*e.g.* la segregación de las fases, la circulación de sólidos, o la altura de lecho).

El modelo de tamaño variable tiene un efecto muy pequeño para la distribución de siete tamaños de partícula de carbón, sin embargo su efecto es significativo cuando el carbón se modela con un único tamaño de partícula o una distribución de tres tamaños. El mayor efecto se produce en las tasas de oxidación (en la zona de entrada de sólidos y en la sección inferior del lecho).

Por último, se ha analizado el efecto de la presencia de la reacción química en el lecho. Las simulaciones realizadas muestran que la presencia de la reacción química modifica el comportamiento fluidodinámico, en particular el patrón de circulación en el lecho. La mayor diferencia se aprecia en el flujo de la zona de entrada del sólido, y en la aparición de asimetrías laterales. Las diferencias observadas muestran el fuerte acoplamiento entre la reacción química y la fluidodinámica, y que, en consecuencia, no deben considerarse por separado.

Resumen, discusión y sugerencias de trabajo futuro

El trabajo de investigación presentado en esta Tesis es el desarrollo y validación de una metodología completa para la descripción euleriana del flujo multifásico gas-sólido reactivo en lechos fluidos; las fases pueden tener un número arbitrario de fases sólidas cuyo tamaño puede evolucionar con el tiempo.

Las contribuciones más importantes presentadas son: la revisión y la formulación de un modelo matemático; el desarrollo de las técnicas numéricas requeridas y de la algoritmia necesaria para su implementación; y la validación y aplicación al estudio del comportamiento de un lecho fluido para la gasificación de carbón.

El algoritmo numérico desarrollado en esta Tesis se ha implementado utilizando librerías de *software* libre. Las leyes de conservación que rigen el flujo gas-sólidos se resuelven utilizando la plataforma de Fluidodinámica Computacional *OpenFOAM* y el tratamiento de los sistemas químicos de reacción homogénea se realiza mediante la suite *Cantera*.

El comportamiento del código desarrollado se ha validado y utilizado para el estudio del flujo multifásico en tres configuraciones: la zona de salida de un lecho fluido circulante, un lecho fluido burbujeante, y un gasificador de carbón de lecho fluido.

En este capítulo se resumen las aportaciones más relevantes en cada sección, se discuten los aspectos que se consideran más importantes del trabajo realizado, y se plantean los temas de mayor interés para su continuación.

8.1. Resumen

El trabajo de modelado realizado se puede resumir en los siguientes aspectos:

- Planteamiento de leyes de conservación que rigen el flujo, en la forma de ecuaciones de transporte en su formulación euleriana-euleriana (Ecuaciones 2.2, 2.3, 2.4, y 2.6).
- Revisión de los términos de transferencia de calor y masa, y establecimiento de una formulación general para su aplicación a modelos eulerianos-eulerianos.
- Modelado de los términos fuente por transferencia de masa y energía asociados a la transformación del sólido (del carbón), y la reacción química en flujos gas-sólido (*i.e.* secado, devolatilización, reacción heterogénea, reacción homogénea).
- Desarrollo de un algoritmo de discretización y resolución del flujo multisólido reactivo transitorio con densidad variable, y tamaño de sólido variable.

El sistema de ecuaciones de transporte planteado requiere para su resolución la incorporación de modelos que describan los fenómenos que tienen lugar (incluyendo modelos de cierre para el tensor de esfuerzos, la presión de sólido y la interacción entre las fases). Los modelos utilizados en esta Tesis han sido revisados y, en su caso, extendidos para que sean aplicables de forma consistente a un número arbitrario de fases sólidas; es decir, para que proporcionen el mismo resultado independientemente del número de fases idénticas utilizadas en la descripción de una única fase sólida.

La Teoría Cinética del Flujo Granular se utiliza para el cierre de las ecuaciones. En esta Tesis se ha seleccionado una de las pocas variantes aplicables a un número arbitrario de fases sólidas [133], que se ha modificado para asegurar su consistencia (ver Sección 2.3.1.2). Además entre los modelos matemáticos para el intercambio entre las fases y la reacción química sólo algunos son aplicables al flujo de varias fases sólidas, y muchos de ellos, para cumplir las condiciones exigibles de consistencia, han requerido una formulación adecuada de las expresiones habitualmente utilizadas en su cálculo (*e.g.* modelos de arrastre de la Sección 2.4.1).

El modelado euleriano frecuentemente requiere la adaptación de modelos desarrollados para la descripción de partículas aisladas. Su aplicación directa al uso de valores promedio utilizados puede introducir estados no físicos, o no considerar adecuadamente la interacción entre las partículas. Una formulación correcta requiere la consideración completa del proceso físico que se modela, como, por ejemplo, se propone en esta Tesis para el modelo de secado de la partícula (ver Sección 3.5).

El método de resolución utilizado en esta Tesis se basa en el método conocido como IPSA (Inter-Phase Slip Algorithm) propuesto para mallas decaladas por Spalding [195]. El algoritmo para la resolución de las ecuaciones de conservación se ha implementado utilizando como base *OpenFOAM*, que utiliza mallas colocalizadas. En esta Tesis, para la adaptación del método a este tipo de mallas, se ha propuesto una extensión consistente de

la técnica de Interpolación del Momento (CMIm) para la discretización de las ecuaciones eulerianas-eulerianas que gobiernan los flujos multifásicos transitorios.

El nuevo procedimiento evita algunas de las deficiencias presentes en la formulación estándar usada habitualmente, que es una simple extensión del algoritmo para flujo monofásico (ver Capítulo 4).

Se ha comparado el comportamiento de ambas técnicas en un caso de prueba: el transporte neumático tras un codo en ángulo recto. Los resultados revelan que CIPSA, el algoritmo consistente y conservativo propuesto, impide la aparición de oscilaciones espaciales espurias en el campo de presión, y evita que la solución de flujos estacionarios dependa del tamaño del paso temporal utilizado en su resolución transitoria (ver Capítulo 5).

El modelo fluidodinámico (sin reacción química) desarrollado se ha validado mediante la simulación de un lecho fluido burbujeante formado por partículas de tipo Geldart D [140]. Las predicciones del código presentan una buena concordancia con los datos experimentales disponibles. Los resultados obtenidos muestran la capacidad del método propuesto para reproducir el complejo régimen de burbujeo/*slugging* que se produce.

El estudio del comportamiento del modelo completo para flujo multifásico y reactivo se ha llevado a cabo mediante la simulación de un gasificador de carbón en lecho fluido [151]. Los resultados de las simulaciones obtenidas se han comparado con los de otras simulaciones disponibles en la literatura. La concentración de las especies químicas a su salida obtenidos en la simulación muestran un buen grado de acuerdo con los resultados experimentales.

En la simulación del gasificador, el carbón y la caliza se modelan como fases separadas, lo que permite predecir su segregación en el lecho, y cuantificarla en distintas condiciones. En concreto, el modelo desarrollado ha permitido evaluar el efecto de la polidispersión del tamaño de la partícula reactiva de carbón en el gasificador. Se han observado diferencias significativas en la altura del lecho, en la segregación entre las fases y en la distribución de las zonas de reacción.

Las conclusiones obtenidas de la simulación de este equipo se pueden resumir en las siguientes:

- La reacción química modifica significativamente la fluidodinámica variando el patrón de circulación de sólidos, y reduciendo su simetría. El flujo se modifica especialmente cerca de la entrada de sólido. Estas modificaciones indican que no es recomendable la realización de una simulación de la cinética química sobre un

campo precalculado, práctica que ha sido de uso extendido en el pasado, y sigue siendo frecuente actualmente.

- La reducción del tamaño de la partícula (monodispersa) afecta al ratio área-volumen aumentando la relación arrastre-peso y las tasas de reacción heterogénea; como resultado se reduce la zona oxidante en el lecho, aumentan las tasas de gasificación e incrementan la concentración de H_2 y CO a la salida.
- El estudio del efecto de la polidispersión del tamaño de carbón muestra que:
 - Modelar una fase polidispersa como un único tamaño de partícula no es adecuado para predecir el comportamiento del lecho.
 - Existe una convergencia en la predicción de los campos fluidos al aumentar el número de tamaños considerados.
 - Para la predicción de la composición del gas a la salida es suficiente con el uso de un menor número de tamaños (tres) que para la predicción correcta de la fluidodinámica (siete).
- El efecto de considerar el tamaño de la partícula variable es más importante cuando las fases sólidas son modeladas como partículas de un único tamaño.

En conclusión el modelo presentado en esta Tesis es el más completo, de su tipo, que se ha encontrado en la bibliografía. Este modelo permite el tratamiento directo del flujo multifásico gas-sólido reactivo transitorio de densidad variable y con un número arbitrario de sólidos de tamaño variable. El algoritmo consistente, basado en herramientas de *software* libre, permite por su diseño modular el acoplar fácilmente nuevos modelos.

8.2. Discusión

El modelo propuesto en esta Tesis forma parte de la familia de modelos eulerianos de Fluidodinámica Computacional basados en principios fundamentales para la descripción numérica del flujo gas-sólido que están, en la actualidad, comenzando a aplicarse en la simulación de equipos industriales. Hasta la fecha, la única alternativa viable para la descripción numérica de estos equipos ha sido, por su reducido coste computacional, el uso de modelos semi-empíricos, que aplican modelos químicos y de transferencia sobre un patrón de fluidodinámico establecido (computado o estimado).

Las ventajas de la simulación multidimensional completa del lecho fluido son bastante conocidas. Por ejemplo, el uso de modelos de Fluidodinámica Computacional permite

optimizar la localización de los puntos de alimentación, y de las paredes para transmisión de calor. Además, pueden ser una herramienta útil en la evaluación de riesgos y problemas de operación de los equipos.

Los códigos de simulación disponibles al comienzo de este trabajo se limitan al flujo bifásico [123, 157, 209], no tienen en cuenta el tratamiento variable de densidad o tamaño [157], tratan las fases granulares como no reactivas [157] o los modelos disponibles para la partícula reactiva son limitados [64]. Desde el comienzo de este trabajo se han presentado diversos modelos que suplen algunas de estas deficiencias (ver, por ejemplo, [84, 137, 138, 234, 236]), sin embargo, ninguno (conocido por el autor) de naturaleza tan general como el presentado en este trabajo.

Se han detectado problemas y se han planteado soluciones en algunas áreas:

- La revisión matemática realizada ha requerido la formalización del tratamiento euleriano de las ecuaciones para flujo multifásico. En especial, se ha presentado una forma general para el tratamiento de la transferencia de masa y de la reacción química (ver Capítulo 3).
- El modelado euleriano de los procesos de partículas aisladas requiere la consideración del proceso físico (*i.e.* de sus interacciones), y no debe limitarse únicamente a su promediado volumétrico (ver, por ejemplo, la corrección a un modelo de secado propuesta en la Sección 3.5).
- La extensión a flujo multifásico de los algoritmos originalmente diseñados para el flujo monofásico no es directa. En este trabajo se ha destacado la necesidad del tratamiento correcto del método de Interpolación del Momento, que afecta a la solución del flujo multifásico (ver Capítulo 4).
- La resolución de la fracción volumétrica presenta problemas numéricos. En esta Tesis se plantea una alternativa en forma conservativa que permite tratar el acoplamiento entre las fases (ver Sección 4.3.2).
- El método de solución descrito CIPSA requiere el uso de distintas estrategias (en tres niveles de resolución) para la resolución precisa del flujo transitorio reactivo (ver Sección 4.3.3).

El modelado correcto de la interacción entre los fenómenos es crítica para la obtención de resultados realistas. Los procesos físicamente simultáneos son habitualmente, por limitaciones en la algoritmia, tratados secuencialmente en la resolución numérica [193]. No obstante, en esta Tesis los procesos de transformación se consideran producidos de forma simultánea. La formación de las especies químicas, por ejemplo, depende de la

mezcla de las corrientes, la transferencia de calor, el cambio en el tamaño de partícula, y del conjunto de reacciones químicas. El modelado incorrecto de cualquiera de estos fenómenos puede afectar no solo a la concentración de las especies químicas y las zonas de reacción, sino también al comportamiento fluidodinámico del lecho, como, por ejemplo, se muestra en la Sección 7.4.3.

La caracterización fisicoquímica de los sólidos a partir de los resultados de pruebas de laboratorio no es a menudo suficiente para su aplicación en las condiciones de simulación (*e.g.* productos de devolatilización). Los materiales y su comportamiento son habitualmente descritos por modelos simplificados. El distinto comportamiento (fisicoquímico) de cada partícula concreta requiere para una simulación correcta el ajuste de los modelos utilizando los datos experimentales disponibles. Además es necesario prever, cuantificar y modelar los posibles efectos de la interacción entre los distintos materiales del lecho. La presencia de cenizas, por ejemplo, puede causar la desactivación química del carbón. Un ejemplo de esta importancia se muestra en los resultados de De Souza-Santos [53] (ver Sección 7.3).

En este trabajo se ha detectado que una definición numérica adecuada de las condiciones de contorno es crítica para una buena predicción del comportamiento del lecho fluido. Un cambio en las condiciones de contorno en la pared puede modificar el patrón de ascenso-descenso de sólidos, como se ha comprobado en las simulaciones del NETL SSCP-1 realizadas en este trabajo (similarmente a lo presentado por [210]). Las condiciones de contorno y geométricas de la salida, cuya descripción no suele estar disponible en la configuración experimental, pueden afectar no sólo al flujo a la salida el distribuidor, sino a los resultados de la parte baja del lecho (ver, por ejemplo, [181]). Si bien a la salida el límite para la correcta simulación suele ser la falta de una descripción detallada del experimento (aguas abajo), en el distribuidor el límite está, también, impuesto por el tamaño de la representación del modelo euleriano-euleriano (ver Capítulo 1, página 13).

8.3. Sugerencias de trabajo futuro

El algoritmo presentado en esta Tesis para el modelado del flujo multifásico puede ser expandido para tratar otros aspectos de la tecnología del lecho fluido. El código desarrollado proporciona un marco adecuado en el que incorporar, validar y explotar nuevos modelos para describir numéricamente el flujo multifásico gas-sólido. La construcción del algoritmo utilizando herramientas disponibles de *software* libre permite la revisión completa del código, su modificación y la incorporación de modelos con un nivel de detalle arbitrario.

Sin ánimo de ser exhaustivos, con este objeto se proponen por su interés las siguientes extensiones:

- La aplicación a equipos industriales requiere el uso de un tamaño de celda grande para ser computacionalmente abordable. Una opción para la aplicación del algoritmo propuesto a estos equipos es la aplicación de modelos submalla que contabilicen en el flujo resuelto el efecto de las pequeñas escalas.
- La predicción de la transmisión de calor en las paredes requiere incorporar modelos que tengan en cuenta en la interacción sólido-pared la formación de clústeres, y el contacto entre partículas empaquetadas. La evaluación de la importancia en el flujo multifásico de otros fenómenos de transferencia de calor, como la radiación, podrá ser un segundo paso para la mejora del modelado de las características térmicas del flujo.
- La incorporación de modelos más completos para la reacción química homogénea requiere una disminución en el tiempo de su resolución que actualmente penaliza el rendimiento del algoritmo (ver Capítulo 7). La implementación de técnicas que permitan un cálculo simplificado y preciso de la cinética de las reacciones químicas. El uso de este tipo de técnicas, como la tabulación LUT (del inglés, *Look-Up Table*), ISAT (del inglés, *In-situ Adaptive Tabulation*), o redes neuronales ANN (del inglés, *Artificial Neural Network*) permitirían reducir el tiempo de cálculo y, en consecuencia, la resolución de dominios de mayor tamaño o con mayor resolución.
- La flexibilidad del algoritmo permite incorporar fases sólidas de distinto material que deben ser tratadas estableciendo sus correspondientes propiedades termofísicas y los modelos necesarios. El modelado químico del sólido puede ser modificado fácilmente para considerar un amplio número de sólidos y condiciones, como:
 - La simulación numérica del lecho fluido presurizado y de la oxcombustión (de creciente importancia e implantación) mediante el ajuste de los términos de reacción química.
 - El modelado de la co-combustión en equipos alimentados simultáneamente con dos o más tipos de sólidos combustibles incorporando modelos que cuantifiquen su interacción (*e.g.* la desactivación/regeneración química de los materiales).
- Finalmente el código general desarrollado podría aplicarse a otros campos (manteniendo la algoritmia, y con el acomodo de los modelos necesarios) como a flujos biológicos o al flujo gas-líquido.

Nomenclatura

Acrónimos

- BFB Lecho fluido burbujeante, del inglés *Bubbling Fluidized Bed*
- CIPSA Algoritmo de deslizamiento entre fases con Interpolación de Momento Compacta (de la contracción de CMIm e IPSA)
- CMI Interpolación del Momento Compacta, del inglés *Compact Momentum Interpolation*
- CMIm Técnica de Interpolación del Momento Compacta extendida a flujo multifásico (CMIm, del inglés *Compact Moment Interpolation-multiphase*)
- DAE Modelo de energías de activación distribuidas, del inglés *Distributed Activation Energies*
- EBU Modelo de *Eddy Break-Up*
- FCC Craqueo catalítico, del inglés *Fluid Catalytic Cracking*
- IPSA Algoritmo de deslizamiento entre fases, del inglés *Inter-Phase Slip Algorithm*
- LF Lecho fluido
- MI Interpolación del Momento, del inglés *Momentum Interpolation*
- MP-PIC Modelo de partícula en celda, del inglés *Multiphase Particle-Particle In Cell*
- ODE Ecuación diferencial ordinaria, del inglés *Ordinary Differential Equation*
- OMI Interpolación del Momento original, del inglés *Original Momentum Interpolation*
- SFOR Reacción química de primer orden, del inglés *Single First Order Reaction*

- SMI Interpolación del Momento Estándar, del inglés *Standard Momentum Interpolation*
- SMIm Técnica de Interpolación del Momento Estándar (SMI, del inglés *Standard Momentum Interpolation*) extendida a multifásico de forma análoga a la extensión CMI

Letras griegas

- β_g Función de suavizado para el modelo de arrastre gas-sólido de Gidaspow et al. [74]
- χ_α Símbolo químico de la especie química α
- δ_{ij} Tensor delta de Kroneker
- Γ_p^T Conductividad térmica de la fase p
- γ_p Tasa de disipación de la temperatura granular debido a colisiones inelásticas
- Γ_p^ϕ Coeficiente de difusión de la propiedad ϕ en la fase p
- κ_p Conductividad de la temperatura granular
- μ_p^{cin} Viscosidad cinética
- μ_p^{col} Viscosidad colisional
- μ_p^{dil} Viscosidad en flujo diluido
- μ_p Viscosidad molecular de la fase p
- ν_α Coeficientes estequiométricos
- $\dot{\omega}_\alpha$ Tasa formación de especie química α por reacción química
- Φ^f Ángulo de fricción
- Π_α Producto para todas las especies químicas α
- ψ_g Coeficiente de compresibilidad adiabático del gas g ($\psi_g = \rho_g/p$)

ρ_p	Densidad de la fase p
\sum_r	Suma para todas las reacciones químicas r
\sum_x	Suma para todos los procesos de transferencia x
\sum_α	Suma para todas las especies químicas α
\sum_p	Suma para todas las fases p
\sum_q	Suma para todas las fases q
\sum_s	Suma para todas las fases sólidas s
\sum_{x_s}	Suma para todos los procesos de transferencia sin cambio de tamaño x_n
τ	Tiempo característico
$\overline{\Theta_p}$	Temperatura granular promedio
Θ_p	Temperatura granular de la fase sólida p
τ_p	Tensor de esfuerzos de la fase p
ξ_p	Viscosidad de compresión de la fase p

Simbolos

A_P	Contribuciones a la diagonal principal de la matriz de coeficientes en el punto P
a_P	Término de contribuciones a la matriz de coeficientes normalizado en el punto P
A_r	Factor preexponencial en la ecuación cinética de Arrhenius (Ecuación 3.16)
b_r	Exponente de la temperatura en la ecuación cinética de Arrhenius (Ecuación 3.16)
C_{fr}	Coefficiente de fricción
d_{pq}	Diámetro promedio de las fases sólidas p y q
d_p	Diámetro de la fases sólida p

d_p	Diámetro de partícula
E_r	Energía de activación en la ecuación cinética de Arrhenius (Ecuación 3.16)
e_{pq}	Coefficiente de restitución entre las fases p y q
e_p	Coefficiente de restitución de la fase p
f_{pq}^h	Coefficiente de transferencia de calor entre la fase p y la fase q
f_{qp}^v	Coefficiente de transferencia de cantidad de movimiento entre la fase p y la fase q
Fr	Constante adimensional del material. Fr debido a que está relacionado con el número adimensional de Froude.
g	Aceleración de la gravedad
g_{pq}	Función de distribución radial promedio de las fases sólidas p y q
g_p	Función de distribución radial de la fase sólida p
h_p^α	Entalpía de la especie α en la fase p
$h_p^{s,\alpha}$	Entalpía sensible de la especie α en la fase p
Δh_L	Calor latente de evaporación
H_P	Contribuciones fuera de la diagonal principal de la matriz de coeficientes en el punto P
$-\Delta h_r$	Calor de reacción $\sum_\alpha \nu_{\alpha,r} h^\alpha$
J	Flujo másico
k_c	Resistencia a la reacción química
k_l	Resistencia a la difusión a través de la capa límite gaseosa
k_n	Resistencia a la difusión a través de productos que rodean al núcleo

\dot{m}_{qp}^x	Tasa de transferencia de masa entre la fase q y la fase p debida al proceso x (<i>e.g.</i> devolatilización). Es un valor positivo si q es la fase donante, y negativo si es la receptora ($\dot{m}_{qp}^x = -\dot{m}_{pq}^x$)
$M^{\Phi,x}$	Término fuente de transferencia de masa en la ecuación de transporte de la variable Φ debido al proceso de transferencia x
M_p^ϕ	Transferencia de propiedad ϕ debido a la transferencia de masa
m_{pq}	Masa de las partículas de las fases p y q
m_p	Masa de la partícula de la fase p
N_s	Número de fases sólidas
n_p	Número de partículas de la fase p
p	Presión (única, compartida por todas las fases)
p_p^s	Presión de sólido de la fase p
p^{fri}	Presión friccional
p_c^{fri}	Presión friccional en condición crítica
$p_{pq}^{S_{col}}$	Contribución colisional a la presión de sólido por colisiones entre las fases p y q
Q_{ps}	Calor transferido por unidad de tiempo a la partícula de sólido s desde la fase p
R	Número de reacciones del mecanismo químico.
R_c	Constante universal de los gases ideales
r_p	Fracción volumétrica de la fase p
r_p^{fri}	Fracción de sólido friccional mínima
r_p^{max}	Fracción de sólido en condición de máximo empaquetamiento
S_p^α	Fuente (o sumidero) por reacción química de la especie α en la fase p

\mathbf{S}_f	Vector de superficie normal a la cara f
s_p	Ratio entre el volumen inicial de la partícula y su volumen actual para la fase p
T_a	Temperatura de activación en la ecuación cinética de Arrhenius (Ecuación 3.16)
T_{eb}	Temperatura de ebullición del agua en las partículas
V_p^0	Volumen inicial de partícula
\mathbf{v}_p	Vector velocidad de la fase p
W	Peso molecular
W_α	Peso molecular de la especie α
y^α	Fracción másica de la especie química α
ΔZ^o	Cambio de la energía libre de Helmholtz en el estado estándar

Números adimensionales

Nu	Número adimensional de Nusselt
Pr	Número adimensional de Prandtl
Re	Número adimensional de Reynolds
Sc	Número adimensional de Schmidt
Sh	Número adimensional de Sherwood

Operadores matemáticos

$\lceil \phi \rceil$	Discretización del término ϕ
$[\phi]_f$	Interpolación de la variable ϕ en la cara f
$[\phi]_f$	Interpolación lineal de la variable ϕ en la cara f

Subíndices/Superíndices

0	Valor en el momento inicial
α	Especie química genérica α
<i>vólatil</i>	Pseudo-especie de volátiles
$vólatil_s^\infty$	Cantidad máxima de volátiles que pueden liberarse
$vólatil_s$	Volátiles contenidos en la fase sólida s
f	Valor en la cara, en mallas colocadas obtenido por interpolación
f_d	Reacción química r -sima directa
f_{ri}	Propiedad para régimen de sólido friccional o de bajo cizallamiento
g	Fase gaseosa
Me	Máximo empaquetamiento. Estado del sólido cuando ocupa el mayor espacio posible
mf	Mínima fricción. Fracción volumétrica a partir de la cual se aplica la teoría friccional
n	Paso temporal anterior
p	Fase genérica p
P	Valor en el punto/en la celda
<i>prod</i>	Referido a especie química que actúa como producto en la reacción química r
q	Fase genérica q , usada para diferenciarla de fase genérica p
r	Reacción química r -sima
r_i	Reacción química r -sima inversa
<i>reac</i>	Referido a especie química que actúa como reactivo en la reacción química r
s	Fase sólida

sup Referido a la superficie de la partícula

vis Propiedad para régimen de sólido viscoso o de alto cizallamiento

x Proceso de transferencia de masa *x*

Bibliografía

- [1] Adamczyk, W. P., Klimanek, A., Białecki, R. A., Węcel, G., Kozołub, P., and Czakiert, T. (2014a). Comparison of the standard Euler–Euler and hybrid Euler–Lagrange approaches for modeling particle transport in a pilot-scale circulating fluidized bed . *Particuology* , 15(0):129–137. Energy storage: Materials and processes .
- [2] Adamczyk, W. P., Kozołub, P., Węcel, G., Klimanek, A., Białecki, R. A., and Czakiert, T. (2014b). Modeling oxy-fuel combustion in a 3D circulating fluidized bed using the hybrid Euler–Lagrange approach . *Applied Thermal Engineering* , 71(1):266–275.
- [3] Adanez, J., Abad, A., Garcia-Labiano, F., Gayan, P., y Diego, L. F. d. (2012). Progress in Chemical-Looping Combustion and Reforming technologies . *Progress in Energy and Combustion Science* , 38(2):215–282.
- [4] Agrawal, K., Loezos, P. N., Syamlal, M., y Sundaresan, S. (2001). The role of meso-scale structures in rapid gas-solid flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 445:151–185.
- [5] Akilli, H., Levy, E., y Sahin, B. (2001). Gas–solid flow behavior in a horizontal pipe after a 90 vertical-to-horizontal elbow. *Powder Technology*, 116(1):43 – 52.
- [6] Akilli, H., Sahin, B., y Tumen, N. F. (2005). Suppression of vortex shedding of circular cylinder in shallow water by a splitter plate. *Flow Measurement and Instrumentation*, 16(4):211 – 219.
- [7] Ambrosino, F., Aproxitola, A., Brachi, P., Marra, F. S., Montagnaro, F., and Salatino, P. (2013). Entrained-flow gasification of coal under slagging conditions: Relevance of fuel–wall interaction and char segregation to the properties of solid wastes . *Fuel* , 114(0):44–55. Advances in Coal Science and Technology, ICCS 2011 .
- [8] Anderson, T. y Jackson, R. (1967). A fluid mathematical description of fluidized beds. *ind. Eng. Chem. Fundam.*, 6(4):527–539.
- [9] Andrews, M. y O’Rourke, P. (1996). The multiphase particle-in-cell (mp-pic) method for dense particulate flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 22(2):379 – 402.
- [10] Arastoopour, H., Pakdel, P., y Adewumi, M. (1990). Hydrodynamic analysis of dilute gas-solids flow in a vertical pipe. *Powder Technology*, 62(2):163 – 170.

- [11] Armstrong, L. M. (2011). *CFD modelling of the gas-solid flow dynamics and thermal conversion processes in fluidised beds*. Tesis Doctoral, University of Southampton, Southampton.
- [12] Armstrong, L. M., Gu, S., y Luo, K. H. (2011). Effects of limestone calcination on the gasification processes in a BFB coal gasifier. *Chemical Engineering Journal*, In Press, Corrected Proof.
- [13] Badzioch, S. y Hawksley, P. G. W. (1970). Kinetics of Thermal Decomposition of Pulverized Coal Particles. *Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development*, 9(4):521–530.
- [14] Baghdadi, A. H. A. (1979). *Numerical Modelling of Two-phase Flow with Inter-phase Slip*. Tesis Doctoral, Imperial College of Science and Technology, London, S.W.7, England .
- [15] Bagnold, R. A. (1954). Experiments on a Gravity-Free Dispersion of Large Solid Spheres in a Newtonian Fluid under Shear. Editado por *Proc. R. Soc. Lond. A*, páginas 49–63. Royal Society.
- [16] Balaji Gopalan y Rupendranath Panday and Jonathan Tucker and Mehrdad Shahnam y Lawrence Shadle and Frank Shaffer and Joseph Mei and Bill Rogers and Chris Guenther (2013). Multiphase Flow Predictive Challenge - Small Scale Problem I (presentación).
- [17] Ballester, J. y Jiménez, S. (2005). Kinetic parameters for the oxidation of pulverised coal as measured from drop tube tests. *Combustion and Flame*, 142(3):210 – 222.
- [18] Barner, H. E., Chartier, J. S., Beisswenger, H., y Schmidt, H. W. (1985). Application of circulating fluid bed technology to the combustion of waste materials. *Environmental Progress*, 4(2):125–130.
- [19] Basu, P. (1999). Combustion of coal in circulating fluidized-bed boilers: a review. *Chemical Engineering Science*, 54(22):5547–5557.
- [20] Behjat, Y., Shahhosseini, S., y Marvast, M. A. (2011). CFD analysis of hydrodynamic, heat transfer and reaction of three phase riser reactor . *Chemical Engineering Research and Design* , 89(7):978–989.
- [21] Bell, R. (2000). *Numerical modelling of multi-particle flows in bubbling gas-solid fluidized beds*. Tesis Doctoral, Swinburne University of Technology, Australia.
- [22] Benhard F. W. Gschaider, Markus Rehm, Peter Seifert, y Dernd Meyer (2008). Implementation of an Alternate Chemistry Library into OpenFOAM. Presentation at OSCFD Conference.

- [23] Benyahia, S. (2008). A time-averaged model for gas-solids flow in a one-dimensional vertical channel. *Chemical Engineering Science*, 63(9):2536–2547.
- [24] Benyahia, S., Arastoopour, H., Knowlton, T. M., y Massah, H. (2000). Simulation of particles and gas flow behavior in the riser section of a circulating fluidized bed using the kinetic theory approach for the particulate phase. *Powder Technology*, 112(1-2):24–33.
- [25] Benyahia, S. y Sundaresan, S. (2011). Do we need sub-grid scale corrections for both continuum and discrete gas-particle flow models? *Powder Technology*, (0).
- [26] Benyahia, S., Syamlal, M., y O'Brien, T. J. (2006). Extension of Hill-Koch-Ladd drag correlation over all ranges of Reynolds number and solids volumen fraction. *Powder Technology*, 162(2):166–174.
- [27] Benzarti, S., Mhiri, H., Bournot, H., y Occelli, R. (2014). Numerical simulation of turbulent fluidized bed with geldart b particles. *Advanced Powder Technology*, 25(6):1737 – 1747.
- [28] Berruti, F. y Kalogerakis, N. (1989). Modelling the internal flow structure of circulating fluidized beds. *The canadian journal of chemical engineering*, 67:1010 – 1014.
- [29] Bhusarapu, S. B. (2003). *Solids flow mapping in gas-solid risers*. Tesis Doctoral, Sever Institute of Washington University, Missouri, USA.
- [30] Bi, H. y Grace, J. (1995). Flow regime diagrams for gas-solid fluidization and upward transport. *International Journal of Multiphase Flow*, 21(6):1229 – 1236.
- [31] Bird, R. B. (2002). *Transport phenomena*, volume 55. ASME.
- [32] Black, S., Szuhánszki, J., Pranzitelli, A., Ma, L., Stanger, P. J., Ingham, D. B., y Pourkashanian, M. (2013). Effects of firing coal and biomass under oxy-fuel conditions in a power plant boiler using CFD modelling . *Fuel* , 113(0):780–786.
- [33] Breault, R. W., Li, T., y Nicoletti, P. (2013). Mass transfer effects in a gasification riser . *Powder Technology* , 242(0):108–116. Selected Papers from the 2010 NETL Multiphase Flow Workshop .
- [34] Brown, K., Kalata, W., y Schick, R. (2014). Optimization of SO₂ Scrubber Using CFD Modeling . *Procedia Engineering* , 83(0):170–180. SYMPHOS 2013 - 2nd International Symposium on Innovation and Technology in the Phosphate Industry .
- [35] Brown, P. N., Byrne, G. D., y Hindmarsh, A. C. (1989). Vode: A variable-coefficient ode solver. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 10(5):1038–1051.

- [36] Byung-Ho Song, Yong-Won Jang, Sang-Don Kim, y Soon-Kook Kang (2001). Gas Yields from Coal Devolatilization in a Bench-Scale Fluidized Bed Reactor. *Korean J. Chem. Eng.*, 18(5):770–774.
- [37] Carver, M. B. y Salcudean, M. (1986). Three-dimensional numerical modeling of phase distribution of two-fluid flow in elbows and return bends. *Numerical Heat Transfer*, 10(3):229–251.
- [38] Chang, J., Wang, G., Gao, J., Zhang, K., Chen, H., y Yang, Y. (2012). CFD modeling of particle–particle heat transfer in dense gas-solid fluidized beds of binary mixture. *Powder Technology*, 217(0):50–60.
- [39] Chapman, S. y Cowling, T. G. (1960). *The mathematical theory of nonuniform gases*. Cambridge University Press, London, UK.
- [40] Chejne, F. y Hernandez, J. P. (2002). Modelling and simulation of coal gasification process in fluidised bed. *Fuel*, 81(13):1687–1702.
- [41] Chejne, F., Lopera, E., y Londoño, C. A. (2011). Modelling and simulation of a coal gasification process in pressurized fluidized bed. *Fuel*, 90(1):399–411.
- [42] Choi, S. K. (1999). Note on the Use of Momentum Interpolation Method for Unsteady Flows. *Numerical Heat Transfer, Part A*, 36:545–550.
- [43] Clift, R., Seville, J. P. K., Moore, S. C., y Chavarie, C. (1987). Comments on buoyancy in fluidized beds. *Chemical Engineering Science*, 42(1):191–194.
- [44] Concentration Heat and Momentum. (CHAM) Ltd. (2012). PHOENICS V3.5. <http://www.cham.co.uk/>.
- [45] Cruz, E., Steward, F. R., y Pugsley, T. (2006). New closure models for CFD modeling of high-density circulating fluidized beds. *Powder Technology*, 169(3):115–122.
- [46] Cubero, A. y Fueyo, N. (2007). A Compact Momentum Interpolation Procedure for Unsteady Flows and Relaxation. *Numerical Heat Transfer Part B: Fundamentals*, 52(December):471–493.
- [47] Cubero, A., Sánchez-Insa, A., y Fueyo, N. (2011). Development of a consistent and conservative Eulerian–Eulerian algorithm for multiphase flows. Penn State University.
- [48] Cubero, A., Sánchez-Insa, A., y Fueyo, N. (2015a). Crossing trajectories and phase change in Eulerian–Eulerian models of disperse multiphase flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 72(0):141–144.

- [49] Cubero, A., Sánchez-Insa, A., y Fueyo, N. (2015b). Crossing trajectories and phase change in Eulerian–Eulerian models of disperse multiphase flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 72(0):141–144.
- [50] Dalla Valle, J. M. (1948). *Micromeritics: the technology of fine particles*. Pitman Pub. Corp.
- [51] Dalle Nogare, Daniela (2008). *Modeling catalytic methane partial oxidation with detailed chemistry*. Tesis Doctoral, Università Degli Studi di Padova.
- [52] David A. Tillman (2013). *Forest Products: Advanced Technologies and Economic Analyses*. Elsevier.
- [53] De Souza-Santos, M. (2010). Comprehensive simulator applied to fluidized bed coal gasification. *The Open Chemical Engineering Journal*, 4:68 – 79.
- [54] Ding, J. y Gidaspow, D. (1990). A Bubbling Fluidization Model Using Kinetic Theory. *AIChE Journal*, 36(4):523–538.
- [55] Drew, D. A. (1983). Mathematical Modeling of Two-Phase Flow. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 15(1):261–291.
- [56] Enwald, H., Peirano, E., y Almstedt, A. E. (1996). Eulerian two-phase flow theory applied to fluidization. *INTERNATIONAL JOURNAL OF MULTIPHASE FLOW*, 22(Suppl. S):21–66.
- [57] Ergun, S. (1952). Fluid Flow through Packed Columns. *Chem. Eng. Prog.*, 48:89–94.
- [58] Eriksson, T., Sippu, O., Hotta, A., Fan, Z., Myöhänen, K., Hyppänen, T., and P. T. (2007). Oxyfuel CFB Boiler As A Route To Near Zero CO₂ Emission Coal Firing. Editado por *POWER GEN Europe*.
- [59] F. Scala, editor (2013). *Fluidized Bed Technologies for Near-Zero Emission Combustion and Gasification*. Elsevier.
- [60] Farrell, P. A. (1996). *Hydrodynamic scaling and solids mixing in pressurized bubbling fluidized bed combustors*. Tesis Doctoral, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge (Massachusetts).
- [61] Ferziger, J. H. y Peric, M. (2001). *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer; 3 edition.
- [62] Fletcher, T. H., Kerstein, A. R., Pugmire, R. J., y Grant, D. M. (1990). Chemical percolation model for devolatilization. 2. Temperature and heating rate effects on product yields. *Energy & Fuels*, 4(1):54–60.

- [63] Fletcher, T. H., Kerstein, A. R., Pugmire, R. J., Solum, M. S., y Grant, D. M. (1992). Chemical percolation model for devolatilization. 3. Direct use of carbon-13 NMR data to predict effects of coal type. *Energy & Fuels*, 6(4):414–431.
- [64] Fluent Inc. (2006). *Fluent User's Guide*. Lebanon, NH, USA, 6.3 edition.
- [65] Fokkema, D. R., Sleijpen, G. L. G., y Vorst, H. A. v. d. (1994). Generalized Conjugate Gradient Squared. Technical Report 851, Department of Mathematics, University Utrecht. Submitted for Proceedings Beckenridge Conference, April, 1994.
- [66] Fueyo, N., Ballester, J., y Dopazo, C. (1995). An Eulerian-Eulerian model of coal combustion, NO_x formation and reburning. Editado por *12th Annual International Pittsburg Coal Conference*, pages 1113–1118, Pittsburgh.
- [67] Fueyo, N., Ballester, J., y Dopazo, C. (1997). The computation of particle size in Eulerian/Eulerian models of coal combustion. *International Journal of Multiphase Flow*, páginas 607–612.
- [68] Gao, J., Lan, X., Fan, Y., Chang, J., Wang, G., Lu, C., y Xu, C. (2009). Hydrodynamics of gas–solid fluidized bed of disparately sized binary particles. *Chemical Engineering Science*, 64(20):4302–4316.
- [69] Garside, J. y Al-Dibouni, M. R. (1977). Velocity-Voidage Relationships for Fluidization and Sedimentation in Solid-Liquid Systems. *Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development*, 16(2):206–214.
- [70] Geldart, D. (1973). Types of gas fluidization. *Powder Technology*, 7:285 – 292.
- [71] Geng, C., Zhong, W., Shao, Y., Chen, D., y Jin, B. (2015). Computational study of solid circulation in chemical-looping combustion reactor model . *Powder Technology* , 276(0):144–155.
- [72] Gerber, S., Behrendt, F., y Oevermann, M. (2010). An Eulerian modeling approach of wood gasification in a bubbling fluidized bed reactor using char as bed material. *Fuel*, 89(10):2903–2917.
- [73] Gidaspow, D. (1994). *Multiphase Flow and Fluidization*. Academic Press, New York.
- [74] Gidaspow, D., Bezburuah, R., y Ding, J. (1992a). Hydrodynamics of Circulating Fluidized Beds, Kinetic Theory Approach. Editado por *In Fluidization VII, Proceedings of the 7th Engineering Foundation Conference on Fluidization*.

- [75] Gidaspow, D., Bezburuah, R., y Ding, J. (1992b). Hydrodynamics of Circulating Fluidized Beds, Kinetic Theory Approach. Editado por *In Fluidization VII, Proceedings of the 7th Engineering Foundation Conference on Fluidization*.
- [76] Gidaspow, D., Jung, J., y Singh, R. K. (2004). Hydrodynamics of fluidization using kinetic theory: an emerging paradigm: 2002 Flour-Daniel lecture. *Powder Technology*, 148(2-3):123–141. Selected papers from the 3b Panel at the 2002 AIChE Meeting in Indianapolis.
- [77] Gilibaro, L., Felice, R. D., y Waldram, S. (1985). Generalized friction factor and drag coefficient correlations for fluid particle interactions. *Chemical Engineering Science*, 40:1817 – 1823.
- [78] Global Data (2014). Clean Coal Technologies, Update 2014 - Global Market Size, Trends, Regulations And Key Country Analysis To 2025. Technical report.
- [79] Goodwin, D. (2009). Cantera: An object-oriented software toolkit for chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes.
- [80] Goodwin, D. G. (2003). An Open-Source, Extensible Software Suite for CVD Process Simulation. Editado por Allendorf, M., Maury, F., and Teyssandier, F., en *Chemical Vapor Deposition XVI and EUROCVI 14*, volumen 2003-08 of *ECS Proceedings*, páginas 155–162. The Electrochemical Society.
- [81] Grant, D. M., Pugmire, R. J., Fletcher, T. H., y Kerstein, A. R. (1989). Chemical model of coal devolatilization using percolation lattice statistics. *Energy & Fuels*, 3(2):175–186.
- [82] Guan, Y., Chang, J., Zhang, K., Wang, B., y Sun, Q. (2014). Three-dimensional CFD simulation of hydrodynamics in an interconnected fluidized bed for chemical looping combustion. *Powder Technology*, 268(0):316–328.
- [83] Gunn, D. J. (1978). Transfer of heat or mass to particles in fixed and fluidised beds. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 21(4):467–476.
- [84] Gómez, M. A., Porteiro, J., Patiño, D., y Míguez, J. L. (2014). CFD modelling of thermal conversion and packed bed compaction in biomass combustion. *Fuel*, 117, Part A(0):716–732.
- [85] Gómez-Barea, A. (2006). *Modelado de los efectos difusionales en la gasificación de partículas de carbonizado de biomasa*. Tesis Doctoral, Escuela Superior de Ingenieros, Universidad de Sevilla, España.
- [86] Gómez-Barea, A. y Leckner, B. (2010). Modeling of biomass gasification in fluidized bed. *Progress in Energy and Combustion Science*, 36(4):444–509.

- [87] Halvorsen, B. (2005). *An Experimental and Computational Study of Flow Behaviour in Bubbling Fluidized Beds*. Tesis Doctoral, The Norwegian University of Science and Technology (NTNU).
- [88] Herzog, N., Schreiber, M., Egbers, C., y Krautz, H. J. (2012). A comparative study of different CFD-codes for numerical simulation of gas–solid fluidized bed hydrodynamics. *Computers & Chemical Engineering*, 39(0):41–46.
- [89] Hestenes, M. R. y Stiefel, E. (1952). Methods of Conjugate Gradients for Solving Linear Systems. *Journal of Research of the National Bureau of Standards*, 49(6):409–436.
- [90] Hindmarsh, A. C. (1980). Lsode and lsodi, two new initial value ordinary differential equation solvers. *SIGNUM Newsl.*, 15(4):10–11.
- [91] Hjertager, B. H. (2007). Multi-fluid CFD Analysis of Chemical Reactors. Editado por Marchisio, D. L., Fox, R. O., Pfeiffer, F., Rammerstorfer, F. G., Salençon, J., Schrefler, B., and Serafini, P., editors, *Multiphase Reacting Flows: Modelling and Simulation*, volumen 492, chapter CISM International Centre for Mechanical Sciences, páginas 125–179. Springer Vienna.
- [92] Hobbs, H., Radulovic, P., y Smooth, L. (1992). Modeling fixed bed coal-gasifiers. *AIChE Journal*, 38:681 – 702.
- [93] Hoomans, B. P. B., Kuipers, J. A. M., Briels, W. J., y Swaaij, W. P. M. v. (1996). Discrete particle simulation of bubble and slug formation in a two-dimensional gas-fluidised bed: A hard-sphere approach. *Chemical Engineering Science*, 51(1):99–118.
- [94] Hu, X., Passalacqua, A., y Fox, R. O. (2015). Application of quadrature-based uncertainty quantification to the NETL small-scale challenge problem SSCP-I. *Powder Technology*, 272(0):100–112.
- [95] Huilin, L. y Gidaspow, D. (2003). Hydrodynamics of binary fluidization in a riser: CFD simulation using two granular temperatures. *Chemical Engineering Science*, 58(16):3777–3792.
- [96] Huilin, L., Gidaspow, D., y Manger, E. (2001). Kinetic theory of fluidized binary granular mixtures. *Phys. Rev. E*, 64(6):061301.
- [97] Huilin, L., Wenti, L., Rushan, B., Lidan, Y., y Gidaspow, D. (2000). Kinetic theory of fluidized binary granular mixtures with unequal granular temperature. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 284(1-4):265–276.

- [98] Huilin, L., Yurong, H., y Gidaspow, D. (2003). Hydrodynamic modelling of binary mixture in a gas bubbling fluidized bed using the kinetic theory of granular flow. *Chemical Engineering Science*, 58(7):1197–1205.
- [99] Iddir, H., Arastoopour, H., y Hrenya, C. M. (2005). Analysis of binary and ternary granular mixtures behavior using the kinetic theory approach. *Powder Technology*, 151(1-3):117–125. Selected papers from the 3b Panel at the 2003 AIChE Meeting in San Francisco.
- [100] (IEA), I. E. A. (2011). Coal information. 2011 edition. documentation for beyond 2020 files. Technical report.
- [101] Igci, Y. y Sundaresan, S. (2011). Constitutive Models for Filtered Two-Fluid Models of Fluidized Gas–Particle Flows. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 50(23):13190–13201.
- [102] Ishii, M. (1975). *Thermo-fluid dynamic theory of two-phase flow*. Eyrolles.
- [103] Issa, R. I. (1986). Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting. *Journal of Computational Physics*, 62(1):40–65.
- [104] Jackson, R. (1963). *The formation and coalescence of drops and bubbles in liquids*. Industrial research fellow report, 1. London The Inst. of Chemical Engineers.
- [105] Jaeger, H. M., Behringer, R. P., y Nagel, S. R. (1996). Granular solids, liquids, and gases. *Reviews of Modern Physics*, 68:1259.
- [106] Jang, J. y Arastoopour, H. (2014). CFD simulation of a pharmaceutical bubbling bed drying process at three different scales. *Powder Technology*, 263(0):14 – 25.
- [107] Jasak, H. (1996). *Error analysis and estimation in the Finite Volume method with applications to fluid flows*. Tesis Doctoral, Imperial College of Science, Technology and Medicine, London.
- [108] Jenkins, J. T. y Mancini, F. (1987). Balance Laws and Constitutive Relations for Plane Flows of a Dense, Binary Mixture of Smooth, Nearly Elastic, Circular Disks. *J. Appl. Mech.*, 54(1):27–34.
- [109] Jenkins, J. T. y Savage, S. B. (1983). A theory for the rapid flow of identical, smooth, nearly elastic, spherical particles. *Journal of Fluid Mechanics*, 130:187–202.
- [110] J.F. Davidson (1961). Symposium on fluidization-discussion. *Transactions of the Institution of Chemical Engineers*, 39:230–232.

- [111] Johnson, P. C. y Jackson, R. (1987). Frictional–collisional constitutive relations for granular materials, with application to plane shearing. *Journal of Fluid Mechanics*, 176:67–93.
- [112] Jovanovic, R., Milewska, A., Swiatkowski, B., Goanta, A., y Spliethoff, H. (2011). Numerical investigation of influence of homogeneous/heterogeneous ignition/combustion mechanisms on ignition point position during pulverized coal combustion in oxygen enriched and recycled flue gases atmosphere. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 54(4):921–931.
- [113] Kawaguchi, Y., Tao, W.-Q., y Ozoe, H. (2002). Checkerboard pressure predictions due to the underrelaxation factor and time step size for a nonstaggered grid with momentum interpolation method. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 41(1):85–94.
- [114] Kee, R. J., Rupley, F. M., Meeks, E., y Miller, J. A. (1996). CHEMKIN-III: A FORTRAN chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical and plasma kinetics. Technical report, Sandia National Laboratories.
- [115] Kee, R. J., Rupley, F. M., Miller, J. A., Coltrin, M. E., Grcar, J. F., Meeks, E., Moffat, H. K., Lutz, A. E., Dixon-Lewis, G., Smooke, M. D., Warnatz, J., Evans, G. H., Larson, R. S., Mitchell, R. E., Petzold, L. R., Reynolds, W. C., Caracotsios, M., Stewart, W. E., Glarborg, P., Wang, C., McLellan, C. L., Adigun, O., Houf, W. G., Chou, C. P., Miller, S. F., Ho, P., Young, P. D., Young, D. J., Hodgson, D. W., Petrova, M. V., y Puduppakkam, K. V. (2007). CHEMKIN Release 4.1.1. Technical report, Reaction Design, San Diego CA.
- [116] Klimanek, A., Adamczyk, W., Katelbach-Woźniak, A., Węcel, G., y Szłęk, A. (2014). Towards a hybrid Eulerian–Lagrangian CFD modeling of coal gasification in a circulating fluidized bed reactor. *Fuel*, 0.
- [117] Knoebig, T., Luecke, K., y Werther, J. (1999). Mixing and reaction in the circulating fluidized bed – A three-dimensional combustor model. *Chemical Engineering Science*, 54(13–14):2151–2160.
- [118] Knowlton, T. M., Patureaux, T., y Barthod, D. (2000). Utilisation de la CFD pour améliorer le fonctionnement du riser d’une unité de FCC (craquage catalytique). *Oil & Gas Science and Technology - Rev. IFP*, 55(2):219–225.
- [119] Kobayashi, H., Howard, J. B., y Sarofim, A. F. (1977). Coal devolatilization at high temperatures. *Symposium (International) on Combustion*, 16(1):411–425.

- [120] Koornneef, J., Junginger, M., y Faaij, A. (2007). Development of fluidized bed combustion—an overview of trends, performance and cost. *Progress in Energy and Combustion Science*, 33(1):19 – 55.
- [121] Kunii, D. y Levenspiel, O. (1967). *Fluidization Engineering*. Robert E. Krieger Publishing CO, Inc, New York.
- [122] Kunz, R. F., Siebert, B. W., Cope, W. K., Foster, N. F., Antal, S. P., and Ettore, S. M. (1998). A coupled phasic exchange algorithm for three-dimensional multi-field analysis of heated flows with mass transfer. *Computers and Fluids*, 27(7):741–768.
- [123] Laboratory, N. E. T. (2010). MFIX Documentation.
- [124] Lathouwers, D. y Bellan, J. (2001). Modeling of dense gas–solid reactive mixtures applied to biomass pyrolysis in a fluidized bed. *International Journal of Multiphase Flow*, 27(12):2155–2187.
- [125] Lim, K., Zhu, J., y Grace, J. (1995). Hydrodynamics of gas-solid fluidization. *International Journal of Multiphase Flow*, 21, Supplement(0):141 – 193. Annual Reviews in Multiphase Flow 1995.
- [126] Liu, J. (2001). *Particle and gas dynamics of high density circulating fluidized beds*. Tesis Doctoral, The University of British Columbia.
- [127] Loison, R. y Chauvin, R. (1964). Pyrolyse rapide du carbon. *Chimie et Industrie*, 91:269.
- [128] Loschkin, M. (2001). Modelling of fractional solid material mass balance of a circulating fluidized bed boiler. Tesis de Master, Lappeenranta University of Technology.
- [129] Lun, C., Savage, S. B., Jeffrey, D. J., y Chepuruiy, N. (1984). Kinetic theories for granular flow: inelastic particles in Couette flow and slightly inelastic particles in a general flow field. *Journal of Fluid Mechanics*, 140:223–256.
- [130] Manchasing, C., Kuchonthara, P., Chalermssinsuwan, B., y Piumsomboon, P. (2013). Experiment and computational fluid dynamics simulation of in-depth system hydrodynamics in dual-bed gasifier. *International Journal of Hydrogen Energy*, 38(25):10417–10430.
- [131] Manger, E. (1996). *Modelling and simulation of gas/solid flow in curvilinear coordinates*. Tesis Doctoral, Telemark Institute of Technology, Norway.
- [132] Mathiesen, V., Solberg, T., y Hjertager, B. H. (1998). *FLOTRACS-MP-3D*. Tek Report. Aalborg Universitetsforlag.

- [133] Mathiesen, V., Solberg, T., y Hjertager, B. H. (2000a). An experimental and computational study of multiphase flow behavior in a circulating fluidized bed. *International Journal of Multiphase Flow*, 26(3):387–419.
- [134] Mathiesen, V., Solberg, T., y Hjertager, B. H. (2000b). Predictions of gas/particle flow with an Eulerian model including a realistic particle size distribution. *Powder Technology*, 112(1-2):34–45.
- [135] Mcnaught, A. D. y Wilkinson, A. (2014). *IUPAC. Compendium of Chemical Terminology, 2nd ed. (the "Gold Book")*. Blackwell Scientific Publications; 2nd Revised edition.
- [136] Mei, C., Zhou, J., Peng, X., Zhou, N., y Zhou, P. (2010). *Simulation and Optimization of Furnaces and Kilns for Nonferrous Metallurgical Engineering*. Springer.
- [137] Mellin, P., Kantarelis, E., y Yang, W. (2014). Computational fluid dynamics modeling of biomass fast pyrolysis in a fluidized bed reactor, using a comprehensive chemistry scheme. *Fuel*, 117, Part A:704 – 715.
- [138] Mellin, P., Zhang, Q., Kantarelis, E., y Yang, W. (2013). An Euler–Euler approach to modeling biomass fast pyrolysis in fluidized-bed reactors - Focusing on the gas phase . *Applied Thermal Engineering* , 58(1–2):344–353.
- [139] Mencinger, J. y Iztok, Z. (2007). On the finite volumen discretization of discontinuous body force field on collocated grid: Application to VOF method. *Journal of Computational Physics*, 221(2):524–538.
- [140] MFS (2013a). NETL Challenge Problem: Small Scale Problem I.
- [141] MFS (2013b). NETL Challenge Problem: Small Scale Problem I. Brochure.
- [142] Motlagh, A. A., Grace, J. R., Salscudean, M., y Hrenya, C. (2014). New structure-based model for eulerian simulation of hydrodynamics in gas–solid fluidized beds of geldart group “a” particles. *Chemical Engineering Science*, 120(0):22 – 36.
- [143] Murray, J. (1965). On the mathematics of fluidization, part 1: Fundamental equations and wave propagation. *Journal Fluid Mechanics*, 21(3):465 – 493.
- [144] Musser, J., Syamlal, M., Shahnam, M., y Huckaby, D. (2015). Constitutive equation for heat transfer caused by mass transfer . *Chemical Engineering Science* , 123(0):436–443.
- [145] Myöhänen, K. (2011). *Modelling of combustion and sorbent reactions in three-dimensional flow environment of a circulating fluidized bed furnace*. Tesis Doctoral, Lappeenranta University of Technology, Lappeenranta, Finland.

- [146] N. Vaidya, P. J. D. y Singhal, A. K. (1995). Two-fluid model finite volumen formulation for computing two-phase flows in complex geometries. Editado por *ASME/JSME Fluids Engineering and Laser Anemometry Conf. and Exhibition*, volumen 225, páginas 179–191, Hilton Head, SC, USA. Royal Society.
- [147] Ng, B. H., Ding, Y., y Ghadiri, M. (2008). Assessment of the kinetic-frictional model for dense granular flow. *Particuology*, 6(1):50–58. Selected papers from 1st UK-China Particle Technology Forum.
- [148] Niksa, S. y Kerstein, A. R. (1991). FLASHCHAIN theory for rapid coal devolatilization kinetics. 1. Formulation. *Energy & Fuels*, 5(5):647–665.
- [149] Niksa, S. y Lau, C. W. (1993). Global rates of devolatilization for various coal types. *Combustion and Flame*, 94:293–307.
- [150] Niksa, S., Liu, G.-s., y Hurt, R. H. (2003). Coal conversion submodels for design applications at elevated pressures. Part I. devolatilization and char oxidation. *Progress in Energy and Combustion Science*, 29(5):425–477.
- [151] Ocampo, A., Arenas, E., Chejne, F., Espinel, J., Londoño, C., Aguirre, J., and Perez, J. D. (2003). An experimental study on gasification of Colombian coal in fluidised bed. *Fuel*, 82(2):161–164.
- [152] Ogawa, S., Umemura, A., y Oshima, N. (1980). On the equations of fully fluidized granular materials. *Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik ZAMP*, 31(4):483–493.
- [153] Oliveira, P. J. (1992). *Computer modelling of multidimensional multiphase flow and application to T-junctions*. Tesis Doctoral, Imperial College of Science, Technology and Medicine, London.
- [154] Oliveira, P. J. y Issa, R. I. (2003). Numerical aspects of an algorithm for the Eulerian simulation of two-phase flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 43(10-11):1177–1198.
- [155] OpenCFD Limited (2008a). *OpenFOAM 1.5 Programmers Guide*, 1.5 edition.
- [156] OpenCFD Limited (2008b). *OpenFOAM 1.5 User Guide*, 1.5 edition.
- [157] OpenFOAM (2011). OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox.
- [158] Park, I. K., Cho, H. K., Yoon, H. Y., y Jeong, J. J. (2009). Numerical effects of the semi-conservative form of momentum equations for multi-dimensional two-phase flows. *Nuclear Engineering and Design*, 239(11):2365–2371.

- [159] Parker, J. M. (2014). CFD model for the simulation of chemical looping combustion . *Powder Technology* , 265(0):47–53. Selected Papers from the 2012 NETL Multiphase Flow Workshop .
- [160] Passalacqua, A. y Fox, R. O. (2011). Implementation of an iterative solution procedure for multi-fluid gas–particle flow models on unstructured grids. *Powder Technology*, 213(1-3):174–187.
- [161] Patankar, S. V. y Spalding, D. B. (1972). A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 15(10):1787–1806.
- [162] Patil, D. J., Annaland, M. v. S., y Kuipers, J. A. M. (2005). Critical comparison of hydrodynamic models for gas–solid fluidized beds—Part I : bubbling gas–solid fluidized beds operated with a jet. *Chemical Engineering Science*, 60(1):57–72.
- [163] P.Basu (2006). *Combustion and Gasification in Fluidized Beds*. CRC Press.
- [164] Peirano, E. (1998). *Modelling and Simulation of Turbulent Gas-Solid Flow Applied to Fluidization*. Tesis Doctoral, Chalmers University of Technology, Sweden.
- [165] Petersen, I. y Werther, J. (2005). Experimental investigation and modeling of gasification of sewage sludge in the circulating fluidized bed. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 44(7):717–736.
- [166] Pigford, R. L. y Baron, T. (1965). Hydrodynamic stability of fluidized bed. *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, 4:81 – 87.
- [167] Pikkarainen, T. (2001). Characterization method for comminution behavior of limestone and fuel ash in a circulating fluidized bed boiler. Tesis de Master, Lappeenranta University of Technology.
- [168] Rahaman, M. F., Naser, J., y Witt, P. J. (2003). An unequal granular temperature kinetic theory: description of granular flow with multiple particle classes. *Powder Technology*, 138(2-3):82–92.
- [169] Reh, L. (1986). the circulating fluid bed reactor - a key to efficient gas/solid processing. Editado por Basu, P., editor, *Circulating Fluidized Bed Technology*, páginas 105 – 118. Pergamon, Oxford.
- [170] Reh, L. (2003). Development potentials and research needs in circulating fluidized bed combustion. *China Particuology*, 1(5):185–200.
- [171] Rhie, C. M. y Chow, W. L. (1983). Numerical Study of the Turbulent Flow Past an Airfoil with Trailing Edge Separation. *AIAA Journal*, 21(11):1525.

- [172] Richardson, J. R. y Zaki, W. N. (1954). Sedimentation and Fluidization: Part I. *Trans. Inst. Chem. Eng.*, 32:35–53.
- [173] Ruckenstein, E. (1967). Mass transfer between a single drop and a continuous phase. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 10:1785–1792.
- [174] Rusche, H. (2002). *Computational fluid dynamics of dispersed two-phase flows at high phase fractions*. Tesis Doctoral, Imperial College of Science, Technology and Medicine, London.
- [175] Savage, S. B. (1983). Granular flows down rough inclines - review and extension. Editado por J. T. Jenkins, M. S. e. a., editor, *Proceedings of U.S.-Japan Senubar on New Models and Constitutive Relations in the Mechanics of granular materials*, Ansterdam. Elsevier.
- [176] Schaeffer, D. (1987). Instability in the Evolution Equations Describing Incompressible Granular Flow. *J. Diff. Eq.*, 66:19–50.
- [177] Seshadri, Y. y Silva Pereira, R. O. d. (1986). Comparison of Formulae for Determining Heat Transfer Coefficient of Packed Beds. *Transactions of the Iron and Steel Institute of Japan*, 26(7):604–610.
- [178] Shah, S., Myöhänen, K., Kallio, S., y Hyppänen, T. (2015). CFD simulations of gas–solid flow in an industrial-scale circulating fluidized bed furnace using subgrid-scale drag models. *Particuology*, 18(0):66 – 75.
- [179] Shahinpoor, M. y Ahmadi, G. (1983). A kinetic theory for the rapid flow of rough inelastic spherical particles and the evolution of fluctuations. *In Advances in the Mechanics and Flow of Granular Materials*, 2:641–667.
- [180] Shen, W. Z., Michelsen, J., y Sorensen, J. N. (2001). Improved Rhie-Chow Interpolation for Unsteady Flow Computations. *AIAA Journal*, 39(12):2406–2409.
- [181] Shi, X., Wu, Y., Lan, X., Liu, F., y Gao, J. (2015). Effects of the riser exit geometries on the hydrodynamics and solids back-mixing in cfb risers: 3d simulation using cpdf approach. *Powder Technology*, 284:130 – 142.
- [182] Shuai, W., Huang, L., Zhenhua, H., Huilin, L., Guodong, L., Dan, L., and Feixiang, Z. (2014a). Numerical modeling of a bubbling fluidized bed coal gasifier by kinetic theory of rough spheres . *Fuel* , 130(0):197–202.
- [183] Shuai, W., Juhui, C., Guodong, L., Huilin, L., Feixiang, Z., y Yanan, Z. (2014b). Predictions of coal combustion and desulfurization in a CFB riser reactor by kinetic theory of granular mixture with unequal granular temperature . *Fuel Processing Technology* , 126(0):163–172.

- [184] Shuai, W., Tianyu, Z., Guodong, L., Huilin, L., y Liyan, S. (2015). Multi-scale heat transfer in fluidized bed reactors by Eulerian CFD modeling . *Fuel* , 139(0):646–651.
- [185] Shuai, W., Zhenhua, H., Huilin, L., Goudong, L., Jiaying, W., y Pengfei, X. (2012). A bubbling fluidization model using kinetic theory of rough spheres. *AIChE Journal*, 58(2):440–455.
- [186] Singh, R. I., Brink, A., y Hupa, M. (2013). CFD modeling to study fluidized bed combustion and gasification . *Applied Thermal Engineering* , 52(2):585–614.
- [187] Slezak, A., Kuhlman, J. M., Shadle, L. J., Spenik, J., y Shi, S. (2010). CFD simulation of entrained-flow coal gasification: Coal particle density/sizefraction effects. *Powder Technology*, 203(1):98–108. Selected Papers from the 2009 NETL Multiphase Flow Workshop.
- [188] Smoot, L. D. y Smith, P. J. (1985). *Coal Combustion and Gasification*. The Plenum Chemical Engineering Series. Springer.
- [189] Solomon, P. R., Fletcher, T. H., y Markham, J. R. (1993a). Progress in coal pyrolysis. *Fuel*, 2(5):587–597.
- [190] Solomon, P. R., Hamblen, D. G., Serio, M. A., Yu, Z.-Z., y Charpenay, S. (1993b). A characterization method and model for predicting coal conversion behaviour. *Fuel*, 72(4):469–488.
- [191] Song, C., Wang, P., y Makse, H. (2008). A phase diagram for jammed matter. *Nature*, 453(7195):629–632.
- [192] Soo, S. L. (1967). *Fluid Dynamics of Multiphase Systems*. Blaisdell, Waltham, Mass.
- [193] Souza Santos, M. (2004). *Solid Fuels Combustion and Gasification. Modeling, simulation and Equipment Operation*. Mechanical Engineering. Marcel Dekker, Inc, New York.
- [194] Souza-Santos, M. D. (1989). Comprehensive modelling and simulation of fluidized bed boilers and gasifiers. *Fuel*, 68(12):1507 – 1521.
- [195] Spalding, D. B. (1976). The Calculation of free-convection phenomena in gas-liquid mixtures. Editado por Afgan, N. and Spalding, D., en *Turbulent Buoyant Convection or Report HTS/76/11, Mech. Eng. Imperial College, London, 1976*, páginas 569–586, Hemisphere, Washington.

- [196] Spalding, D. B. (1981). Numerical Computation of Multi-phase Flows: A course of twelve lectures and computer workshops. Editado por *In Von Karman Inst. for Fluid Dyn. Numerical Computation of Multi-Phase Flows*, páginas 1–118.
- [197] Spalding, D. B. (1982). The 'Shadow' Method of Particle-Size Calculation in Two-Phase Combustion. Editado por *Proceedings of the Nineteenth Symposium (International) on Combustion*, páginas 941–952, Pittsburgh.
- [198] Spalding, D. B. (1993). Mathematical Methods in Nuclear-Reactor Thermal Hydraulics. Editado por *Keynote Paper. ANS Meeting on Nuclear-Reactor Thermal Hydraulics*, Saratoga, NY.
- [199] Squires, A. M. (1986). The story of fluid catalytic cracking: The first circulating fluid bed. Editado por Basu, P., editor, *Circulating Fluidized Bed Technology*, páginas 1 – 19. Pergamon Press, Oxford.
- [200] Srivastava, A., Agrawal, K., Sundaresan, S., Karri, S. B. R., y Knowlton, T. M. (1998). Dynamics of gas-particle flow in circulating fluidized beds. *Powder Technology*, 100(2-3):173–182.
- [201] Srivastava, A. y Sundaresan, S. (2003). Analysis of a frictional-kinetic model for gas-particle flow. *Powder Technology*, 129(1-3):72–85.
- [202] Srujal Shah (2012). *Analysis and validation of space averaged drag model for numerical simulations of gas-solid flows in fluidized beds*. Tesis Doctoral, Lappeenranta University of Technology, Lappeenranta, Finland.
- [203] Sun, J. (2007). *Multiscale modeling of segregation in granular flows*. Tesis Doctoral, Iowa State University.
- [204] Sutkar, V. S., Deen, N. G., Salikov, V., Antonyuk, S., Heinrich, S., and Kuipers, J. A. M. (2015). Experimental and numerical investigations of a pseudo-2D spout fluidized bed with draft plates. *Powder Technology*, 270, Part B(0):537–547. 6th International Workshop on Granulation: Granulation across the length scales.
- [205] Syamlal, M. (1985). *Multiphase hydrodynamics of gas-solids flow*. Tesis Doctoral, Illinois Institute of Technology, Chicago.
- [206] Syamlal, M. (1987). The Particle-Particle Drag Term in a Multiparticle Model of Fluidization. Editado por *DOE/MC/21353-2373, NTIS/DE87006500*, National Technical Information Service, Springfield, VA.
- [207] Syamlal, M. y Gidaspow, D. (1985). Hydrodynamics of fluidization: Prediction of wall to bed heat transfer coefficients. *AICHE J*, 31:127–135.

- [208] Syamlal, M. y O'Brien, T. (1987). The Derivation of a Drag Coefficient Formula from Velocity-Voidage Correlations. Editado por *Unpublished report*.
- [209] Syamlal, M., Rogers, W., y O'Brien, T. J. (1993). MFIx Documentation: Volume 1, Theory Guide. Editado por *DOE/METC-9411004, NTIS/DE9400087*, National Technical Information Service, Springfield, VA.
- [210] Tandon, M. P. y Karnik, A. U. (2014). Simulation of rectangular fluidized bed with Geldart d particles. Editado por *10th International Conference on CFD in Oil & Gas, Metallurgical and Process Industries*, SINTEF, Trondheim, Norway.
- [211] Tenneti, S., Sun, B., Garg, R., y Subramaniam, S. (2013). Role of fluid heating in dense gas–solid flow as revealed by particle-resolved direct numerical simulation . *International Journal of Heat and Mass Transfer* , 58(1–2):471–479.
- [212] The Combustion Systems Ltd. (2005). Fluidised Combustion Process Design Manual. Technical report, The Combustion Systems Ltd.
- [213] Tripathi, A. y Khakhar, D. V. (2011). Rheology of binary granular mixtures in the dense flow regime. *Physics of Fluids*, 23(11):113302.
- [214] Tsuji, Y., Kawaguchi, T., y Tanaka, T. (1993). Discrete particle simulation of two-dimensional fluidized bed. *Powder Technology*, 77(1):79 – 87.
- [215] Tsuo, Y. P. y Gidaspow, D. (1990). Computation of Flow Patterns in Circulating Fluidized Beds. *AIChE Journal*, 36(6):885–896.
- [216] Ubhayakar, S. K., Stickler, D. B., Rosenberg, C. W. V., , J., y Gannon, R. E. (1977). Rapid devolatilization of pulverized coal in hot combustion gases. *Symposium (International) on Combustion*, 16(1):427–436.
- [217] Upadhyay, M. y Park, J.-H. (2015). CFD simulation via conventional Two-Fluid Model of a circulating fluidized bed riser: Influence of models and model parameters on hydrodynamic behavior . *Powder Technology* , 272(0):260–268.
- [218] van der Vorst, H. (1992). Bi-CGSTAB: A Fast and Smoothly Converging Variant of Bi-CG for the Solution of Nonsymmetric Linear Systems. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 13(2):631–644.
- [219] van Wachem, B. G. M., Schouten, J. C., van den Bleek, C. M., Krishna, R., and Sinclair, J. L. (2001). Cfd modeling of gas-fluidized beds with a bimodal particle mixture. *AIChE Journal*, 47(6):1292–1302.

- [220] Vascellari, M., Roberts, D. G., Hla, S. S., Harris, D. J., y Hasse, C. (2015). From laboratory-scale experiments to industrial-scale cfd simulations of entrained flow coal gasification. *Fuel*, 152:58 – 73. International Freiberg Conference on IGCC & XtL Technologies in 2014.
- [221] Vepsäläinen, A., Shah, S., Ritvanen, J., y Hyppänen, T. (2014). Interphase mass transfer coefficient in fluidized bed combustion by Eulerian CFD modeling . *Chemical Engineering Science* , 106(0):30–38.
- [222] Wachem, B. G. M. v. y Almstedt, A. E. (2003). Methods for multiphase computational fluid dynamics. *Chemical Engineering Journal*, 96(1–3):81–98. Festschrift Prof. Cor M. van den Bleek.
- [223] Wang, C., Lv, Z., y Li, D. (2008). Experimental study on gas-solids flows in a circulating fluidised bed using electrical capacitance tomography. *Powder Technology*, 185(2):144–151.
- [224] Wang, J., Hoef, M. A. v. d., y Kuipers, J. A. M. (2010a). CFD study of the minimum bubbling velocity of Geldart A particles in gas-fluidized beds. *Chemical Engineering Science*, 65(12):3772–3785.
- [225] Wang, W., Lu, B., Zhang, N., Shi, Z., y Li, J. (2010b). A review of multiscale CFD for gas-solid CFB modeling. *International Journal of Multiphase Flow*, 36(2):109–118. Special Issue: Multiphase Flow Research in China.
- [226] Wang, X., Jin, B., y Zhong, W. (2009). Three-dimensional simulation of fluidized bed coal gasification. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 48(2):695–705.
- [227] Weller, H. G. (2002). Derivation, modelling and solution of the conditionally averaged two-phase flow equations. Technical Report TR/HGW/02, Nabla Ltd.
- [228] Wen, C. Y. y Yu, Y. H. (1966). Mechanics of Fluidization. *Chem. Eng. Prog. Symp. Series*, 62:100–111.
- [229] Wen, C. Y., Chen, H., y Onozaki, M. (1982). User's Manual for Computer Simulation and Design of the Moving Bed Gasifier. Technical Report DOE/MC/16474-1390 (DE83009533), United States Department Of Energy, Morgantow Energy Technology Center, Morgantown Virginia.
- [230] Wilde, J. D., Marin, G. B., y Heynderickx, G. J. (2003). The effects of abrupt T-outlets in a riser: 3D simulation using the kinetic theory of granular flow. *Chemical Engineering Science*, 58(3–6):877–885. 17th International Symposium of Chemical Reaction Engineering (IS CRE 17).

- [231] Williams, A., Backreedy, R., Habib, R., Jones, J. M., y Pourkashanian, M. (2002). Modelling coal combustion: the current position. *Fuel*, 81(5):605–618.
- [232] Williams, A., Pourkashanian, M., y Jones, J. M. (2001). Combustion of pulverised coal and biomass. *Progress in Energy and Combustion Science*, 27(6):587–610.
- [233] Winter, F., Prah, M. E., y Hofbauer, H. (1997). Temperatures in a fuel particle burning in a fluidized bed: The effect of drying, devolatilization, and char combustion. *Combustion and Flame*, 108(3):302–314.
- [234] Xiong, Q., Aramideh, S., Passalacqua, A., y Kong, S.-C. (2014). Biotc: An open-source CFD code for simulating biomass fast pyrolysis. *Computer Physics Communications*, 185(6):1739 – 1746.
- [235] Xiong, Q. y Kong, S.-C. (2014). Modeling effects of interphase transport coefficients on biomass pyrolysis in fluidized beds. *Powder Technology*, 262(0):96 – 105.
- [236] Xiong, Q., Kong, S.-C., y Passalacqua, A. (2013). Development of a generalized numerical framework for simulating biomass fast pyrolysis in fluidized-bed reactors. *Chemical Engineering Science*, 99:305 – 313.
- [237] Yang, N., Wang, W., Ge, W., y Li, J. (2003). CFD simulation of concurrent-up gas–solid flow in circulating fluidized beds with structure-dependent drag coefficient. *Chemical Engineering Journal*, 96(1–3):71–80. Festschrift Prof. Cor M. van den Bleek.
- [238] Yilmaz, A. y Levy, E. K. (2001). Formation and dispersion of ropes in pneumatic conveying. *Powder Technology*, 114(1–3):168 – 185.
- [239] Yu, B., Tao, W.-Q., Wei, J.-J., Kawaguchi, Y., Tagawa, T., y Ozoe, H. (2002). Discussion on momentum interpolation method for collocated grids of incompressible flow. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 42(2):141–166.
- [240] Yu, L., Lu, J., Zhang, X., y Zhang, S. (2007). Numerical simulation of the bubbling fluidized bed coal gasification by the kinetic theory of granular flow (KTGF). *Fuel*, 86(5-6):722–734.
- [241] Yu, X., Hassan, M., Ocone, R., y Makkawi, Y. (2015). A CFD study of biomass pyrolysis in a downer reactor equipped with a novel gas–solid separator-II thermochemical performance and products . *Fuel Processing Technology* , 133(0):51–63.
- [242] Zhong, W., Xie, J., Shao, Y., Liu, X., y Jin, B. (2015). Three-dimensional modeling of olive cake combustion in CFB. *Applied Thermal Engineering*, 88:322 – 333. Special Issue for International Heat Transfer Symposium 2014.

-
- [243] Zhou, Q. y Wang, J. (2015). CFD study of mixing and segregation in CFB risers: Extension of EMMS drag model to binary gas–solid flow . *Chemical Engineering Science* , 122(0):637–651.