

**MODELAMIENTO Y SOLUCIÓN NUMÉRICA DEL PROCESO DE CO-
COMBUSTIÓN DE CARBÓN Y GAS NATURAL EN UN HORNO DE
CLINKERIZACIÓN**

CESAR LUIS BARRAZA BOTET

**UNIVERSIDAD DEL NORTE
DIVISIÓN DE INGENIERÍAS
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MECÁNICA
BARRANQUILLA**

2010

**MODELAMIENTO Y SOLUCIÓN NUMÉRICA DEL PROCESO DE CO-
COMBUSTIÓN DE CARBÓN Y GAS NATURAL EN UN HORNO DE
CLINKERIZACIÓN**

Tesis de grado para optar al Título de Magíster en Ingeniería Mecánica

CESAR LUIS BARRAZA BOTET

DIRECTOR
ANTONIO BULA SILVERA, Ph.D.
Ingeniero Mecánico

**UNIVERSIDAD DEL NORTE
DIVISIÓN DE INGENIERÍAS
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MECÁNICA
BARRANQUILLA**

2010

Nota de aceptación:

Presidente del jurado

Jurado

Jurado

Barranquilla, Junio de 2010

AGRADECIMIENTOS

A directivos, docentes y asesores de la Universidad del Norte por su guía permanente, tanto en mi formación como magister, como en el desarrollo de este proyecto.

A la Universidad del Norte por ser un ente de formación académica, cultural y de valores.

A todos los que en forma directa o indirecta contribuyeron a la culminación de mis estudios de maestría.

CESAR.

DEDICATORIA

Este proyecto es un homenaje a mi padre Luis Enrique Barraza, de quien aún recuerdo sus enseñanzas, que trato de aplicar en mi vida.

Quiero agradecerle a mi madre Enelsa Botet por sus sacrificios, a mis hermanas Anyily y Farleys por su apoyo y a mi sobrina Maria Angélica.

También le doy gracias a mi novia Nataly Ditta por su amor incondicional y su comprensión en los momentos difíciles.

A mi tutor, el Ingeniero Antonio Bula, le agradezco por creer en mis capacidades y por darme las herramientas para alcanzar esta meta.

CESAR LUIS BARRAZA BOTET

CONTENIDO

	Pag.
1. INTRODUCCIÓN	16
1.1 PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA	17
1.2 JUSTIFICACIÓN.....	18
1.3 ANTECEDENTES.....	19
1.4 OBJETIVOS	20
1.4.1 Objetivo General	20
1.4.2 Objetivos Específicos	20
1.5 METODOLOGÍA	21
2. MARCO DE REFERENCIA.....	23
2.1 MARCO TEÓRICO	23
2.1.1 Combustión	23
2.1.2 Llama de Difusión Turbulenta	23
2.1.3 Combustión de Sólidos.....	39
2.2 ESTADO DEL ARTE	50
3. MODELAMIENTO MATEMÁTICO.....	53
3.1 PROPIEDADES TERMOFÍSICAS.....	54
3.1.1 Densidad	54
3.1.2 Calor Específico	55
3.1.3 Viscosidad Molecular	55
3.1.4 Conductividad Térmica.....	56
3.1.5 Difusividad Molecular.....	56
3.2 CONSERVACIÓN DE MASA Y MOMENTO.....	57
3.2.1 Relaciones constitutivas	58
3.3 CONSERVACIÓN DE ENERGÍA	59
3.3.1 Entalpía Termoquímica	59
3.3.2 Relaciones de Flujo Difusivo	60

3.4	CONSERVACIÓN DE ESPECIES.....	61
3.4.1	Relaciones de Flujo Difusivo	61
3.5	TURBULENCIA.....	62
3.5.1	Modelo k- ϵ	63
3.5.2	Relaciones Constitutivas	63
3.5.3	Ecuaciones de Conservación.....	64
3.5.4	Funciones de Pared.....	66
3.6	FLUJO DE FASE DISPERSA	70
3.6.1	Enfoque Lagrangeano	71
3.6.2	Ecuaciones de Conservación.....	71
3.6.3	Dispersión Turbulenta.....	76
3.7	COMBUSTIÓN GASEOSA	78
3.7.1	Modelo “Eddy Break-up” Turbulento.....	78
3.8	COMBUSTIÓN DE CARBÓN	83
3.8.1	Devolatilización	83
3.8.2	Quemado del Carbón Fijo	86
3.8.3	Combustión de Volátiles.....	89
3.9	FORMACIÓN DE NO _x	89
3.9.1	NO _x Térmico	90
3.9.2	NO _x Prompt.....	95
3.9.3	NO _x de Combustible.....	97
3.10	RADIACIÓN.....	101
3.10.1	Método de Ordenadas Discretas.....	101
4.	SOLUCIÓN NUMÉRICA.....	106
4.1	DOMINIO COMPUTACIONAL.....	106
4.1.1	Geometría del Sistema	106
4.1.2	Extensión del Dominio.....	109
4.1.3	Mallado	111
4.2	DISCRETIZACIÓN	114

4.2.1	Formulación General	114
4.2.2	Flujo de Fase Dispersa.....	120
4.2.3	Radiación.....	123
4.3	ALGORITMO DE SOLUCIÓN.....	125
4.3.1	Algoritmo SIMPLE.....	125
4.3.2	Sobre-relajamiento.....	127
4.3.3	Convergencia	128
4.4	CONDICIONES DE FRONTERA.....	130
4.4.1	Pared Interna del Horno	130
4.4.2	Pared del Aislamiento Térmico del Quemador	131
4.4.3	Paredes Externa e Interna del Quemador.....	132
4.4.4	Salida de Gases de Combustión	133
4.4.5	Entrada de Metano	134
4.4.6	Entrada de Mezcla Aire-Carbón.....	135
4.4.7	Fronteras Cíclicas	138
4.5	ESTRATEGÍA DE SOLUCIÓN	138
4.5.1	Combustión de Metano	139
4.5.2	Tasa Constante de Devolatilización de Carbón.....	141
4.5.3	Co-combustión Convectiva	142
4.5.4	Co-combustión Global	142
4.6	INDEPENDENCIA DE MALLADO	144
5.	ANÁLISIS DE RESULTADOS.....	149
5.1	ANÁLISIS GENERAL	149
5.2	FLUJO DE FASE DISPERSA	155
5.3	DEVOLATILIZACIÓN	158
5.4	FORMACIÓN DE NO _x	161
5.5	RADIACIÓN	162
5.6	CONDICIONES DE SALIDA	165
5.6.1	Temperatura.....	165

5.6.2	Inquemados.....	166
5.6.3	Combustión Incompleta.....	167
5.6.4	Óxidos Nitrosos.....	169
CONCLUSIONES.....		170
BIBLIOGRAFÍA.....		172
ANEXO A.....		180

LISTA DE TABLAS

	pag.
Tabla 1. Coeficientes para el modelo de turbulencia estándar $k-\epsilon$	66
Tabla 2. Valores de constantes para la función de pared de velocidad.	68
Tabla 3. Valores de referencia para mallado global.....	112
Tabla 4. Valores de mallado para el quemador.....	113
Tabla 5. Valores de mallado para el aislamiento del quemador.	113
Tabla 6. Valores de mallado para redondeos de la cubierta del horno.	113
Tabla 7. Condiciones de frontera para la pared interna del horno.....	131
Tabla 8. Condiciones de frontera para el aislamiento del quemador.....	131
Tabla 9. Condiciones de frontera para las paredes del quemador.	133
Tabla 10. Condiciones de frontera para la salida de gases de combustión.	133
Tabla 11. Condiciones de frontera para la entrada de metano.	134
Tabla 12. Condiciones de frontera para la entrada de aire.	136
Tabla 13. Análisis próximo y último del carbón utilizado.	136
Tabla 14. Condiciones de frontera y propiedades del carbón de alimentación....	137
Tabla 15. Condiciones iniciales para el modelo de combustión de metano.....	139
Tabla 16. Sobre-relajamiento para la combustión de metano.....	140
Tabla 17. Sobre-relajamiento la tasa constante de devolatilización.	141
Tabla 18. Sobre-relajamiento para la co-combustión convectiva.....	142
Tabla 19. Sobre-relajamiento para la co-combustión global.	143
Tabla 20. Valores de referencia para mallado global para 21505 celdas.....	144

Tabla 21. Valores de referencia para mallado global para 35417 celdas..... 145

Tabla 22.Valores de referencia para mallado global para 40062 celdas..... 145

LISTA DE FIGURAS

	pag.
Figura 1. Relación de estado simplificada para la temperatura.	31
Figura 2. Longitudes de llamas tipo chorro correlacionadas con el número de Froude de la llama.	34
Figura 3. Fracciones radiantes de llamas tipo chorro en función de la tasa de liberación de calor y el tamaño del quemador.	37
Figura 4. Esquema general de la combustión de carbono mostrando las reacciones heterogéneas y homogéneas globales.	42
Figura 5. Perfiles de Temperatura y de fracciones másicas de especies para un modelo de doble película de una partícula esférica de carbono.	44
Figura 6. Flujos másicos de especies en la superficie del carbono y en la llama plana.	46
Figura 7. Parámetros dimensionales para definir la rugosidad.	68
Figura 8. Movimiento de una partícula desde el punto de vista Lagrangeano.	73
Figura 9. Tasa de devolatilización para carbones sub-bituminosos (puntos), bituminosos hv (continua) y bituminosos lv (trazos).	85
Figura 10. Vista Simplificada de la oxidación del carbón fijo.	86
Figura 11. Mecanismo de reacción global de fase gaseosa de De Soete.	97
Figura 12. Dependencia de η respecto a la relación de equivalencia para cuatro tipos de carbón fijo. "Char G" proviene de un carbón subbituminoso.	99
Figura 13. Distribución axial de parámetros de un combustor tubular de mezclas gas-carbón.	104

Figura 14. Montaje del quemador en el horno.....	107
Figura 15. Vista lateral de la parte externa del quemador.	107
Figura 16. Entradas de gas natural y de la mezcla aire-carbón al quemador.	108
Figura 17. Tubo interno del quemador con estabilizador de llama (bluff body). ..	108
Figura 18. Vista seccionada del quemador.....	109
Figura 19. Vista seccionada del conjunto quemador-horno.	109
Figura 20. Extensión del dominio computacional.	111
Figura 21. Mallado final del dominio computacional.	112
Figura 22. Zonas del dominio computacional con refinamiento.	113
Figura 23. Ilustración de una celda con nodo central P y otra celda vecina con nodo central N.....	116
Figura 24. Ilustración de nodos indicando la dirección del flujo convectivo para diferenciación.	119
Figura 25. Ilustración de una 'parcela' Lagrangeana atravesando una celda computacional.	121
Figura 26. Angulo sólido mostrado como parte de un hemisferio.	124
Figura 27. Localización de la pared interna del horno.	130
Figura 28. Localización del aislamiento térmico del quemador.....	132
Figura 29. Localización de la pared externa del quemador.....	132
Figura 30. Localización de la pared interna del quemador.....	133
Figura 31. Localización de la salida de gases de combustión.	134
Figura 32. Localización de la entrada de metano.	135
Figura 33. Localización de la entrada de la mezcla aire-carbón.	137

Figura 34. Localización de las fronteras cíclicas.	138
Figura 35. Localización de las celdas utilizadas para el proceso de ignición.....	140
Figura 36. Comportamiento de los residuales durante la solución del modelo global.	143
Figura 37. Malla de 21505 celdas para estudio de independencia de mallado. ..	144
Figura 38. Malla de 35417 celdas para estudio de independencia de mallado. ..	145
Figura 39. Malla de 40062 celdas para estudio de independencia de mallado. ..	146
Figura 40. Temperatura a lo largo del horno para la malla de 21505 celdas.	147
Figura 41. Temperatura a lo largo del horno para la malla de 35417 celdas.	147
Figura 42. Temperatura a lo largo del horno para la malla de 40062 celdas.	148
Figura 43. Perfil de concentraciones de CH ₄	149
Figura 44. Detalle del perfil de concentraciones de CH ₄	150
Figura 45. Perfil de concentraciones de CO.	151
Figura 46. Detalle del perfil de concentraciones de CO.	151
Figura 47. Perfil de concentraciones de CO ₂	152
Figura 48. Perfil de concentraciones de H ₂	152
Figura 49. Perfil de concentraciones de O ₂	153
Figura 50. Vectores velocidad de la fase continua.....	154
Figura 51. Detalle de vectores velocidad de la fase continua.	154
Figura 52. Masa de las partículas de carbón.....	155
Figura 53. Detalle de masa de las partículas de carbón.....	156
Figura 54. Temperatura de las partículas de carbón.	157

Figura 55. Detalle de temperatura de las partículas de carbón.....	157
Figura 56. Detalle de vectores de velocidad de las partículas de carbón.	158
Figura 57. Perfil de concentraciones de CHO.	159
Figura 58. Detalle del perfil de concentraciones de CHO.....	159
Figura 59. Perfil de concentraciones de H ₂ O.	160
Figura 60. Perfil de concentraciones de HCN.	161
Figura 61. Perfil de concentraciones de NO.	162
Figura 62. Perfil de temperatura para el modelo de co-combustión convectivo. .	163
Figura 63. Perfil de temperatura para el modelo de co-combustión global.	163
Figura 64. Temperatura de la pared interna del horno para los modelos convectivo y global.	164
Figura 65. Distribución radial de la temperatura a la salida del dominio.	165
Figura 66. Distribución radial de CH ₄ a la salida del dominio.....	166
Figura 67. Distribución radial de CHO a la salida del dominio.	167
Figura 68. Distribución radial de CO a la salida del dominio.	168
Figura 69. Distribución radial de H ₂ a la salida del dominio.	168
Figura 70. Distribución radial de NO a la salida del dominio.	169

1. INTRODUCCIÓN

La gran cantidad de energía térmica proveniente de la transformación de sustancias con alto potencial químico, le da relevancia a la combustión entre los distintos procesos de transformación energética. Dicha energía térmica extraída de las fuentes combustibles es utilizada en diferentes aplicaciones entre las que se destacan la generación de potencia, el uso en la industria de procesos y el calentamiento residencial e industrial. Cada una de estas aplicaciones, por su naturaleza, utiliza diferentes tipos de combustibles en distintas fases. Además de estas aplicaciones, también existen procesos en los que se utilizan mezclas o combinación de combustibles diferentes con el fin de optimizarlos energéticamente, económica y ambientalmente. Ejemplos de estos últimos son motores de combustión interna funcionando de manera dual y el uso de mezclas de gas natural y carbón en calderas y hornos.

Debido a la importancia que tiene el proceso de clínkerización para la industria de la producción de cemento y a que los hornos utilizados para este fin se caracterizan por su alto consumo energético, se llevó a cabo el modelamiento del proceso de co-combustión de Carbón y Gas Natural. Con el desarrollo y la solución numérica de este modelo es posible implementar técnicas de optimización de procesos para incrementar el aprovechamiento de la energía, reducir las emisiones y/o disminuir costos de operación.

1.1 PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

El problema que se abordará en esta investigación se refiere a los procesos de combustión en los que se utilizan mezclas de combustibles sólidos y gaseosos. La motivación para el estudio de estos procesos es, que a pesar de que existen modelos analíticos sobre el comportamiento de los procesos de combustión para combustibles gaseosos y para combustibles sólidos por separado, no se cuenta con modelos que describan el comportamiento de la combustión cuando se lleva a cabo con mezclas de estos. Como consecuencia de lo anterior, no es posible caracterizar los procesos antes mencionados y mucho menos llevar a cabo ajuste de estos en busca del mejoramiento de la eficiencia energética para estas aplicaciones.

La pregunta científica que se busca responder con esta investigación es la siguiente: ¿Es posible establecer un modelo analítico, con un nivel de exactitud aceptable, que describa el comportamiento de la co-combustión de carbón y gas natural, que sirva de base para obtener soluciones numéricas y que además permita realizar estudios tendientes a la optimización de dicho proceso?

1.2 JUSTIFICACIÓN

La importancia del desarrollo de esta investigación radica en que este modelo analítico, resuelto numéricamente, permita, aparte de entender e interpretar los fenómenos presentes en estos sistemas, simular este tipo de procesos de combustión, desarrollar capacidad predictiva bajo diferentes condiciones de operación, sustituir experimentos costosos o difíciles de llevar a cabo, guiar diseños de experimentos y determinar el efecto de parámetros individuales realizando estudios paramétricos. De esta manera se pueden realizar variaciones a los parámetros de la combustión, tendientes a optimizarlos de acuerdo con los resultados obtenidos a partir del modelo y sin la necesidad de intervenir excesivamente en la operación de los equipos que conforman este proceso.

De acuerdo con esto, se pretende desarrollar un modelo matemático que describa de forma adecuada los fenómenos más significativos que intervienen en la co-combustión de carbón y gas natural, y la forma en la que ellos interactúan en el proceso global de combustión. Se espera que las simplificaciones hechas en la etapa de modelamiento analítico aporten un error aceptable respecto a lo que ocurre en el proceso real.

1.3 ANTECEDENTES

Como antecedente de esta investigación se cuenta con el trabajo investigativo realizado por Bula [1], en el cual se desarrolló un modelo matemático de pirolización de una pared vertical expuesta a un flujo cruzado en estado estable. Las ecuaciones gobernantes que conforman el modelo y describen la conservación de masa, momento, energía y concentración de especies fueron resueltas numéricamente utilizando la formulación de volúmenes finitos con las apropiadas condiciones de frontera.

Los resultados obtenidos incluyen la distribución de velocidad, entalpía y la concentración de combustible, oxidante, productos y gases inertes sobre la región de la capa límite. Además, se determinaron la localización y la estructura de la llama así como la tasa de la pirolisis en la superficie. A través, de dicho modelo se realizaron estudios paramétricos de los que se concluyó que la estructura de la llama difusiva mostraba una fuerte dependencia de las magnitudes relativas de los números locales de Grashof y Reynolds.

1.4 OBJETIVOS

1.4.1 Objetivo General

- Desarrollar un modelo del proceso de co-combustión de carbón y gas natural en un horno de clinkerización.

1.4.2 Objetivos Específicos

- Construir el modelo matemático que describa el comportamiento del proceso de combustión de carbón y gas natural.
- Establecer la configuración física del sistema y las condiciones de operación para el proceso de combustión de carbón y gas natural.
- Solucionar numéricamente el modelo matemático preestablecido utilizando herramientas computacionales.

1.5 METODOLOGÍA

La metodología utilizada para llevar a cabo esta investigación fue la siguiente:

➤ **Especificar los objetivos globales del modelo.**

Inicialmente se establecieron las variables a estudiar. Por una parte, las variables de entrada que afectan el proceso, y por otra parte, la variable de salida que son de interés para el proceso de combustión en cuestión. Además de esto, se reconocieron las limitaciones iniciales del modelo desarrollado.

➤ **Establecer el modelo físico.**

Dicho modelo físico se basó en los mecanismos principales involucrados en este proceso de combustión. Para lograr esto se debió adquirir un conocimiento previo de los fenómenos significativos involucrados en los proceso de combustión.

➤ **Definir la configuración geométrica del sistema.**

En este punto se procedió a hacer el reconocimiento de la geometría del sistema real y su forma de operación. Además, se establecieron las dimensiones sistema para efectos de modelamiento.

➤ **Construir el marco principal del modelo matemático.**

El marco principal del modelo matemático se estableció utilizando las ecuaciones de conservación y transporte adecuadas de acuerdo con el modelo físico establecido anteriormente.

➤ **Simplificar el Modelo.**

Para lograr esta simplificación se estableció que términos del modelo matemático no son significativos de acuerdo con la misma configuración física del proceso.

➤ **Especificar otros componentes del modelo.**

Con otros componentes del modelo se hace referencia a las condiciones iniciales, condiciones de frontera, constantes cinéticas, propiedades termodinámicas y propiedades de transporte.

➤ **Resolver el modelo matemático con técnicas numéricas.**

En este paso metodológico se estableció el método numérico a utilizar y se resolvió el modelo analítico por medios computacionales.

➤ **Examinar la capacidad del modelo de generar soluciones exactas.**

A esta altura, se buscó establecer que tan exacta resulta ser la solución computacional respecto al tamaño de malla hasta asegurar de que la solución fuera independiente a dicho tamaño.

2. MARCO DE REFERENCIA

2.1 MARCO TEÓRICO

2.1.1 Combustión

La combustión puede ser definida como “una oxidación rápida que genera calor, o luz y calor; también, como una oxidación lenta acompañada por una cantidad relativamente pequeña de calor y sin luz”. Para este caso, se restringirá esta definición para incluir solamente los casos con oxidación rápida, ya que, la mayor cantidad de aplicaciones prácticas caen en esta clasificación.

De esta definición se puede observar la importancia que tiene las reacciones químicas en los procesos de combustión. También hace énfasis en la importancia de la combustión, debido a que transforma la energía almacenada en los enlaces químicos en energía térmica utilizable de gran variedad de formas.

Para abordar el estudio de la combustión es necesario identificar los procesos físicos significativos que forman el marco de la ciencia de la combustión. Para esto es necesario conocer sobre disciplinas como termoquímica, transferencia de calor y masa, cinética química y mecánica de fluidos, ya que la combustión envuelve interacciones complejas entre estas.

2.1.2 Llama de Difusión Turbulenta

La llama de difusión turbulenta es empleada en la mayoría de los sistemas de combustión prácticos, principalmente por la facilidad con la cual este tipo de llamas pueden ser controladas [12].

Debido a la cantidad de aplicaciones de la combustión difusiva, existen muchos tipos de llamas difusivas. Por ejemplo, las llamas de chorro simple son empleadas en fundición de vidrios y operaciones de clinker de cemento, entre otras; las llamas estabilizadas por fuertes zonas de recirculación creadas por flujos circundantes o paredes divergentes son usadas en muchos sistemas, como calderas utilitarias e industriales; y las llamas parcialmente premezcladas, creadas por quemadores, se emplean en muchos hornos industriales.

Llamas tipo Chorro. Las llamas difusivas turbulentas tipo chorro visualmente tienen bordes difusos, similares a las de las llamas premezcladas. Sin embargo, las llamas difusivas de hidrocarburos generalmente son más luminosas que sus contrapartes premezcladas, ya que algo de hollín usualmente está presente en la llama. Las longitudes instantáneas visibles de las llamas turbulentas tipo chorro es altamente variables, como la forma general de las mismas. La luminosidad en la base de la llama es algo débil, de color azul, y característica de una región libre de hollín. A niveles más altos de la llama, existen cantidades considerables de hollín, y la llama toma una apariencia amarilla brillante. Para combustibles poco propensos a formar hollín, como el metano, la longitud de la región de llama azul es mucho más larga y la luminosidad en la región que contiene hollín es mucho menor. Las mediciones de radiación espectral realizadas por Gore [13] de llamas de metano-aire mostraron que, a pesar que una llama puede tener algo de luminosidad visible desde el hollín, la contribución de la radiación del hollín a la pérdida radiante total puede ser insignificante. Para combustibles con mayor presencia de hollín, sin embargo, la radiación del hollín puede tener una mayor contribución a la pérdida total de calor radiante.

Otra observación general que se puede discutir es la influencia del diámetro inicial del chorro y la tasa de flujo en el tamaño de la llama. Los resultados de los experimentos clásicos de Wohl [14] muestran varios rasgos importantes de las llamas de difusión. Primero, a bajas tasas de flujo, donde las llamas son

laminares, la altura de la llama es independiente del diámetro inicial del chorro, y depende solo de la tasa de flujo. A medida que el flujo se incrementa, la turbulencia comienza a influenciar la altura de la llama y se puede observar un régimen de transición. Sobre esta región de transición, los niveles de incremento de la turbulencia con la tasa de flujo resultan en que la llama totalmente turbulenta es más corta que su contraparte laminar, indicada por el mínimo local de cada curva. A medida que el flujo se incrementa aun más, la longitud de la llama, o se mantiene esencialmente constante (diámetro del tubo menos de 0.133 in), o se incrementa cada vez menos (diámetro de tubo de 0.152 in y mayores). Esto es consecuencia de que la entrada del aire y la tasa de mezclado sean proporcionales, más o menos, al flujo de combustible. Además, se observa una dependencia significativa de la longitud de la llama sobre el diámetro inicial del chorro.

La última observación general se refiere a la estabilidad de la llama. A suficientemente bajas tasas de flujo, la base de la llama tipo chorro se ubica bastante cerca (unos pocos milímetros) de la salida del tubo del quemador y se dice que se encuentra adjunta. A medida que se aumenta el flujo de combustibles, se empiezan a formar agujeros en el plano de la llama en la base de esta, y con un mayor aumento en el flujo, se forman cada vez más agujeros hasta que no queda llama continua cerca del puerto del quemador. A esta condición se le llama levantamiento. Con un mayor incremento en el flujo, la distancia de levantamiento (la distancia desde el puerto del quemador a la base de la llama) aumenta. Para un flujo suficientemente grande, la llama se apaga. Así, existen dos condiciones de flujo críticas relacionadas con la estabilidad de la llama: levantamiento y apagado.

La estabilidad de la llama tiene muchas implicaciones para aplicaciones prácticas. Por ejemplo, el levantamiento se debe reducir de forma que la llama se acerque al quemador y su posición sea independiente de la tasa de flujo. Esto permite una

ignición positiva para llamas con chispa o piloto en el quemador y asegura que la posición de la llama está controlada. Obviamente, por razones de seguridad, se debe abolir la operación cerca del límite de apagado. Un horno de gran tamaño lleno de una mezcla de combustible y aire sería un riesgo muy grande.

Comparación con chorros no reactivos. Existen tres importantes características de los chorros turbulentos no reactivos que se deben tener en cuenta para estos casos: primero, el campo de velocidad es una función “universal” cuando todas las velocidades se escalan por la velocidad de salida y las coordenadas espaciales, x y r , se escalan por el radio de la boquilla del chorro $R(d_j \equiv 2R)$; segundo, el ángulo de esparcimiento del chorro es constante, independiente de la velocidad de salida del chorro y el diámetro; y tercero, la llamada viscosidad de Eddy, ε , es independiente de la localización en el campo de flujo y es directamente proporcional tanto a la velocidad de salida de la boquilla, v_e , como al diámetro, d_j . Estos resultados teóricos están de acuerdo de manera razonable con datos experimentales.

Parece razonable proponer que la llama comparta algunas de las características de los chorros isotérmicos. La principal implicación de asumir esto último se refiere a la forma y longitud de la llama. Si además se asume que la difusividad turbulenta para la transferencia de masa es la misma que para la transferencia de momento, entonces la distribución de la fracción de masa de combustible resultante debería ser equivalente a la distribución adimensional de la velocidad, así, $Y_F(x, r) = v(x, r)/v_e = f(x/d_j)$. Sin embargo, esto solo puede ser cierto en la ausencia de combustión ya que Y_F es cero fuera de los límites de la llama, mientras la velocidad no ha llegado a cero aun. Por otra parte, la fracción de la mezcla puede usarse en lugar de la fracción de masa del combustible y tiene un comportamiento análogo al campo de velocidad adimensional. Así, se espera que, para un tipo de combustible dado, la longitud de la llama sea independiente de la

velocidad del chorro v_e y proporcional al diámetro de la boquilla d_j , y el ángulo de esparcimiento debe ser independiente tanto de v_e como de d_j . Los resultados experimentales [14] muestran que, para tubos de diámetro pequeño, las longitudes de llama son efectivamente independientes de v_e y que las longitudes de llama son aproximadamente proporcionales a d_j .

Para realizar el análisis simplificado de la llama tipo chorro, se requiere utilizar la fracción de la mezcla como única variable para describir la composición de la llama en cualquier lugar, en vez de emplear las relaciones de conservación de especies por separado para el combustible, el oxidante y los productos.

La definición de fracción de la mezcla, f , la cual aplica localmente para un volumen de control suficientemente pequeño es

$$f = \frac{\text{masa del material con origen en la corriente de combustible}}{\text{masa de la mezcla}}$$

Esta cantidad tiene dos características importantes: primero, puede ser usado para definir los límites de la llama, ya que solo se relaciona con la relación de equivalencia como

$$f = \frac{\Phi}{(A/F)_{stoic} + \Phi} \quad (2.1)$$

Donde $(A/F)_{stoic}$ es la relación aire-combustible estequiométrica para el combustible que sale de la boquilla. Así, el límite de la llama se define como el lugar donde $\Phi = 1$; de ahí, el límite de la llama también se define por el lugar donde la fracción de la mezcla toma el valor f_s , definido como

$$f_s = \frac{1}{(A/F)_{stoic} + 1} \quad (2.2)$$

La segunda característica importante de la fracción de la mezcla es que se conserva por todo el campo de flujo ya que se define por una ecuación gobernante sin generación. Esto permite usar f en lugar de la conservación individual de especies y, como resultado, simplificar significativamente la formulación matemática del problema.

Suposiciones. Las siguientes suposiciones se usan para construir un modelo matemático simple de una llama tipo chorro de difusión turbulenta:

1. El flujo promedio en el tiempo es estable y axi-simétrico y es producido por un chorro de combustible emergente desde una boquilla circular de radio R , el cual se quema en un reservorio de aire infinito y quieto.
2. El transporte molecular de momento, especies y energía térmica no es importante en comparación al transporte turbulento.
3. la difusividad turbulenta del momento, o viscosidad de Eddy, $\varepsilon = (\mu_{turb}/\rho)$, es constante a través del campo de flujo e igual a $0.0285v_e R$. Esta es una extensión de la hipótesis de longitud de mezclado para el chorro de densidad constante para el chorro reactivo de densidad variable omitiendo las fluctuaciones de densidad.
4. Todas las correlaciones que incluyen las fluctuaciones de velocidad se desprecian.
5. El transporte turbulento de momento, especies y energía térmica son iguales, es decir, los números turbulentos de Schmidt, Prandtl y Lewis equivalen a la unidad, $Sc_T = Pr_T = Le_T$. La consecuencia de esta suposición es que la difusividad turbulenta de momento (viscosidad de Eddy, ε) puede ser

sustituida por la difusividad turbulenta de masa y la difusividad térmica, El efecto de flotación se desprecia.

6. La transferencia de calor por radiación es insignificante.
7. Solo es importante la difusión turbulenta radial de momento, especies y energía térmica; la difusión turbulenta axial se desprecia.
8. La velocidad del chorro de combustible es uniforme a la salida de la boquilla, es decir, un perfil de flujo tapón.
9. Las propiedades de la mezcla están definidas por tres especies: combustible, oxidante y productos. Todos tienen peso moleculares iguales ($M = 29 \text{ kg/kmol}$) y calores específicos ($c_p = 1200 \text{ J/kg} \cdot \text{K}$), y el calor de combustión del combustible es 4.107 J/kg . La relación másica de aire-combustible estequiométrica es 15:1 ($f_s = 1/16 = 0.0625$).
10. Se ignoran las fluctuaciones de las fracciones de la mezcla en la relación de estado usada para determinar la densidad media. Para un análisis más riguroso, la densidad media sería calculada para alguna función de distribución de probabilidad de una mezcla supuesta, caracterizada por un valor medio y una varianza.

Aplicación de las leyes de conservación. De acuerdo con las suposiciones anteriores y definiendo variables adimensionales, usando una longitud característica R y una velocidad característica v_e , la conservación de masa total se escribe como

$$\frac{\partial}{\partial x^*} (\bar{\rho}^* \bar{v}_x^*) + \frac{1}{r^*} \frac{\partial}{\partial r^*} (r^* \bar{\rho}^* \bar{v}_r^*) = 0 \quad (2.3)$$

La conservación de momento axial queda de la siguiente forma:

$$\frac{\partial}{\partial x^*} (r^* \bar{\rho}^* \bar{v}_x^* \bar{v}_x^*) + \frac{\partial}{\partial r^*} (r^* \bar{\rho}^* \bar{v}_r^* \bar{v}_x^*) = \frac{\partial}{\partial r^*} \left[\left(\frac{1}{\text{Re}_T} \right) r^* \frac{\partial \bar{v}_x^*}{\partial r^*} \right] \quad (2.4)$$

La ecuación de la fracción de la mezcla está dada por:

$$\frac{\partial}{\partial x^*} (r^* \bar{\rho}^* \bar{v}_x^* \bar{f}) + \frac{\partial}{\partial r^*} (r^* \bar{\rho}^* \bar{v}_r^* \bar{f}) = \frac{\partial}{\partial r^*} \left[\left(\frac{1}{\text{Re}_T \text{Sc}_T} \right) r^* \frac{\partial \bar{f}}{\partial r^*} \right] \quad (2.5)$$

y la ecuación de entalpía adimensional queda como:

$$\frac{\partial}{\partial x^*} (r^* \bar{\rho}^* \bar{v}_x^* \bar{h}^*) + \frac{\partial}{\partial r^*} (r^* \bar{\rho}^* \bar{v}_r^* \bar{h}^*) = \frac{\partial}{\partial r^*} \left[\left(\frac{1}{\text{Re}_T \text{Sc}_T} \right) r^* \frac{\partial \bar{h}^*}{\partial r^*} \right] \quad (2.6)$$

Donde el número de Reynolds turbulento se define como

$$\text{Re}_T \equiv \frac{v_e R}{\varepsilon} \quad (2.7)$$

con la tercera suposición, $\text{Re}_T = 35$. Se observa que con un numero constante de Reynolds, la solución adimensional del problema, $\bar{v}_x^*(r^*, x^*)$, $\bar{v}_r^*(r^*, x^*)$, y $\bar{f}(r^*, x^*)$, $\bar{h}^*(r^*, x^*)$, no depende ni de la velocidad inicial del chorro ni del diámetro de la boquilla.

Las condiciones de frontera son:

$$\bar{v}_r^*(0, x^*) = 0 \quad (2.8a)$$

$$\frac{\partial \bar{v}_x^*}{\partial r^*}(0, x^*) = \frac{\partial \bar{f}}{\partial r^*}(0, x^*) = \frac{\partial h^*}{\partial r^*}(0, x^*) = 0 \quad (\text{Simetría}) \quad (2.8b)$$

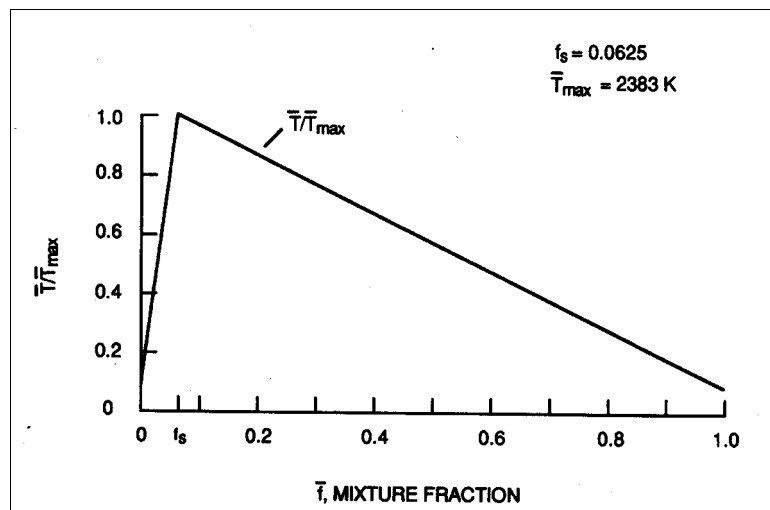
$$\bar{v}_x^*(r^* \leq 1.0) = \bar{f}(r^* \leq 1.0) = h^*(r^* \leq 1.0) = 1$$

(Suposición 9) (2.8c)

$$\bar{v}_x^*(r^* > 1.0) = \bar{f}(r^* > 1.0) = h^*(r^* > 1.0) = 0$$

Ya que las condiciones de frontera son idénticas para \bar{v}_x^* , \bar{f} y h^* , y como las ecuaciones gobernantes para \bar{v}_x^* , \bar{f} y h^* también se vuelven idénticas para $Sc_T = 1$ (Suposición 5), se necesita resolver solo la ecuación (2.3) y la ecuación (2.4), (2.5) o (2.6) donde $\bar{v}_x^* = \bar{f} = h^*$. Con las suposiciones 10 y 11, la relación de estado para la temperatura es una simple función lineal de \bar{f} como se ve en la figura 1. La densidad media entonces se relaciona con la temperatura media a través de la ecuación de estado de gas ideal, $\bar{\rho} = (PM/(R_u T))$.

Figura 1. Relación de estado simplificada para la temperatura.



Turns, S. R., An Introduction to Combustion: Concepts and Applications, McGraw-Hill, New York, 1996.

A pesar de la simplicidad de este modelo de llama turbulenta tipo chorro, los parámetros generales de la llama se predicen bien, aunque no se puede declarar completa exactitud. Despreciar las fluctuaciones de densidad es probablemente la simplificación más importante.

Longitud de la llama. Para llamas verticales creadas por chorros de combustibles penetrando un fluido en reposo, existen cuatro factores importantes que determinan la longitud de la llama:

- La importancia relativa del flujo inicial de momento del chorro y las fuerzas de flotación que actúan en la llama, Fr_f
- La estequiometría, f_s
- La relación de la densidad del fluido en la boquilla con la densidad del gas del ambiente, ρ_e/ρ_∞
- El diámetro inicial del chorro, d_j .

El primero de estos factores puede caracterizarse por el número de Froude de la llama, Fr_f . Para llamas de chorro turbulento, se utiliza la siguiente definición del número de Froude [15]:

$$Fr_f = \frac{v_e f_s^{3/2}}{\left(\frac{\rho_e}{\rho_\infty}\right)^{1/4} \left[\frac{\Delta T_f}{T_\infty} g d_j\right]^{1/2}} \quad (2.9)$$

donde ΔT_f es el aumento de la temperatura característica resultante de la combustión. Para valores muy pequeños de Fr_f , la llama es dominada por la flotación, mientras que para valores muy grandes, el momento inicial del chorro controla el mezclado y, por ende, el campo de velocidad en la llama.

Los tres factores restantes son importantes independientemente de que la flotación ejerza influencia o no. Por ejemplo, combustibles con valores bajos de fracción de mezcla estequiométrica, f_s , requieren ingresar mayores cantidades de aire por unidad de masa de combustible para alcanzar proporciones estequiométricas en comparación con combustibles con grandes valores de f_s . Esto implica llamas más largas para cantidades más pequeñas de fracciones estequiométricas de mezcla. Como ilustración, el requerimiento de aire estequiométrico del propano es alrededor de seis veces el del monóxido de carbono, y una llama de propano es aproximadamente siete veces más larga que la llama de monóxido de carbono [16].

La relación de densidades, ρ_e/ρ_∞ , y el diámetro inicial del chorro, d_j , pueden ser convenientemente combinados como un solo parámetro, frecuentemente llamado diámetro del momento, d_j^* , y se define como

$$d_j^* = d_j (\rho_e / \rho_\infty)^{1/2} \quad (2.10)$$

donde se ha asumido un perfil de velocidad de salida uniforme. La idea básica de esta definición es que chorros con flujos momento inicial idénticos deben tener campos de velocidad iguales. Así, incrementar la densidad del fluido en la boquilla produce el mismo efecto que aumentar el diámetro de la boquilla de acuerdo con la ecuación (2.10). Este resultado se predice de la teoría de chorro [17], y evidencia experimental [18] muestra que esto es cierto.

Correlaciones. Resultados experimentales que muestran la influencia combinada de los cuatro factores primordiales que afectan la longitud de la llama, discutidos anteriormente, se muestran en la figura 2. El número de Froude de la llama, Fr_f ,

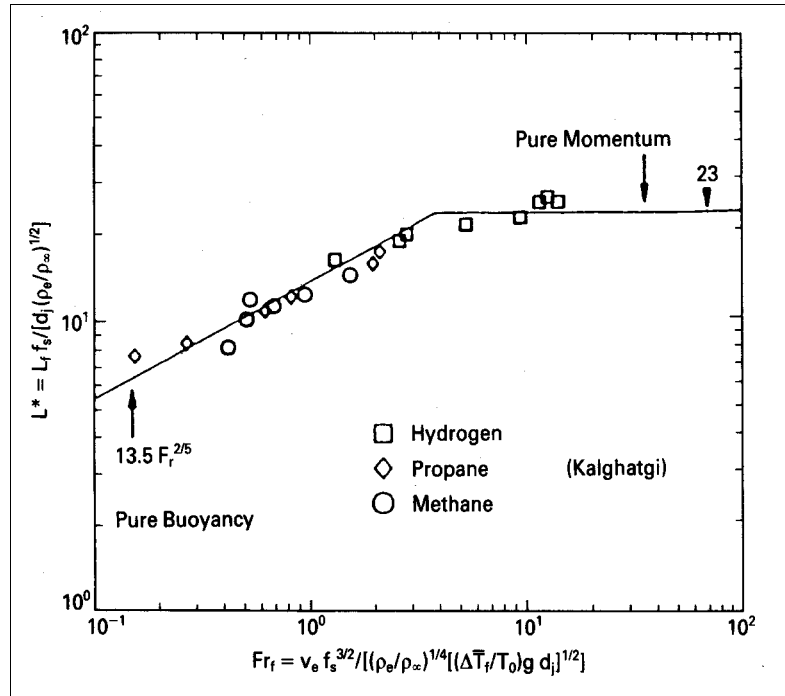
aparece como la abscisa, mientras los factores restantes se usan para definir la longitud de llama adimensional, la cual se grafica en la ordenada, y se define por

$$L^* \equiv \frac{L_f f_s}{d_j (\rho_e / \rho_\infty)^{1/2}} \quad (2.11a)$$

o

$$L^* = \frac{L_f f_s}{d_j^*} \quad (2.11b)$$

Figura 2. Longitudes de llamas tipo chorro correlacionadas con el numero de Froude de la llama.



Delichatsios, M. A., "Transition from Momentum to Buoyancy-Controlled Turbulent Jet Diffusion Flames and Flame Height Relationships," *Combustion and Flame*, 92: 349-364 (1993).

En la figura 2 se identifican dos regímenes: un régimen dominado por la flotación que se correlaciona por la expresión

$$L^* = \frac{13.5 Fr_f^{2/5}}{(1 + 0.07 Fr_f^2)^{1/5}} \text{ para } Fr_f < 5 \quad (2.12)$$

y un régimen dominado por el momento donde la longitud de llama adimensional L^* es constante, es decir,

$$L^* = 23 \text{ para } Fr_f \geq 5 \quad (2.13)$$

Otras correlaciones han sido propuestas [19]; sin embargo, las anteriores son fáciles de usar y probablemente tan precisas como las otras. Varios investigadores usan diferentes definiciones y técnicas experimentales para determinar las longitudes de llama; de ahí que la exactitud de cada correlación dependa de la consistencia de los datos base usados para establecerlas.

Radiación de la llama. Las llamas de difusión turbulenta pueden ser altamente radiantes. En ciertas aplicaciones prácticas, esta radiación es un atributo deseado que contribuye a calentar una carga. En otras aplicaciones, sin embargo, las pérdidas por radiación pueden contribuir a la pérdida de eficiencia (motores diesel) o riesgos de seguridad. En las turbinas de gas, la carga de calor radiante es el mayor factor en la durabilidad de la línea de combustión.

Un término frecuentemente usado en la literatura de combustión es la fracción radiante, χ_R . La fracción radiante representa la relación de la tasa de transferencia de calor radiante de la llama hacia los alrededores, \dot{Q}_{rad} , respecto al calor total liberado por la llama, $\dot{m}_F \Delta h_c$, es decir,

$$\chi_R \equiv \frac{\dot{Q}_{rad}}{\dot{m}_F \Delta h_c} \quad (2.14)$$

donde \dot{m}_F es el flujo de masa de combustible suministrado a la llama y Δh_c es el calor de combustión del combustible. Dependiendo del tipo de combustible y las condiciones de flujo, las fracciones radiantes para la llamas de chorros varían desde poco porcentaje hasta más del 50%. La figura 3 muestra la variación de χ_R con la tasa de liberación de calor, $\dot{Q}(= \dot{m}\Delta h_c)$, para tres combustibles y varios tamaños de quemador [20].

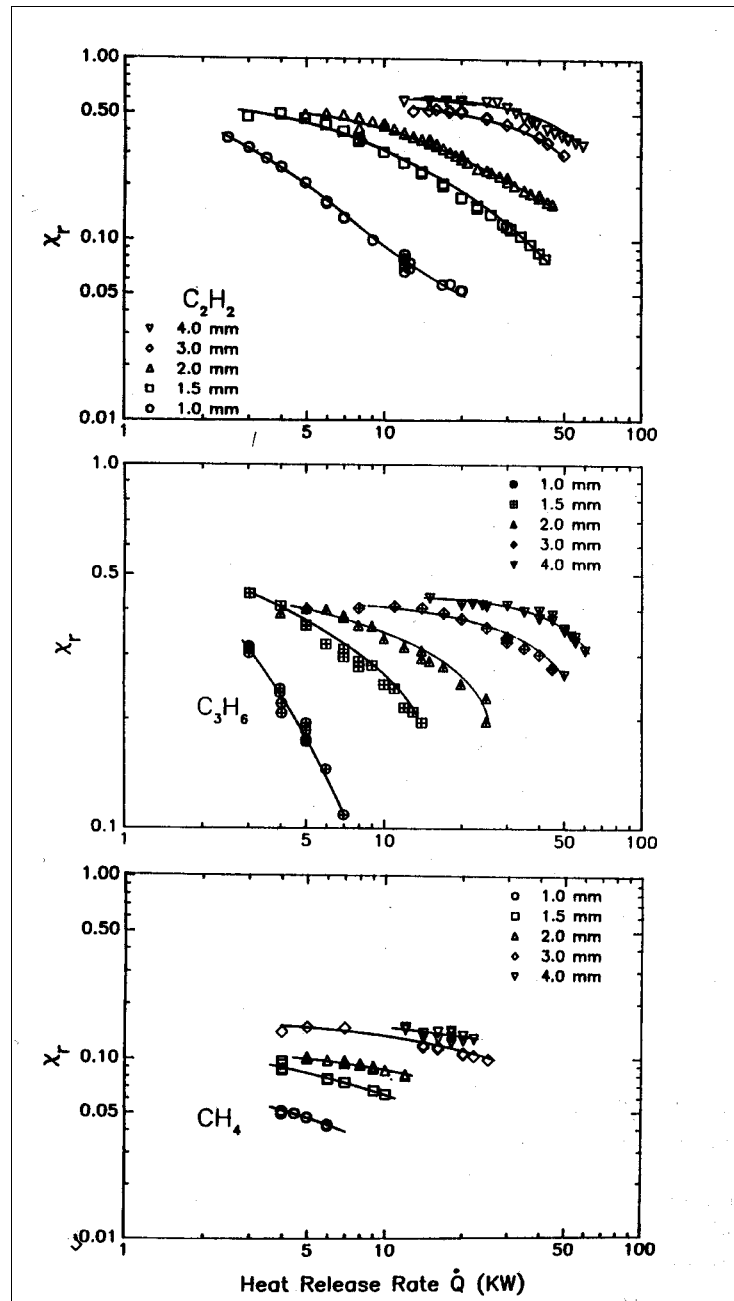
Varias observaciones interesantes de pueden hacer de la figura 3. Primero, se observa que la fracción radiante para los tres combustibles se ordena igual que la facilidad de formar hollín. Esto sugiere que el hollín en la llama es importante al determinar su fracción radiante. La segunda observación es que χ_R depende, tanto del tamaño de la llama (d_j) como de la tasa de liberación de calor. La tendencia general es que χ_R decrezca cuando se reduce el tamaño de la llama a una tasa de quemado fija, y cuando se aumenta la tasa de quemado con un tamaño fijo de llama. A pesar de que los procesos que intervienen son bastante complicados, especialmente porque la cinética del hollín está envuelta, estas tendencias se pueden interpretar por un simple análisis escalar [21]. Si se considera la llama entera como una fuente uniforme de liberación de calor y radiación, la tasa a la cual se pierde energía desde la llama se puede establecer aproximadamente como

$$\dot{Q}_{rad} \approx a_p V_f \sigma T_f^4 \quad (2.15)$$

donde a_p es un coeficiente de absorción para la llama, y V_f y T_f son el volumen y la temperatura de la llama, respectivamente. La fracción radiante de la ecuación 2.14 se vuelve

$$\chi_R = \frac{a_p V_f \sigma T_f^4}{\dot{m}_F \Delta h_c} \quad (2.16)$$

Figura 3. Fracciones radiantes de llamas tipo chorro en función de la tasa de liberación de calor y el tamaño del quemador.



Delichatsios, M. A., Markstein, G. H., Orloff, L., deRis, J., "Turbulent Flow Characterization and Radiation from Gaseous Fuel Jets," Final Report, GRI 88/0100, Gas Research Institute, 1988.

Ahora, se sabe que en el régimen de momento dominante, la longitud de la llama es directamente proporcional al diámetro del quemador, d_j ; así, se espera que el volumen de la llama sea

$$V_f \propto d_j^3 \quad (2.17)$$

Además,

$$\dot{m}_F = \rho_F v_e \pi d_j^2 / 4 \quad (2.18)$$

Reemplazando V_f y \dot{m}_F en la ecuación 2.16 se obtiene

$$\chi_R \propto a_p T_f^4 d_j / v_e \quad (2.19)$$

Lo cual es consistente con la influencia del diámetro y de la tasa de liberación de calor sobre χ_R mostrada en la figura 3 para valores grandes de \dot{Q} . Se puede notar que $\dot{Q} \propto v_e$ para valores fijos de d_j . La idea expresada en la ecuación 2.19 es que χ_R depende directamente del tiempo disponible para que la llama pierda energía radiante, donde el tiempo característico es proporcional a d_j/v_e . Se debe tener en cuenta que este simple análisis ignora efectos de flotación y las interrelaciones entre a_p , T_f y χ_R .

Como se mencionó anteriormente, la tendencia del combustible a formar hollín es el factor más importante para determinar las pérdidas radiantes desde la llama. Existen dos fuentes de radiación en las llamas: radiación molecular, principalmente desde el CO₂ y el H₂O; y esencialmente radiación de cuerpo negro desde el hollín de la llama. La radiación molecular está concentrada en bandas ensanchadas del espectro infrarrojo.

Se puede utilizar la ley de desplazamiento de Wien's [22] para estimar la longitud de la onda asociada con la intensidad máxima de la radiación de cuerpo negro del hollín en la llama de etileno como sigue:

$$\lambda_{\max} = \frac{2897.8 \mu m \cdot K}{T_f (K)} \approx 1.22 \mu m \quad (2.20)$$

Donde para el valor de T_f se ha usado la temperatura de llama adiabática para la mezcla estequiométrica de etileno-aire (2369 K). Ya que la llama no es adiabática, la verdadera temperatura de la llama debe ser menor de 2369 K y λ_{\max} mayor de 1.22 μm . Usando un λ_{\max} de 1.5 μm , que es consistente con datos experimentales, se predice una temperatura de llama característica de aproximadamente 1930 K.

2.1.3 Combustión de Sólidos

El problema de combustión de sólidos es muy complejo, ya que depende tanto de la naturaleza del combustible, como de la aplicación específica. Los modelos de combustión del carbono proveen cierto entendimiento sobre la naturaleza general de la combustión de sólidos y también tienen relevancia en el problema de la combustión de carbón.

Reacciones Heterogéneas. En la combustión de sólidos adquieren gran importancia las reacciones químicas heterogéneas. Una reacción química heterogénea es una reacción que envuelve especies que existen en diferentes estados físicos, es decir, reacciones de gas-liquido o de gas-sólido.

Garnider [23] subdividió el proceso global de reacción gas-sólido en los siguientes procesos constituyentes:

1. Transporte de la molécula reactante hacia la superficie por convección y/o difusión.
2. Adsorción de la molécula reactante por la superficie.
3. Pasos elementales de la reacción de varias combinaciones de la molécula adsorbida, la misma superficie y las moléculas en fase gaseosa.
4. Desadsorción de las moléculas de los productos desde la superficie.
5. Transporte de las moléculas de los productos alejándose de la superficie por convección y/o difusión.

Los pasos primero y quinto son tratados usando los conceptos de transferencia de masa. Los pasos intermedios son más complejos, especialmente el número 3, y son más relacionados a la físico-química.

Existen tres “leyes de tasa de reacción” [23] que surgen como resultado de que tan fuerte las moléculas del reactante y/o producto son adsorbidas por la superficie. Primero, si la molécula del reactante A es débilmente adsorbida, entonces la tasa de reacción, \mathfrak{R} , es proporcional a la concentración de A en la fase gaseosa adyacente a la superficie:

$$\mathfrak{R} = k(T)[A] \quad (2.21)$$

donde $k(T)$ es el coeficiente de tasa de reacción. Segundo, si A es fuertemente adsorbida, entonces la tasa de reacción es independiente de la concentración de A en la fase gaseosa.

$$\mathfrak{R} = k(T) \quad (2.22)$$

El último caso a considerar es cuando la molécula del reactante A es débilmente adsorbida, mientras la molécula del producto B es fuertemente adsorbida. Para este caso,

$$\mathfrak{R} = k(T) \frac{[A]}{[B]} \quad (2.23)$$

donde $[A]$ y $[B]$ son las concentraciones de A y B en la fase gaseosa inmediatamente adyacente a la superficie.

Quemado del Carbono. La combustión del carbono es interesante por razones prácticas. Por ejemplo, en la combustión de carbón pulverizado, se produce carbono después de que el material volátil se desprende de la partícula de carbón y se quema. El quemado subsiguiente del carbono es el proceso limitante que establece los requerimientos del tiempo de residencia necesario, y de allí, el volumen del espacio de combustión. Además, una sustanciosa cantidad de calor es irradiada a la carga desde las partículas de carbono quemándose.

La figura 4 muestra esquemáticamente una superficie de carbono en combustión con una capa límite reactiva. En la superficie, el carbono puede ser atacado por O_2 , CO_2 o H_2O , dependiendo principalmente de la temperatura de la superficie, por medio de las siguientes reacciones globales:

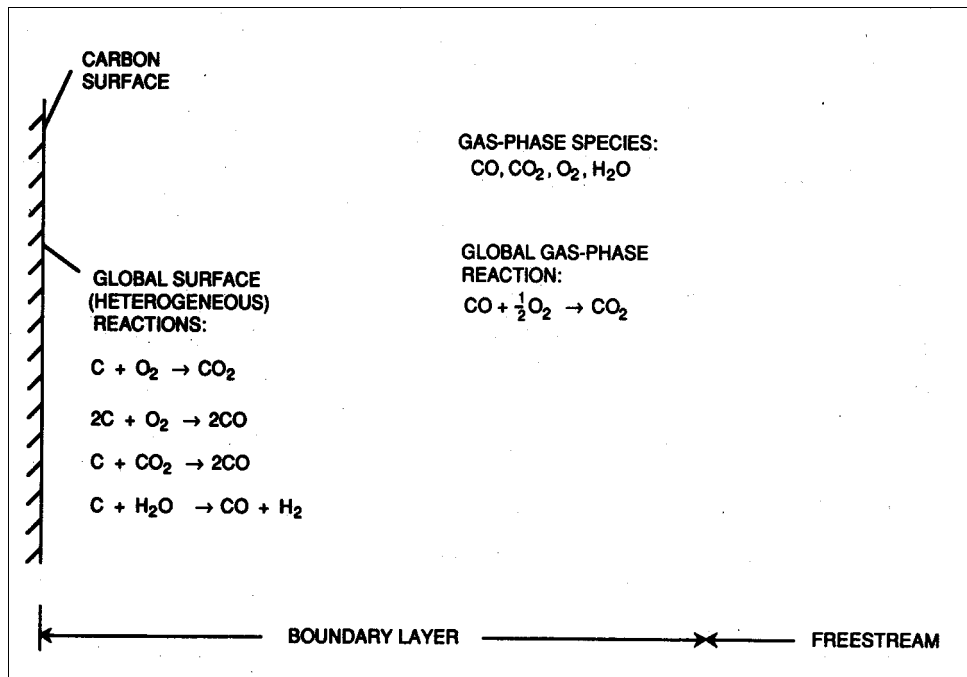


El producto principal en la superficie del carbono es CO. El CO se difunde lejos de la superficie a través de la capa límite donde se combina con el O_2 que se difunde hacia adentro de acuerdo con la siguiente reacción homogénea global:



Por supuesto, muchos pasos elementales de reacción están envueltos en la reacción 2.28, siendo una de las más importantes $CO + OH \rightarrow CO_2 + H$.

Figura 4. Esquema general de la combustión de carbono mostrando las reacciones heterogéneas y homogéneas globales.



Turns, S. R., *An Introduction to Combustion: Concepts and Applications*, McGraw-Hill, New York, 1996.

En principio, el problema de la oxidación del carbono puede ser resuelto utilizando las ecuaciones de conservación apropiadas para las especies, la energía y la masa, definiendo todos los pasos elementales de la reacción, y luego resolviendo estas ecuaciones sujetas a apropiadas condiciones de frontera en la superficie y en la corriente libre. Una mayor complicación de este escenario es, sin embargo, que la superficie de carbono es porosa y la naturaleza detallada de la superficie cambia a medida que se produce la oxidación del carbono. Así, el proceso de

difusión intraparticular juega el papel más importante en la combustión de carbono bajo ciertas condiciones [24].

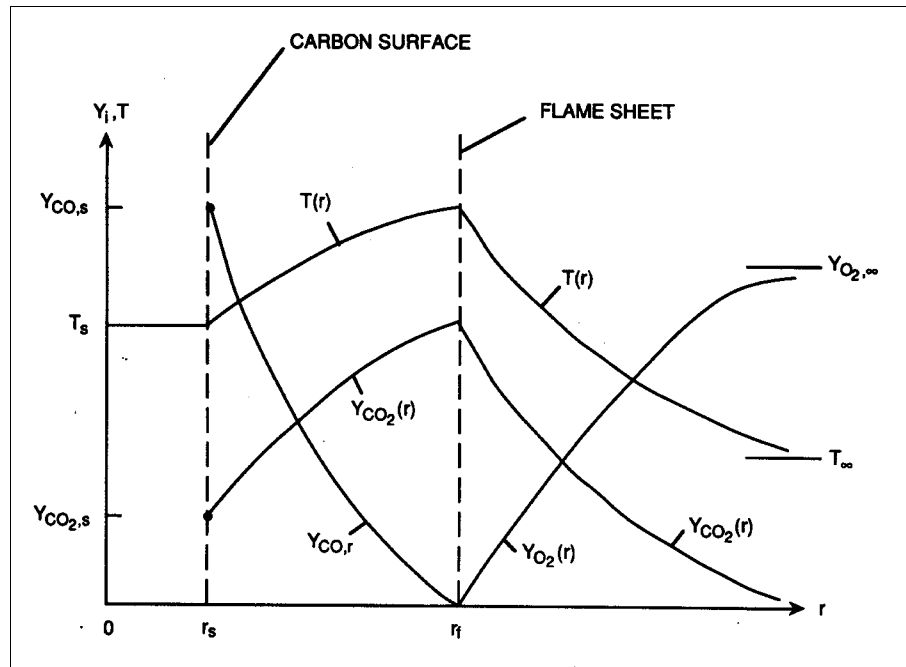
Modelos simplificados de combustión de carbono dependen de las reacciones globales dadas en la figura 4 y usualmente asumen que la superficie es insensible a la difusión. Dependiendo de las suposiciones hechas tanto para la superficie y la fase gaseosa, emergen diferentes escenarios que generalmente son clasificados como modelos de una película, doble película, o de película continua. En los modelos de una película, no hay llama en la fase gaseosa y la temperatura máxima ocurre en la superficie del carbono. En los modelos de doble película, una llama plana se localiza a cierta distancia de la superficie, donde el CO producido en la superficie reacciona con el O₂ que ingresa. En los modelos de película continua, se distribuye una zona de llama en la capa límite, en lugar de hacerlo de forma plana.

En este caso se desarrollará un modelo de doble película ya que aparte de ser bastante simplificado, es más realista que el de una película ya que muestra la producción secuencial y oxidación del CO. Este modelo se usará para obtener estimaciones de los tiempos de quemado del carbono.

Modelo de doble película. En particular, el modelo de doble película presenta la oxidación del carbono en forma de monóxido de carbono en lugar de dióxido de carbono. La figura 5 ilustra la concentración de especies y los perfiles de temperatura a través de las dos películas gaseosas, una al interior de la llama plana y una en el exterior. En el modelo de doble película, la superficie de carbono es atacado por CO₂ de acuerdo con la reacción global 2.26, $C + CO_2 \rightarrow 2CO$. El CO producido en la superficie se difunde hacia fuera y es consumido en la llama plana donde se encuentra un flujo de O₂ que se difunde hacia adentro en proporciones estequiométricas. La reacción global $CO + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow CO_2$ se asume

como infinitamente rápida; así, tanto el CO como el O₂ son idénticamente cero en la llama plana. La temperatura presenta su pico en la llama plana (Figura 5). El objetivo específico es encontrar la tasa de quemado.

Figura 5. Perfiles de Temperatura y de fracciones másicas de especies para un modelo de doble película de una partícula esférica de carbono.



Turns, S. R., An Introduction to Combustion: Concepts and Applications, McGraw-Hill, New York, 1996.

Suposiciones. Además, de lo descrito anteriormente, las siguientes suposiciones se usan para construir un modelo matemático de doble película:

1. El proceso de quemado es cuasi-estable.
2. La partícula esférica de carbono se quema en un medio ambiente infinito y quieto, que contienen solo oxígeno y un gas inerte, como el nitrógeno. No existen interacciones con otras partículas, y se ignoran los efectos convectivos.
3. La conductividad térmica, k , el calor específico, c_p , y el producto de la densidad y la difusividad de masa, ρD , en la fase gaseosa son todas

constantes. Además se asume que el número de Lewis es la unidad, es decir, $Le = k/(\rho c_p D) = 1$.

4. La partícula de carbono es insensible a las especies en la fase gaseosa, es decir, la difusión entre partículas se ignora.
5. La partícula es de temperatura uniforme e irradia como un cuerpo gris a los alrededores sin participación del medio.

Estequiometría. Los flujos de masa de varias especies se pueden relacionar por simples balances de masa en la superficie de la partícula y en la llama, como se ilustra en la figura 6. Estos son:

En la superficie:
$$\dot{m}_C = \dot{m}_{CO} - \dot{m}_{CO_2,i} \quad (2.29a)$$

En la llama:
$$\dot{m}_{CO} = \dot{m}_{CO_2,i} - \dot{m}_{CO_2,o} - \dot{m}_{O_2} \quad (2.29b)$$

o

$$\dot{m}_C = \dot{m}_{CO_2,o} - \dot{m}_{O_2} \quad (2.29c)$$

Usando las relaciones estequiométricas en la superficie y en la llama, todos los flujos se pueden relacionar con la tasa de quemado, \dot{m}_C :

En la superficie:
$$1kgC + v_s kgCO_2 \rightarrow (v_s + 1)kgCO \quad (2.30a)$$

En la llama:
$$1kgC + v_f kgO_2 \rightarrow (v_f + 1)kgCO_2 \quad (2.30b)$$

donde

$$v_s = \frac{44.01}{12.01} = 3.664 \quad (2.31a)$$

y

$$v_f = v_s - 1 \quad (2.31b)$$

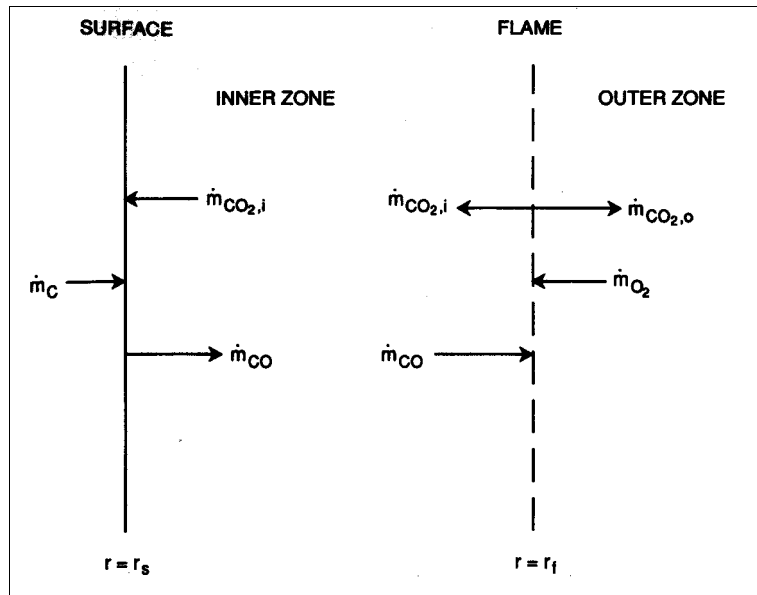
Así, las magnitudes de los flujos son:

$$\dot{m}_{CO_2,i} = v_s \dot{m}_C \quad (2.32a)$$

$$\dot{m}_{O_2} = v_f \dot{m}_C = (v_s - 1) \dot{m}_C \quad (2.32b)$$

$$\dot{m}_{CO_2,o} = (v_f + 1) \dot{m}_C = v_s \dot{m}_C \quad (2.32c)$$

Figura 6. Flujos másicos de especies en la superficie del carbono y en la llama plana.



Turns, S. R., *An Introduction to Combustion: Concepts and Applications*, McGraw-Hill, New York, 1996.

Conservación de Especies. Se procede a aplicar la ley de Fick para obtener las ecuaciones diferenciales que describen la distribución del CO_2 tanto en la zona interna como en la externa y, de forma similar, una ecuación para las especies inertes (N_2). Estas son:

Zona Interna CO_2

$$\dot{m}_C = \frac{4\pi r^2 \rho D}{(1 + Y_{CO_2}/v_s)} \frac{d(Y_{CO_2}/v_s)}{dr} \quad (2.33a)$$

con condiciones de frontera

$$Y_{CO_2}(r_s) = Y_{CO_2,s} \quad (2.33b)$$

$$Y_{CO_2}(r_f) = Y_{CO_2,f} \quad (2.33c)$$

Zona Externa CO₂

$$\dot{m}_C = \frac{-4\pi r^2 \rho D}{(1 - Y_{CO_2}/v_s)} \frac{d(Y_{CO_2}/v_s)}{dr} \quad (2.34a)$$

con condiciones de frontera

$$Y_{CO_2}(r_f) = Y_{CO_2,f} \quad (2.34b)$$

$$Y_{CO_2}(r \rightarrow \infty) = 0 \quad (2.34c)$$

Inertes (N₂)

$$\dot{m}_C = \frac{4\pi r^2 \rho D}{(Y_I)} \frac{dY_I}{dr} \quad (2.35a)$$

con condiciones de frontera

$$Y_I(r_f) = Y_{I,f} \quad (2.35b)$$

$$Y_I(r \rightarrow \infty) = Y_{I,\infty} \quad (2.35c)$$

De la integración de estas tres ecuaciones (33-35) entre los límites indicados por las condiciones de frontera se obtienen las siguientes tres ecuaciones algebraicas que contienen cinco incógnitas: \dot{m}_C , $Y_{CO_2,s}$, $Y_{CO_2,f}$, $Y_{I,f}$ y r_f :

$$\dot{m}_C = 4\pi \left(\frac{r_s r_f}{r_f - r_s} \right) \rho D \ln \left[\frac{1 + Y_{CO_2,f}/v_s}{1 + Y_{CO_2,s}/v_s} \right] \quad (2.36)$$

$$\dot{m}_C = -4\pi r_f \rho D \ln(1 - Y_{CO_2,f}/v_s) \quad (2.37)$$

$$Y_{I,f} = Y_{I,\infty} \exp\left(-\dot{m}_C / (4\pi r_f \rho D)\right) \quad (2.38)$$

De $\sum Y_i = 1$, se sabe que

$$Y_{CO_2,f} = 1 - Y_{I,f} \quad (2.39)$$

Las ecuaciones restantes necesarias para resolver el sistema se obtienen de las expresiones de la cinética química en las que intervienen \dot{m}_C y $Y_{CO_2,s}$.

Cinética de la Superficie. La reacción $C + CO_2 \rightarrow 2CO$ es de primer orden respecto a la concentración de CO_2 [25] y así la tasa de quemado se expresa de la siguiente forma

$$\dot{m}_C = 4\pi r_s^2 k_c \frac{M_C M_{mix}}{M_{CO_2}} \frac{P}{R_u T_s} Y_{CO_2,s} \quad (2.40)$$

donde

$$k_c (m/s) = 4.016 \cdot 10^8 \exp\left[\frac{-29.790}{T_s (K)}\right] \quad (2.41)$$

La ecuación 2.40 se puede escribir más compactamente como

$$\dot{m}_C = K_{kin} Y_{CO_2,s} \quad (2.42)$$

donde

$$K_{kin} = 4\pi r_s^2 k_c \frac{M_C M_{mix}}{M_{CO_2}} \frac{P}{R_u T_s} \quad (2.43)$$

Las ecuaciones 2.36-2.39 pueden ser manipuladas para eliminar todas las variables excepto \dot{m}_C y $Y_{CO_2,s}$, es decir,

$$\dot{m}_C = 4\pi r_s \rho D \ln(1 + B_{CO_2,m}) \quad (2.44)$$

donde

$$B_{CO_2,m} = \frac{2Y_{O_2,\infty} - [(v_s - 1)/v_s] Y_{CO_2,s}}{v_s - 1 + [(v_s - 1)/v_s] Y_{CO_2,s}} \quad (2.45)$$

La ecuación 2.44 se puede resolver iterativamente con la ecuación 2.42 para hallar \dot{m}_C . Para combustión controlada por difusión, $Y_{CO_2,s}$ es cero y \dot{m}_C puede ser evaluada directamente por la ecuación 2.44.

Tiempo de Quemado de la Partícula. Para quemado controlado por difusión, encontrar el tiempo de quemado de la partícula requiere utilizar la ley ϕ^2 , de forma que el diámetro de la partícula se establece como una función del tiempo como sigue:

$$\phi^2(t) = \phi_0^2 - K_B t \quad (2.46)$$

Donde la constante de tasa de quemado, K_B , está dada por

$$K_B = \frac{8\rho D}{\rho_C} \ln(1+B) \quad (2.47)$$

Haciendo $\phi = 0$ en la ecuación 2.46 se obtiene el tiempo de vida de la partícula

$$t_C = \phi_0^2 / K_B \quad (2.48)$$

donde para esta caso, $B = B_{CO_2,m}$, con la fracción másica de la superficie fijada en cero. En la ecuación 2.47, ρ se refiere a la densidad de la fase gaseosa y ρ_C a la del carbono sólido.

Ya que para este análisis se ha asumido un medio gaseoso quieto, para tener en cuenta los efectos de flujo convectivo sobre una partícula de carbono quemándose en condiciones controladas por difusión, la tasa de quemado se aumenta por el factor $Sh/2$, donde Sh es el número de Sherwood que juega el mismo papel para la transferencia de masa que el número de Nusselt lo hace para la transferencia de calor. Para un número de Lewis igual a la unidad, $Sh = Nu$; así:

$$(\dot{m}_{C,diff})_{conv} = \frac{Nu}{2} (\dot{m}_{C,diff}) \quad (2.49)$$

2.2 ESTADO DEL ARTE

Las recientes investigaciones en combustión, tanto de llamas difusivas de combustibles gaseosos, como de combustibles sólidos, han sido llevadas a cabo principalmente de dos formas. Por una parte, se encuentran estudios experimentales de las diferentes características de los procesos de combustión antes mencionados; y por otra parte, soluciones de modelos matemáticos de combustión utilizando métodos numéricos y herramientas computacionales para distintas configuraciones, para ambos casos.

Poundenx [2] investigó experimentalmente las secciones transversales de las columnas de los productos de combustión de llamas difusivas tipo chorro en flujo cruzado. Sus objetivos fueron determinar las fuerzas que llevan a la similitud dinámica del comportamiento de la columna cerca de la llama y medir la forma de la sección transversal en términos de estas variables dinámicas. Demostró que no hay transición dinámica del fluido que afecte el comportamiento de la columna y que las fuerzas dominantes son el flujo de momento horizontal del flujo cruzado y la flotación de los productos de combustión.

Song [3] estudió los efectos de boquillas elípticas sobre la estabilidad de la llama en flujo cruzado para un rango de condiciones de operación. Su trabajo presentó los resultados experimentales para llamas de gas natural usando quillas circulares y elípticas con diferentes relaciones de aspecto y áreas de descarga. Encontró que las llamas que provenían de boquillas elípticas con el eje mayor perpendicular al flujo cruzado presentan mayores límites de estabilidad comparados con los de las llamas provenientes de boquillas circulares y de boquillas elípticas con el eje menos normal al flujo cruzado.

Marshall [4] estudió experimentalmente las características térmicas de llamas co-circundantes con diferentes distribuciones de momentos de entrada axial y angular. La carga de calor, el número de Reynolds, y la relación de equivalencia global se mantuvieron constantes mientras la distribución del flujo y la vorticidad eran sistemáticamente variadas entre dos chorros de aire.

Por otra parte, Kang [5] desarrolló un método de volumen finito efectivo y exacto, de malla desestructurada paralela, para manejar flujos reactivos turbulentos física y geoméricamente complejos. Los resultados numéricos indicaron que este enfoque predice razonablemente bien las características globales de las llamas de difusión turbulentas en tres dimensiones.

Yan [6] elaboró un procedimiento paralelo basado en un algoritmo de programa simple y datos múltiples (SPMD) para el cálculo paralelo de la combustión turbulenta y el esparcimiento de llama. Los cálculos se basan en el modelamiento de flujos reactivos turbulentos y radiantes y la pirolisis de combustible sólido. El comportamiento del procedimiento paralelo fue evaluado usando varios casos de prueba. En general, obtuvo buena eficiencia.

Los estudios referentes a la combustión de sólidos se han enfocado en el análisis experimental de diferentes parámetros de funcionamiento para casos de

combustión en lechos fluidos, como se puede observar en las referencias [7] y [8], donde se evalúan los efectos de la distribución del aire y de la presión para estos sistemas.

Además de lo anterior, He [9] desarrollo un modelo numérico general que describe la compleja dinámica de fluido y los procesos de transferencia de calor para lechos fluidos circulantes (CFBs) a alta temperatura.

Drennan [75] utilizó una herramienta CFD para optimizar la ubicación de los quemadores en una instalación de co-combustión de gas natural y carbón con el objetivo maximizar el desempeño del proceso, alcanzando importantes ahorros y reducción de emisiones.

Maloney [76] también utilizó una herramienta CFD para diseñar un sistema para posibilitar la combustión de gas natural sobre la mayor extensión posible del lecho de carbón de una caldera, dadas ciertas restricciones geométricas. El modelo implementado fue validado experimentalmente en el campo, mostrando ser una solución adecuada técnica y económicamente, a través de los resultados obtenidos para las emisiones y la capacidad.

Heikkinen [77] desarrolló la simulación CFD y la validación experimental del proceso de co-combustión de residuos de pollo, carne y huesos con carbón pulverizado en un reactor de flujo. Este trabajo demostró que los procesos de co-combustión que incluyen biomasa sólida pueden ser razonablemente bien descritos por los sub-modelos de combustión de carbón.

Por último, existen algunos estudios relacionados con la combustión de mezclas de combustibles en fases sólidas y gaseosas, enfocados al desarrollo de modelos para lechos fluidos de como lo hizo Kulasekaran [26], y también estudios experimentales como el llevado a cabo por Bayless [27].

3. MODELAMIENTO MATEMÁTICO

Con el objeto de retirar el alto contenido de humedad que posee la pasta que ingresa a un horno de clinkerización, y poder llevar cabo las reacciones químicas que le dan las características al producto, es necesario utilizar gases de combustión a alta temperatura que le suministren la cantidad de calor requerida para que se lleve a cabo este proceso. Estos gases de combustión provienen de un proceso de combustión, que se lleva a cabo en los primeros metros del horno desde donde se encuentra el quemador. En dicho proceso es posible quemar gas natural y carbón, lo que representa un reto al momento de realizar el modelamiento debido a la cantidad de fenómenos presentes en la combustión, tanto del gas natural como del carbón, además de los efectos generados por la interacción de estos procesos al tratarse de una mezcla de combustibles en diferentes fases.

El sistema que se tiene para esta aplicación consiste en un horno cilíndrico rotatorio que posee en su extremo inicial un quemador conformado por dos tubos concéntricos. Por el tubo interno del quemador se suministra gas natural, mientras que en la cavidad existente entre el la pared externa del tubo interno y la pared interna del tubo externo fluye una mezcla de aire y carbón pulverizado. Cuando el gas natural y la mezcla aire-carbón salen del quemador e ingresan a la zona del horno donde se produce la combustión. Luego, dichos gases dejan la zona de combustión y pasan a la zona de cadenas donde le transfieren calor a la pasta húmeda.

Para el proceso descrito anteriormente se llevan a cabo fenómenos de flujo de fluidos, turbulencia, flujo multifase, combustión difusiva de gases, combustión de carbón que incluye los procesos de devolatilización y reacción heterogénea del carbón fijo, formación de NOx por distintos mecanismos, y transferencia de combinada de calor incluyendo radiación, los cuales se modelan a continuación.

3.1 PROPIEDADES TERMOFÍSICAS

Debido a las variaciones de las propiedades termofísicas de los fluidos, como la densidad, la viscosidad, la conductividad térmica, la difusividad de las especies y los calores específicos, como funciones de la temperatura, las fracciones másicas y otras variables, es necesario incluir funciones que representen dichas dependencias en el modelamiento del sistema de la siguiente forma:

3.1.1 Densidad

Para el modelamiento del sistema de interés se tiene que todas las sustancias constituyentes de la mezcla se comportan como gases ideales, por lo que se tiene que la densidad de la mezcla viene dada por:

$$\rho = \frac{p}{RT \left(\sum_m \frac{Y_m}{M_m} \right)} \quad (3.1)$$

donde Y_m es la fracción másica de cada componente con un peso molecular M_m , la sumatoria se efectúa sobre todos los componentes de la mezcla, R es la constante universal de los gases y p y T son la presión y temperatura de la mezcla respectivamente.

3.1.2 Calor Específico

Para mezcla de múltiples componentes m , se determina el calor específico de la mezcla como promedio ponderado másico de los valores de los componentes así:

$$c_p = \sum_m Y_m c_{p,m} \quad (3.2)$$

donde c_p es el calor específico de la mezcla, y $c_{p,m}$ y Y_m son el calor específico y la fracción másica del componente m respectivamente.

Los valores del calor específico de cada una de las sustancias constituyentes se calculan a partir de una determinada relación polinómica como una función de la temperatura de la siguiente manera:

$$\left(\frac{c_p}{R}\right)_m = \sum_i^m (a_m)_i T^{i-1} \quad (3.3)$$

donde $(a_m)_i$ es el i -ésimo coeficiente polinómico [28] del componente m .

3.1.3 Viscosidad Molecular

Para mezclas de gases, se utiliza la formula de Wilke [29] para la viscosidad de la mezcla como sigue:

$$\mu = \sum_{i=1}^N \frac{X_i \mu_i}{\left(\sum_{j=1}^N X_j \Phi_{ij}\right)} \quad (3.4)$$

donde

$$\Phi_{ij} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{M_i}{M_j} \right)^{-\frac{1}{2}} \left(1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{M_j}{M_i} \right)^{\frac{1}{4}} \right)^2 \quad (3.5)$$

X_i es la fracción molar y μ_i la viscosidad molecular del componente i y N es el número de especies en la mezcla. μ_i se asumió constante para cada componente.

3.1.4 Conductividad Térmica

Para mezclas de gases se utiliza la formula de Mathur [30] así:

$$k = \frac{1}{2} \left(\sum_{i=1}^N X_i k_i + \frac{1}{\left(\sum_{i=1}^N \frac{X_i}{k_i} \right)} \right) \quad (3.6)$$

donde k_i es la conductividad térmica del componente i , el cual se asumió constante para cada sustancia constituyente de la mezcla.

3.1.5 Difusividad Molecular

La difusividad molecular del componente m en una mezcla gaseosa, D_m , se calcula como [31]:

$$D_m = \frac{\sum_{i=1, i \neq m}^N X_i M_i}{\bar{M} \sum_{i=1, i \neq m}^N \frac{X_i}{D_{im}}} \quad (3.7)$$

donde M_i es el peso molecular del componente i en la mezcla, \bar{M} es el peso molecular promedio de la mezcla y D_{im} es la difusividad binaria de los componente i y m , la cual se tomó como constante para cada par de componentes.

3.2 CONSERVACIÓN DE MASA Y MOMENTO

Las ecuaciones de Navier-Stokes o de conservación de masa y momento para flujo de fluido compresible en notación tensorial Cartesiana son [32]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = s_M \quad (3.8)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j u_i - \tau_{ij}) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + s_i \quad (3.9)$$

donde t es tiempo, x_i son las coordenadas Cartesianas ($i=1, 2, 3$), u_i la componente de la velocidad del fluido en la dirección x_i , ρ la densidad, τ_{ij} son las componentes del tensor de esfuerzo, s_M la fuente de masa, s_i las componentes de la fuente de momento, p la presión piezométrica $= p_s - \rho_0 g_m x_m$, donde p_s es la presión estática, ρ_0 la densidad de referencia, g_m las componentes de la aceleración gravitacional y x_m las coordenadas relacionadas para las que se definió ρ_0 .

Simplificando las ecuaciones anteriores y teniendo en cuenta el desplazamiento de la fase continua debido a la presencia de la fase dispersa en la mezcla, de acuerdo con el sistema que se quiere modelar, estas quedan de la siguiente forma

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\alpha \rho u_j) = \alpha s_{M,d} \quad (3.10)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\alpha \rho u_j u_i - \tau_{ij}) = \alpha \left(-\frac{\partial p}{\partial x_i} + s_{i,d} \right) \quad (3.11)$$

donde α es la fracción volumétrica ocupada por el fluido. Los términos que se refieren a la variación en el tiempo se suprimieron y las fuentes de masa, $s_{M,d}$, y momento, $s_{i,d}$, en este caso, representan el intercambio superficial de masa y momento entre la fase dispersa y la fase continua. Además, es importante decir que, para este caso, el sistema de coordenadas se considera en dos dimensiones ($i=1, 2$).

3.2.1 Relaciones constitutivas

Para situaciones donde se considera la existencia flujos turbulentos, u_i , p y otras variables dependientes, incluyendo τ_{ij} , asumen sus valores promedio conjuntos, y aplicados a fluidos Newtonianos, el tensor de esfuerzo obedece la siguiente relación constitutiva [33]:

$$\tau_{ij} = \alpha \mu s_{ij} - \frac{2}{3} \alpha \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} - \alpha \overline{\rho u'_i u'_j} \quad (3.12)$$

donde μ es la viscosidad dinámica molecular del fluido y δ_{ij} , el 'delta de Kronecker', es uno cuando $i=j$ y cero en cualquier otro caso; u' son las fluctuaciones alrededor de la velocidad promedio conjunta y la barra superior denota el proceso de promediado conjunto. El tercer término de la derecha en la ecuación anterior representa los esfuerzos de Reynolds adicionales debido al movimiento turbulento. Estos se relacionan al campo de velocidad media a través

de los modelos de turbulencia. Por último, el tensor medio de la tasa de deformación está dado por:

$$s_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \quad (3.13)$$

3.3 CONSERVACIÓN DE ENERGÍA

3.3.1 Entalpía Termoquímica

La transferencia de calor en el sistema a modelar se evalúa de acuerdo a la forma general de la ecuación de conservación de la entalpía para una mezcla de fluidos de la siguiente manera [34]:

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho h u_j + F_{h,j}) = \frac{\partial p}{\partial t} + u_j \frac{\partial p}{\partial x_j} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + s_h \quad (3.14)$$

Aquí, h es la entalpía estática, definida por:

$$h \equiv \bar{C}_p T - C_p^0 T_0 + \sum Y_m H_m = h_t + \sum Y_m H_m \quad (3.15)$$

y T la temperatura, Y_m la fracción másica del componente m de la mezcla, H_m el calor de formación del componente m , \sum la sumatoria sobre todos los componente de la mezcla, \bar{C}_p el calor específico a presión constante promedio a la temperatura T , C_p^0 el calor específico de referencia a la temperatura T_0 , $F_{h,j}$ el flujo difusivo de energía en la dirección x_j , s_h la fuente de energía y h_t la entalpía térmica. Como se observa, la entalpía estática se define como la suma de las componentes térmica y química, lo cual es conveniente al momento de manejar flujos químicamente reactivos.

Redefiniendo la ecuación de conservación de la entalpía para el sistema a modelar se tiene:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\alpha \rho h u_j + F_{h,j}) = \alpha \left(u_j \frac{\partial p}{\partial x_j} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \nabla \cdot \vec{q}_r + s_{h,d} \right) \quad (3.16)$$

donde una vez más se han suprimido el término que hace referencia a la variación en el tiempo. Aunque los términos de fuente de energía deberían ser suprimidos debido a que las fuentes y sumideros de energía generados por reacciones químicas, tanto exotérmicas como endotérmicas, están implícitas en la definición de la entalpía estática, es necesario incluir los efectos de generación debido a la radiación en medios participativos ($\nabla \cdot \vec{q}_r$) y a la transferencia superficial de energía entre la fase dispersa y la fase continua ($s_{h,d}$).

3.3.2 Relaciones de Flujo Difusivo

Inicialmente se asumirá que los componentes de flujos difusivos moleculares de calor y masa satisfacen las leyes de Fourier y Fick respectivamente. De acuerdo con lo anterior,

$$F_{h,j} \equiv -k \frac{\partial T}{\partial x_j} + \alpha \bar{\rho} \overline{u'_j h'} + \sum_m h_m \alpha \rho Y_m V_{m,j} \quad (3.17)$$

donde k es la conductividad térmica, $V_{m,j}$ es la componente j de la velocidad de difusión \vec{V}_m , h_m la entalpía estática del componente m . El segundo término de la derecha, que contiene las fluctuaciones de la entalpía estática h' , representa el flujo de energía difusiva turbulenta [35], el cual es definido por el modelo de turbulencia.

3.4 CONSERVACIÓN DE ESPECIES

Cada componente m de una mezcla de fluidos, cuya concentración local se expresa por medio de la fracción másica Y_m , se asume que es gobernada por una ecuación de conservación de especies de la siguiente forma:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_m) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j Y_m + F_{m,j}) = s_m \quad (3.18)$$

donde $F_{m,j}$ es la componente de flujo difusivo de masa de la especie m en la dirección x_j y s_m la rata de producción o consumo de masa de la especie m .

Al redefinir la ecuación de conservación de especies se tiene.

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\alpha \rho u_j Y_m + F_{m,j}) = \alpha(R_m + s_{m,d}) \quad (3.19)$$

donde solo se suprimió el término referente a la variación en el tiempo, ya que la rata de producción o consumo se evaluará a través de las tasas de reacción presentes en el flujo reactivo, R_m , y la transferencia superficial de especies entre las fases, $s_{m,d}$.

3.4.1 Relaciones de Flujo Difusivo

De forma análoga a la ecuación de energía:

$$F_{m,j} \equiv \alpha \rho Y_m V_{m,j} + \alpha \bar{\rho} \overline{u'_j Y'_m} \quad (3.20)$$

Donde el último término de la derecha, que contiene las fluctuaciones de la fracción másica Y'_m , representa el flujo másico turbulento [35] definido por el modelo de turbulencia, $V_{m,j}$ es la componente j de la velocidad de difusión \vec{V}_m , la cual se define como

$$\vec{V}_m = -\frac{1}{X_m} D_m \nabla X_m - \frac{D_m^T}{\rho Y_m} \nabla \ln T \quad (3.21a)$$

$$\vec{V}_m = -\frac{D_m}{X_m} (\nabla X_m + K_{T,m} \nabla \ln T) \quad (3.21b)$$

donde X_m es la fracción molar, D_m la difusividad molecular y D_m^T el coeficiente de difusión térmica del componente m en la mezcla gaseosa. Además

$$K_{T,m} = \frac{X_m}{\rho Y_m} \cdot \frac{D_m^T}{D_m} \quad (3.22)$$

se define con la relación de difusión térmica del componente m . Sin embargo, para este caso se asumirá que no existe difusividad térmica significativa, por lo que la ecuación 3.21 queda como:

$$\vec{V}_m = -\frac{1}{X_m} D_m \nabla X_m \quad (3.23)$$

3.5 TURBULENCIA

El enfoque utilizado para describir el comportamiento de la turbulencia, llamado modelo de viscosidad de Eddy (*Eddy Viscosity*), está basado en la analogía entre el proceso de difusión molecular y el movimiento turbulento. En estos modelos, los esfuerzos de Reynolds y los flujos turbulentos de los escalares están directamente relacionados a los gradientes locales del campo medio de flujo a través de una

difusividad y una viscosidad turbulenta, determinando la viscosidad turbulenta por una escala de velocidad turbulenta característica y una escala de longitud.

3.5.1 Modelo k-ε

Este modelo comprende el uso de ecuaciones de transporte para la energía cinética turbulenta k a su tasa de disipación ε . En este modelo, k y ε se eligen como escala de velocidad turbulenta y escala de longitud respectivamente. Cuando en estos modelos se usa una relación lineal entre los esfuerzos de Reynolds y las deformaciones, se clasifican como modelos lineales. Entonces, para este sistema se empleará un modelo lineal estándar [36-38], en el cual se usa la forma de las ecuaciones de k y ε para altos números de Reynolds, junto con representaciones algebraicas de leyes de pared para la transferencia de flujo, calor y masa [36].

3.5.2 Relaciones Constitutivas

Como se asume que los esfuerzos turbulentos de Reynolds y los flujo de los escalares se relacionan con las variables medias de flujo de forma análoga a las situaciones de flujo laminar [36], entonces

$$-\overline{\rho u'_i u'_j} = \mu_t s_{ij} - \frac{2}{3} \left(\mu_t \frac{\partial u_k}{\partial x_k} + \rho k \right) \delta_{ij} \quad (3.24)$$

$$\overline{\rho u'_i h'} = - \frac{\mu_t}{\sigma_{h,t}} \frac{\partial h}{\partial x_j} \quad (3.25)$$

$$\overline{\rho u'_j Y'_m} = - \frac{\mu_t}{\sigma_{m,t}} \frac{\partial Y_m}{\partial x_j} \quad (3.26)$$

donde

$$k \equiv \frac{\overline{u'_i u'_i}}{2} \quad (3.27)$$

es la energía cinética turbulenta, μ_t la viscosidad turbulenta y $\sigma_{h,t}$ y $\sigma_{m,t}$ los números turbulentos de Prandtl y Schmidt respectivamente. La viscosidad turbulenta se relaciona con k y ε así [36]:

$$\mu_t = f_\mu \frac{C_\mu \rho k^2}{\varepsilon} \quad (3.28)$$

donde C_μ es un coeficiente empírico usualmente constante y f_μ es la función de amortiguamiento, la cual se hace igual a uno para este caso. Los números turbulentos de Prandtl y Schmidt son cantidades a las que comúnmente se asumen constantes y de igual valor. Los valores numéricos de los parámetros anteriores se definen de acuerdo al modelo utilizado como se verá más adelante.

3.5.3 Ecuaciones de Conservación

La ecuación de transporte para la energía cinética turbulenta es [38]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho k u_j - \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] = \\ \mu_t (P + P_B) - \rho \varepsilon - \frac{2}{3} \left(\mu_t \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \rho k \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \mu_t P_{NL} \end{aligned} \quad (3.29)$$

donde

$$P \equiv S_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad (3.30)$$

$$P_B \equiv -\frac{g_i}{\sigma_{h,t}} \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x_j} \quad (3.31)$$

$$P_{NL} = -\frac{\rho}{\mu_t} \overline{u'_i u'_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \left[P - \frac{2}{3} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \frac{\rho k}{\mu_t} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right] \quad (3.32)$$

Aunque $P_{NL} = 0$ para modelos lineales y σ_k es el número turbulento de Prandtl. El primer término del lado derecho de la ecuación 3.29 representa la generación turbulenta debido a esfuerzos normales y cortantes y fuerzas de flotación, el segundo la disipación viscosa, y el tercero la amplificación o atenuación debido a efectos de compresibilidad. El último término tiene en cuenta las contribuciones no lineales.

Al simplificar la ecuación de transporte de energía cinética turbulenta reduciendo el término transitorio del lado izquierdo y los términos referentes a las fuerzas de flotación y a las contribuciones no lineales del lado derecho, esta queda de la siguiente forma:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho k u_j - \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] = \mu_t P - \rho \varepsilon - \frac{2}{3} \left(\mu_t \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \rho k \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \quad (3.33)$$

Para la tasa de disipación de la energía cinética turbulenta se tiene:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho \varepsilon u_j - \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] = \\ C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} \left[\mu_t P - \frac{2}{3} \left(\mu_t \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \rho k \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right] + \\ C_{\varepsilon 3} \frac{\varepsilon}{k} \mu_t P_B - C_{\varepsilon 2} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} + C_{\varepsilon 4} \rho \varepsilon \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} \mu_t P_{NL} \end{aligned} \quad (3.34)$$

donde σ_ε es el número turbulento de Prandtl y $C_{\varepsilon 1}$, $C_{\varepsilon 2}$, $C_{\varepsilon 3}$, $C_{\varepsilon 4}$ son coeficientes cuyos valores se encuentran en la tabla 1 [36-38], junto con las constantes antes definidas. El primer término del lado derecho de la ecuación 3.34 representa la contribución a la producción de disipación debido a esfuerzos lineales y a efectos de dilatación/compresión, el segundo la contribución debido a efectos de flotación,

el cuarto la contribución debido a cambios temporales de la densidad media, importante para modelos de combustión, y el quinto la contribución debido a esfuerzos no lineales. El tercer término tiene en cuenta la destrucción de la disipación.

Tabla 1. Coeficientes para el modelo de turbulencia estándar k-ε.

C_μ	σ_k	σ_ε	$\sigma_{h,t}$	$\sigma_{m,t}$	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	$C_{\varepsilon 3}$	$C_{\varepsilon 4}$	κ	E
0.09	1.0	1.22	0.9	0.9	1.44	1.92	0	-0.33	0.419	9.0

Launder, B.E., and Spalding, D.B. 1974. 'The numerical computation of turbulent flows', Comp. Meth. in Appl. Mech. and Eng., 3, pp. 269-289.

Al simplificar la ecuación de la tasa de disipación suprimiendo el término transitorio de la izquierda y los términos referentes a los efectos de flotación y a las contribuciones no lineales del lado derecho, esta queda así:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho \varepsilon u_j - \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] = C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} \left[\mu_t P - \frac{2}{3} \left(\mu_t \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \rho k \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right] - C_{\varepsilon 2} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} + C_{\varepsilon 4} \rho \varepsilon \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \quad (3.35)$$

3.5.4 Funciones de Pared

Los modelos de turbulencia para altos números de Reynolds requieren una formulación algebraica, llamadas "funciones de pared", para representar la distribución de la velocidad, la temperatura, la turbulencia, las concentraciones, etc. al interior de la capa límite [36]. Esto es necesario porque el modelo de turbulencia no es válido al interior de la capa donde los efectos moleculares y de turbulencia son comparables en magnitud.

Las suposiciones principales aplicadas a la formulación de la función de pared son las siguientes:

- Las variaciones en la velocidad, temperatura, etc. son predominantemente normal a la pared, llevando a un comportamiento unidimensional.
- Los efectos de los gradientes de presión y de fuerzas de cuerpo son despreciables, llevando a esfuerzos cortantes uniformes en la capa.
- Los esfuerzos cortantes y los vectores de velocidad son unidireccionales y están alineados a través de la capa.
- Existe un balance entre la producción y la disipación de energía turbulenta.
- Existe una variación lineal de la escala de longitud turbulenta.

Las formulaciones resultantes que definen los perfiles en términos de la distancia normal y desde la pared son:

Velocidad. Para paredes rugosas y semi-rugosas se tiene,

$$u^+ = \begin{cases} y^+ & , y^+ \leq y_m^+ \\ A + \frac{1}{\kappa} \ln \left[\frac{y^+ - D^+}{B + CR^+} \right] & , y^+ > y_m^+ \end{cases} \quad (3.36)$$

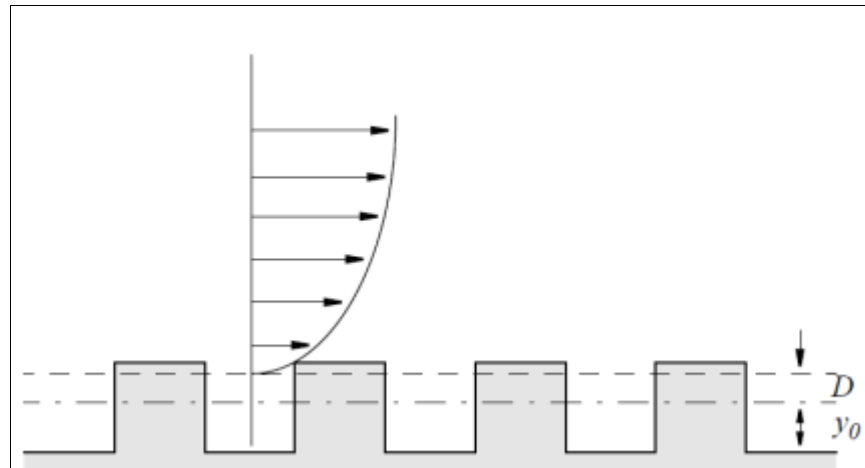
$$y^+ = \frac{\rho u_\tau y}{\mu} = \rho C_\mu^{1/4} k^{1/2} \frac{y}{\mu} \quad (3.37)$$

$$D^+ = \rho C_\mu^{1/4} k^{1/2} \frac{D}{\mu} \quad (3.38)$$

$$R^+ = \rho C_\mu^{1/4} k^{1/2} \frac{y_0}{\mu} \quad (3.39)$$

donde $u^+ = (u - u_w)/u_\tau$, u es la velocidad tangencial del fluido, u_w la velocidad tangencial de la pared, $u_\tau = (\tau_w/\rho)^{1/2}$, τ_w el esfuerzo cortante en la pared, κ la constante de von Karman; A , B y C son constantes, D es el espesor de desplazamiento y y_0 la altura de rugosidad equivalente. Estas dos cantidades se ilustran en la figura 7, donde se observa que el valor de D es tal que la velocidad del fluido es cero a una distancia $y_0 + D$ desde la pared. El valor de y_m^+ es cero para paredes totalmente rugosas y los valores de las constantes dependen del flujo y del tipo de rugosidad.

Figura 7. Parámetros dimensionales para definir la rugosidad.



Launder, B.E., and Spalding, D.B. 1974. 'The numerical computation of turbulent flows', *Comp. Meth. in Appl. Mech. and Eng.*, 3, pp. 269-289.

Mediciones realizadas por Nikuradse [39] para flujo en tuberías con alta rugosidad indican los valores para las constantes de la tabla 2.

Tabla 2. Valores de constantes para la función de pared de velocidad.

A	B	C	D
8.5	0	1	0

Schlichting, H. 1968. "Boundary Layer Theory". 6th Edition, McGraw-Hill, New York.

Temperatura/Fracción Másica. Si ϕ denota ya sea temperatura o fracción másica, y $F_{\phi,w}$ el flujo de calor o masa desde la pared hacia el fluido, entonces

$$\phi^+ = \begin{cases} \sigma_\phi y^+ & , y^+ \leq y_T^+ \\ \sigma_{\phi,t} (u^+ + P) & , y^+ > y_T^+ \end{cases} \quad (3.40)$$

donde u^+ está dada por la ecuación 3.36, y P , el factor de resistencia de la subcapa, por [40]

$$P \equiv 9.24 \left[\left(\frac{\sigma_\phi}{\sigma_{\phi,t}} \right)^{3/4} - 1 \right] \left[1 + 0.28 \exp \left(\frac{-0.007 \sigma_\phi}{\sigma_{\phi,t}} \right) \right] \quad (3.41)$$

donde $\phi^+ = \rho(\phi_w - \phi)u_\tau / F_{\phi,w}$ para flujo másico, o $\phi^+ = C_p \rho(\phi_w - \phi)u_\tau / F_{\phi,w}$ para flujo de calor, ϕ_w es el valor en la pared, σ_ϕ el número de Prandtl o Schmidt molecular, $\sigma_{\phi,t}$ el número de Prandtl o Schmidt turbulento y y_T^+ satisface la ecuación:

$$\sigma_\phi y_T^+ - \sigma_{\phi,t} \left[\frac{1}{\kappa} \ln(E y_T^+) + P \right] = 0 \quad (3.42)$$

donde E es un coeficiente empírico cuyo valor se encuentra en la tabla 1.

De lo anterior, es útil definir y calcular el coeficiente local de transferencia de calor o masa como

$$H_t = \frac{F_{\phi,w}}{\phi_w - \phi} = \frac{\rho u_\tau}{\sigma_{\phi,t} (u^+ + P)} \quad (3.43)$$

para flujo másico, o

$$H_t = \frac{F_{\phi,w}}{\phi_w - \phi} = \frac{C_p \rho u_\tau}{\sigma_{\phi,t} (u^+ + P)} \quad (3.44)$$

para flujo de calor.

También es posible calcular el coeficiente global de transferencia de calor o masa, el cual se define en términos de la temperatura o fracción másica media de bulo, ϕ_b , como sigue

$$H_t = \frac{F_{\phi,w}}{\phi_w - \phi_b} \quad (3.45)$$

Se debe notar que la generación de calor debido a la disipación viscosa es tenida en cuenta en los cálculos de la temperatura de la pared y el flujo de calor.

Parámetros de Turbulencia. Se puede demostrar que bajo condiciones de equilibrio:

$$k^+ = C_\mu^{-1/2} \quad (3.46)$$

$$\varepsilon^+ = \frac{C_\mu^{3/4}}{\kappa} \quad (3.47)$$

donde:

$$k^+ = \frac{k\rho}{\tau_w} \quad (3.48)$$

$$\varepsilon^+ = \frac{\varepsilon y}{k^{3/2}} \quad (3.49)$$

3.6 FLUJO DE FASE DISPERSA

Para el sistema que se está modelando se sabe que el flujo consiste de una fase continua, la cual es una mezcla gaseosa reactiva, y una fase dispersa en la forma de partículas sólidas de carbón. En general, el movimiento de la fase dispersa es

influenciado por el de la fase continua y viceversa, debido al desplazamiento y a los efectos de transferencia de momento, masa y calor en la interface.

3.6.1 Enfoque Lagrangeano

Debido a que partículas individuales se introducen en un flujo turbulento portador, cada una de ellas tiene su propia trayectoria aleatoria producto de la interacción con el fluctuante campo de velocidad turbulento. Además, como la fase dispersa en este caso es volátil y reactiva, se produce transferencia de masa entre las fases. Esto es acompañado de transferencia de calor, lo cual se produce debido a las diferencias de temperatura en la interface. La transferencia de masa en la interface produce cambios de tamaño en las partículas que conforman la fase dispersa.

El marco en el cual se modela este tipo de fenómenos es del tipo Lagrangeano/Eulereano [41], en el cual, las ecuaciones de conservación de masa, momento y energía para la fase dispersa se especifican para cada elemento individual, mientras que las ecuaciones gobernantes para la fase continua se expresan en la forma Eulereana con algunas modificaciones para tener en cuenta la presencia de la fase dispersa, tal como se hizo al obtener las ecuaciones 3.10, 3.11, 3.16 y 3.19.

3.6.2 Ecuaciones de Conservación

La velocidad instantánea del fluido y la velocidad de cada partícula se denotan por \vec{u} y \vec{u}_d respectivamente. El subíndice d se refiere a la fase dispersa, las cantidades que no poseen subíndice se refieren a la fase continua y el vector de posición de la partícula se representa como \vec{x}_d . Las ecuaciones de conservación para las partículas desde el punto de vista Lagrangeano son las siguientes:

Momento. La ecuación de momento para una partícula de masa m_d es

$$m_d \frac{d\vec{u}_d}{dt} = \vec{F}_{dr} + \vec{F}_p + \vec{F}_{am} + \vec{F}_b \quad (3.50)$$

donde

1. \vec{F}_{dr} es la fuerza de arrastre (figura 8), dada por

$$\vec{F}_{dr} = \frac{1}{2} C_d \rho A_d |\vec{u} - \vec{u}_d| (\vec{u} - \vec{u}_d) \quad (3.51)$$

donde A_d es el área transversal de la partícula y C_d el coeficiente de arrastre, dado por

$$C_d = \begin{cases} 24(1 + 0.15 \text{Re}_d^{0.687}) / \text{Re}_d, & \text{Re}_d \leq 10^3 \\ 0.44 & , \text{Re}_d > 10^3 \end{cases} \quad (3.52)$$

y Re_d es el número de Reynolds de la partícula, definido como

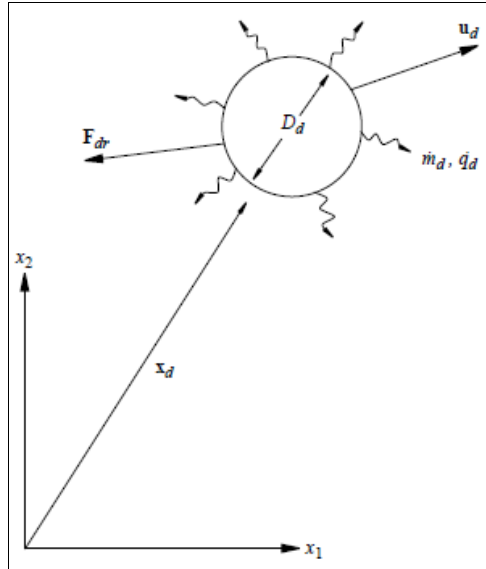
$$\text{Re}_d \equiv \frac{\rho |\vec{u} - \vec{u}_d| D_d}{\mu} \quad (3.53)$$

2. \vec{F}_p es la fuerza de presión dada por

$$\vec{F}_p = -V_d \nabla p \quad (3.54)$$

donde V_d es el volumen de la partícula y ∇p el gradiente de presión en el fluido portador. p incluye todas las componentes hidrostáticas.

Figura 8. Movimiento de una partícula desde el punto de vista Lagrangeano.



3. \vec{F}_{am} es la llamada fuerza de “masa virtual”. Esta es la requerida para acelerar el fluido portador penetrado por la partícula. La expresión para esta es

$$\vec{F}_{am} = -C_{am}\rho V_d \frac{d(\vec{u}_d - \vec{u})}{dt} \quad (3.55)$$

donde C_{am} es el coeficiente de masa virtual, usualmente con valor de 0.5 [42].

4. \vec{F}_b es un término de fuerza de cuerpo general que representa los efectos de la gravedad y de las aceleraciones presentes en un sistema de coordenadas no inercial. En el caso de un marco de referencia rotatorio, \vec{F}_b es

$$\vec{F}_b = m_d [\vec{g} - \vec{\omega} \times (\vec{\omega} \times \vec{r}) - 2(\vec{\omega} \times \vec{u}_d)] \quad (3.56)$$

donde \vec{g} es el vector de aceleración gravitacional, $\vec{\omega}$ el vector de velocidad angular y \vec{r} el vector de distancia hasta el eje de rotación. Para el caso partícula que se está modelando aquí $|\vec{F}_b| = 0$.

El conocer la velocidad de la partícula permite determinar su vector de posición instantánea \vec{x}_d integrando

$$\frac{d\vec{x}_d}{dt} = \vec{u}_d \quad (3.57)$$

De la ecuación 3.51, la escala de tiempo de relajación de momento τ_M se identifica como

$$\tau_M = \frac{m_d |\vec{u} - \vec{u}_d|}{\vec{F}_{dr}} = \frac{2m_d}{C_d \rho A_d |\vec{u} - \vec{u}_d|} = \frac{4\rho_d D_d}{3C_d \rho |\vec{u} - \vec{u}_d|} \quad (3.58)$$

Masa. En la presencia de transferencia de masa a una tasa F_m por unidad de área superficial, la tasa de cambio másica de la partícula está dada por

$$\frac{dm_d}{dt} = -A_s F_m \quad (3.59)$$

donde A_s es el área superficial de la partícula y F_m se determina de acuerdo con los modelos de devolatilización del carbón y de reacción del carbón fijo. De la ecuación anterior, la escala de tiempo de relajación de masa τ_m se define como

$$\tau_m = \frac{m_d}{A_s |F_m|} = \frac{\rho_d D_d}{6 |F_m|} \quad (3.60)$$

Energía. El balance de energía de la partícula tiene en cuenta los solo mecanismos de transferencia de calor superficial, ya que las pérdidas/ganancias debido al cambio de fase son cero, entonces:

$$m_d c_{p,d} \frac{dT_d}{dt} = -A_s \dot{q}_d'' \quad (3.61)$$

donde $c_{p,d}$ es el calor específico y T_d la temperatura de la partícula respectivamente. El flujo de calor superficial por unidad de área superficial, \dot{q}_d'' , está dado por la siguiente relación:

$$\dot{q}_d'' = h(T_d - T) \quad (3.62)$$

donde T es la temperatura del fluido portador en los alrededores de la partícula y h es el coeficiente de transferencia de calor, para el cual se utiliza la formulación de El Wakil [43], en la cual es evaluado a partir de un correlación aplicable en ausencia de transferencia de masa y luego multiplicada por un factor de correlación para tener en cuenta dicho proceso. El h corregido esta dado por

$$h = \frac{k_m Nu Z}{(e^Z - 1) D_d} \quad (3.63)$$

donde k_m es la conductividad del fluido portador y el número de Nusselt, Nu , es obtenido de la correlación de Ranz-Marshall [44] como sigue:

$$Nu = 2 \left(1 + 0.3 Re_d^{1/2} Pr^{1/3} \right) \quad (3.64)$$

Donde Pr es el número de Prandt. La cantidad Z se define como

$$Z = \frac{-c_{p,d}(dm_d/dt)}{\pi D_d k_m Nu} \quad (3.65)$$

De las ecuaciones 3.61 y 3.62, la escala de tiempo de relajación térmica para las partículas τ_T se identifica como

$$\tau_T = \frac{c_{p,d} \rho_d D_d}{6h} = \frac{c_{p,d} \rho_d D_d^2}{6k_m Nu} \quad (3.66)$$

3.6.3 Dispersión Turbulenta

Una partícula al interior de un flujo turbulento experimenta un campo de velocidad aleatoriamente variable al cual responde de acuerdo con su inercia. El modelo estocástico usado para modelar este proceso [45] asume que, como la partícula el campo de flujo turbulento, esta interactúa con una serie de vórtices turbulentos. También se asume que la fluctuante velocidad al interior de cada vórtice es isotrópica y obedece una función de densidad de probabilidad Gaussiana (pdf). Además, se asumen que el tiempo de interacción, τ_I , es suficientemente corto que la velocidad del fluido en un vórtice dado es efectivamente constante durante este proceso. El tiempo de interacción se toma como el menor entre el tiempo de vida del vórtice τ_v y el tiempo requerido por la partícula para atravesarlo τ_I .

De acuerdo con estas suposiciones, la partícula experimenta una velocidad instantánea del fluido \vec{u} en cada vórtice dada por

$$\vec{u} = \vec{U} + \vec{u}' \quad (3.67)$$

donde \vec{U} es la velocidad local promedio y \vec{u}' es la perturbación aleatoria. Esta última se calcula a partir de un función de probabilidad Gaussiana con media cero y una derivación estándar dada por

$$\sigma = (2k/3)^{1/2} \quad (3.68)$$

donde k es la energía cinética turbulenta. Así, \bar{u} tal como se definió anteriormente es la cantidad usada en las ecuaciones anteriores para cálculos de flujo turbulento.

El tiempo de interacción se evalúa como

$$\tau_I = \min(\tau_e, \tau_t) \quad (3.69)$$

El tiempo de vida de vórtice está relacionado a la difusividad de una partícula de fluido de acuerdo con el modelo de turbulencia, dado por

$$\tau_e = 3C_\mu \frac{k}{\varepsilon} \quad (3.70)$$

y el tiempo de transito se estima como

$$\tau_t = \begin{cases} \infty & , \tau_M \leq \frac{l}{|\bar{u} - \bar{u}_d|} \\ -\tau_M \ln \left(1 - \frac{l}{\tau_M |\bar{u} - \bar{u}_d|} \right) & , \tau_M > \frac{l}{|\bar{u} - \bar{u}_d|} \end{cases} \quad (3.71)$$

Donde τ_M es la escala de tiempo de relajación de momento y l es la escala de longitud turbulenta integral, definida como sigue

$$l = \frac{C_\mu^{3/4} k^{3/2}}{\varepsilon} \quad (3.72)$$

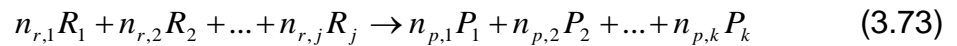
3.7 COMBUSTIÓN GASEOSA

3.7.1 Modelo “Eddy Break-up” Turbulento

El modelo “Eddy Break-up” (EBU) de Magnussen [46] fue desarrollado originalmente para aplicaciones de combustión de gases que incluyen flujos turbulentos y está basado en las siguientes suposiciones:

- Las reacciones son irreversibles y constan de un combustible (F), un oxidante (O) y unos productos (P), más posibles especies inertes.
- La escala de tiempo de reacción es tan pequeña que el mecanismo que controla la tasa de reacción es el micro-mezclado turbulento.

Cada reacción es de la siguiente forma:



donde R y P denotan reactivos y productos respectivamente y los valores de n son los coeficientes estequiométricos.

De acuerdo con el modelo, la tasa de consumo del combustible está dada por

$$R_F = -\frac{\rho \varepsilon}{k} A_{ebu} \min \left[Y_F, \frac{Y_O}{s_O}, B_{ebu} \frac{Y_P}{s_P} \right] \text{ kg/m}^3 \text{ s} \quad (3.74)$$

donde

$$s_O \equiv \frac{n_O M_O}{n_F M_F} \quad (3.75)$$

$$s_P \equiv \frac{n_P M_P}{n_F M_F} \quad (3.76)$$

y A_{ebu} y B_{ebu} son coeficientes empíricos adimensionales con valores nominales predeterminados de 4 y 0.5 respectivamente. Los primeros dos argumentos en corchetes en la ecuación 3.74 determinan la fracción másica local controladora de la tasa de reacción, mientras que el tercero, intenta inhibir la reacción donde la temperatura es baja. La escala de tiempo de micro-mezclado se toma como k/ε , la escala de tiempo de disipación.

Así, se calcula la fracción másica de cada combustible de su propia ecuación diferencial de transporte 3.19, incorporando la tasa de reacción correspondiente a cada reacción existente. Además, debido a que este es un sistema de reacciones no homogéneas, se debe resolver una ecuación diferencial adicional para cada reacción considerada. El escalar conservado utilizado en este caso se conoce como la fracción de la mezcla, f , y se define como la fracción másica total de combustible quemado y no quemado. f se obtiene solucionando la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho f) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho u_j f - \left(\rho D_f + \frac{\mu_t}{\sigma_{f,t}} \right) \frac{\partial f}{\partial x_j} \right] = S \quad (3.77)$$

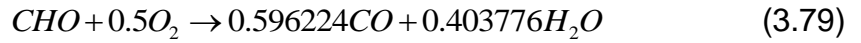
donde $\sigma_{f,t}$ es el número turbulento de Schmidt, al que se le asigna el mismo valor de $\sigma_{m,t}$. El término de fuente S representa la adición de combustible a la fase gaseosa originado desde la fase discreta compuesta en este caso por las partículas de carbón.

Redefiniendo la ecuación de conservación de la fracción másica para el sistema a modelar se tiene:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\alpha \rho u_j f - \alpha \left(\rho D_f + \frac{\mu_t}{\sigma_{f,t}} \right) \frac{\partial f}{\partial x_j} \right] = \alpha S \quad (3.78)$$

donde una vez más se han suprimido el término que hace referencia a la variación en el tiempo y tenido en cuenta el desplazamiento de la fase continua debido a la presencia de la fase dispersa en la mezcla.

Para el caso del sistema particular que se requiere modelar aquí se tienen las siguientes reacciones:



donde las reacciones 3.79 y 3.81 aplican a la combustión de de los volátiles liberados por las partículas de carbón y las reacciones 3.80, 3.81 y 3.82 establecen los pasos para la reacción del metano. La reacción 3.81 se utiliza para los dos casos porque ambos procesos producen CO durante su primer paso de reacción. La sustancia denominada como CHO es una sustancia homogénea cuyas propiedades están dadas por la proporción de carbono, hidrógeno y oxígeno en el carbón según su análisis último.

Ahora, para cada reacción especificada se definirá una tasa de consumo de combustibles de la forma de la ecuación 3.74, donde cada combustible es la primera sustancia de cada una de las reacciones y cada reacción genera sus propios productos, así:

$$R_{CHO} = -\frac{\rho\varepsilon}{k} A_{ebu} \min \left[Y_{CHO}, Y_{O_2} \frac{n_{CHO} M_{CHO}}{n_{O_2} M_{O_2}}, B_{ebu} Y_{P_1} \frac{n_{CHO} M_{CHO}}{n_{P_1} M_{P_1}} \right] \quad (3.83)$$

$$R_{CH_4} = -\frac{\rho\varepsilon}{k} A_{ebu} \min \left[Y_{CH_4}, Y_{O_2} \frac{n_{CH_4} M_{CH_4}}{n_{O_2} M_{O_2}}, B_{ebu} Y_{P_2} \frac{n_{CH_4} M_{CH_4}}{n_{P_2} M_{P_2}} \right] \quad (3.84)$$

$$R_{CO} = -\frac{\rho \mathcal{E}}{k} A_{ebu} \min \left[Y_{CO}, Y_{O_2} \frac{n_{CO} M_{CO}}{n_{O_2} M_{O_2}}, B_{ebu} Y_{P_3} \frac{n_{CO} M_{CO}}{n_{P_3} M_{P_3}} \right] \quad (3.85)$$

$$R_{H_2} = -\frac{\rho \mathcal{E}}{k} A_{ebu} \min \left[Y_{H_2}, Y_{O_2} \frac{n_{H_2} M_{H_2}}{n_{O_2} M_{O_2}}, B_{ebu} Y_{P_4} \frac{n_{H_2} M_{H_2}}{n_{P_4} M_{P_4}} \right] \quad (3.86)$$

Luego, para cada combustible se tiene una ecuación de transporte de la forma de la ecuación 3.19, en las que se incluyen sus respectivas tasas de reacción así:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\alpha \rho u_j Y_{CHO} + F_{CHO,j}) = \alpha (R_{CHO} + s_{CHO,d}) \quad (3.87)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\alpha \rho u_j Y_{CH_4} + F_{CH_4,j}) = \alpha R_{CH_4} \quad (3.88)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\alpha \rho u_j Y_{CO} + F_{CO,j}) = \alpha \left(R_{CO} - 0.595564 \frac{M_{CO}}{M_{CHO}} R_{CHO} - \frac{M_{CO}}{M_{CH_4}} R_{CH_4} + s_{CO,d} \right) \quad (3.89)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\alpha \rho u_j Y_{H_2} + F_{H_2,j}) = \alpha \left(R_{H_2} - 2 \frac{M_{H_2}}{M_{CH_4}} R_{CH_4} \right) \quad (3.90)$$

donde los valores numéricos de las ecuaciones anteriores representan los coeficientes estequiométricos de las reacciones respectivas. Ahora, se procede a plantear las ecuaciones diferenciales de conservación de las fracciones de mezcla, de la forma de la ecuación 3.78, para cada una de las reacciones gaseosas presentes en el sistema así:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\alpha \rho u_j f_1 - \alpha \left(\rho D_{f_1} + \frac{\mu_t}{\sigma_{f,t}} \right) \frac{\partial f_1}{\partial x_j} \right] = \alpha S_1 = \alpha s_{CHO,d} \quad (3.91)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\alpha \rho u_j f_2 - \alpha \left(\rho D_{f_2} + \frac{\mu_t}{\sigma_{f,t}} \right) \frac{\partial f_2}{\partial x_j} \right] = 0 \quad (3.92)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\alpha \rho u_j f_3 - \alpha \left(\rho D_{f_3} + \frac{\mu_t}{\sigma_{f,t}} \right) \frac{\partial f_3}{\partial x_j} \right] = \alpha S_3 = \alpha s_{CO,d} \quad (3.93)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\alpha \rho u_j f_4 - \alpha \left(\rho D_{f_4} + \frac{\mu_t}{\sigma_{f,t}} \right) \frac{\partial f_4}{\partial x_j} \right] = 0 \quad (3.94)$$

donde solo se han conservado los términos de generación desde las fase dispersa para las ecuaciones 3.87 y 3.91, y 3.89 y 3.93, ya que para sus reacciones correspondientes, es decir 3.79 y 3.81, el combustible o parte de él proviene de la fase dispersa, en este caso, las partícula de carbón. Entonces, mientras el CHO se produce como resultado de la devolatilización del carbón, parte del CO generado en este proceso proviene de la reacción heterogénea que se lleva a cabo en la superficie de la partícula en el proceso de quemado del carbón fijo. Estos dos últimos procesos se abordarán más adelante.

En este punto es necesario establecer las ecuaciones de conservación para las especies restantes de la forma de la ecuación 3.19, teniendo en cuenta las respectivas reacciones en las que actúan y sus respectivas tasas se consumo de combustible de la siguiente manera:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\alpha \rho u_j Y_{O_2} + F_{O_2,j}) = \alpha \left[0.5 M_{O_2} \left(\frac{R_{CHO}}{M_{CHO}} + \frac{R_{CH_4}}{M_{CH_4}} + \frac{R_{CO}}{M_{CO}} + \frac{R_{H_2}}{M_{H_2}} \right) + R_{O_2,NO_x} \right] \quad (3.95)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\alpha \rho u_j Y_{H_2O} + F_{H_2O,j}) = \alpha \left(-0.404436 \frac{M_{H_2O}}{M_{CHO}} R_{CHO} - \frac{M_{H_2O}}{M_{H_2}} R_{H_2} + s_{H_2O,d} \right) \quad (3.96)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\alpha \rho u_j Y_{CO_2} + F_{CO_2,j}) = -\alpha \frac{M_{CO_2}}{M_{CO}} R_{CO} \quad (3.97)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\alpha \rho u_j Y_{N_2} + F_{N_2,j}) = \alpha R_{N_2,NO_x} \quad (3.98)$$

donde la ecuación 3.96 contiene el término de generación de vapor de agua debido a que este tiene en cuenta la liberación de la humedad del carbón durante el proceso de devolatilización. En las ecuaciones 3.95 y 3.98, las tasas de reacción R_{N_2,NO_x} y R_{O_2,NO_x} del nitrógeno y el oxígeno, respectivamente, están en función de la tasa de formación de NOx de acuerdo al modelamiento que se verá más adelante.

3.8 COMBUSTIÓN DE CARBÓN

El carbón es un material compuesto que consiste en sustancias orgánicas e inorgánicas. El modelamiento de la combustión del carbón incluye el modelamiento de la devolatilización del carbón, la combustión homogénea de los volátiles gaseosos y la oxidación heterogénea de las partículas sólidas de carbón fijo. Ya que la carga de partículas de carbón pulverizado es relativamente baja, se aplicará el tratamiento multifase Lagrangeano descrito anteriormente, complementado con el modelo de Fuente de Partícula en Celda de Migdal y Agosta [47].

El proceso completo de combustión de carbón está compuesto por tres subprocesos diferentes descritos a continuación:

3.8.1 Devolatilización

Es el proceso mediante el cual, el carbón, libera todo el material volátil contenido en él. Badzioch y Hawksley [48] postularon el hecho de que la devolatilización era un proceso reactivo de primer orden, con una tasa de reacción proporcional a la cantidad de material volátil remanente en el carbón:

$$\frac{dV}{dt} = K_v (V^* - V) \quad (3.99)$$

donde V^* es el contenido de material volátil en kg luego de aplicar el factor de ajuste Q . Este factor varía entre 1.15 y 1.35 según Therssen [49], por lo que para este caso se utilizó un valor de 1.25.

La integración de la ecuación 3.99 proporciona la cantidad de material volátil liberado, V , en el tiempo t :

$$V = V^* \left[1 - \exp \left(- \int_0^t K_v dt \right) \right] \quad (3.100)$$

La constante de reacción, K_v , depende del tipo de carbón y debe ser determinada experimentalmente. Esta constante esta correlacionada con la temperatura por una expresión en la forma de Arrhenius así:

$$K_v = A_v \exp \left(- \frac{E_v}{RT_p} \right) \quad (3.101)$$

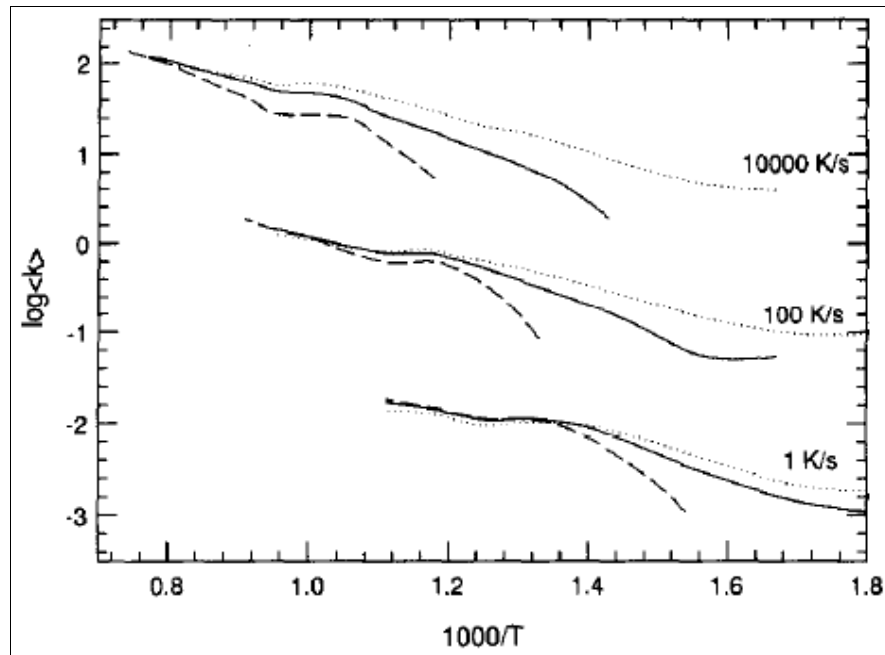
donde A_v es el factor pre-exponencial (s^{-1}), E_v la energía de activación para la devolatilización (J/kmol), R la constante universal de los gases (J/kmol.K) y T_p la temperatura de la partícula de carbón.

Según Niksa [50], la figura 9 ilustra como las tasas nominales de producción de volátiles cambian en la medida en que se varían las tasas de calentamiento. También se observa que las variaciones sobre el espectro de rangos nunca son tan sustanciales como las que se producen al cambiar la tasa de calentamiento en un orden de magnitud. De aquí se puede concluir que los carbones del mismo

rango tendrán el mismo comportamiento durante el proceso de devolatilización mientras dicho proceso se lleve a cabo a la misma tasa de calentamiento.

De acuerdo a lo anterior, para el sistema que se está modelando, es apropiado asumir una tasa de calentamiento alta debido a que en la mayoría de los procesos reales ocurre esto; además, ya que el carbón utilizado durante este proceso se encuentra en el rango de los carbones subbituminosos, es posible utilizar la figura 9 para determinar A_v y E_v , asumiendo que la tasas de calentamiento es de alrededor de 10000 K/s. Como resultado de lo anterior, se obtuvieron valores de 2964.55 s^{-1} y $3.31 \times 10^7 \text{ J/kmol}$ para el factor pre-exponencial y la energía de activación respectivamente. La figura 9 también proporciona información sobre la temperatura a la cual comienza el proceso de devolatilización, que para este caso es de 595 K.

Figura 9. Tasa de devolatilización para carbones sub-bituminosos (puntos), bituminosos hv (continua) y bituminosos Iv (trazos).



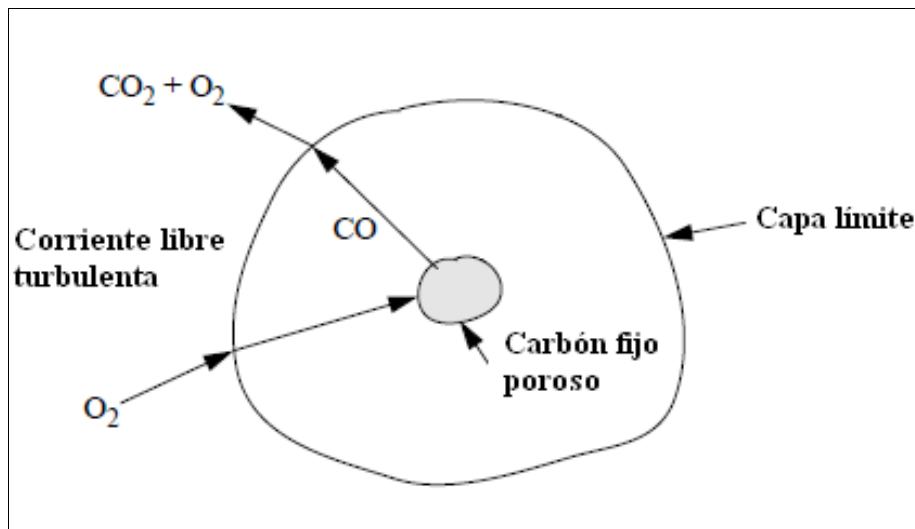
Niksa, S. 1995. 'Predicting the devolatilization behavior of any coal from its ultimate analysis', *Combust. Flame*, 100, pp. 384-394.

3.8.2 Quemado del Carbón Fijo

El tiempo requerido para llevar a cabo el quemado del carbón fijo representa una parte significativa del proceso de combustión del carbón y su modelamiento tiende a ser complicado por razones como la incertidumbre de la estructura del carbón fijo, el complejo mecanismo de reacción entre el carbón fijo y otros reactivos (O_2 , H_2O , CO_2 , H_2), la fragmentación del carbón fijo, y la misma composición exacta del carbón fijo. Debido a estas incertidumbres, el modelamiento de estos procesos es altamente dependiente de datos de tasas de reacción obtenidos experimentalmente para carbones específicos y condiciones de prueba.

Un modelo simplificado para la combustión del carbón fijo se lleva a cabo como se ilustra en la figura 10. Como se observa, la partícula de carbón fijo se encuentra rodeada por una capa límite laminar a través de la cual se debe difundir el oxígeno para reaccionar con el carbón fijo.

Figura 10. Vista Simplificada de la oxidación del carbón fijo.



Para el caso especial en el que la tasa de reacción superficial entre el carbón fijo y el oxígeno es bastante alta, la tasa de consumo de carbón fijo está controlada por la tasa de difusión del O_2 a través de la capa límite:

$$q = K_d(P_g - P_s) \quad (3.102)$$

donde q es la tasa de consumo ($\text{kg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$) por unidad de área superficial, P_g es la presión parcial del oxígeno en la corriente libre (Nm^{-2}), P_s es la presión parcial de oxígeno en la superficie de la partícula de carbón fijo (Nm^{-2}) y K_d es el coeficiente de tasa de difusión que se expresa como:

$$K_d = \frac{24\phi D}{d_p RT_m} \quad (3.103)$$

Donde ϕ es un factor de mecanismo que toma un valor de 2 para una reacción en la superficie de la partícula que solo produce CO como en este caso, R es la constante universal de los gases ($\text{J}/\text{kmol}\cdot\text{K}$), T_m es la temperatura media partícula-gas (K), d_p es el diámetro de la partícula (m) y D es el coeficiente de difusión (m^2s^{-1}).

Basado en datos experimentales [51], K_d se puede expresar como sigue cuando $\phi = 2$:

$$K_d = 5.06 \times 10^{-12} \frac{T_m^{0.75}}{d_p} \text{ kg}\cdot\text{m}^{-2}\text{s}^{-1} (\text{Nm}^{-2})^{-1} \quad (3.104)$$

Para el caso en el que la tasa de reacción de la superficie es pequeña comparada con K_d , la tasa de consumo para una reacción de medio orden está dada por:

$$q = K_c P_s^{1/2} \quad (3.105)$$

K_c es el coeficiente de tasa de reacción química basado en el área superficial externa efectiva de la partícula de carbón fijo y se expresa matemáticamente como:

$$K_c = A_{char} \exp\left(-\frac{E_{char}}{RT_p}\right) \quad (3.106)$$

donde A_{char} es el factor pre-exponencial ($\text{kg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}(\text{Nm}^{-2})^{-1/2}$), E_{char} es la energía de activación para la oxidación del carbón fijo (J/kmol), R es la constante universal de los gases ($\text{J}/\text{kmol}\cdot\text{K}$) y T_p es la temperatura de la partícula (K).

Debido a que no se cuenta con datos experimentales de la tasa de reacción heterogénea del carbón fijo para el carbón utilizado actualmente en este proceso, no es posible determinar los valores correspondiente de A_{char} y E_{char} . Sin embargo, como el carbón utilizado en el proceso entra en la categoría de subbituminoso y, ya que Murphy [52] estudio experimentalmente la cinética de reacción del carbón fijo de un carbón de este tipo, se asumirá que el comportamiento cinético de ambos tipos de carbón fijo no difiere en gran medida. Por lo tanto, se utilizarán los valores obtenidos por Murphy para definir la cinética de la reacción del carbón fijo obtenido del carbón subbituminoso Highvale, conservando la composición del carbón subbituminoso utilizado en el proceso real. Entonces, para una tasa de reacción de medio orden ($n = 0.5$), dichos valores son $0.0565 \text{ kg}/\text{m}^2\cdot\text{s}(\text{N}/\text{m}^2)^{1/2}$ y $5.34 \times 10^7 \text{ J}/\text{kmol}$ para el factor pre-exponencial y la energía de activación respectivamente.

Ya que la tasa de combustión del carbón fijo puede ser controlado tanto por la tasa límite de difusión como por la tasa límite de reacción química, es posible utilizar un modelo [53] que combine K_d y K_c para formar un modelo efectivo de tasa de consumo. Este modelo cambia entre el límite de difusión y el límite cinético de

reacción a medida que el carbón fijo avanza a través del dominio. Para un modelo de medio orden, la tasa global de consumo está definida como:

$$q = K_d \left[P_g - \left(\frac{q}{K_c} \right)^2 \right] \quad (3.107)$$

Consecuentemente, la tasa de quemado del carbón fijo se puede obtener de:

$$\frac{dchar}{dt} = -q\pi d_p^2 \quad (3.108)$$

3.8.3 Combustión de Volátiles

El material volátil contiene gases de hidrocarburos combustibles, oxígeno, humedad y algunas especies inorgánicas que contribuyen a la formación de contaminantes. Para llevar a cabo el modelamiento de la combustión de estos volátiles se utilizará el modelo extendido “Eddy Break-up” [46] que permite la combustión simultánea de las partículas de carbón y el metano que ingresa al sistema. Como producto del uso de dicho modelo extendido se obtuvieron las reacciones 3.79 y 3.81, sus respectivas tasas de reacción y ecuaciones de transporte para las sustancias que intervienen, tal como se definieron anteriormente.

3.9 FORMACIÓN DE NOx

A pesar de que los óxidos nitrosos son importantes contaminantes, la concentración de estos en la mayoría de los dispositivos de combustión es baja; debido a esto, tienen poca influencia sobre el campo de flujo. Además, la escala de tiempo para las reacciones de los NOx es mayor que las escalas de tiempo

para los procesos de mezclado turbulento y la combustión de los hidrocarburos que controlan las reacciones que liberan calor. Así, los cálculos de los NOx pueden ser separados de las predicciones del campo de flujo reactivo principal.

Para el modelamiento del sistema de interés se utilizarán tres mecanismos de formación de oxido nítrico durante la combustión de hidrocarburos de la siguiente forma:

3.9.1 NOx Térmico

El NOx térmico se forma debido a la oxidación del nitrógeno atmosférico a alta temperatura. Para el oxido nítrico térmico, las principales reacciones se reconocen generalmente como el mecanismo extendido de tres pasos de Zeldovich, como sigue:



Las constantes de para estas reacciones han sido medidas en numerosos estudios experimentales [54-55], y los datos obtenidos de dichos estudios han sido críticamente evaluados [56]. Las expresiones para los coeficientes para las reacciones 3.109 a 3.111 basados en [56] son:

$$K_1 = 1.8 \times 10^{11} \exp\left(\frac{-38370}{T}\right) m^3(kgmol)^{-1} s^{-1} \quad (3.112)$$

$$K_{-1} = 3.8 \times 10^{10} \exp\left(\frac{-425}{T}\right) \quad (3.113)$$

$$K_2 = 1.8 \times 10^7 T \exp\left(\frac{-4680}{T}\right) \quad (3.114)$$

$$K_{-2} = 3.8 \times 10^6 T \exp\left(\frac{-20820}{T}\right) \quad (3.115)$$

$$K_3 = 7.1 \times 10^{10} \exp\left(\frac{-450}{T}\right) \quad (3.116)$$

$$K_{-3} = 7.1 \times 10^{11} \exp\left(\frac{-24560}{T}\right) \quad (3.117)$$

donde K_1 , K_2 y K_3 son las constantes de reacción directas y K_{-1} , K_{-2} y K_{-3} son las inversas para las reacciones 3.109 a 3.111 respectivamente.

La tasa de formación de NOx es significativa solo a altas temperaturas debido a que la fijación térmica del nitrógeno requiere el rompimiento del fuerte lazo del N₂. Este efecto está representado por la alta energía de activación de la reacción 3.109, la cual hace esta reacción el paso limitante del mecanismo de Zeldovich. La energía de activación para la oxidación del N es pequeña, por ende se puede establecer un estado cuasi-estable. Basado en esta suposición, la tasa instantánea de formación de NOx térmico es:

$$\hat{R}_{NO,t} = \frac{\rho^2 M_{NO}}{1 + K_{-1} \frac{Y_{NO}}{M_{NO}} \left/ \left(K_2 \frac{Y_{O_2}}{M_{O_2}} + K_3 \frac{Y_{OH}}{M_{OH}} \right) \right.} kg.m^{-3}.s^{-1} \quad (3.118)$$

$$\left[2K_1 \frac{Y_O}{M_O} \frac{Y_{N_2}}{M_{N_2}} - \frac{2K_{-1} \frac{Y_{NO}}{M_{NO}}}{K_2 \frac{Y_{O_2}}{M_{O_2}} + K_3 \frac{Y_{OH}}{M_{OH}}} \left(K_{-2} \frac{Y_O}{M_O} \frac{Y_{NO}}{M_{NO}} + K_{-3} \frac{Y_H}{M_H} \frac{Y_{NO}}{M_{NO}} \right) \right]$$

Debido a que las concentraciones de los radicales O, OH y H no son calculadas por el modelo de combustión, se deben utilizar ciertas suposiciones para obtener

estos valores. De acuerdo con Westenberg [57], la concentración de los átomos de O en equilibrio pueden ser obtenidos de:

$$[O] = K_p [O_2]^{1/2} \text{ kgmol.m}^{-3} \quad (3.119)$$

y

$$Y_o = [O] \frac{M_o}{\rho} \quad (3.120)$$

donde

$$K_p = \frac{1.255 \times 10^4}{T^{1/2}} \exp\left(-\frac{31090}{T}\right) \text{ kgmol}^{\frac{1}{2}} \text{m}^{-\frac{3}{2}} \quad (3.121)$$

Por otra parte las concentraciones de los radicales de OH y H son inicialmente especificadas como cero.

Interacción Químico-Turbulenta. La alta turbulencia del sistema a modelar implica que el cálculo de las tasas medias de reacción evaluada exclusivamente en términos de temperatura (densidad) y concentración de especies medias lleve a resultados inexactos. La tasa media de formación de NOx térmico se puede relacionar con la tasa instantánea de formación de la ecuación 3.118 utilizando la función de densidad de la probabilidad conjunta $P_{(C_1, C_2, \dots, T)}$ así:

$$R_{NO,t} = \int \int \int_{\min}^{\max} \hat{R}_{NO,t(C_1, C_2, \dots, T)} P_{(C_1, C_2, \dots, T)} \partial C_1 \partial C_2 \dots \partial T \quad (3.122)$$

donde $\hat{R}_{NO,t}$ es el valor de la tasa de formación de NOx térmico cuando las concentraciones tienen los valores de C_1, C_2, \dots , y la temperatura tiene un valor de T . Los límites de integración se definen por los posibles valores máximos y mínimos de las variables independientes.

Ahora, si se asume que las variables de la función de densidad de la probabilidad son estadísticamente independientes, esta se puede expresar como:

$$P_{(C_1, C_2, \dots, T)} = P_{(C_1)} P_{(C_2)} \dots P_{(T)} \quad (3.123)$$

Debido a que el NOx térmico es fuertemente dependiente de la temperatura, es posible argumentar que la variación de la temperatura tiene un mayor impacto en la producción de NOx que las fluctuaciones de la concentración de especies. Así, las funciones de densidad de la probabilidad para las concentraciones pueden ser definidas en términos de funciones delta:

$$P_{(C_1)} = \delta(C_1 - \bar{C}_1) \quad (3.124a)$$

$$P_{(C_2)} = \delta(C_2 - \bar{C}_2) \dots \quad (3.124b)$$

Con el objetivo de cambiar los límites de integración a cero y uno, se adimensionaliza la temperatura así:

$$\hat{\theta} = \frac{\hat{T} - T_{\min}}{T_b - T_{\min}} \quad (3.125)$$

donde T_{\min} es la mínima temperatura al interior del campo de flujo y T_b es la máxima temperatura local, calculada asumiendo que las reacciones de combustión son completamente locales.

Asumiendo una función beta, la función de densidad de de la probabilidad resulta como:

$$P(\hat{\theta}) = \left(\hat{\theta}^{a-1} (1 - \hat{\theta})^{b-1} \right) / \left(\int_0^1 \theta^{a-1} (1 - \theta)^{b-1} d\theta \right) \quad (3.126)$$

donde a y b pueden ser obtenidas como sigue:

$$\theta = \frac{a}{a+b} \quad (3.127)$$

$$\overline{\hat{\theta}^2} = \frac{a(a+1)}{(a+b)(a+b+1)} \quad (3.128)$$

La varianza, $\overline{\theta'^2}$, está dada por:

$$\overline{\theta'^2} = \overline{\hat{\theta}^2} - \theta^2 = \frac{ab}{(a+b)^2(a+b+1)} = \theta(1-\theta)S \quad (3.129)$$

donde

$$S = \frac{1}{a+b+1} \quad (3.130)$$

El máximo valor que puede tener la varianza es:

$$\overline{\hat{\theta}^2}_{\max} = \theta(1-\theta) \quad (3.131)$$

Por lo tanto, $0 \leq S \leq 1$.

Combinando las ecuaciones 3.127 y 3.129 se tiene que:

$$a = \frac{1-S}{S} \theta \quad (3.132)$$

$$b = \frac{1-S}{S} (1-\theta) \quad (3.133)$$

Hand [58] argumenta que $0.5 \leq S \leq 1$ para que a y b sean menor que 1. De hecho, se utiliza un valor de 0.6 para S .

La sustitución de las ecuaciones 3.126 y 3.124 en la ecuación 3.122 resulta en:

$$R_{NO,t} = \left(\int_0^1 \hat{R}_{NO,t}(\bar{c}_1, \bar{c}_2, \dots, \theta) \theta^{a-1} (1-\theta)^{b-1} d\theta \right) / \left(\int_0^1 \theta^{a-1} (1-\theta)^{b-1} d\theta \right) \quad (3.134)$$

Esta integral debe ser evaluada numéricamente sobre el espacio de temperatura adimensional, teniendo claro que mientras mayor sea el número de pasos de integración, más exactos serán los resultados.

Ahora, asumiendo la reacción global $N_2 + O_2 \rightarrow 2NO$, que sustituya las reacciones elementales del mecanismo de Zeldovich, es posible determinar las tasas de reacción para el nitrógeno y el oxígeno moleculares durante la formación del NOx térmico así:

$$R_{N_2,t} = -\frac{1}{2} R_{NO,t} \frac{M_{N_2}}{M_{NO}} \quad (3.135)$$

$$R_{O_2,t} = -\frac{1}{2} R_{NO,t} \frac{M_{O_2}}{M_{NO}} \quad (3.136)$$

3.9.2 NOx Prompt

El NOx prompt se forma por la reacción de fragmentos de hidrocarburos y el nitrógeno molecular. Posee una leve dependencia de la temperatura y un tiempo de vida de solo algunos microsegundos. La tasa de producción de NOx prompt está dada por De Soete [59] como,

$$R_{NO,pt} = k_{pt} M_{NO} \quad kg.m^{-3}s^{-1} \quad (3.137)$$

donde k_{pt} es la constante de reacción y se define como:

$$k_{pt} = k_r \left(\frac{RT}{P} \right)^{1+b} [O_2]^b [N_2] [CH_4] \exp\left(\frac{-E_a}{RT} \right) \text{ kgmol.m}^{-3}\text{s}^{-1} \quad (3.138)$$

$[O_2]$, $[N_2]$ y $[CH_4]$ son las concentraciones de las especies en kgmol/m^3 . Para estas llamas de aire y CH_4 , la energía de activación E_a es igual a $303.5 \times 10^6 \text{ J/kgmol}$ y $k_r = 6.4 \times 10^6$ de acuerdo con Peters [60]. La constante universal de gases R , la temperatura T y la presión P están en unidades SI. El orden de reacción para el oxígeno, b , depende de las condiciones experimentales. De acuerdo con De Soete [59], b varía con la fracción molar de oxígeno X_{O_2} como sigue:

$$\begin{aligned} b = 1.0 & , & X_{O_2} < 0.0041 \\ b = -3.95 - 0.9 \ln X_{O_2} & , & 0.0041 \leq X_{O_2} \leq 0.0111 \\ b = -0.35 - 0.1 \ln X_{O_2} & , & 0.0111 \leq X_{O_2} \leq 0.03 \\ b = 0.0 & , & X_{O_2} \geq 0.03 \end{aligned} \quad (3.139)$$

Sin embargo, para la combustión del metano, es posible usar $b = 0.5$ como recomienda Peters [60].

Para el caso de la formación de NOx prompt también es posible determinar las tasas de reacción para el nitrógeno y el oxígeno moleculares con base en una reacción global, solo que en este caso, dicha reacción global se lleva a cabo en la presencia del CH_4 , como observa en la ecuación 3.138. De esta manera, las tasas de reacción para el N_2 y el O_2 son:

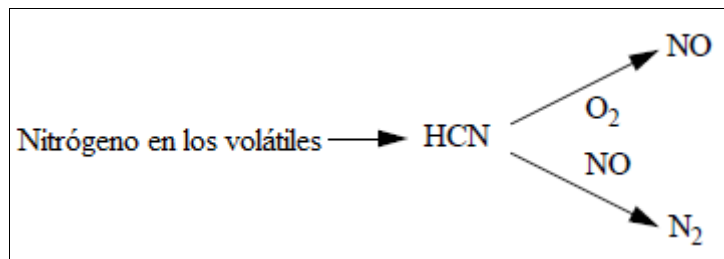
$$R_{N_2,pt} = -\frac{1}{2} k_{pt} M_{N_2} \quad (3.140)$$

$$R_{O_2,pt} = -\frac{1}{2} k_{pt} M_{O_2} \quad (3.141)$$

3.9.3 NOx de Combustible

El NOx de combustible se forma por la oxidación gaseosa del nitrógeno volátil del carbón y por la combustión heterogénea de del nitrógeno del carbón fijo. La cinética global propuesta por De Soete [59] es usada para modelar el NOx de combustible que se deriva de los volátiles del carbón, tal como se observa en la figura 11.

Figura 11. Mecanismo de reacción global de fase gaseosa de De Soete.



De Soete, G.G. 1975. 'Overall reaction rates of NO and N₂ formation from fuel nitrogen', 15th Symp. (Int.) on Combustion, The Combustión Institute, pp. 1093-1102.

Las tasas de producción o destrucción de NOx de combustible para los volátiles, HCN, N₂ y O₂ están dadas como:

$$R_{NO,vol.} = (k_1 - k_2)\rho \frac{M_{NO}}{M_{mix}} \quad kg.m^{-3}s^{-1} \quad (3.142)$$

$$R_{HCN} = R_{vol.HCN} - (k_1 + k_2)\rho \frac{M_{HCN}}{M_{mix}} \quad (3.143)$$

$$R_{N_2,vol.} = k_2\rho \frac{M_{N_2}}{M_{mix}} \quad (3.144)$$

$$R_{O_2,vol.} = -k_1\rho \frac{M_{O_2}}{M_{mix}} \quad (3.145)$$

donde $R_{vol.HCN}$ es la tasa de generación de HCN debido a la devolatilización del carbón. k_1 y k_2 son las tasas de producción y destrucción de NO en el mecanismo de De Soete. Estas constantes de reacción están dadas como:

$$k_1 = 1.0 \times 10^{10} X_{HCN} X_{O_2}^b \exp\left(\frac{-280.5 \times 10^6}{RT}\right) \quad (3.146)$$

$$k_2 = 3.0 \times 10^{12} X_{HCN} X_{NO} \exp\left(\frac{-251.2 \times 10^6}{RT}\right) \quad (3.147)$$

donde X_{HCN} , X_{NO} y X_{O_2} son las fracciones molares de las especies y la constante universal de gases y la temperatura están expresadas en unidades SI. b es el orden de la reacción para el oxígeno y se relaciona con la fracción molar del oxígeno como en la ecuación 3.139.

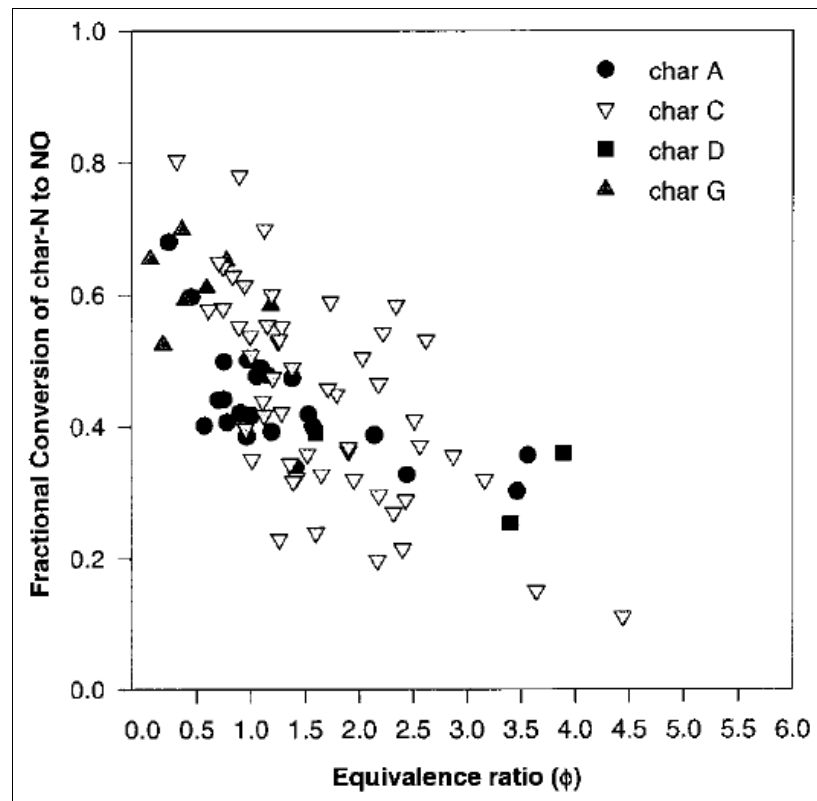
El nitrógeno en el carbón está distribuido entre los volátiles y el carbón fijo. La oxidación heterogénea del nitrógeno del carbón fijo para formar NO se modela como un proceso de des adsorción según De Soete [61]. La tasa de producción está vinculada a la tasa de quemado del carbón fijo y se expresa como:

$$R_{NO,char} = R_{char} Y_{N,char} B \eta \frac{M_{NO}}{M_N} \quad (3.148)$$

donde R_{char} es la tasa de combustión del carbón fijo en $kg.m^{-3}s^{-1}$, la eficiencia de conversión del nitrógeno del carbón fijo a NO, η , es un parámetro que depende del tipo de carbón y B en la fracción de carbón fijo quemado, ósea, la masa de carbón fijo consumido respecto a la masa inicial de carbón fijo.

Según Nelson [62], tal como se observa en la figura 12, η posee una notable dependencia de la relación de equivalencia, que para este caso, con un exceso de aire del 10%, es de 0.91. Si se considera que el carbón utilizado para el proceso que se está modelando se comporta de la misma manera que el carbón subbituminoso utilizado por Nelson, el cual produce un carbón fijo como el de la figura 12 denominado “char G”, el valor de η sería 0.65.

Figura 12. Dependencia de η respecto a la relación de equivalencia para cuatro tipos de carbón fijo. “Char G” proviene de un carbón subbituminoso.



Nelson, P. F., Nancarrow, P. C., Bus, J., Prokopiuk, A. 2002. 'Fractional conversion of char N to no in an entrained flow reactor', *Proceedings of the Combustion Institute*, 29 (2), pp. 2267-2274

Ahora, para determinar la tasa de producción de N_2 debido al nitrógeno proveniente del carbón fijo y la tasa de desaparición de oxígeno se tiene:

$$R_{N_2, char} = R_{char} Y_{N, char} B(1-\eta) \frac{M_{N_2}}{M_N} \quad (3.149)$$

$$R_{O_2, char} = -\frac{1}{2} R_{NO, char} \frac{M_{O_2}}{M_{NO}} \quad (3.150)$$

Luego de haber establecido las tasas de reacción de cada una de las sustancias que intervienen en los tres tipos de mecanismos de formación de NOx, se procede a determinar las tasas globales de formación de dichas sustancias debido a la formación total de NOx así:

$$R_{O_2, NO_x} = R_{O_2, t} + R_{O_2, pt} + R_{O_2, vol.} + R_{O_2, char} \quad (3.151)$$

$$R_{N_2, NO_x} = R_{N_2, t} + R_{N_2, pt} + R_{N_2, vol.} + R_{N_2, char} \quad (3.152)$$

$$R_{NO} = R_{NO, t} + R_{NO, pt} + R_{NO, vol.} + R_{NO, char} \quad (3.153)$$

donde las ecuaciones 3.151 y 3.152 se pueden reemplazar en las ecuaciones diferenciales de transporte 3.95 y 3.98, respectivamente, mientras que para las ecuaciones 3.143 y 3.153 es necesario establecer dos nuevas ecuaciones diferenciales de transporte para el HCN y el NO como sigue:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\alpha \rho u_j Y_{HCN} + F_{HCN, j}) = \alpha R_{HCN} \quad (3.154)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\alpha \rho u_j Y_{NO} + F_{NO, j}) = \alpha R_{NO} \quad (3.155)$$

3.10 RADIACIÓN

Debido a las altas temperaturas presentes en el fluido producto de las reacciones químicas llevadas a cabo, es necesario tener en cuenta los efectos de la transferencia de calor por radiación térmica en medios participativos durante el modelamiento del proceso. Para llevar a cabo el modelamiento de la radiación en medios participativos se utilizará el método de ordenadas discretas como se verá a continuación.

3.10.1 Método de Ordenadas Discretas

A medida que un haz de radiación pasa a través del medio participativo, que se asume como gris, su intensidad radiante I en la dirección Ω es absorbida e incrementada por el material que interviene de acuerdo con la ecuación de transferencia de radiación (RTE) como sigue [63]:

$$\frac{dI}{ds} = -(k_a + k_s + k_p)I + k_a I_b + k_p I_p + \frac{k_s}{4\pi} \int_{4\pi} p(\Omega, \Omega') I(\Omega') d\Omega' \quad (3.156)$$

donde s es la distancia en la dirección Ω , I_b la potencia emisiva de cuerpo negro del material a la temperatura T ($I_b = \sigma T^4 / \pi$), I_p la potencia emisiva equivalente de la fase discreta, k_a el coeficiente de absorción, k_p el coeficiente equivalente de absorción de partícula, k_s el coeficiente de dispersión y $p(\Omega, \Omega')$ la probabilidad que la radiación incidente en la dirección Ω' sea dispersada en una magnitud $d\Omega$ hacia la dirección Ω .

El coeficiente equivalente de absorción de partícula está dado por

$$k_p = \frac{\sum_i \varepsilon_p \pi r_i^2}{V} \quad (3.157)$$

donde ε_p es la emisividad de la partícula, r_i el radio de la partícula y V el volumen de la celda.

Reescribiendo la ecuación 3.156 en términos de la intensidad radiante para una longitud de onda específica λ , esta se convierte en:

$$\frac{dI_\lambda}{ds} = -(k_{a\lambda} + k_{s\lambda} + k_{p\lambda})I_\lambda + k_{a\lambda}I_{b\lambda} + k_{p\lambda}I_{p\lambda} + \frac{k_{s\lambda}}{4\pi} \int_{4\pi} I_\lambda(\Omega) d\Omega \quad (3.158)$$

donde I_λ es la intensidad de radiación a la longitud de onda λ ($\text{W}/(\text{m}^2\text{srm}^{-1})$), $k_{a\lambda}$ el coeficiente de absorción a la longitud de onda λ (m^{-1}), $k_{p\lambda}$ el coeficiente equivalente de absorción de partícula a la longitud de onda λ (m^{-1}), el cual se asume como independiente de la longitud de onda (ecuación 3.157), $k_{s\lambda}$ el coeficiente de dispersión a la longitud de onda λ (m^{-1}), $I_{b\lambda}$ la intensidad de cuerpo negro a la longitud de onda λ , $I_{p\lambda}$ la intensidad de cuerpo negro a la longitud de onda λ y a la temperatura de la partícula, y Ω el ángulo sólido.

$I_{b\lambda}$ se define como

$$I_{b\lambda} = \frac{2C_1}{\lambda^5 (e^{C_2/\lambda T} - 1)} \quad (3.159)$$

donde $C_1 = 0.595522 \times 10^{-16} \text{ Wm}^2/\text{s}$ y $C_2 = 0.01439\text{mK}$. Además, es importante mencionar que el componente de dispersión se asume como isotrópico.

Ahora, para el proceso que se está modelando aquí, se asumirá que el coeficiente de absorción $k_{a\lambda}$ es un coeficiente de absorción global, llamado coeficiente medio de absorción de Planck, que tiene en cuenta los efectos de absorción de la mezcla de gases y de las partículas sólidas de carbón, por lo que la ecuación 3.158 queda así:

$$\frac{dI_{\lambda}}{ds} = -(k_{a\lambda} + k_{s\lambda})I_{\lambda} + k_{a\lambda}I_{b\lambda} + \frac{k_{s\lambda}}{4\pi} \int_{4\pi} I_{\lambda}(\Omega) d\Omega \quad (3.160)$$

Cuando los coeficientes de absorción y dispersión del medio son independientes de la longitud de onda, al medio se le llama gris. En ese caso, la ecuación 3.160 puede ser integrada sobre la longitud de onda para producir una ecuación independiente de esta.

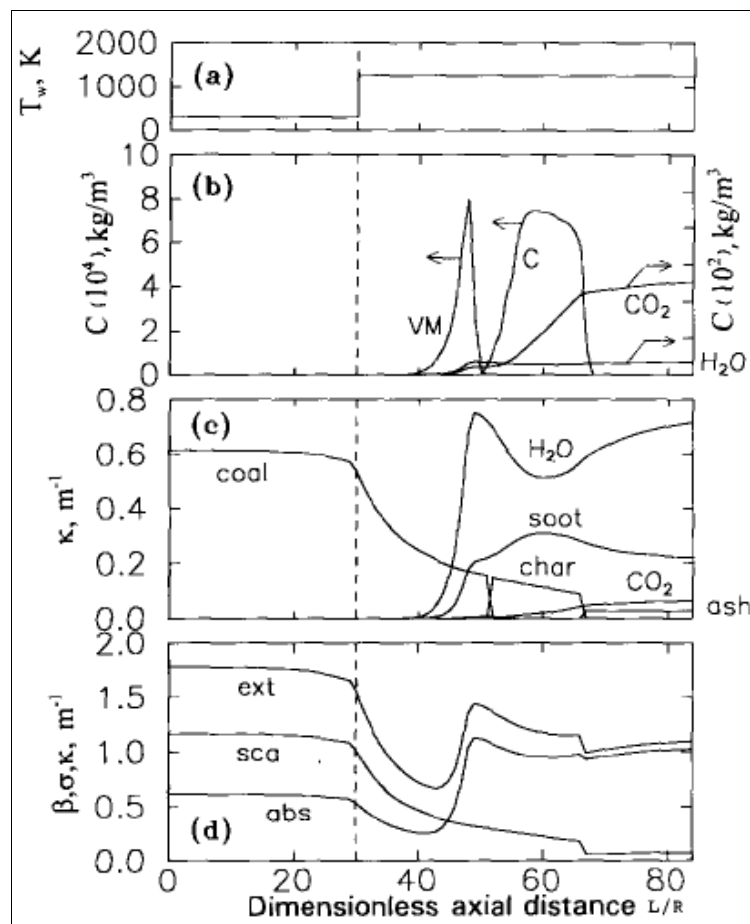
Según Kim [64], tal como se ve en la figura 13, para un combustor tubular de mezclas gas-carbón, las propiedades de radiación medias de Planck del medio participativo varían con la distancia axial adimensional del combustor a medida que se lleva a cabo el proceso de combustión del carbón. Sin embargo, se observa en la misma figura que, desde la longitud en la cual se libera la totalidad del material volátil en adelante, los coeficientes medios no varían en gran medida. Entonces, debido a que en el proceso que se está modelando, la devolatilización se lleva a cabo rápidamente y muy cerca de la salida del quemador, se asumirán valores constantes para los coeficientes de absorción y dispersión de acuerdo a lo observado en la figura 13, para la salida del combustor. Dichos valores son de 1 y 0.1 para los coeficientes de absorción y dispersión medios de Planck, respectivamente.

La condición de frontera aplicada a la ecuación RTE para fronteras con emisión y reflexión (con emisividad ε_w y reflectividad ρ_w) difusas es, para cada longitud de onda λ :

$$I_{\lambda}(\vec{s}) = \varepsilon_w I_{b\lambda} + \frac{\rho_w}{\pi} \int_{(\vec{n} \cdot \vec{s}' < 0)} I_{\lambda}(\vec{s}') |\vec{n} \cdot \vec{s}'| d\Omega \quad (3.161)$$

donde \vec{s} es un vector unitario en la dirección Ω , \vec{n} el vector unitario de superficie dirigido hacia afuera de la superficie y \vec{s}' el vector unitario a lo largo de la coordenada alejándose de la pared.

Figura 13. Distribución axial de parámetros de un combustor tubular de mezclas gas-carbón.



Kim, C., and Lior, N. 1995. 'Easily computable good approximations for spectral radiative properties of particle-gas components and mixture in pulverized coal combustors', *Fuel*, 12, pp. 1891-1902.

El flujo de calor radiante en una dirección particular \vec{q}_r está dado por la integración de la intensidad de radiación sobre todos los ángulos sólidos y sobre el espectro de longitudes de onda:

$$\vec{q}_r(r) = \int_0^{\infty} \int_{4\pi} I_\lambda(\vec{s}) \vec{s} d\Omega d\lambda \quad (3.162)$$

La solución para la radiación es combinada con la solución fluido-dinámica a través de la divergencia del flujo de calor por radiación como se observa en la ecuación 3.16. Este término intercambia energía entre el fluido y el campo de energía radiante. Dado el campo de intensidad, la divergencia del flujo de calor se calcula como

$$\nabla \cdot \vec{q}_r = \int_0^{\infty} k_{a\lambda} \left(4\pi I_{b\lambda} - \int_{4\pi} I_\lambda d\Omega \right) d\lambda \quad (3.163)$$

4. SOLUCIÓN NUMÉRICA

Con el objetivo de dar solución al modelo anteriormente planteado, es necesario llevar a cabo una secuencia de pasos metodológicos entre los cuales se encuentra la definición del dominio computacional, el proceso de mallado, la discretización de las ecuaciones de conservación, la especificación de los parámetros de control y de las condiciones iniciales y de frontera. Es importante mencionar que la herramienta computacional utilizada para realizar el proceso de mallado fue Star-CCM+, mientras que la solución del modelo se llevó a cabo con el uso de Star-CD, ambos productos comerciales de la compañía CD-Adapco.

4.1 DOMINIO COMPUTACIONAL

4.1.1 Geometría del Sistema

Para establecer la configuración geométrica del sistema a modelar fue necesario realizar el levantamiento de las piezas que lo conforman. Para esto se realizaron visitas a ARGOS – PLANTA CARIBE, donde se encuentra operando el horno de clinkerización a modelar, una durante la operación normal del horno y otra durante una parada de mantenimiento, de las cuales se obtuvieron las dimensiones del quemador. La geometría referente al montaje del quemador en el horno se puede apreciar en la figura 14, mientras que los detalles correspondientes a la parte externa trasera del quemador se observan en las figuras 15 y 16. La geometría del tubo interno se aprecia en la figura 17, donde se observa que en el extremo presenta un cambio de geometría (bluff body) cuyo fin es estabilizar la llama.

Figura 14. Montaje del quemador en el horno.



Figura 15. Vista lateral de la parte externa del quemador.



Con la información recopilada sobre la geometría del quemador se procedió a realizar el levantamiento de las piezas del quemador como se observa en la figura 18, utilizando una vista seccionada. También se elaboraron los planos del quemador como se aprecia en el anexo A.

Figura 16. Entradas de gas natural y de la mezcla aire-carbón al quemador.



Figura 17. Tubo interno del quemador con estabilizador de llama (bluff body).



Luego de tener el quemador totalmente especificado, se procedió a acoplarlo con el horno cilíndrico, el cual posee un diámetro de 4 m, un espesor de asilamiento de 0.2 m y una longitud de 110 m antes de llegar a la zona de cadenas; esto para

generar la geometría completa a analizar, tal como se aprecia en la figura 19 en una vista seccionada.

Figura 18. Vista seccionada del quemador.

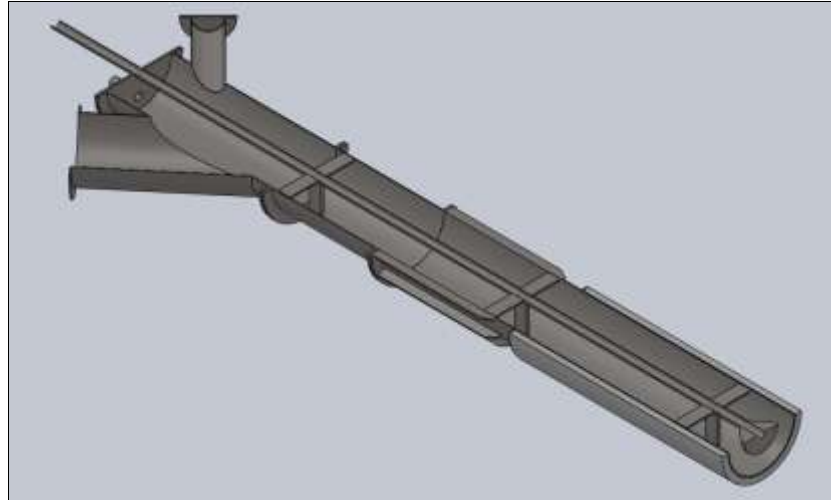
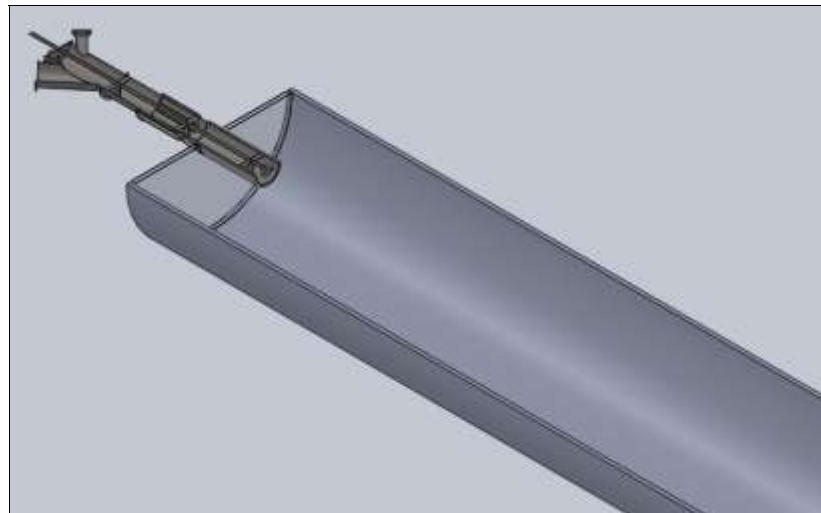


Figura 19. Vista seccionada del conjunto quemador-horno.



4.1.2 Extensión del Dominio

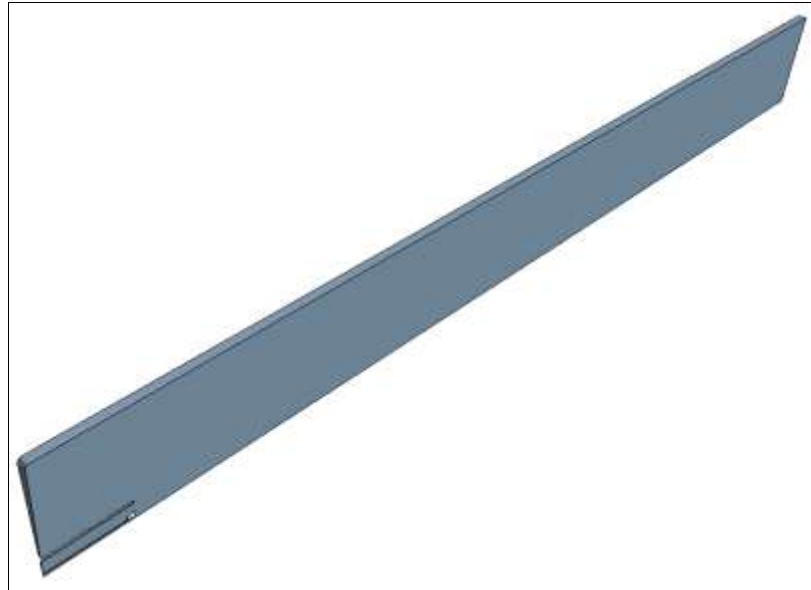
Debido a las grandes dimensiones del horno de clinkerización se hace necesario determinar la geometría sobre la que finalmente se va a realizar el modelamiento,

basándose en simplificaciones debidas a comportamientos simétricos de las variables, alcances esperados del modelo mismo y zonas de poca influencia sobre la solución. Lo anterior se hace con el fin de permitir un mejor aprovechamiento de los recursos computacionales disponibles. Las consideraciones que se tuvieron en cuenta para establecer la extensión del dominio computacional son:

1. La llama se considera axisimétrica. Esto quiere decir que las variables dependientes solo varían a lo largo de las coordenadas radial y longitudinal en un sistema de coordenadas cilíndrico cuyo eje coincide con el eje del horno. Lo anterior permite llevar a cabo un análisis en dos dimensiones, lo cual simplifica de manera sustancial el modelo y reduce la cantidad de recursos computacionales necesarios. De acuerdo a esto, se procede a considerar como parte del dominio computacional solamente 5° del sistema horno-quemador a lo largo de la coordenada angular del sistema de coordenadas cilíndrico.
2. La longitud de análisis para el horno es de 20 m. Esta consideración se basa en el hecho de que existe una limitante de recursos computacionales que no permite modelar una mayor longitud de horno.
3. La zona posterior del quemador que se encuentra por fuera del horno no se tiene en cuenta. Esto reduce el dominio computacional de tal forma que solo se incluye la longitud del quemador que se encuentra al interior del horno. Lo anterior se realiza porque la zona del quemador que tiene mayor influencia sobre la combustión en el horno es la correspondiente al estabilizador de llama, que si se incluye en el dominio.

Producto de las suposiciones y simplificaciones anteriores se tiene un dominio computacional como el observado en la figura 20.

Figura 20. Extensión del dominio computacional.



4.1.3 Mallado

Luego de tener completamente definido el dominio computacional del sistema a resolver, se procede a generar la malla computacional conformada por los volúmenes finitos sobre los cuales se discretizarán las ecuaciones de conservación anteriormente planteadas.

Este proceso consiste en establecer una forma y un tamaño aproximados para dichos volúmenes finitos en los cuales se dividirá el dominio computacional establecido. Es importante considerar que esta malla no es necesariamente homogénea en todo el dominio y esta variación de tamaños depende de las zonas sobre las cuales se tenga un mayor interés.

Para este caso particular se dividió el dominio computacional en elementos volumétricos hexaédricos con capas prismáticas sobre las condiciones de frontera de pared para observar el comportamiento de las capas límite sobre estas zonas.

Los valores utilizados para el mallado global se encuentran consignados en la tabla 3.

Tabla 3. Valores de referencia para mallado global.

Valores de Referencia Globales	
Tamaño Máximo de Celda	0.1 m
Número de Capas Prismáticas	4
Tasa de Crecimiento de Capa Prismática	1.5
Espesor de Capa Prismática	20 mm
Curvatura de Superficie	60 Pts./círculo
Tasa de Crecimiento de Superficie	1.3
Tamaño Máximo de Superficie	0.16 m
Tamaño Mínimo de Superficie	0.16 m

Sin embargo, como se observa en la figura 21, existen zonas con un mallado más fino que manejan algunos valores de referencia diferentes a los globales. Este es el caso de las paredes del quemador, las paredes del aislamiento y de las paredes redondeadas de la cubierta del horno; los valores que difieren del mallado global para estas zonas se encuentran en las tablas 4, 5 y 6, respectivamente.

Figura 21. Mallado final del dominio computacional.



Tabla 4. Valores de mallado para el quemador.

Valores de Referencia del Quemador	
Espesor de Capa Prismática	10 mm
Tamaño Máximo de Superficie	10 mm
Tamaño Mínimo de Superficie	10 mm

Tabla 5. Valores de mallado para el aislamiento del quemador.

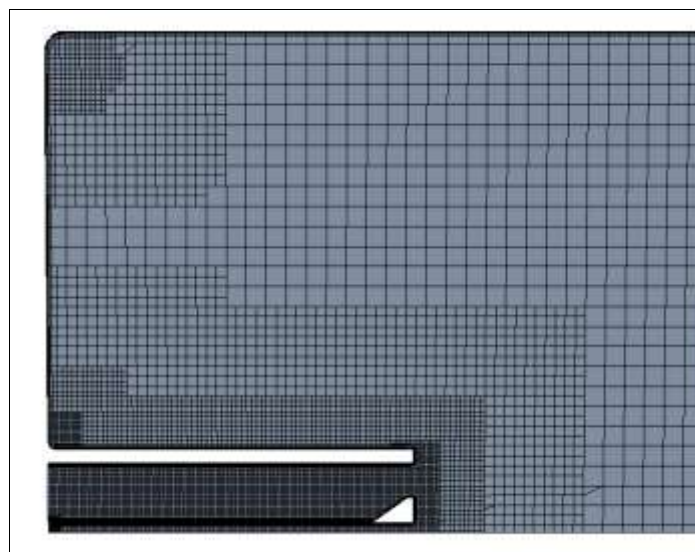
Valores de Referencia del Aislamiento del Quemador	
Tamaño Máximo de Superficie	50 mm
Tamaño Mínimo de Superficie	50 mm

Tabla 6. Valores de mallado para redondeos de la cubierta del horno.

Valores de Referencia de Paredes Redondeadas de la Cubierta	
Curvatura de Superficie	100 Pts./círculo
Tamaño Máximo de Superficie	20 mm
Tamaño Mínimo de Superficie	20 mm

En la figura 22 se puede observar con mayor detalle las zonas del dominio computacional que han sido refinadas, con sus respectivas transiciones hacia el tamaño de malla global.

Figura 22. Zonas del dominio computacional con refinamiento.



4.2 DISCRETIZACIÓN

Las ecuaciones de conservación descritas anteriormente contienen integrales de superficie y volumen que necesitan ser aproximadas para ser solucionadas. Por lo anterior, se procede a describir el conjunto de prácticas utilizadas para realizar dichas aproximaciones de acuerdo con los modelos aplicados para la descripción física del fenómeno en cuestión.

4.2.1 Formulación General

Las ecuaciones diferenciales que gobiernan la conservación de masa, momento, energía, especies, energía cinética turbulenta y disipación de la energía cinética turbulenta del sistema modelado son discretizadas utilizando el método de volúmenes finitos (FV) [65, 66]. Así, estas son integradas inicialmente sobre las celdas computacionales individuales y luego aproximadas en términos de los valores del nodo central de las celdas para las variables dependientes. Este enfoque tiene el mérito de asegurar que las formas discretizadas preserven las propiedades de conservación de las ecuaciones diferenciales iniciales.

Para propósitos de discretización en volúmenes finitos, es conveniente trabajar con la siguiente forma general de las ecuaciones de conservación libres de coordenadas para estado estable:

$$\text{div}(\rho \vec{u} \phi - \Gamma_{\phi} \text{grad} \phi) = s_{\phi} \quad (4.1)$$

donde \vec{u} es el vector de velocidad del fluido, ϕ representa a cualquiera de las variables dependientes y Γ_{ϕ} y s_{ϕ} son los coeficientes asociados a la difusión y a las fuentes, los cuales se pueden deducir de las ecuaciones diferenciales.

Una forma exacta de la ecuación 4.1, válida para un volumen arbitrario V limitado por una superficie cerrada S se puede escribir como [67]

$$\int_S (\rho \bar{u} \phi - \Gamma_\phi \text{grad} \phi) \cdot d\vec{S} = \int_V s_\phi dV \quad (4.2)$$

donde \vec{S} es el vector de superficie. Si V y S son, respectivamente, tomadas como el volumen V_p y las caras discretizadas S_j ($j=1, N_f$) de una celda computacional (figura 23), la ecuación 4.2 se vuelve

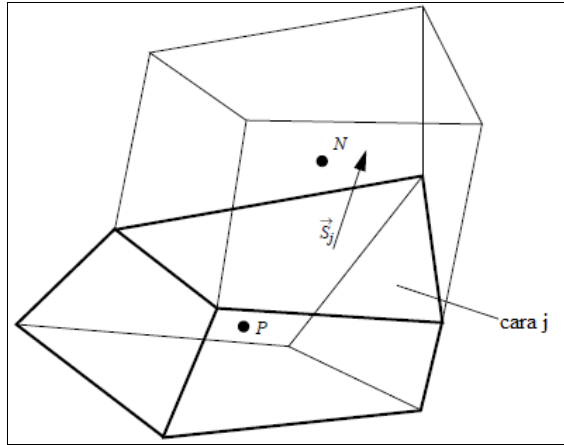
$$\sum_j \int_{S_j} (\rho \bar{u} \phi - \Gamma_\phi \text{grad} \phi) \cdot d\vec{S} = \int_{V_p} s_\phi dV \quad (4.3)$$

De aquí en adelante, es necesario el uso de aproximaciones. Además, vale la pena recordar que el término de la izquierda de la ecuación 4.3 se divide en dos contribuciones separadas C_j y D_j debidas a la convección y a la difusión, respectivamente, y cada una se expresa en términos de valores promedio aproximados sobre las caras de la celda así:

$$\sum_j \int_{S_j} (\rho \bar{u} \phi - \Gamma_\phi \text{grad} \phi) \cdot d\vec{S} \approx \sum_j (\rho \bar{u} \phi \cdot \vec{S})_j - \sum_j (\Gamma_\phi \text{grad} \phi \cdot \vec{S})_j \equiv \sum_j C_j - \sum_j D_j \quad (4.4)$$

Los valores promedios de las caras son aproximadas por los valores en el centroide de estas; este paso representa la aproximación de la regla del punto medio de las integrales de superficie, la cual posee una precisión de segundo orden cuando los valores en los centroides de las caras son exactos u obtenidos usando una aproximación de segundo orden o mayor.

Figura 23. Ilustración de una celda con nodo central P y otra celda vecina con nodo central N.



Los términos de difusión D_j son aproximados por expresiones centradas en las caras de la forma

$$D_j \approx \Gamma_{\phi,j} \left[f_j^l (\phi_N - \phi_P) + \left\{ \text{grad}\phi \cdot \vec{S} - f_j^l \text{grad}\phi \cdot \vec{d}_{PN} \right\}_j \right] \quad (4.5)$$

donde el primer término en los corchetes representa la difusión normal entre P y el nodo central de la celda vecina N , y el segundo término que se encuentra al interior de las llaves es la difusión cruzada.

La manera en la cual los flujos convectivos y difusivos se expresan en términos de los valores nodales de ϕ es uno de los factores clave que determinan la exactitud y la estabilidad de la solución. Para altos números de Reynolds como los presentes en este sistema, la elección de la aproximación de flujo convectivo es particularmente importante.

Esencialmente existen dos tipos principales de aproximación de flujo convectivo ampliamente usados, estos son

1. Esquemas de ‘orden bajo’, los cuales característicamente generan formas de ecuaciones discretizadas que son fáciles de resolver, producen soluciones que obedecen los límites físicos esperados, pero alguna veces aumenta la dispersión de los gradientes. Este efecto se conoce como ‘difusión numérica’ [68, 69]. Esta es una forma de error de truncamiento que se reduce al refinar la malla, pero incrementando el costo de cálculo.
2. Esquemas de ‘orden superior’, los cuales preservan mejor los gradientes súbitos, pero puede llevar a ecuaciones que son difíciles de resolver y/o tienen soluciones que exhiben oscilaciones espaciales no físicas. Estas oscilaciones pueden, en algunos casos, llevar a valores absurdos. Este fenómeno es llamado ‘dispersión numérica’ [70]. También es posible de disminuir por un refinamiento de malla o usando esquemas monotónicos.

Ahora, los factores C_j definidos en la ecuación 4.4 son reescritos como

$$C_j \equiv F_j \phi_j \quad (4.6)$$

donde

$$F_j \equiv (\rho \bar{u} \cdot \vec{S})_j \quad (4.7)$$

Es el flujo másico superficial a través de la cara j y ϕ_j , el valor promedio en la cara, es efectivamente interpolado desde los valores nodales seleccionados en concordancia con el esquema utilizado. Los valores de las caras para las propiedades auxiliares como ρ y Γ también son obtenidos por interpolación, usualmente lineal.

El término de la derecha de la ecuación 4.3 generalmente contiene componente que representan fuentes o sumideros de la propiedad transportada, así como términos adicionales de flujo; la forma exacta depende de las variables dependiente y de las circunstancias. Los términos de flujo y de otros que

contienen gradientes son aproximado de manera similar a los C_j y D_j , mientras que las cantidades sin gradientes son evaluadas usando las cantidades nodales centradas en la celda. Por conveniencia, el resultado de este proceso se escribe en la forma general cuasi-lineal

$$\int_{V_p} s_\phi dV \approx s_1 - s_2 \phi_P \quad (4.8)$$

Formulación de Flujo Convectivo. En este caso particular se utilizaron dos tipos de esquemas de diferenciación para obtener las ecuaciones discretizadas como sigue:

- **Diferenciación a Contra-flujo (UD).** Este esquema de primer orden selecciona el valor vecino a contra-flujo más cercano para ϕ_j (figura 24), así:

$$C_j^{UD} \equiv F_j \begin{cases} \phi_P, & F_j \geq 0 \\ \phi_{N+}, & F_j < 0 \end{cases} \quad (4.9)$$

Esta forma de interpolación preserva los límites físicos correctos de ϕ para todas las condiciones, pero puede llevar a difusión numérica [68,69].

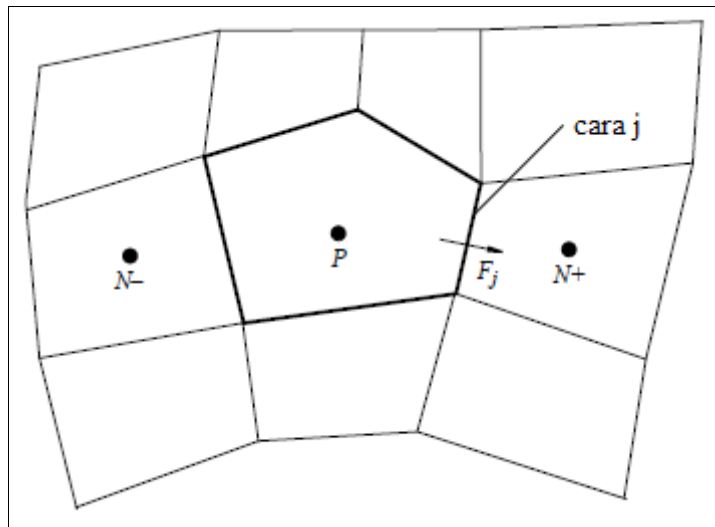
Este esquema fue utilizado para la diferenciación de las ecuaciones de conservación de momento, energía, especies, energía cinética turbulencia y tasa de disipación de la energía cinética.

- **Diferenciación Central.** El esquema de diferenciación central, el cual es de segundo orden, simplemente interpola linealmente sobre el valor vecino más cercano, independientemente de la dirección del flujo, produciendo

$$C_j^{CD} = F_j [f_+ \phi_P + (1 - f_+) \phi_{N+}] \quad (4.10)$$

Donde f_+ es el factor de interpolación geométrica. Este esquema produce menor difusión numérica, pero puede ser dispersivo [70]. Para este caso, se utilizó este esquema para la diferenciación de la densidad, con un factor de interpolación de 0.01.

Figura 24. Ilustración de nodos indicando la dirección del flujo convectivo para diferenciación.



Ecuaciones Finales de Volúmenes Finitos. La forma final de las ecuaciones discretizadas de volúmenes finitos se obtiene substituyendo los diferentes términos aproximados de vuelta en la ecuación 4.3 y luego invocando la ecuación de continuidad discretizada, la cual se puede escribir como

$$\sum F_j = 0 \quad (4.11)$$

El resultado, en la forma más compacta, es

$$A_p \phi_p^n = \sum_m A_m \phi_m^n + s_1 \quad (4.12)$$

donde A_m representa los efectos de convección y/o difusión, la sumatoria es sobre todos los nodos vecinos usados en la discretización de flujo, y

$$A_p \equiv \sum_m A_m + s_2 \quad (4.13)$$

Existe una ecuación como la 4.12 para cada celda computacional, sensiblemente modificada, donde sea necesario, para incorporar las condiciones de frontera. Además, hay tantos conjuntos de ecuaciones como variables dependientes, cuando el conjunto de continuidad (ecuación 4.11) es tenido en cuenta.

4.2.2 Flujo de Fase Dispersa

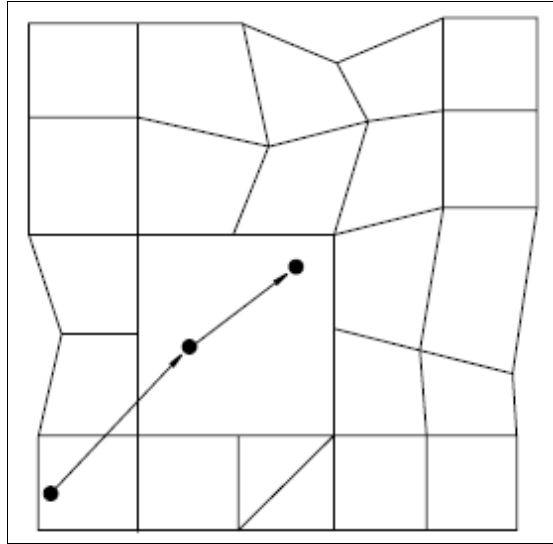
Las ecuaciones de conservación Lagrangeanas que gobiernan la velocidad, la posición, el tamaño, la densidad y la temperatura de las partículas dispersas en una fase continua de fluido tienen la forma diferencial ordinaria de primer orden. Estas ecuaciones son integradas a lo largo de las trayectorias de cada una de las 'parcelas computacionales' (figura 25) que representan una muestra estadística de la población real.

Las trayectorias se determinan como parte de la solución. Para este propósito, las ecuaciones gobernantes son discretizadas en la forma implícita de Euler de primer orden. Por ejemplo, la ecuación de momento (ecuación 3.50) es aproximada como

$$m_d \frac{\bar{u}_d^n - \bar{u}_d^o}{\delta t_d} = \bar{F}_{dr}^n + \bar{F}_p^n + \bar{F}_{am}^n + \bar{F}_b^n \quad (4.14)$$

donde n y o denotan los valores nuevos y antiguos existentes durante en el paso temporal de integración δt_d .

Figura 25. Ilustración de una 'parcela' Lagrangeana atravesando una celda computacional.



El paso de tiempo de la partícula, δt_d , se determina de la siguiente manera:

1. La escala de tiempo de la partícula en la celda, δt_c , es definida como el tiempo tomado para atravesar una fracción Co^d de una dimensión local característica de la celda l

$$\delta t_c = Co^d \frac{l}{|\vec{u}_d|} \quad (4.15)$$

donde Co^d es el numero de Courant de la partícula y debe tener típicamente un valor de 0.35.

2. δt_d es evaluado a partir de la expresión

$$\delta t_d = \min[\delta t_c, \tau_M, \tau_m, \tau_T, \tau_t] \quad (4.16)$$

donde τ_M , τ_m , τ_T y τ_t son las escalas de tiempo de relajación de momento, de masa, térmica y de turbulencia, respectivamente.

Los valores locales de velocidad del fluido, requeridos para la evaluación de \vec{F}_{dr} son interpolados sobre la base de los gradientes de velocidad de la celda, y de la misma manera para cualquier otra propiedad requerida del fluido portador. Se emplean prácticas similares para las otras ecuaciones de la fase dispersa.

Este modelo tiene en cuenta el hecho de que cada parcela computacional correspondiente a la fase dispersa puede intercambiar masa, momento y energía con el fluido portador; una pérdida por parte de una parcela es una ganancia para el fluido y viceversa. Estos intercambios se obtienen de la integración de las ecuaciones Lagrangeanas. Por ejemplo, la ecuación 4.15 proporciona la tasa promedio de pérdida o ganancia de momento de una parcela computacional debido al arrastre y los efectos de adición de masa sobre un incremento de tiempo δt_d .

Por lo tanto, la pérdida/ganancia total de momento $\Delta \vec{M}_d$ de un grupo de parcelas atravesando una celda dada durante un periodo de tiempo $t = n_d \delta t_d$, siendo n_d el número de pasos de tiempo de parcela, es

$$\Delta \vec{M}_d = \frac{1}{n_d} \sum_{particulas} \sum_{n_d} \left(m_d \frac{\vec{u}_d^n - \vec{u}_d^o}{\delta t_d} - \vec{F}_{am}^n - \vec{F}_b^n - \vec{F}_p^n \right) \quad (4.17)$$

Esta cantidad, con signo opuesto, representa la tasa promedio de ganancia/pérdida de momento del fluido para una celda dada y por lo tanto es insertada como una fuente en la ecuación de momento de la fase continua, que

para este caso es la ecuación 3.11, donde dicha fuente, para la coordenada i , queda como

$$s_{i,d} = -\frac{\Delta M_{i,d}}{V_p} \quad (4.18)$$

Evaluaciones análogas se realizan para las tasas de intercambio de masa y energía por medio de la integración y la sumatoria sobre las ecuaciones apropiadas.

4.2.3 Radiación

El método de ordenadas discretas utilizado aquí soluciona ecuaciones de campo para la intensidad de la radiación asociada a una dirección fija s , representada por un ángulo sólido discreto como el mostrado en la figura 26.

El cálculo de las ordenadas discretas requiere la especificación del número de ángulos sólidos u 'ordenadas' en el que se discretiza una esfera que rodea un punto particular [71, 72]. Como resultado de la ecuación 3.160, la forma de estas ecuaciones ordenadas para cada banda de longitud de onda es

$$\vec{s}_i \cdot \nabla I_i = -(k_{a\lambda} + k_{s\lambda}) I_i + k_{a\lambda} I_{b\lambda} + \frac{k_s}{4\pi} \sum_{j=1}^n w_j I_j \quad (4.19)$$

donde w_j son los pesos de cuadratura que dependen de las ordenadas elegidas y n es el numero de ordenadas.

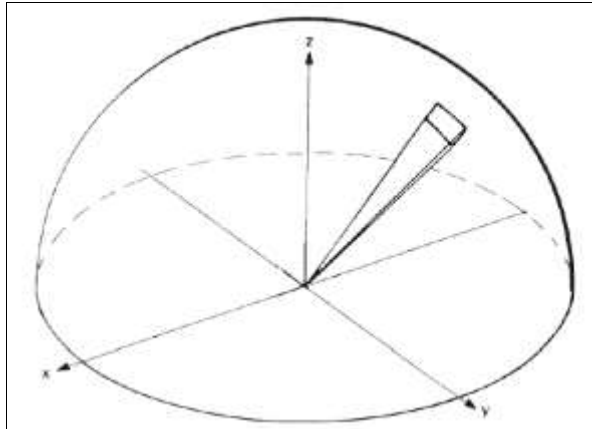
La ecuación de transporte para cada dirección de ordenada es discretizada y solucionada independientemente, usando las mismas prácticas de discretización y de solución iterativa que para las otras ecuaciones de transporte. Por esta razón, las iteraciones globales son necesarias para incluir los términos de dispersión

isotrópica en la ecuación RTE y para calcular las condiciones de frontera de paredes. Las condiciones de frontera de pared angularmente discretizadas toman la forma:

$$I_{i,w} = \varepsilon_w I_{b\lambda} + \frac{\rho_w}{\pi} \sum_{(\vec{n} \cdot \vec{s}'_j < 0)} I_j \left| \vec{n} \cdot \vec{s}'_j \right|_w \quad (4.20)$$

El término de refracción representa la sumatoria sobre las direcciones de las ordenadas incidentes sobre la pared.

Figura 26. Angulo sólido mostrado como parte de un hemisferio.



La solución de la radiación provee un término de fuente para la ecuación de energía dinámica del fluido como la dada por la ecuación 3.163 para la ecuación 3.16. La forma discretizada de este término de fuente para cualquier celda es

$$-\nabla \cdot \vec{q}_r = k_a \left(\sum_{j=1}^n w_j I_j - 4\pi I_b \right) \quad (4.21)$$

Para este caso en particular se procedió a utilizar una discretización angular que permitiera dividir el hemisferio correspondiente a cada centroide de cara de condiciones de frontera de pared en un total de 24 ángulos sólidos, para obtener

un igual número de ordenadas discretas a través de las cuales se soluciona la ecuación de transporte.

4.3 ALGORITMO DE SOLUCIÓN

En este punto se hace necesario el empleo de métodos implícitos para resolver las ecuaciones algebraicas de volúmenes finitos que resultaron de las prácticas de discretización descritas anteriormente. Independientemente del enfoque, los métodos implícitos conllevan a la solución simultánea de los conjuntos de ecuaciones algebraicas, lo cual es algunas veces considerado como una desventaja. Sin embargo, se han desarrollado métodos iterativos muy eficientes y casi invariables para resolver estas ecuaciones con sus característicamente escasas matrices. Para este caso particular se utiliza un algoritmo implícito que es una variante del conocido método SIMPLE (Método Semi-Implícito para Ecuaciones Ligadas a la Presión) [73, 74].

4.3.1 Algoritmo SIMPLE

Algunas características importantes del algoritmo SIMPLE son:

1. Emplea una estrategia de predicción-corrección, permitida por el uso de separación de la operación, para desasociar temporalmente las ecuaciones de flujo de cualquier otra, de forma que se puedan solucionar secuencialmente.
2. La continuidad es forzada con la ayuda de un conjunto de ecuaciones para la presión, derivada de la combinación de las ecuaciones de volúmenes finitos para el momento y la masa.
3. La secuencia de solución contiene una etapa de predicción, la cual produce un campo de velocidad provisional derivado de las ecuaciones de momento y una distribución de presión provisional. Los campos provisionales son luego

- redefinidos en la etapa de corrección para demandar satisfacción simultánea, en algún nivel de aproximación, de los balances de momento y continuidad.
4. Durante el cálculo iterativo para estado estable, la secuencia anterior es ejecutada repetitivamente, con actualización interna de los coeficientes dependientes del campo que surgen de la asociación y las no linealidades, hasta que se alcanza la solución. Se emplea el sobre-relajamiento como una medida de estabilización en este proceso.
 5. Dentro de la secuencia, los conjuntos de ecuaciones de operación separada comprende, en cualquier etapa, solo una de las variables de campo, por ejemplo, el conjunto de incógnitas vectoriales es dividido en una secuencia de conjuntos escalares.
 6. Los conjuntos de ecuaciones algebraicas se resuelven por medio iterativos, aunque esta no es una práctica imprescindible.

Ecuaciones Escalares de Transporte. La solución de las ecuaciones escalares de transporte para la conservación de parámetros de turbulencia, entalpía y especies químicas toma lugar, donde se requiere, dentro de la operaciones secuenciales llevadas a cabo durante cada iteración. También se incluye en esta secuencia el cálculo de las propiedades termofísicas, como la densidad y las capacidades térmicas específicas, utilizando ecuaciones de estado y otras funciones de propiedades. Las interrelaciones que pueden existir entre estas variables adicionales y el campo del fluido son manejadas, principalmente, por linealización sobre la iteración previa.

Como resultado de la desasociación de la ecuación para cada variable dependiente y la subsecuente linealización, se obtienen grandes conjuntos de ecuaciones lineales algebraicas. Con el objetivo de solucionar estas ecuaciones, se utiliza una técnica de solucionadores de gradiente conjugado (CG) con varios métodos pre-acondicionadores.

Para este caso particular, las interrelaciones entre el flujo y los campos escalares son particularmente fuertes. Por una parte esto se debe a que en el cálculo del flujo turbulento usando el modelo $k - \varepsilon$, el vínculo ocurre por medio de la viscosidad turbulenta. Además, ya que también es un problema de combustión, la densidad actúa como el principal agente de unión debido a su dependencia de la temperatura y las fracciones másicas. Estas fuertes interacciones requieren algunas veces el uso de sobre-relajamiento para suprimir inestabilidades en el cálculo.

4.3.2 Sobre-relajamiento

Como resultado de la discretización, la ecuación de transporte para una variable en cada celda P en un problema en estado estable (ecuación 4.12) se puede escribir como

$$A_P \phi_P = \sum_m A_m \phi_m + s_P \quad (4.22)$$

donde ϕ_P y ϕ_m son los valores de ϕ en la celda P y sus m vecinas, y A_P , A_m y s_P son coeficientes que resultan de la discretización y la linealización.

Típicamente, se desea resolver iterativamente sistemas de ecuaciones no lineales que describen el transporte vinculado de muchas variables ϕ . Para promover la convergencia del proceso iterativo en este caso, es posible aplicar la llamada técnica de sobre-relajamiento inercial descrita por

$$A_P \phi_P^k = \alpha_\phi \left(\sum_m A_m \phi_m^k + s_P \right) + (1 - \alpha_\phi) A_P \phi_P^{k-1} \quad (4.23)$$

donde k es el contador de iteraciones y α_ϕ es el factor de sobre-relajamiento. La ecuación 4.23 se puede también se puede escribir como

$$A_P \phi_P^k = \sum_m A_m \phi_m^k + s_P - \frac{1 - \alpha_\phi}{\alpha_\phi} A_P (\phi_P^k - \phi_P^{k-1}) \quad (4.24)$$

Los valores típicos de los factores de sobre-relajamiento inercial α_ϕ están entre 0.7 y 1. Los valores óptimos están en función de la naturaleza de las ecuaciones de transporte a ser resueltas y a sus vínculos con otros procesos de transporte, los factores de sobre-relajamiento usados para las otras ecuaciones de transporte, y la calidad de la malla. Estos valores pueden ser determinados únicamente a través de experimentos numéricos.

4.3.3 Convergencia

Para cálculos iterativos en estado estable, se utiliza información de los residuales r_ϕ de la solución de volúmenes finitos, tanto para propósitos de monitoreo como de control. El residual en una celda particular para la iteración k es el desbalance de la ecuación 4.12 de transporte de volumen finito, debido a su solución incompleta así:

$$r_\phi^k \equiv A_P \phi_P^k - \sum_m A_m \phi_m^k - s_1 \quad (4.25)$$

La medida realmente empleada para juzgar la convergencia es la suma residual absoluta normalizada R_ϕ^k , definida por

$$R_\phi^k \equiv \frac{\sum |r_\phi^k|}{M_\phi} \quad (4.26)$$

donde la sumatoria se efectúa sobre todas las celdas del dominio computacional y M_ϕ es un factor de normalización. Se usa un factor de escalamiento que sea

representativo del flujo de la variable transportada a través del dominio computacional como un factor de normalización predeterminado. Este se determina utilizando la siguiente definición general para M_ϕ :

$$M_\phi = \sum_P |A_P \phi_P^k| \quad (4.27)$$

Para las ecuaciones de momento, un solo residual normalizado R_{MOM}^k es calculado usando los residuales de las componentes de velocidad r_{uj}^k así:

$$R_{MOM}^k \equiv \frac{\sqrt{\sum_j (\sum |r_{uj}^k|)^2}}{\sqrt{\sum_j (M_{uj}^k)^2}} \quad (4.28)$$

Los valores de R_ϕ^k se calculan durante cada iteración para cada variable resuelta. En el caso de la presión, el residual calculado es en realidad el de la conservación de masa.

Ahora, los residuales son utilizados para decidir cuándo terminar los cálculos, con el requerimiento de que estos caigan por debajo de un valor prescrito λ , así:

$$\max(R_\phi^k) < \lambda \quad (4.29)$$

donde λ es típicamente del orden de 10^{-3} . La satisfacción de este tipo de criterio y la no variación de los valores de campo constituyen condiciones suficientes para la convergencia.

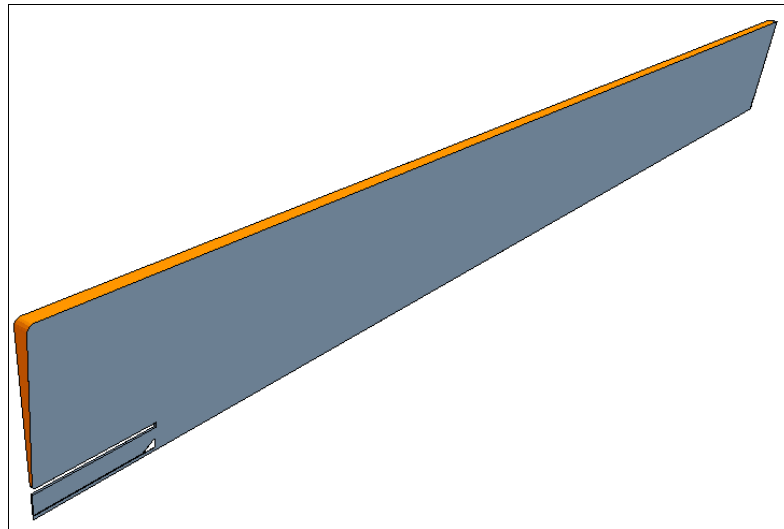
4.4 CONDICIONES DE FRONTERA

En este punto es necesario especificar los tipos de condiciones de frontera y los valores correspondientes de estas para el dominio computacional establecido anteriormente.

4.4.1 Pared Interna del Horno

En la figura 27 se puede observar la localización de la pared interna del horno en el dominio computacional, mientras que en la tabla 7 se encuentran los valores correspondientes a dicha pared. Estos se obtuvieron de las propiedades del acero inoxidable 316 con superficie oxidada, que es el material utilizado para construir la cubierta del horno con una superficie expuesta a la combustión.

Figura 27. Localización de la pared interna del horno.



El valor de la resistencia térmica se obtuvo a partir de la ecuación

$$R_T = R_{cond} + R_{conv} = \frac{e}{K_{CR}} + \frac{1}{h_{conv}} \quad (4.30)$$

Donde R representa las resistencias a la transferencia de calor en $m^2.K/W$, e es el espesor radial del aislamiento de cemento refractario del horno igual a 0.2 m, K_{CR} es la conductividad térmica del cemento refractario de 0.14 W/m.K y h_{conv} es el coeficiente convectivo de transferencia de calor del aire estancado del medio ambiente con un valor de 25 W/m².K.

Tabla 7. Condiciones de frontera para la pared interna del horno.

Condiciones de Frontera para la Pared Interna del Horno	
Condición de Deslizamiento	No
Rugosidad (m)	4.5×10^{-5}
Condición Térmica	Conductiva-Convectiva
Temperatura Ambiente (K)	308
Resistencia (m^2K/W)	1.47
Emisividad	0.8
Reflectividad	0.2
Transmisividad	0

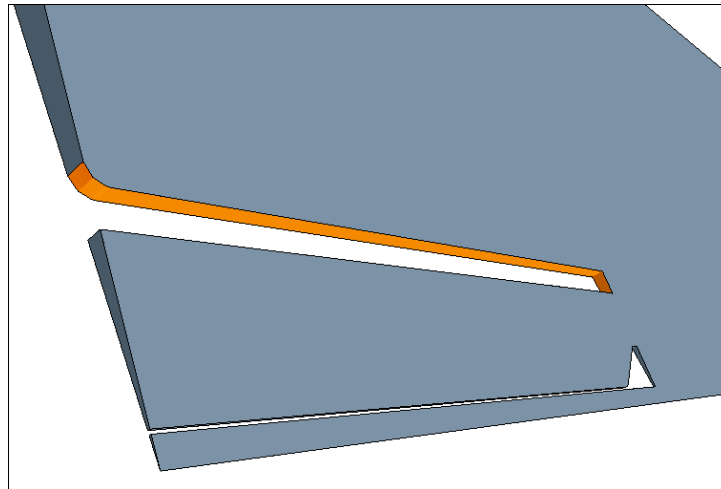
4.4.2 Pared del Aislamiento Térmico del Quemador

Este aislamiento se realiza con cemento refractario, para el cual se tiene las propiedades consignadas en la tabla 8. La ubicación de la condición de frontera perteneciente a la pared del aislamiento térmico del quemador se aprecia en la figura 28.

Tabla 8. Condiciones de frontera para el aislamiento del quemador.

Condiciones de Frontera para la Pared del Aislamiento Térmico del Quemador	
Condición de Deslizamiento	No
Rugosidad (m)	0.003
Condición Térmica	Adiabática
Emisividad	0.96
Reflectividad	0.04
Transmisividad	0

Figura 28. Localización del aislamiento térmico del quemador.



4.4.3 Paredes Externa e Interna del Quemador

Las localizaciones de las paredes externas e internas del quemador se ilustran en las figuras 29 y 30, respectivamente. Estas paredes pertenecen, respectivamente, a los tubos externo e interno del quemador, los cuales fueron fabricados de acero inoxidable 316. Los valores de las condiciones de frontera para estas paredes se encuentran en la tabla 9.

Figura 29. Localización de la pared externa del quemador.

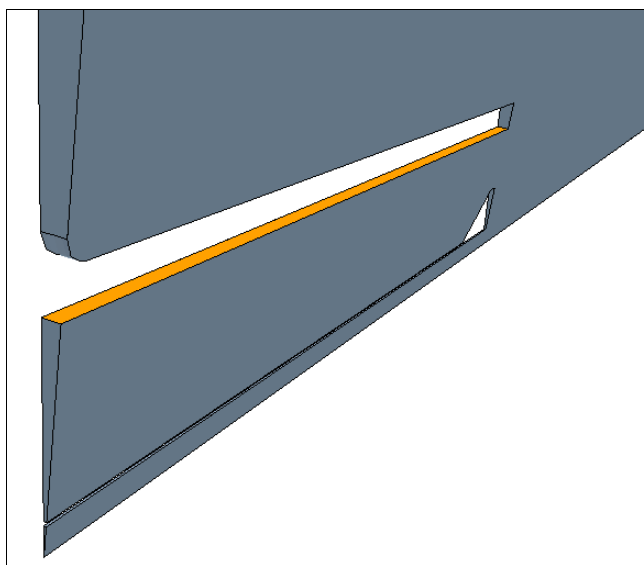


Figura 30. Localización de la pared interna del quemador.

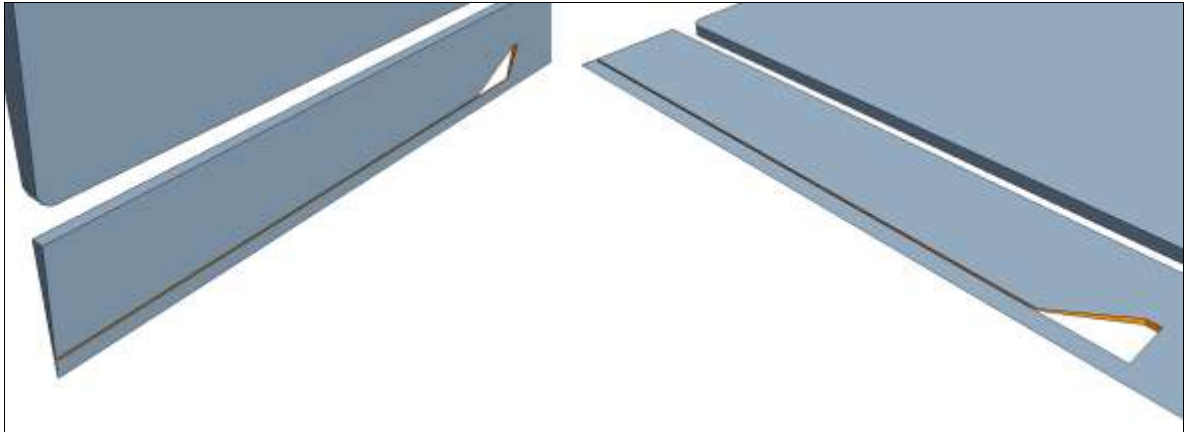


Tabla 9. Condiciones de frontera para las paredes del quemador.

Condiciones de Frontera para las Paredes Externa e Interna del Quemador	
Condición de Deslizamiento	No
Rugosidad (m)	4.5×10^{-5}
Condición Térmica	Adiabática
Emisividad	0.66
Reflectividad	0.34
Transmisividad	0

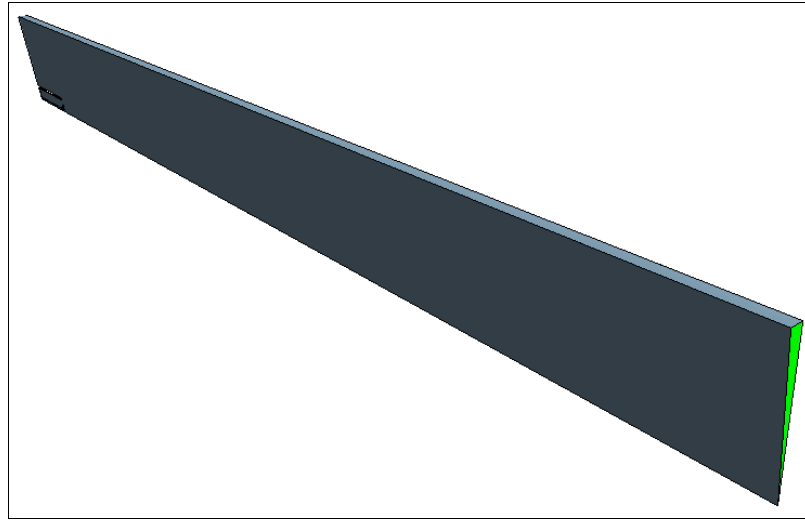
4.4.4 Salida de Gases de Combustión

Para la salida de los gases de combustión se utilizará una condición de frontera de división de flujo, donde se establece que toda sustancia que ingrese al dominio computacional debe salir por esta frontera. Los valores correspondientes a la salida de los gases de combustión se encuentran en la tabla 10, mientras que la ubicación de esta se muestra en la figura 31.

Tabla 10. Condiciones de frontera para la salida de gases de combustión.

Condiciones de Frontera para la Salida de Gases de Combustión	
Condición de Salida	División
Relación de División	1
Temperatura de Radiación (K)	1171

Figura 31. Localización de la salida de gases de combustión.



El valor de la temperatura de radiación hace referencia a la temperatura de superficie de la pared que se encuentre más allá de las condiciones de frontera abiertas (entradas y salidas), la cual irradia hacia el interior del dominio. Para este caso particular se tomó la temperatura de las cadenas que se encuentran más allá de la zona de combustión.

4.4.5 Entrada de Metano

Los valores correspondientes a la condición de frontera para la entrada de metano se encuentran consignados en la tabla 11.

Tabla 11. Condiciones de frontera para la entrada de metano.

Condiciones de Frontera para la Entrada de Metano	
Velocidad Normal (m/s)	78.61
Intensidad de Turbulencia	0.0324
Escala de Longitud (m)	0.00545
Densidad (kg/m ³)	0.649
Temperatura (K)	301.15
Temperatura de Radiación (K)	345.95
Fracción Másica de CH ₄	1
Fracción Másica de f_2	1

Para determinar la intensidad de la turbulencia en las entradas es necesario calcular inicialmente el número de Reynolds; luego se establece el valor de la escala de longitud como sigue:

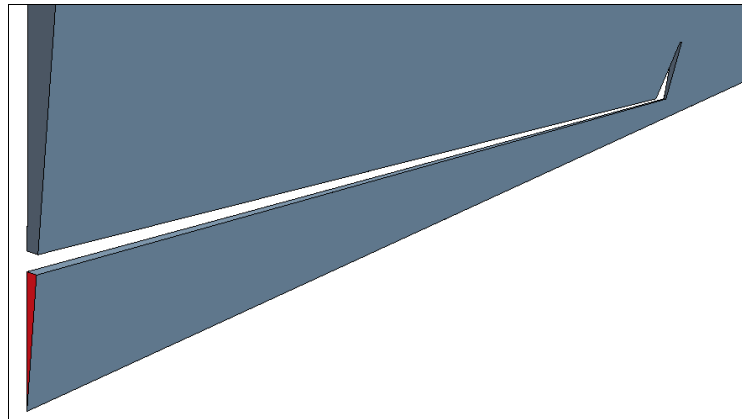
$$\text{Re} = \frac{\rho V D_h}{\mu} \quad (4.31)$$

$$I_t = 0.16 \text{Re}^{-1/8} \quad (4.32)$$

$$\ell = 0.07 D_h \quad (4.33)$$

La ubicación de la condición de frontera de entrada de metano se aprecia en la figura 32.

Figura 32. Localización de la entrada de metano.



4.4.6 Entrada de Mezcla Aire-Carbón

Para la entrada de la mezcla aire-carbón es necesario considerar por separado los valores correspondientes al aire y al carbón. Esto es necesario principalmente porque estas dos sustancias se encuentran en diferentes fases; así, mientras en aire pertenece a la fase continua, el carbón pertenece a la fase dispersa. En la tabla 12 se pueden observar los valores de la condición de frontera de entrada solo para el aire.

Tabla 12. Condiciones de frontera para la entrada de aire.

Condiciones de Frontera para el Aire de Entrada	
Velocidad Normal (m/s)	108.13
Intensidad de Turbulencia	0.0248
Escala de Longitud (m)	0.0327
Densidad (kg/m ³)	1.016
Temperatura (K)	345.95
Temperatura de Radiación (K)	345.95
Fracción Másica de O ₂	0.229
Fracción Másica de N ₂	0.752
Fracción Másica de H ₂ O	0.019

En las tablas 13 y 14 se encuentran, respectivamente, los resultados de los análisis próximo y último, y otras propiedades y condiciones de alimentación del carbón Bijao utilizado en el proceso de combustión.

Tabla 13. Análisis próximo y último del carbón utilizado.

Análisis Próximo del Carbón Bijao en Base de Aire Seco	
Material Volátil (%)	38.06
Humedad (%)	18.78
Carbón Fijo (%)	35.92
Ceniza (%)	7.24
Análisis Último del Carbón Bijao en Base Seca Libre de Cenizas	
C (%)	82.32
H (%)	5.24
O (%)	10.98
N (%)	1.46

Para determinar el valor de la fracción del Nitrógeno total del carbón que corresponde a los volátiles tal como aparece en la tabla 14, se consideró que el carbón utilizado en este proceso generaba un carbón fijo de las mismas características del carbón fijo producido por el carbón subbituminoso utilizado por Nelson [62]. Vale la pena recordar que anteriormente se utilizó el carbón

subbituminoso de Nelson para aproximar el comportamiento de la generación de NOx combustible del carbón fijo.

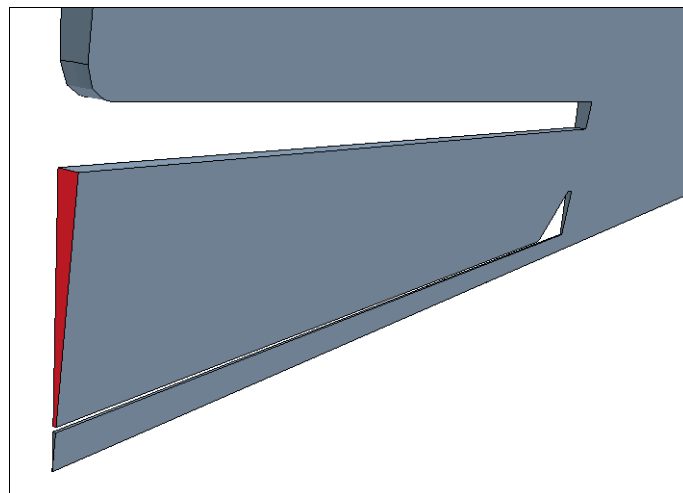
Tabla 14. Condiciones de frontera y propiedades del carbón de alimentación.

Condiciones de Frontera y Propiedades del Carbón de Alimentación	
Velocidad Normal (m/s)	108.13
Diámetro Medio de Partícula (m)	7.5×10^{-5}
Desviación Estándar (m)	2.5×10^{-5}
Densidad (kg/m ³)	1310
Temperatura (K)	345.95
Flujo Másico (kg/s)	0.033
Valor Calórico Neto (J/kg)	2.23×10^7
Fracción de N Totales en Volátiles	0.62

Es importante aclarar que los valores de velocidad de entrada de metano y aire, junto con el valor de flujo másico de carbón corresponden a una proporción en masa de combustible carbón-metano de 91-9%, con un exceso de aire del 10% para el combustible equivalente.

La localización de la condición de frontera de entrada de la mezcla aire-carbón se observa en la figura 33.

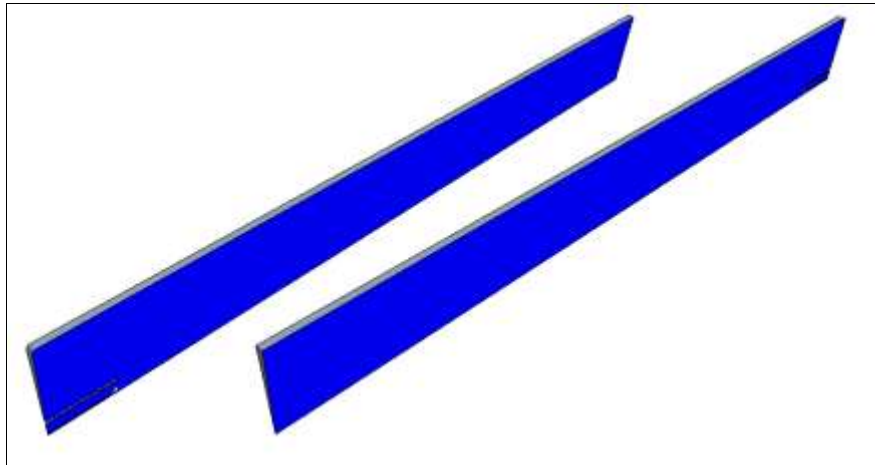
Figura 33. Localización de la entrada de la mezcla aire-carbón.



4.4.7 Fronteras Cíclicas

Las fronteras cíclicas permiten la reducción del dominio computacional, en la medida en que igualan los valores de las variables dependientes, tanto escalares como vectoriales, sobre un par de estas fronteras. En este caso particular, debido a que el sistema se considera axisimétrico, se procedió a tomar como fronteras cíclicas las dos superficies radiales que se encuentran desfasadas 5° entre sí, tal y como se aprecia en la figura 34.

Figura 34. Localización de las fronteras cíclicas.



4.5 ESTRATEGÍA DE SOLUCIÓN

La estrategia de solución para el sistema modelado aquí consiste en una serie de soluciones sucesivas de modelos simplificados que aumentan su complejidad progresivamente hasta llegar a la solución del modelo global. Lo anterior requiere que para cada modelo, a excepción del inicial, se tome como punto de partida la solución del modelo anterior. Esto se debe realizar de esta manera porque el modelo global contiene muchas variables dependientes a ser resueltas e intentar solucionarlo en un solo paso conllevaría a divergencia en la misma solución. Lo

que se busca con esta estrategia es solucionar un grupo de variables de variables por cada solución hasta completar el total de variables independientes.

4.5.1 Combustión de Metano

El primer modelo reducido al que se le dará solución consiste únicamente en la combustión gaseosa del metano, excluyendo el modelamiento referente al flujo de la fase dispersa de las partículas de carbón junto con sus respectivos modelos de combustión, la formación de NOx y la transferencia de calor por radiación. Para este modelo reducido es necesario excluir la reacción gaseosa 3.79 del modelo global ya que esta corresponde a la combustión de los volátiles del carbón.

Condiciones Iniciales. Debido a que este modelo reducido no parte de la solución de ningún otro modelo, es necesario establecer sus condiciones iniciales tal como aparecen en la tabla 15.

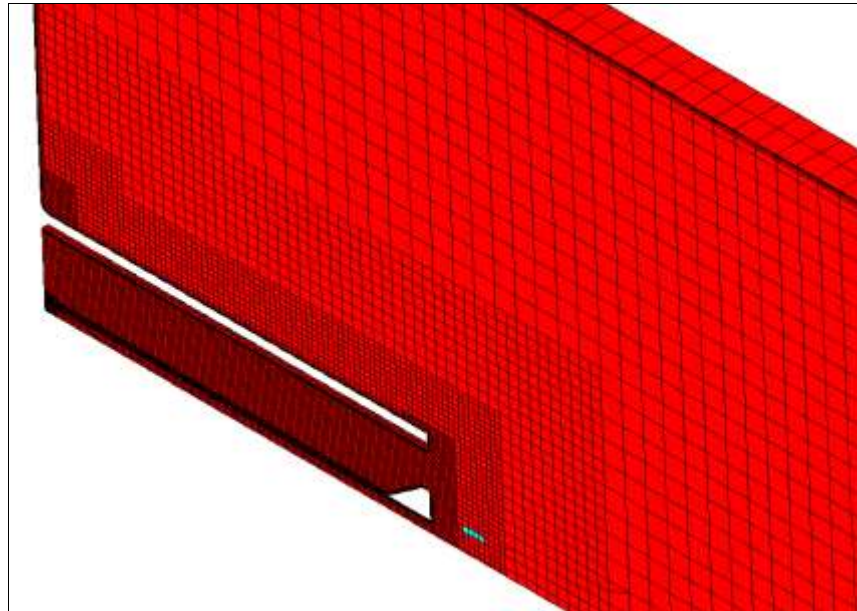
Tabla 15. Condiciones iniciales para el modelo de combustión de metano.

Condiciones Iniciales para el Modelo de Combustión de Metano	
Temperatura (K)	345.95
Fracción Másica de O ₂	0.229
Fracción Másica de N ₂	0.752
Fracción Másica de H ₂ O	0.019

Ignición. La ignición es el mecanismo por medio del cual se da inicio a la solución de un proceso de combustión. Para llevar a cabo la ignición es necesario elegir un número arbitrario de celdas en una zona donde se espere que se lleve a cabo la combustión. A estas celdas se les atribuye un valor de fracción de mezcla característico de una zona de combustión ($f = 0.05$), durante un número de iteraciones dada, después del cual la combustión se desarrolla por si misma hasta alcanzar una solución estable. Para este caso se utilizaron 4 celdas en la zona del horno cerca a la salida del quemador, para actuar como puntos de ignición entre

las iteraciones 1 y 700. En la figura 35 se observa la ubicación de las celdas usadas para este proceso.

Figura 35. Localización de las celdas utilizadas para el proceso de ignición.



Control de la Solución. Con el objetivo de asegurar la convergencia de la solución y establecer el final de esta, se utilizan los factores de sobre-relajamiento de la tabla 16 con una tolerancia máxima de residuales de 1×10^{-4} .

Tabla 16. Sobre-relajamiento para la combustión de metano.

Factores de Sobre-relajamiento para el Modelo de Combustión de Metano	
Momento	0.7
Presión	0.2
Temperatura	0.8
Turbulencia	0.7
Densidad	0.2
Especies	0.5

4.5.2 Tasa Constante de Devolatilización de Carbón

El modelo de tasa constante de devolatilización de carbón incluye, con respecto al anterior, el modelo de flujo de fase dispersa de partículas de carbón junto con los modelos de combustión de carbón. Sin embargo, para el modelo de devolatilización constante se considera que la devolatilización del carbón se lleva a cabo en un lapso de tiempo muy corto, con una temperatura de devolatilización muy baja. Esto se realiza de esta manera ya que se busca una rápida iniciación de este proceso para alcanzar más fácilmente la convergencia en modelos posteriores. Los valores utilizados en este caso fueron 0.01 s y 353 K para el tiempo y la temperatura de devolatilización, respectivamente. Vale la pena decir que para este modelo es necesario incluir nuevamente la reacción 3.79 que se refiere a la combustión de los volátiles. Además, el mecanismo de ignición puede excluirse, ya que para la solución de este modelo se toma como condición inicial la solución del modelo anterior que posee temperaturas características de un proceso de combustión, lo que facilita la devolatilización.

Control de la Solución. Para asegurar la convergencia de la solución y establecer el final de esta, se utilizan los factores de sobre-relajamiento de la tabla 17 con una tolerancia máxima de residuales de 3×10^{-4} .

Tabla 17. Sobre-relajamiento la tasa constante de devolatilización.

Factores de Sobre-relajamiento para el Modelo de Tasa Constante de Devolatilización de Carbón	
Momento	0.4
Presión	0.1
Temperatura	0.4
Turbulencia	0.4
Densidad	0.1
Especies	0.4
Partícula	0.1

4.5.3 Co-combustión Convectiva

El modelo de co-combustión convectiva contiene todos los fenómenos aplicados al modelo global con excepción de la transferencia de calor por radiación en medios participativos. La solución se desarrolla partiendo del modelo de tasa constante de devolatilización, pero en este caso, para establecer la tasa de devolatilización, se emplea la ecuación de devolatilización de un paso con la forma de Arrhenius y además se incluyen los mecanismos de formación de NOx.

Control de la Solución. Con el objetivo de asegurar la convergencia de la solución y establecer el final de esta, se utilizan los factores de sobre-relajamiento de la tabla 18 con una tolerancia máxima de residuales de 3×10^{-4} .

Tabla 18. Sobre-relajamiento para la co-combustión convectiva.

Factores de Sobre-relajamiento para el Modelo de Co-combustión Convectiva	
Momento	0.3
Presión	0.1
Temperatura	0.3
Turbulencia	0.3
Densidad	0.1
Especies	0.3
Partícula	0.1

4.5.4 Co-combustión Global

El modelo de co-combustión global incluye todos los fenómenos establecidos en la etapa de modelamiento. La solución de este se inicia a partir de la solución del modelos de co-combustión convectiva, y su diferencia con este último es que incluye la transferencia de calor por radiación en medios participativos.

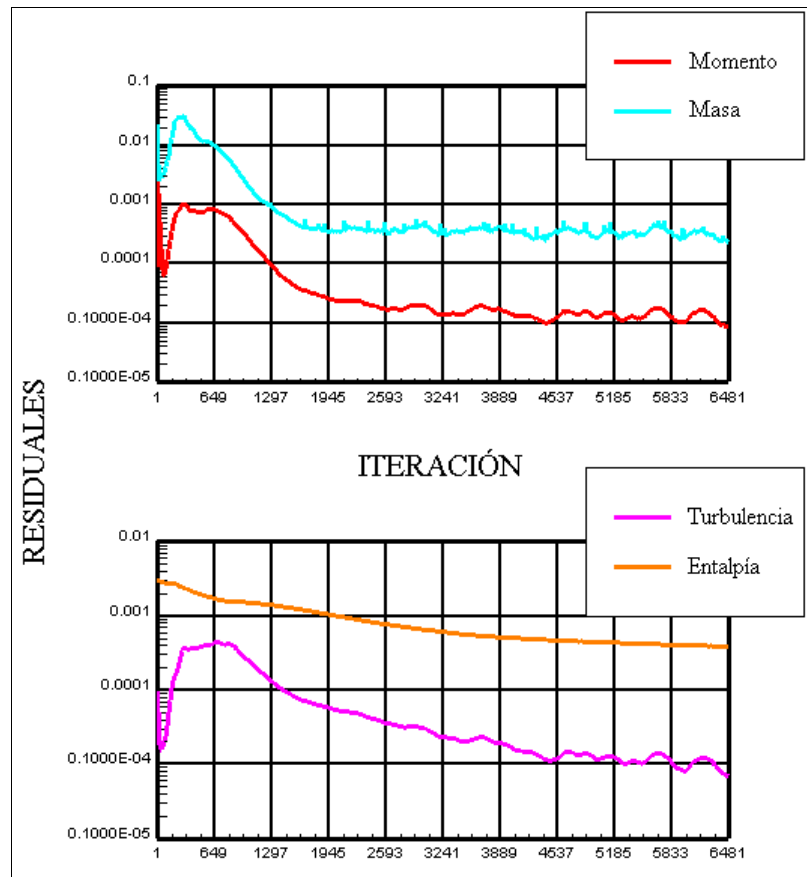
Control de la Solución. Para asegurar la convergencia de la solución y establecer el final de esta, se utilizan los factores de sobre-relajamiento de la tabla

19 con una tolerancia máxima de residuales de 3×10^{-4} . En la figura 36 se observa el comportamiento de los residuales para la solución del modelo global.

Tabla 19. Sobre-relajamiento para la co-combustión global.

Factores de Sobre-relajamiento para el Modelo de Co-combustión Global	
Momento	0.3
Presión	0.1
Temperatura	0.001
Turbulencia	0.3
Densidad	0.1
Especies	0.3
Partícula	0.1
Temperatura de Pared	0.001

Figura 36. Comportamiento de los residuales durante la solución del modelo global.



4.6 INDEPENDENCIA DE MALLADO

Con el fin de asegurar que las soluciones obtenidas no se vean afectadas por el tamaño de malla considerado, se procede a realizar un estudio de independencia de mallado. Para esto se generan tres mallas con 21505, 35417 y 40062 celdas realizando refinamientos sucesivos, tal y como se observan en las figuras 37, 38 y 39, las cuales pertenecen a los parámetros de tamaño de malla consignados en las tablas 20, 21 y 22, respectivamente.

Figura 37. Malla de 21505 celdas para estudio de independencia de mallado.

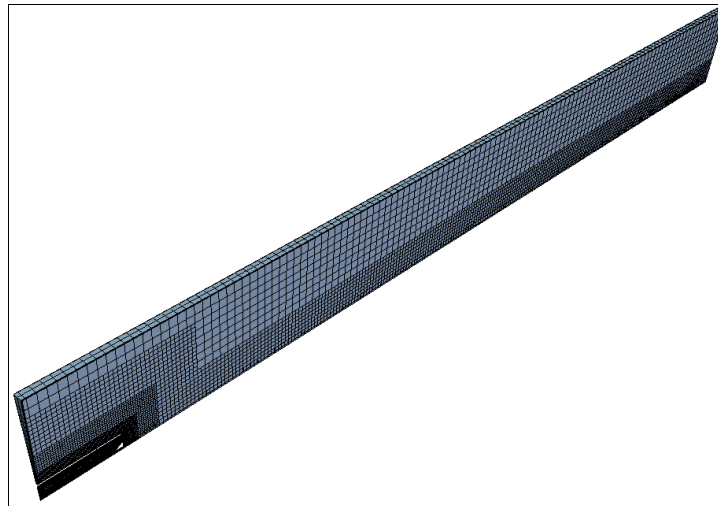


Tabla 20. Valores de referencia para mallado global para 21505 celdas.

Valores de Referencia Globales	
Tamaño Máximo de Celda	0.2 m
Número de Capas Prismáticas	4
Tasa de Crecimiento de Capa Prismática	1.5
Espesor de Capa Prismática	20 mm
Curvatura de Superficie	60 Pts./círculo
Tasa de Crecimiento de Superficie	1.3
Tamaño Máximo de Superficie	0.18 m
Tamaño Mínimo de Superficie	0.18 m

Figura 38. Malla de 35417 celdas para estudio de independencia de mado.



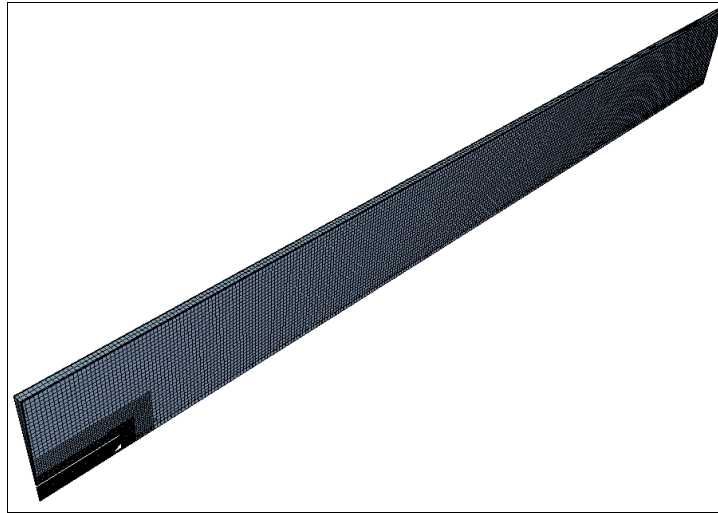
Tabla 21. Valores de referencia para mado global para 35417 celdas.

Valores de Referencia Globales	
Tamaño Mximo de Celda	0.1 m
Nmero de Capas Prismticas	4
Tasa de Crecimiento de Capa Prismtica	1.5
Espesor de Capa Prismtica	20 mm
Curvatura de Superficie	60 Pts./crculo
Tasa de Crecimiento de Superficie	1.3
Tamaño Mximo de Superficie	0.16 m
Tamaño Mnimo de Superficie	0.16 m

Tabla 22. Valores de referencia para mado global para 40062 celdas.

Valores de Referencia Globales	
Tamaño Mximo de Celda	0.07 m
Nmero de Capas Prismticas	4
Tasa de Crecimiento de Capa Prismtica	1.5
Espesor de Capa Prismtica	20 mm
Curvatura de Superficie	60 Pts./crculo
Tasa de Crecimiento de Superficie	1.3
Tamaño Mximo de Superficie	0.14 m
Tamaño Mnimo de Superficie	0.14 m

Figura 39. Malla de 40062 celdas para estudio de independencia de mallado.



Sobre estas tres mallas generadas se procedió a implementar el modelo de combustión de metano, debido a que es el más simplificado de todos los modelos utilizados y, por ende, alcanza la convergencia con mayor rapidez para valores de tolerancia de residuales más bajos. Vale la pena enfatizar que, para estos tres casos, se utilizaron las mismas condiciones iniciales y de frontera, con los mismos parámetros de control de la solución. Como criterio de análisis de la independencia del mallado se toma el valor de la temperatura del fluido a lo largo del eje del horno. Se eligió esta variable ya que, en un proceso de combustión, la temperatura afecta significativamente los valores de otras variables dependientes como, por ejemplo, las concentraciones de especies, la densidad y la viscosidad del fluido. Los resultados obtenidos para el criterio definido anteriormente se observan en las figuras 40, 41 y 42, respectivamente. Al observar estas figuras se puede asegurar que no existe diferencia significativa en el comportamiento de la temperatura a lo largo del eje del horno, por lo tanto, es posible afirmar que existe independencia de mallado. Lo anterior permite que se tome cualquiera de las mallas generadas para llevar a cabo la solución del modelo global, sin embargo, para asegurar un balance entre el tiempo requerido para alcanzar la solución y la posibilidad de evitar problemas de dispersión y/o difusión numérica durante la

solución de los modelos subsiguiente, se procedió a utilizar la malla de 35417 celdas con los parámetros de tamaño que se especificaron en la sección 4.3.1.

Figura 40. Temperatura a lo largo del horno para la malla de 21505 celdas.

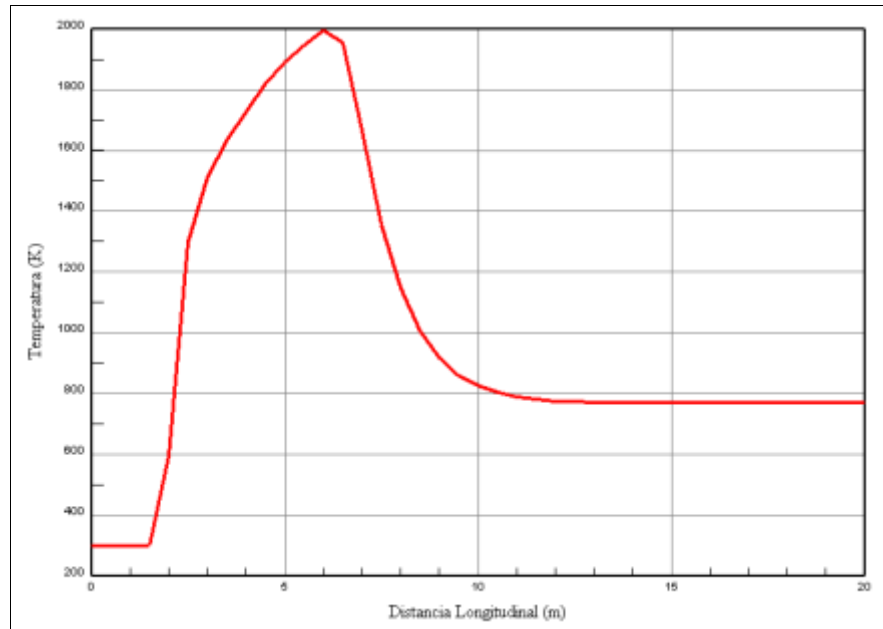


Figura 41. Temperatura a lo largo del horno para la malla de 35417 celdas.

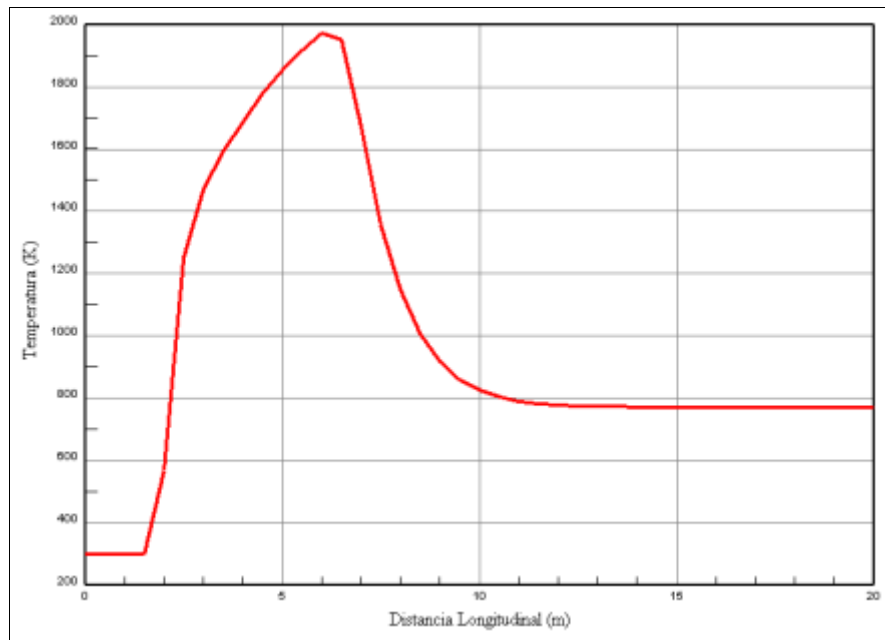
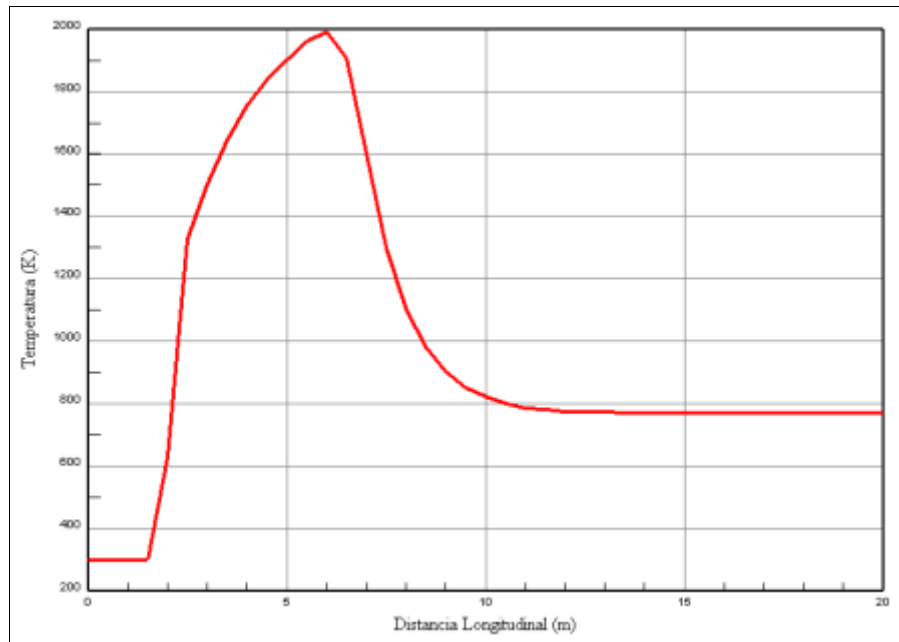


Figura 42. Temperatura a lo largo del horno para la malla de 40062 celdas.



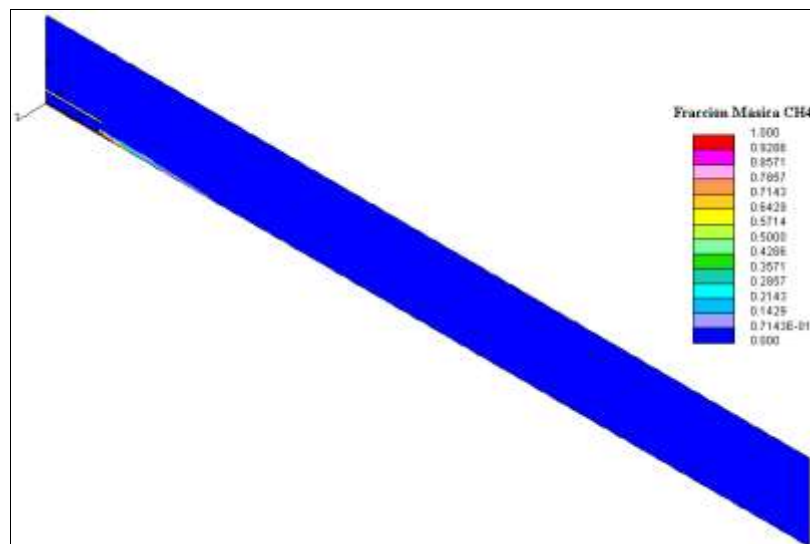
5. ANÁLISIS DE RESULTADOS

Luego de haber alcanzado la solución del modelo global de co-combustión de gas natural y carbón en el horno de clinkerización, se procede a evaluar los resultados obtenidos. Sin embargo, debido a la gran cantidad de fenómenos presentes en este proceso, inicialmente se aborda el análisis de manera general para algunas variables dependientes, para luego hacer énfasis en los sub-modelos más representativos que conforman el modelo global y la manera en la que estos afectan las demás variables.

5.1 ANÁLISIS GENERAL

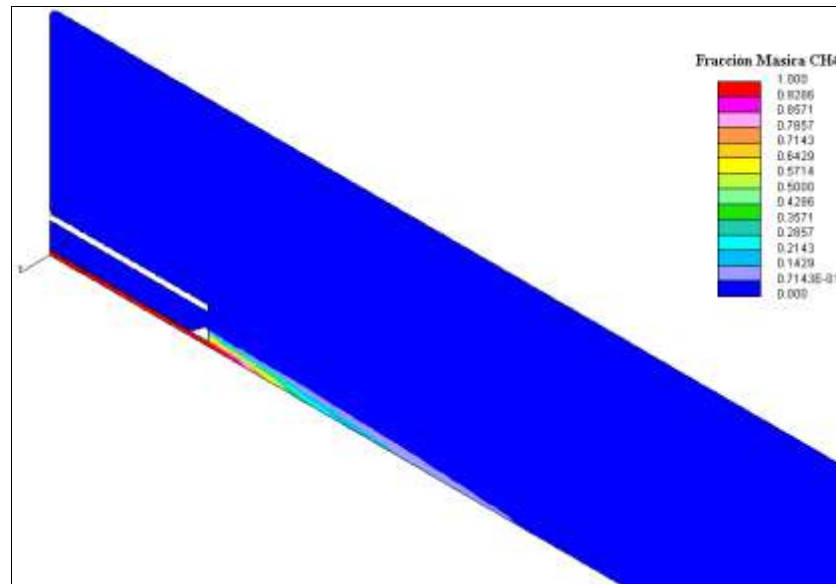
En la figura 43 se puede observar la distribución de concentraciones de metano en el horno, donde se aprecia la rápida combustión de este luego de su salida del tubo interno del quemador tal y como se esperaría.

Figura 43. Perfil de concentraciones de CH₄.



La figura 44 muestra en detalle la zona se lleva a cabo la reacción del metano. Se aprecia que dicha zona coincide con la localización de las celdas usadas para el proceso de ignición, lo cual permitió un inicio apropiado para la solución del modelo de combustión de metano.

Figura 44. Detalle del perfil de concentraciones de CH₄.



La figura 45 ilustra el perfil de concentraciones de monóxido de carbono, donde se observan claramente tres zonas de alta concentración de esta sustancia. Esto se debe principalmente a que el CO se genera como producto de los tres tipos de reacciones presentes en el proceso, las cuales se llevan a cabo en estas tres mismas zonas. Por una parte se tiene la región cercana al eje del horno donde se da la combustión del metano, para la cual uno de sus productos es el CO. Luego se tiene la zona alrededor de la salida de la mezcla aire-carbón entre los tubos externo e interno del quemador, la cual se observa más detalladamente en la figura 46, y que corresponde a la combustión de los volátiles del carbón, los cuales también producen CO. Por último, se tiene la zona de reacción heterogénea de las partículas de carbón fijo, para la cual, su único producto es el monóxido de carbono. Sin embargo, esta tercera zona también corresponde, aunque en menor

medida, a una región de devolatilización de algunas partículas de carbón que fueron aceleradas en su paso por el estabilizador de llama y tuvieron un menor tiempo de permanencia en la zona de alta temperatura donde se llevó a cabo la devolatilización de la mayoría de partículas.

Figura 45. Perfil de concentraciones de CO.

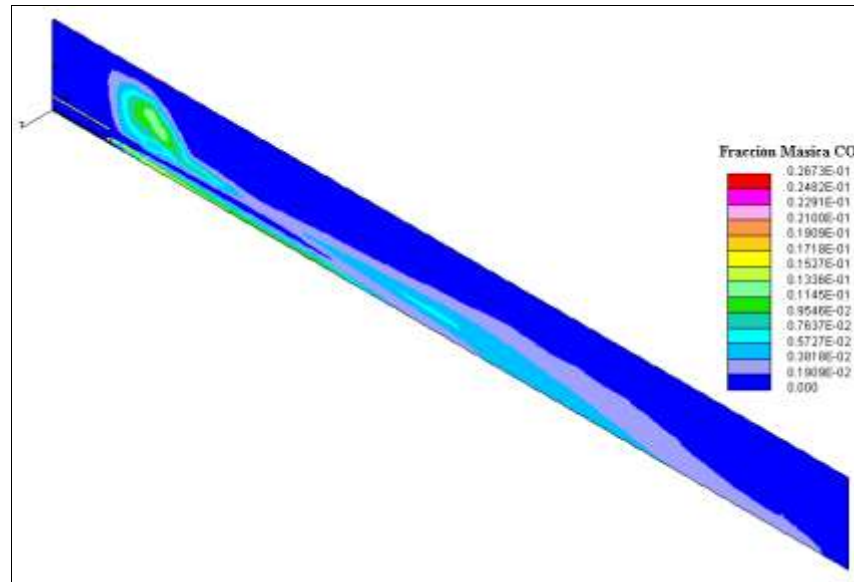
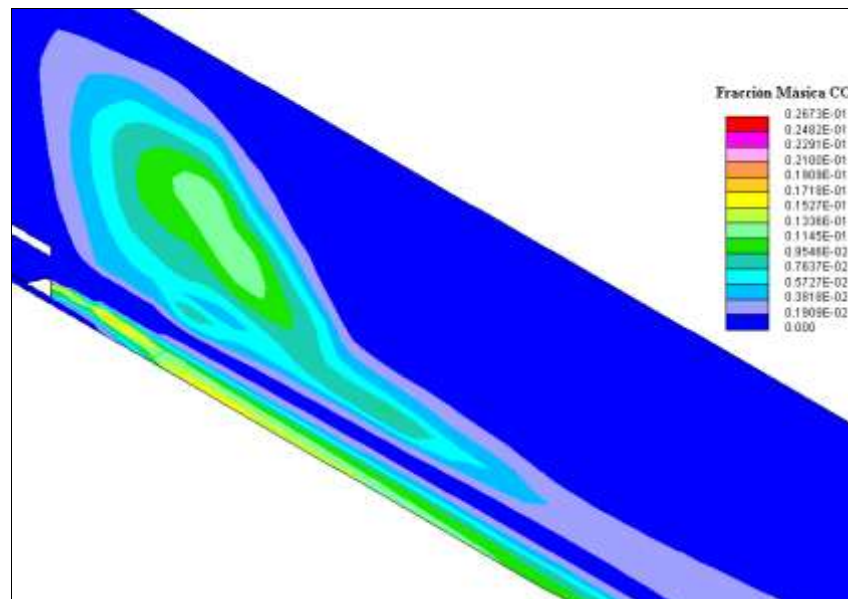


Figura 46. Detalle del perfil de concentraciones de CO.



En la figura 47 se observa en perfil de concentraciones de dióxido de carbono al interior del horno, en la cual se tiene que la región con mayor concentración de esta sustancia corresponde a la zona de devolatilización del carbón. La figura 48 muestra la distribución de la concentración de hidrógeno, donde se aprecia que la zona del eje del horno corresponde a la mayor presencia de esta sustancia debido a que allí se da la combustión del metano.

Figura 47. Perfil de concentraciones de CO₂.

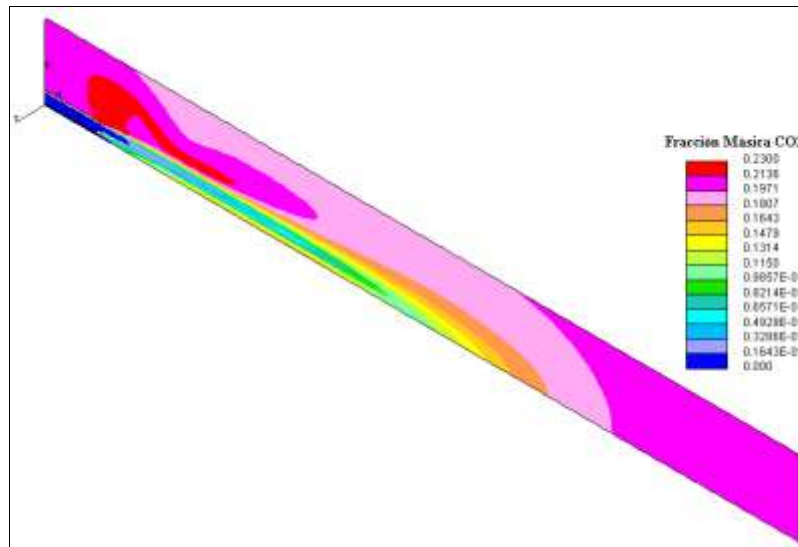
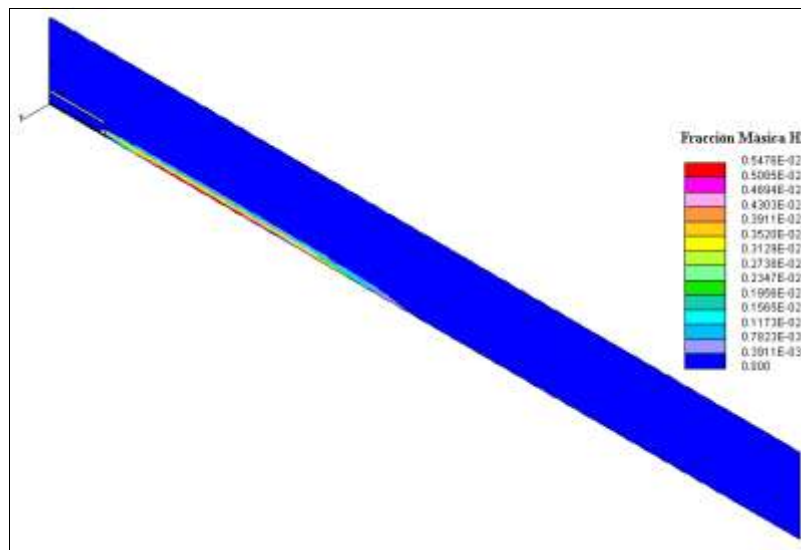
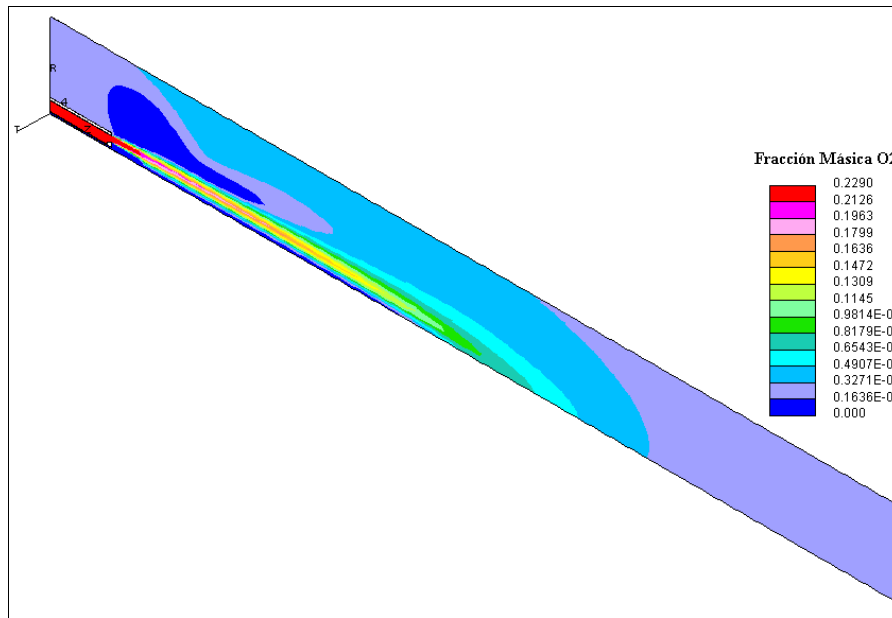


Figura 48. Perfil de concentraciones de H₂.



El perfil de concentraciones oxígeno de la figura 49 ilustra, entre otras, las regiones de más baja concentración de esta sustancia correspondientes a la zona de devolatilización y de combustión de metano. A la salida del horno se tiene una zona de relativa baja concentración, lo cual indica que gran parte del oxígeno suministrado a través de la entrada de la mezcla aire-carbón fue utilizado en las diferentes reacciones presentes en el horno.

Figura 49. Perfil de concentraciones de O₂.



En la figura 50 se puede apreciar la distribución de los vectores de velocidad de la fase continua en el horno. Se observa en dicha figura que la forma característica de la llama se produce gracias al estabilizador de llama. Sin embargo, este estabilizador también induce una zona de recirculación del fluido en la región del horno adyacente al quemador, tal y como se ilustra en la figura 51. Esta zona de recirculación hace que algunos productos de la combustión de los volátiles presenten altas concentraciones en la parte posterior del horno, lo que a su vez conlleva a una baja concentración de oxígeno en dicha región. Ejemplos de lo anterior se observan en las figuras 47 y 51 para el dióxido de carbono y el oxígeno, respectivamente.

Figura 50. Vectores velocidad de la fase continúa.

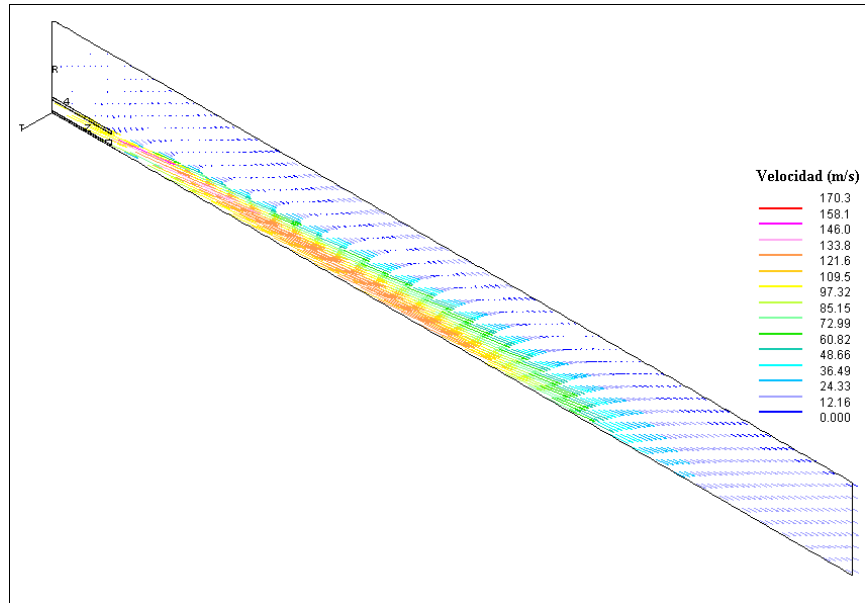
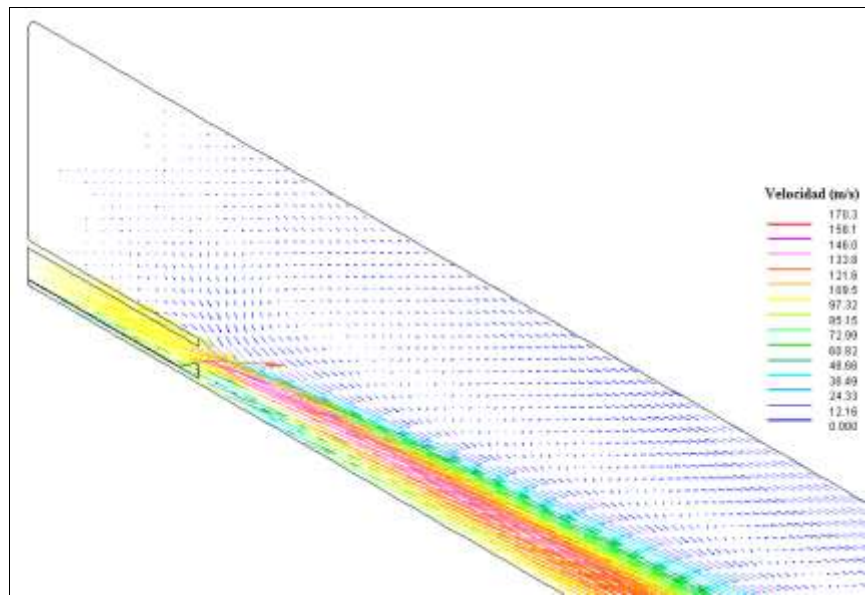


Figura 51. Detalle de vectores velocidad de la fase continúa.



5.2 FLUJO DE FASE DISPERSA

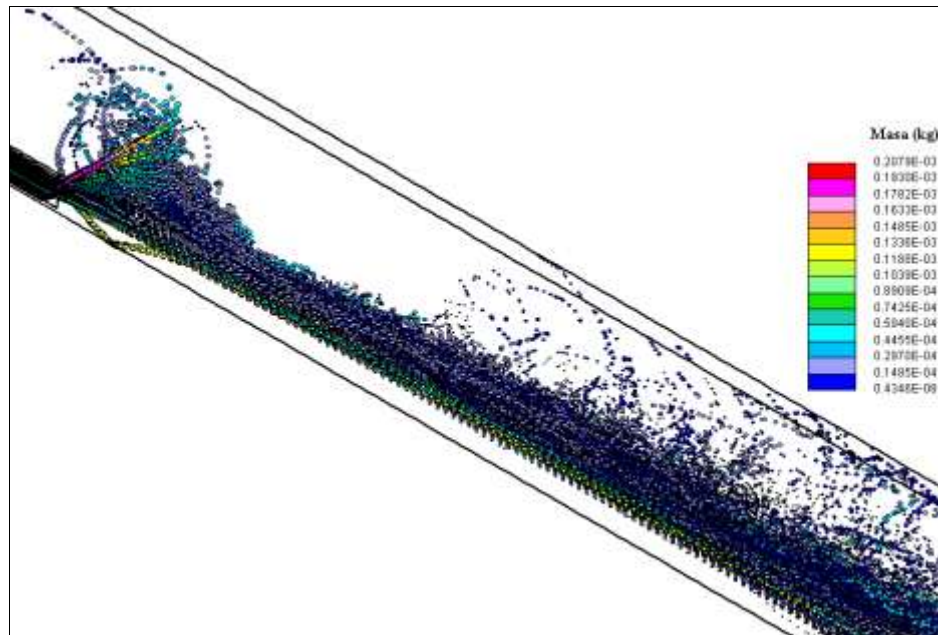
Debido al alto porcentaje de carbón suministrado al horno como combustible, en comparación con la cantidad de metano de alimentación, adquiere gran importancia para el modelo de co-combustión el análisis de los fenómenos de transporte presentes en el flujo de la fase dispersa, conformada por las partículas de carbón. Como se dijo anteriormente, en este caso se utilizó un enfoque Lagrangeano para definir las ecuaciones de conservación de la fase dispersa, lo cual permite hacer un seguimiento de la trayectoria de cada partícula a través del dominio mientras intercambia momento, masa y energía con la fase continua. La figura 52 ilustra la ubicación de las partículas de carbón en el horno con sus respectivos valores de masa. Se observa en esta misma figura que existe una alta densidad de partículas en la zona de devolatilización y que las partículas van disminuyendo su masa a medida que se acercan a la salida del dominio.

Figura 52. Masa de las partículas de carbón.



En la figura 53 se tiene un acercamiento de la zona de devolatilización principal donde se detalla la pérdida de masa de las partículas en esta región y la tendencia de algunas de estas a dirigirse hacia la parte posterior del horno, inducidas por la zona de recirculación presente en esta región. Además se observa una segunda zona de devolatilización aguas abajo de la zona primaria, donde se devolatilizan las partículas aceleradas por el estabilizador de llama.

Figura 53. Detalle de masa de las partículas de carbón.



La figura 54 muestra la distribución de temperatura de las partículas en el horno. En ella se tiene dos regiones de alta temperatura, una ubicada en la zona de devolatilización y otra cercana a la salida del dominio, donde prácticamente se ha quemado todo el carbón alimentado al horno. En la figura 55 se ilustra en detalle la temperatura de las partículas en la zona de devolatilización. Al comparar la figura 53 con la figura 55 se aprecia que las partículas que poseen menor masa en la región primaria de devolatilización muestran altos valores de temperatura, lo cual ilustra la dependencia del proceso de devolatilización con la temperatura.

Figura 54. Temperatura de las partículas de carbón.

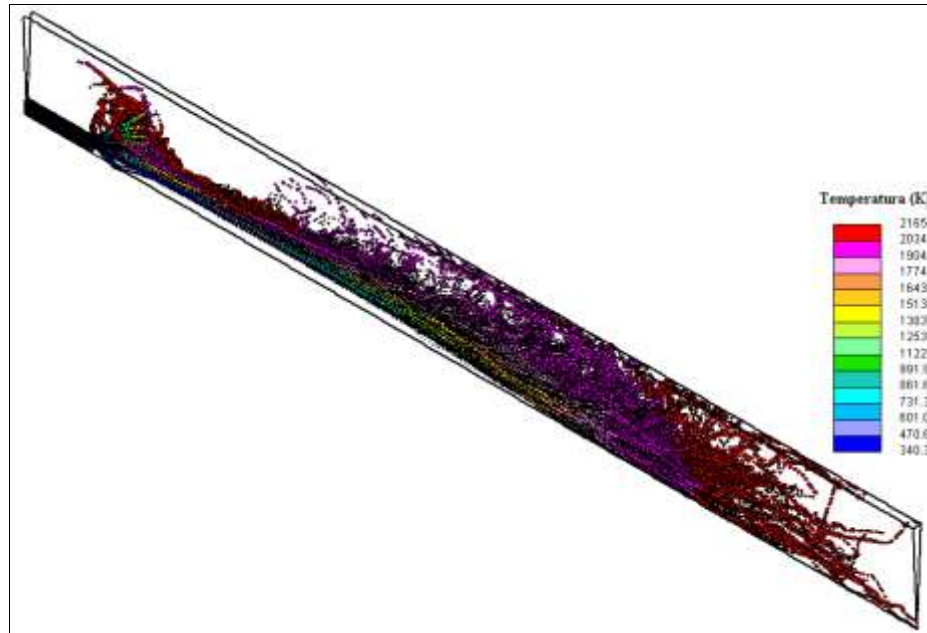
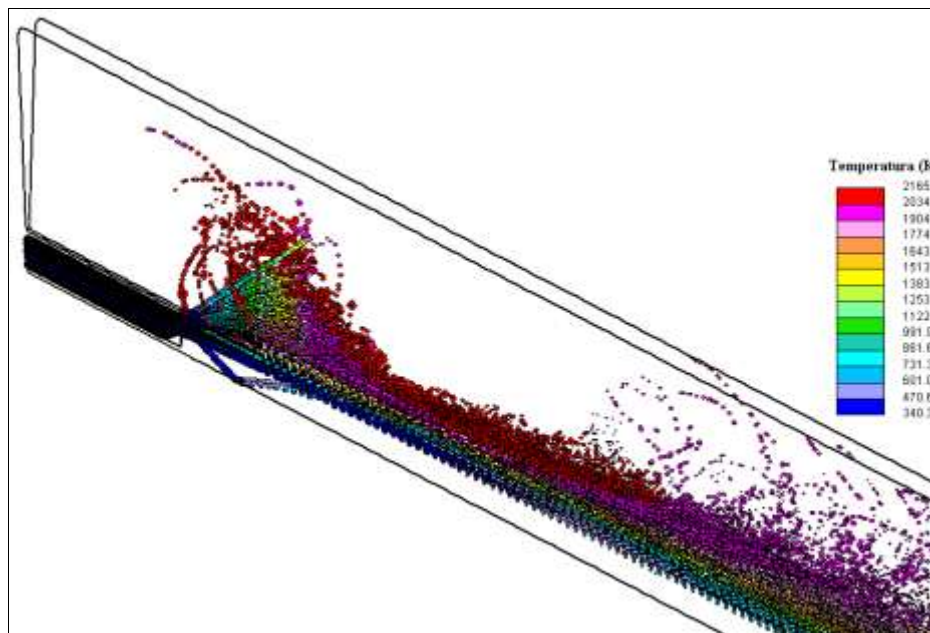


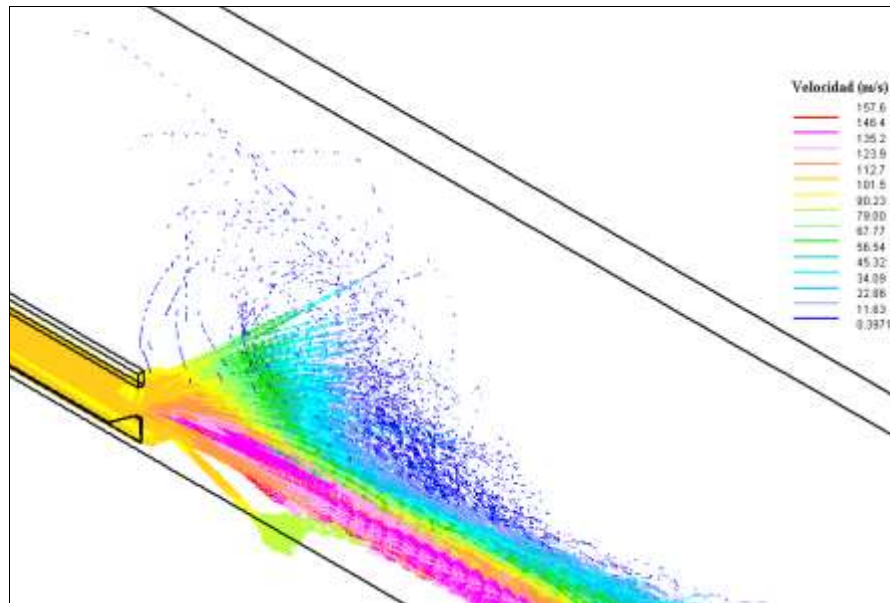
Figura 55. Detalle de temperatura de las partículas de carbón.



Los vectores mostrados en la figura 56 representan la dirección y magnitud de la velocidad de las partículas de carbón en la zona de devolatilización primaria. Con la ayuda de estos vectores se puede visualizar la recirculación de partículas de

carbón en la región adyacente al quemador inducida por la zona de recirculación de la fase continua, la cual también es influenciada en cierta medida por el flujo de la fase dispersa.

Figura 56. Detalle de vectores de velocidad de las partículas de carbón.



5.3 DEVOLATILIZACIÓN

Vale la pena recordar que del proceso de devolatilización del carbón se obtiene tres tipos de volátiles. Primero, el principal producto la devolatilización es el CHO, que, como se había dicho antes, es una sustancia homogénea cuyas propiedades vienen dadas por las concentraciones de carbono, hidrógeno y oxígeno en el carbón de acuerdo con el análisis último. El perfil de concentraciones de CHO se puede observar en la figura 57, donde solo se aprecia la zona primaria de devolatilización. Sin embargo, al modificar el rango de valores de concentración de CHO y observar en detalle las zonas de devolatilización como en la figura 58, se

puede apreciar la segunda zona de devolatilización, en la cual se genera una cantidad de volátiles de CHO significativamente menor que en la zona primaria.

Figura 57. Perfil de concentraciones de CHO.

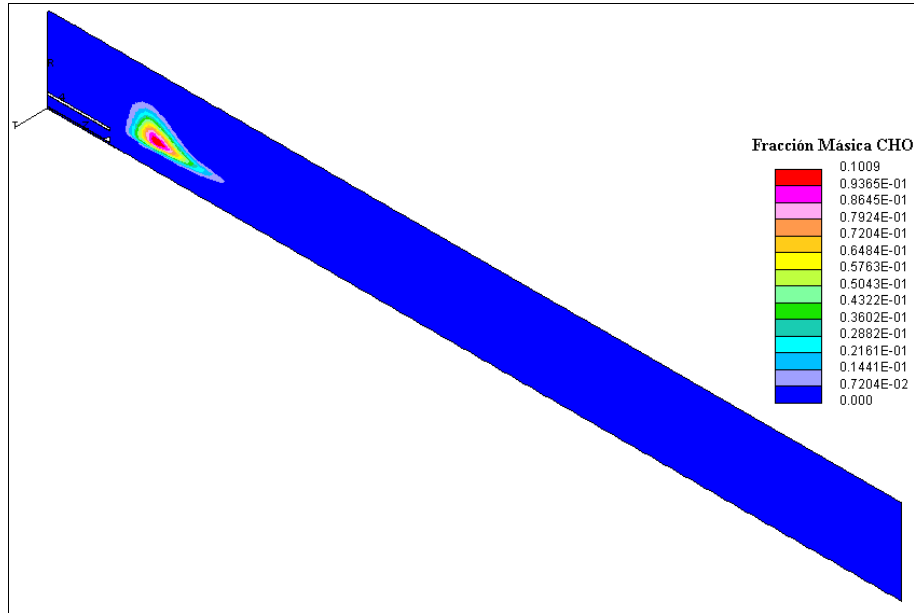
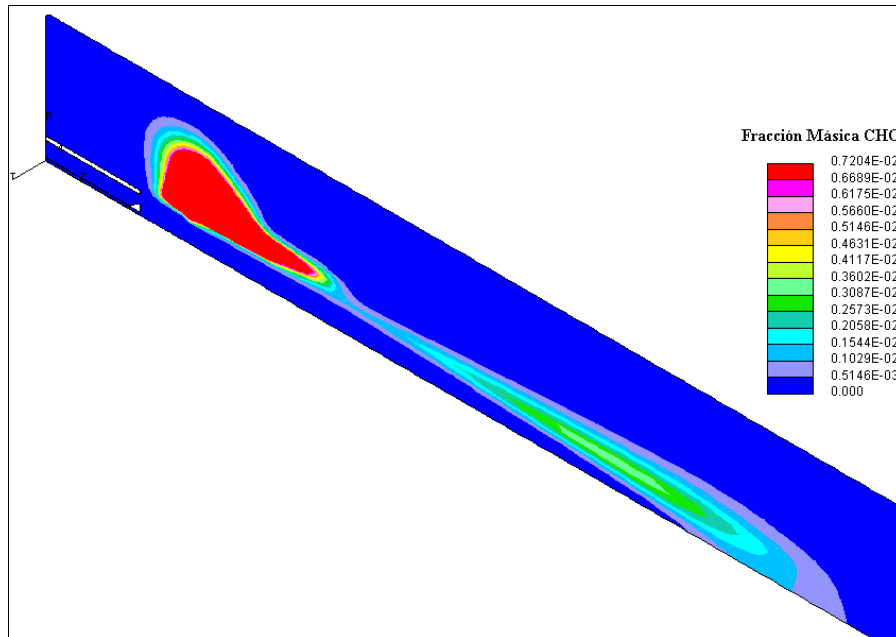
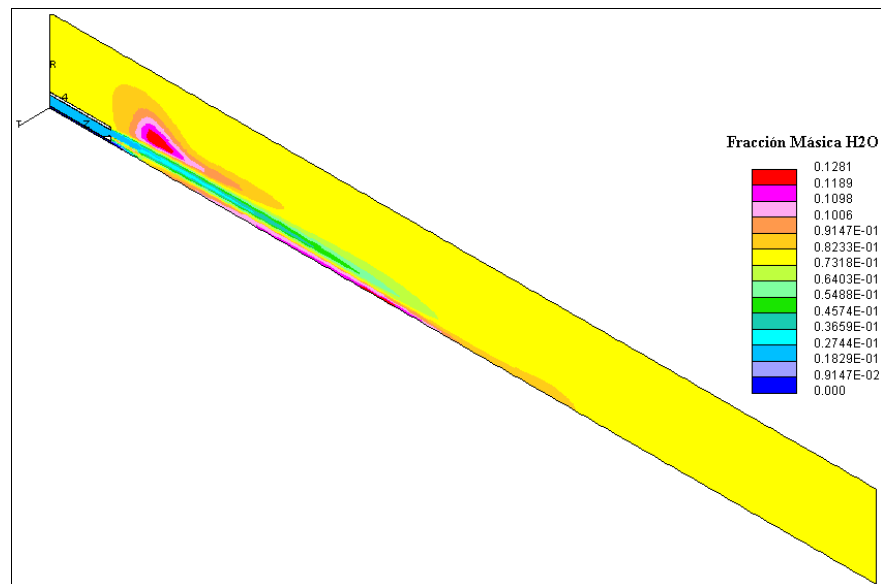


Figura 58. Detalle del perfil de concentraciones de CHO.



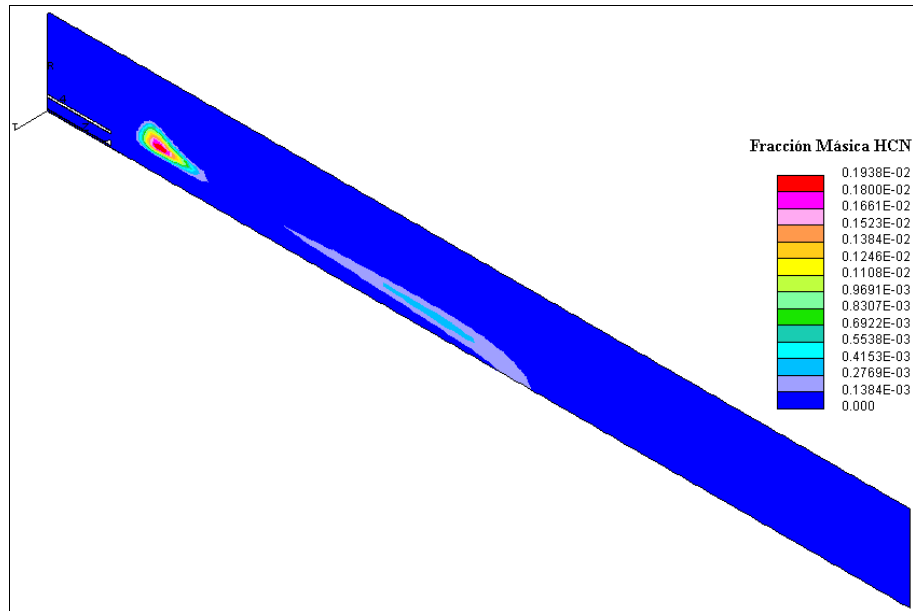
La segunda sustancia presente en los volátiles del carbón es el agua contenida en el carbón obtenida del análisis próximo. La figura 59 muestra el perfil de concentraciones de agua en el interior del horno con una alta concentración en la zona primaria de devolatilización. Sin embargo, esta distribución global no obedece únicamente a la humedad liberada por el carbón durante la devolatilización, sino que también incluye a la humedad del aire de alimentación para el proceso global de combustión, y a los productos de las reacciones presentes para el quemado de los volátiles de CHO y del hidrógeno generado por la combustión del metano.

Figura 59. Perfil de concentraciones de H₂O.



Para finalizar, con los volátiles también se libera el nitrógeno parte del nitrógeno contenido en el carbón, dado por su análisis último. La liberación de este nitrógeno volátil se produce en forma de HCN, tal y como se estableció en la sección 3.9.3. La figura 60 ilustra la distribución de concentraciones de HCN, donde también se aprecian las zonas de devolatilización, con una mayor concentración de esta sustancia para la zona primaria.

Figura 60. Perfil de concentraciones de HCN.

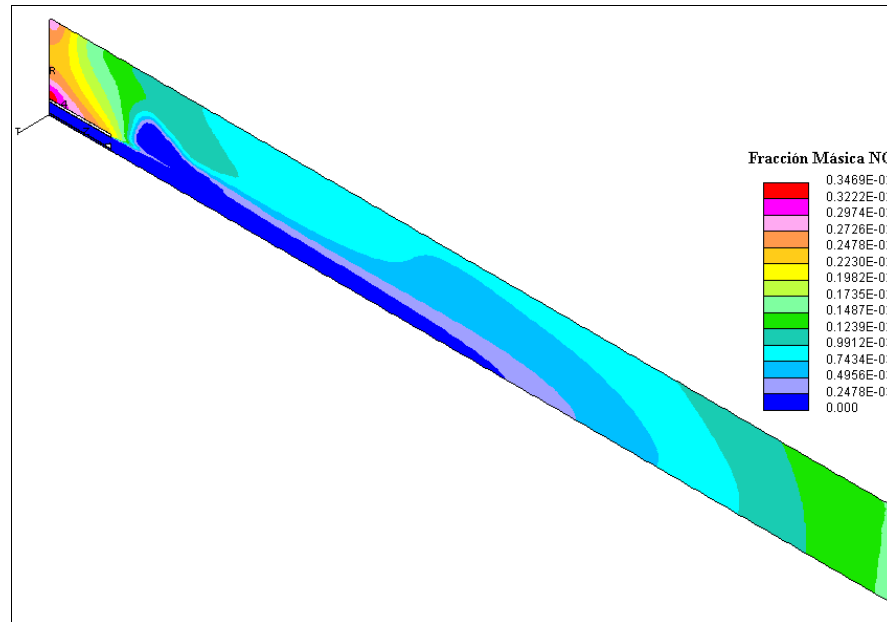


5.4 FORMACIÓN DE NO_x

Ya se había dicho anteriormente que para predecir la formación de contaminantes de este proceso se implementarían los tres mecanismos principales de formación de NO_x. De acuerdo a lo anterior, se tiene una distribución de concentración de NO tal y como aparece en la figura 61. Sin embargo, para esta distribución de concentraciones no es fácil determinar cuáles zonas están siendo influenciadas en mayor o menor medida por cada uno de los mecanismos de formación de NO. A pesar de lo anterior, si es posible intuir en que regiones se esperaría que uno u otro mecanismo se lleve a cabo basado en las características de los mismos mecanismos. Por ejemplo, la zona posterior del horno, que presenta la mayor concentración de NO, también se caracteriza por poseer altas temperaturas, por lo cual se le puede atribuir a la formación de NO térmico. La región aguas arriba de la zona de devolatilización, que muestra una tendencia a aumentar la concentración de NO mientras se acerca a la salida del dominio se le puede

atribuir al mecanismo de formación de NO combustible, inicialmente para los volátiles y seguidamente para el carbón fijo. El mecanismo de formación de NO *prompt* se debe dar cerca de la llama de metano, aunque con una concentración muy baja de NO.

Figura 61. Perfil de concentraciones de NO.



5.5 RADIACIÓN

El fenómeno de transferencia de calor por radiación en medios participativos ejerce una influencia significativa en el comportamiento del proceso de co-combustión, ya que este tiende a reducir la temperatura del fluido, lo cual a su vez, afecta otras variables dependientes, como por ejemplo la tasa de devolatilización o la tasa de formación de NO térmico, por nombrar algunos. Para analizar el impacto de la radiación en el proceso de interés se pueden comparar las figuras 62 y 63 que muestran la distribución de la temperatura del fluido al interior del horno para

el modelo de co-combustión convectivo, ósea sin transferencia de calor por radiación, y el modelo global que si la incluye.

Figura 62. Perfil de temperatura para el modelo de co-combustión convectivo.

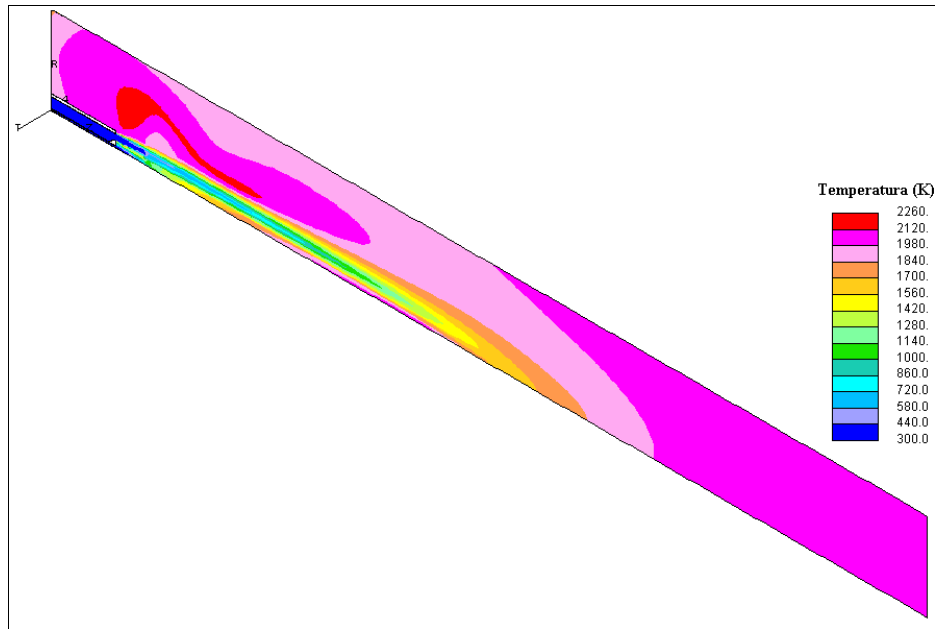
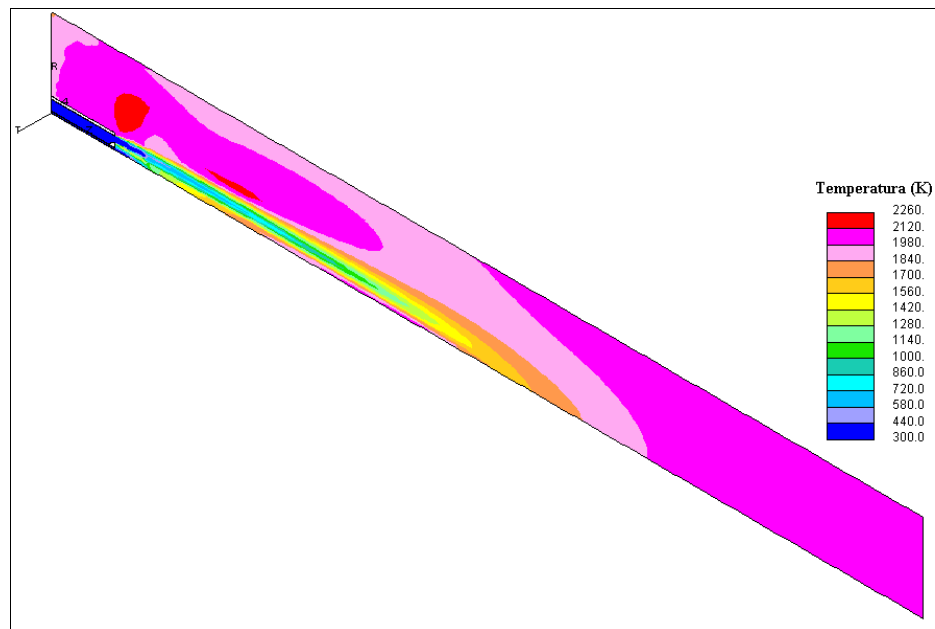


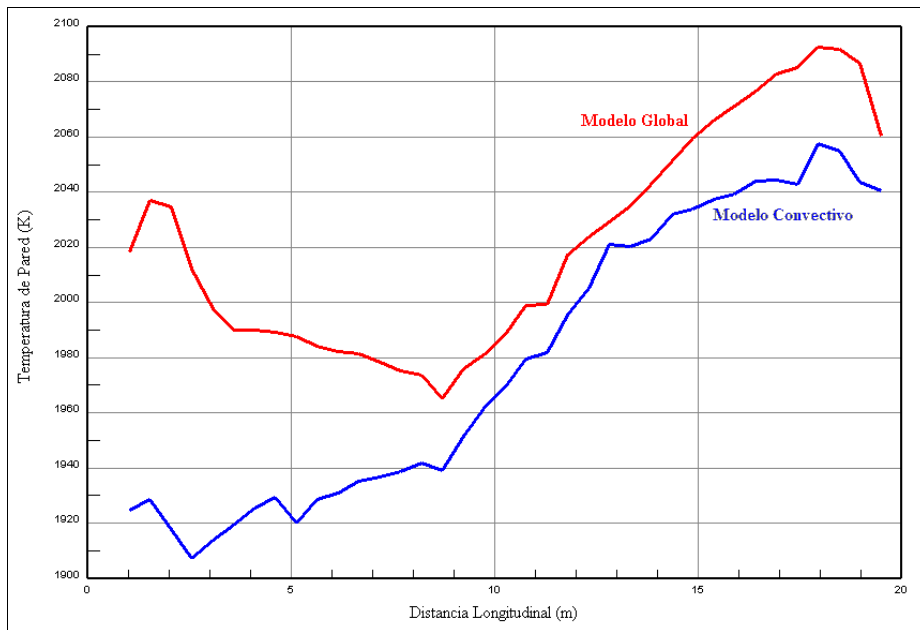
Figura 63. Perfil de temperatura para el modelo de co-combustión global.



De la comparación anterior se puede observar que la distribución de temperaturas para el proceso de incluye la radiación presenta un región de alta temperatura de menor extensión que para el caso del modelo convectivo, lo cual indica que la radiación tiene un efecto de enfriamiento sobre los gases de combustión como era de esperarse.

Sin embargo, el impacto de la radiación se puede ver de manera más clara en la forma en la que estas afecta la temperatura de la pared interna del horno, tal y como se aprecia en la figura 64. En esta figura se grafica el valor de la temperatura de la pared interna del horno a lo largo del dominio computacional. Se puede apreciar que en todo punto de la longitud del horno, la temperatura de la pared es más alta para el modelo global comparada con la del modelo convectivo, lo cual indica que el calor “extra” de radiación cedido por los gases de combustión va directamente hacia la pared del horno.

Figura 64. Temperatura de la pared interna del horno para los modelos convectivo y global.



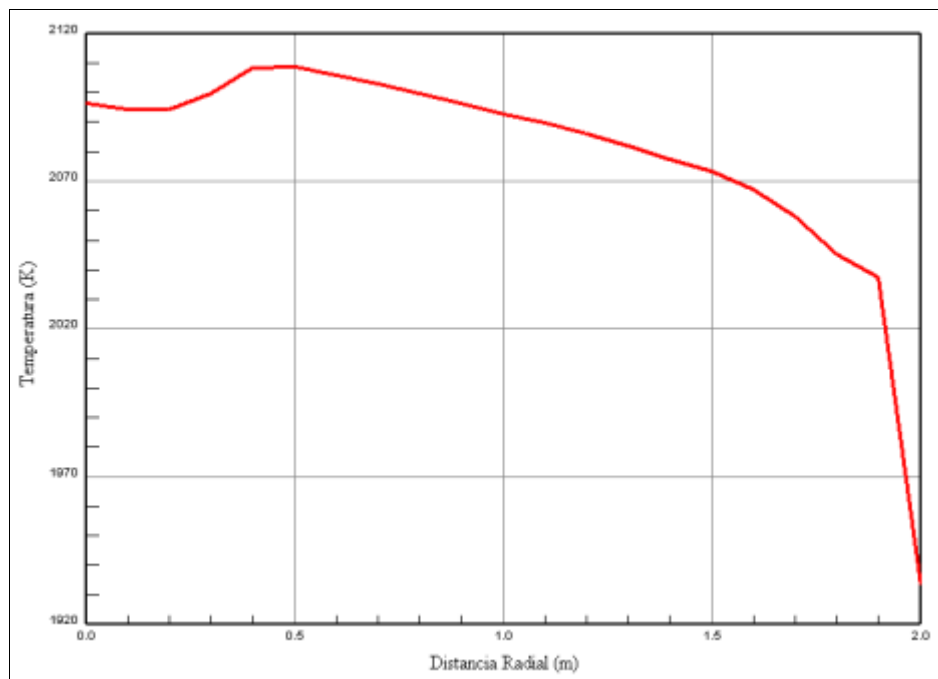
5.6 CONDICIONES DE SALIDA

Debido a que para el modelo planteado aquí solo se consideró una porción de la zona de combustión del horno correspondiente a los 20 m iniciales de su longitud, toma gran importancia establecer las condiciones de salida de los gases de combustión del dominio computacional, ya que, más allá de la región evaluada se siguen dando procesos de mezclado y transferencia de calor, para que luego ingresen los gases de combustión a la zona de cadenas.

5.6.1 Temperatura

La temperatura de salida de los gases de combustión es quizás la condición de salida más importante a tener en cuenta debido a que afecta en gran medida a los procesos subsiguientes. La figura 65 muestra la distribución radial de la temperatura a la salida del dominio computacional.

Figura 65. Distribución radial de la temperatura a la salida del dominio.

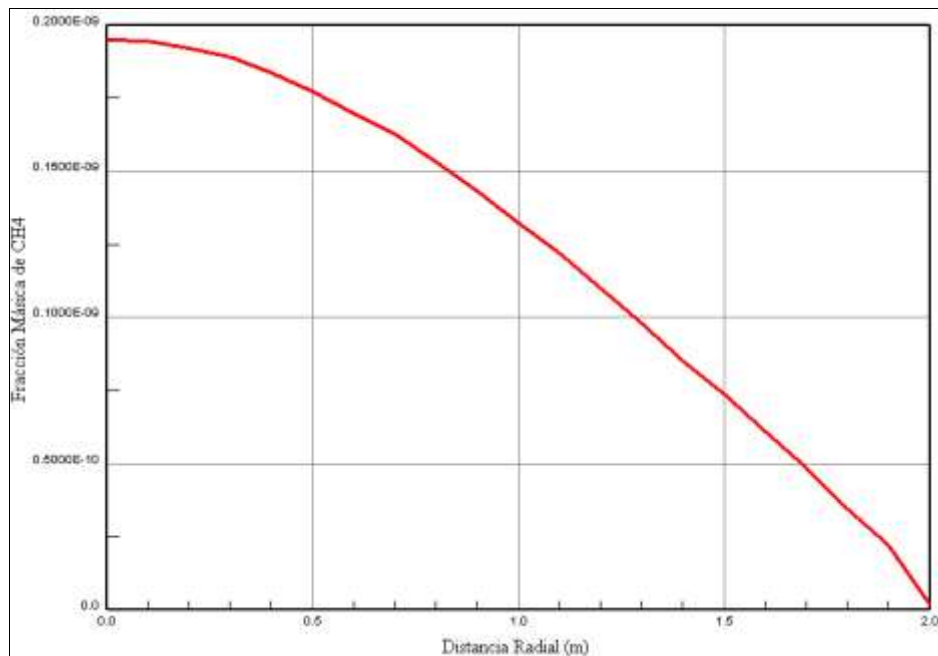


En esta figura se observa un valor de temperatura relativamente alta sobre el eje del horno que se le atribuye a la llama del metano. Sin embargo, el valor máximo, que se presenta alrededor de los 0.5 m se debe en gran medida a la zona de combustión del carbón, particularmente del carbón fijo. Por último, el cambio de la pendiente de la curva cercano a los 1.9 m se da debido a la capa límite térmica sobre la pared interna del horno.

5.6.2 Inquemados

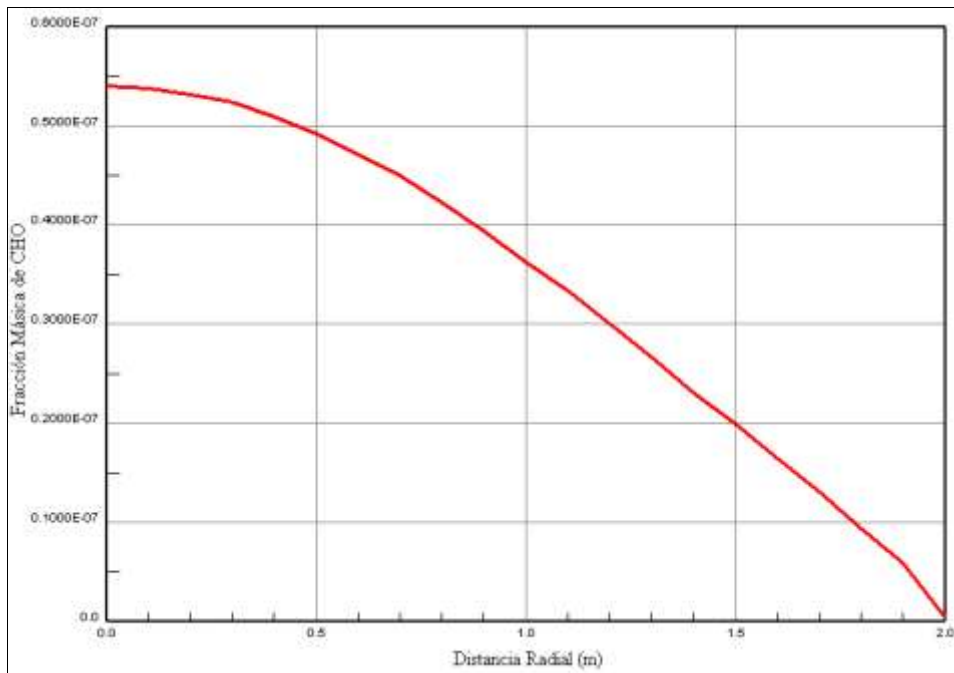
Una de la principales formas de contaminantes producidos en los procesos de combustión se refiere a los hidrocarburos que no alcanzan a quemarse completamente. Para este proceso se pueden presentar dos tipos de inquemados, por una parte se tienen los correspondientes al metano, que como se aprecia en la figura 66, tienen su máximo sobre el eje del horno, aunque para efectos prácticos sus valores son muy bajos.

Figura 66. Distribución radial de CH₄ a la salida del dominio.



La segunda clase de inquemados se refieren al CHO de los volátiles del carbón, los cuales se grafican en la figura 67. Como en el caso anterior, su valor máximo de concentración se da sobre el eje del horno pero con valores un poco mayores. Este valor es de aproximadamente 0.54 ppm, lo cual todavía es una concentración muy baja.

Figura 67. Distribución radial de CHO a la salida del dominio.



5.6.3 Combustión Incompleta

La combustión incompleta es una medida de la eficiencia del proceso de combustión, ya que, en la medida en que la combustión se complete, se libera una mayor cantidad de la energía química que poseen las sustancias que intervienen en las reacciones. Para determinar el grado en que se completan las reacciones presentes en este proceso se evalúan las condiciones de salida del dominio del monóxido de carbono y del hidrógeno, como se aprecia en las figuras 68 y 69, respectivamente. Para ambos casos se observa el valor máximo sobre el eje del horno, aunque para el monóxido de carbono se tiene una concentración

considerable de 1300 ppm, mientras que la concentración del hidrógeno es tan baja que se considera insignificante.

Figura 68. Distribución radial de CO a la salida del dominio.

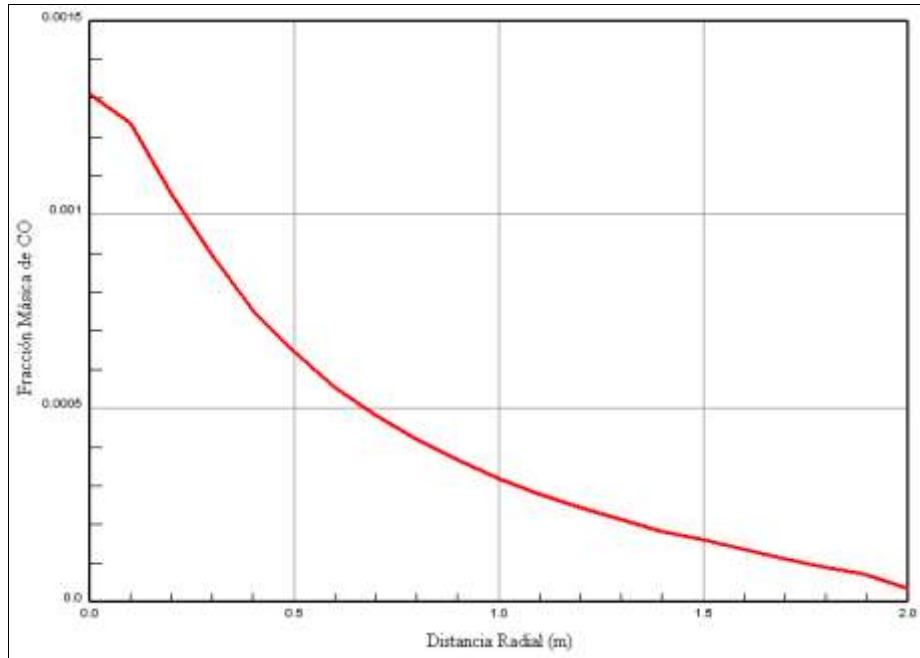
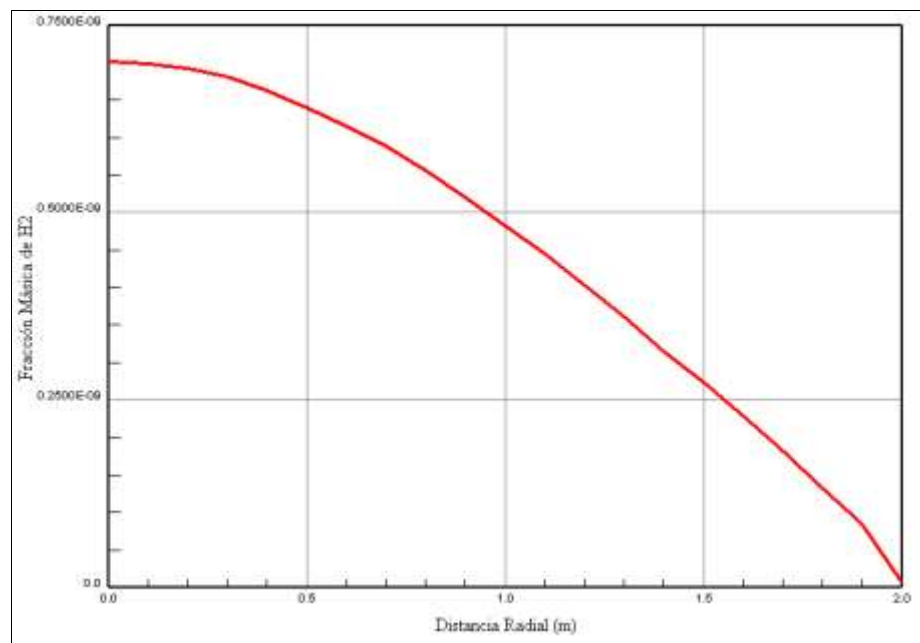


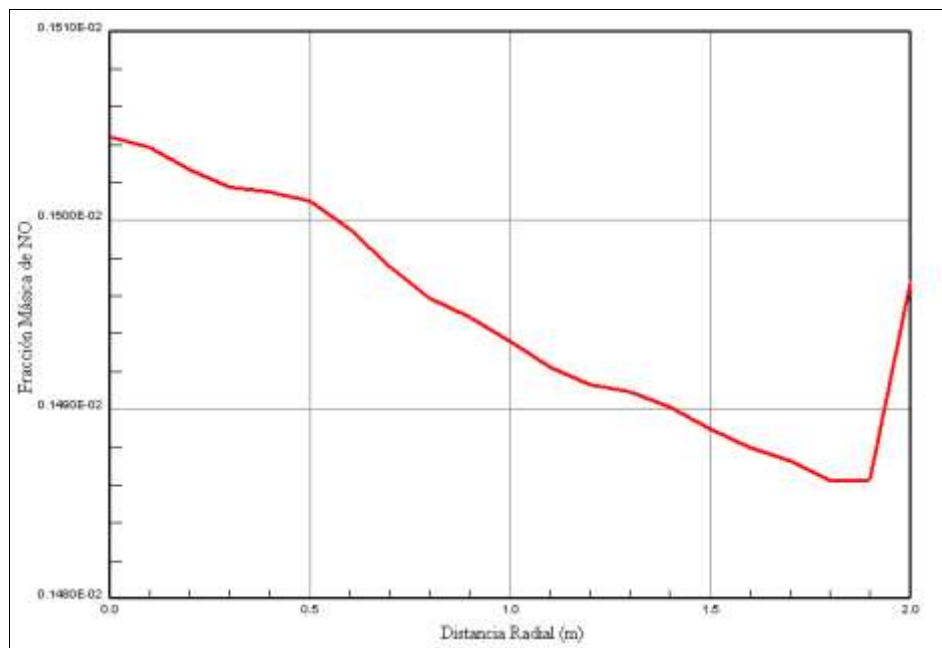
Figura 69. Distribución radial de H₂ a la salida del dominio.



5.6.4 Óxidos Nitrosos

Otra forma de contaminantes que se considera importante en los procesos de combustión se refiere a la formación de los óxidos nitrosos. En este caso en particular se evaluó la concentración de NO a la salida del dominio tal y como se ilustra en la figura 70, donde se aprecia que los valores de concentración de esta sustancia oscilan alrededor de 1500 ppm. Este valor representa una formación importante de este tipo de contaminante, aunque era de esperarse para un proceso de combustión con carbón como combustible principal.

Figura 70. Distribución radial de NO a la salida del dominio.



CONCLUSIONES

Basado en el proceso de definición del modelo matemático para el proceso global de co-combustión, es pertinente decir que este representa de manera confiable el comportamiento real los fenómenos presentes a interior de la zona de combustión del horno. Esto se debe principalmente a que, a pesar de no contar con estudios experimentales de procesos como devolatilización y quemado de carbón fijo para el carbón utilizado en el proceso real, se usaron parámetros tomados de bibliografía pertinente para estos fenómenos, en los cuales se analizaron carbones subbituminosos similares al empleado aquí.

Otro aspecto importante que vale la pena enfatizar se refiere a que las simplificaciones geométricas llevadas a cabo permitieron reducir significativamente el tiempo de solución del modelo sin afectar de manera alguna la misma solución, lo que se debió principalmente al comportamiento axisimétrico del proceso. Por otra parte, se tuvo una limitante respecto a la extensión de horno para el estudio, ya que la zona de combustión del proceso real es de aproximadamente 110 m, la cual no fue posible analizar por completo debido a restricciones de capacidad en los recursos computacionales. Además, se tuvo especial precaución en asegurar que las condiciones de frontera obedecieran a los parámetros de operación real del proceso.

Para la solución del modelo computacional se utilizó una estrategia que resultó exitosa, ya que aseguró la convergencia de todos los modelos reducidos y del modelo global, donde tuvo un papel importante la elección de los factores de sobre-relajamiento aplicables a cada modelo y solución respectiva.

La solución del modelo global para todos los parámetros analizados mostró estar entre los valores esperados para este tipo de proceso, lo cual reafirma la veracidad de las suposiciones hechas durante la etapa de modelamiento.

Por todo lo anterior, es posible afirmar que tanto el modelo matemático, como la manera en la que se llevó a cabo la solución de este, permiten realizar estudios tendientes a la optimización de dicho proceso implementando técnicas estadísticas, ya sea para incrementar el aprovechamiento de la energía, reducir las emisiones y/o disminuir costos de operación sin intervenir de manera importante en el proceso productivo.

Por último, el enfoque utilizado para el modelamiento y solución de este proceso puede ser aplicable a otros tipos de sistema en los cuales estén presentes procesos de co-combustión con combustibles en diferentes fases, llevando a cabo modificaciones menores. Este puede ser el caso de procesos de gasificación o de combustión dual en motores de combustión interna por nombrar algunos.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] Bula, A. J., Mixed Convective Burning of a Vertical Fuel Surface in the Presence of a Horizontal Cross Flow, Msc. Thesis, University of South Florida, Tampa Florida, 1997.
- [2] Poudenx, P., Howell, L., Wilson, D. J. and Kostiuik, L. W. (2004). 'Downstream Similarity of Thermal Structure in Plumes from Jet Diffusion Flames in a Crossflow', *Combustion Science and Technology*, 176:3, 409 — 435.
- [3] Song, G. P., Papanikolaou, N. and Mohamad, A. A. (2004). 'Flame Stability with Elliptical Nozzles in a Crossflow', *Combustion Science and Technology*, 176:3, 359 — 379.
- [4] Marshall, André W. and Gupta, Ashwani K. (2004) 'Thermal Behaviour of Coswirling Flames', *Combustion Science and Technology*, 176:3, 437 — 451.
- [5] Kang, Sungmo and Kim, Yongmo (2003). 'Parallel Unstructured-Grid Finite-Volume Method for Turbulent Nonpremixed Flames Using the Flamelet Model', *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 43:6, 525 — 547.
- [6] Yan, Z. H. (2002) 'Parallel Computation of Turbulent Combustion and Flame Spread in Fires', *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 41:2, 191 — 208.
- [7] Kuo, J. -T., Hsu, W. -S., Yo, T. -C., "Effect of Air Distribution on Solid Fuel Bed Combustion". *Transactions of ASME*. Vol. 119, June 1997.
- [8] Wang, A. L. T., Stubington, J. F., XU, J., "Hydrodynamic Performance of a Novel Design of Pressurized Fluidized Bed Combustor". *Transactions of ASME*. Vol. 128, June 2006.

- [9] He, Q., Winter, F., Lu, J. –D., “Analysis of the Heat Transfer Mechanism in High-Temperature Circulating Fluidized Beds by a Numerical Model”. Transactions of ASME. Vol. 124, March 2002.
- [10] Turns, S. R., *An Introduction to Combustion: Concepts and Applications*, McGraw-Hill, New York, 1996.
- [11] Kuo, K. K., *Principles of Combustion*, 2nd Ed., John Wiley & Sons, New Jersey, 2005.
- [12] Weinberg, F. J., “The First Half-Million Years of Combustion Research and Today’s Burning Problems,” *Progress in Energy and Combustion Science*, 1: 17-31 (1975).
- [13] Gore, J. P., A Theoretical and Experimental Study of Turbulent Flame Radiation, Ph.D. Thesis, The Pennsylvania State University, University Park, PA, p. 119, 1986.
- [14] Wohl, K., Gazley, C., Kapp, N., “Diffusion Flames,” *Third Symposium on Combustion and Flame and Explosion Phenomena*, Williams & Wilkins, Baltimore, p. 288, 1949
- [15] Delichatsios, M. A., “Transition from Momentum to Buoyancy-Controlled Turbulent Jet Diffusion Flames and Flame Height Relationships,” *Combustion and Flame*, 92: 349-364 (1993).
- [16] Hawthorne, W. R., Weddell, D. S., Hottel, H. C., “Mixing and Combustion in Turbulent Gas Jets,” *Third Symposium on Combustion and Flame and Explosion Phenomena*, Williams & Wilkins, Baltimore, p. 266, 1949
- [17] Thring, M. W., Newby, M. P., “Combustion Length of Enclosed Turbulent Jet Flames,” *Fourth Symposium (International) on Combustion*, Williams & Wilkins, Baltimore, p. 789, 1953.
- [18] Ricou, F. P., Spalding, D. B., “Measurements of Entrainment by Axisymmetrical Turbulent Jets,” *Journal of Fluid Mechanics*, 11: 31-32 (1963).

- [19] Becker, H. A., Liang, P., "Visible Length of Vertical Free Turbulent Diffusion Flames," *Combustion and Flames*, 32: 115-137 (1978).
- [20] Delichatsios, M. A., Markstein, G. H., Orloff, L., deRis, J., "Turbulent Flow Characterization and Radiation from Gaseous Fuel Jets," Final Report, GRI 88/0100, Gas Research Institute, 1988.
- [21] Turns, S. R., Myhr, F. H., "Oxides and Nitrogen Emissions from Turbulent Jet Flames: Part I-Fuel Effects and Flame Radiation," *Combustion and Flame*, 87: 319-335 (1991).
- [22] Siegel, R., Howell, J. R., *Thermal Radiation Heat Transfer*, Second Ed., McGraw-Hill, New York, 1981.
- [23] Gardiner, W. C., Jr., *Rates and Mechanisms of Chemical Reactions*, Benjamin, Menlo Park, CA, 1972.
- [24] Simons, G. A., "The Role of Pore Structure in Coal Pyrolysis and Gasification," *Progress in Energy and Combustion Science*, 9: 269-290 (1983).
- [25] Mon, E., Amundson, N. R., "Diffusion and Reaction in a Stagnant Boundary Layer about a Carbon Particle. 2. An Extension," *Industrial Engineering Fundamentals*, 17(4): 313-321 (1978).
- [26] Sivakumar Kulasekaran, Temi M. Linjewile, Pradeep K. Agarwal, "Mathematical modeling of fluidized bed combustion: 3. Simultaneous combustion of char and combustible gases", *Fuel*, 78: 403-417, 1999.
- [27] David J. Bayless, Alan R. Schroeder, Michael G. Olsen, David C. Johnson, James E. Peters, Herman Krier, Richard O. Buckius, "The effects of cofiring natural gas and coal on sulfur retention in ash", *Combustion and Flame*, 106:231-240, 1996.
- [28] Kee, R.J., Rupley, F.M., and Miller, J.A. 1987. 'The Chemkin thermodynamic data base', Sandia Report SAND87-8215B, Unlimited Release.
- [29] Bird, R.B., Stewart, W.E., and Lightfoot, E.N. 1966. "Transport Phenomena". John Wiley & Sons, New York.

- [30] Mathur, S., Tondon, P.K., and Saxena, S.C. 1967. 'Thermal conductivity of binary, ternary and quaternary mixtures of rare gases', *Mol. Phys.*, 12, p. 569.
- [31] Kee, R.J., Dixon-Lewis, G., Warnatz, J., Coltrin, M.E., and Miller, J.A. 1992. 'A Fortran computer code package for evaluation of gas-phase multicomponent transport properties', Sandia Report SAND86-8246.
- [32] Warsi, Z.V.A. 1981. 'Conservation form of the Navier-Stokes equations in general nonsteady coordinates', *AIAA Journal*, 19, pp. 240-242.
- [33] Hinze, P.O. 1975. "Turbulence". 2nd Edition, McGraw-Hill, New York.
- [34] Jones, W.P. 1980. 'Prediction methods for turbulent flames', in "Prediction Methods for Turbulent Flow" (Ed. W. Kollman). Hemisphere, Washington, D.C., pp. 1-45.
- [35] Libby, P.A., and Williams, F.A. 1980. "Turbulent Reacting Flows". Springer Verlag, Berlin.
- [36] Launder, B.E., and Spalding, D.B. 1974. 'The numerical computation of turbulent flows', *Comp. Meth. in Appl. Mech. and Eng.*, 3, pp. 269-289.
- [37] Rodi, W. 1979. 'Influence of buoyancy and rotation on equations for the turbulent length scale', *Proc. 2nd Symp. on Turbulent Shear Flows*.
- [38] El Tahry, S.H. 1983. 'k- ϵ equation for compressible reciprocating engine flows', *AIAA, J. Energy*, 7(4), pp. 345-353.
- [39] Schlichting, H. 1968. "Boundary Layer Theory". 6th Edition, McGraw-Hill, New York.
- [40] Jayatilika, C.L. 1969. 'The influence of Prandtl number and surface roughness on the resistance of the laminar sub-layer to momentum and heat transfer', *Progress in Heat and Mass Transfer*, 1, pp. 193-330.
- [41] Bracco, F.V. 1985. 'Modeling of engine sprays', SAE Technical Paper Series 850394.
- [42] Milne-Thompson, L.M. 1968. "Theoretical Hydrodynamics". 5th edition, McMillan & Co., New York.

- [43] El Wakil, M.M., Ueyhara, O.A., and Myers, P.S. 1954. 'A theoretical investigation of the heating-up period of injected fuel droplets vaporizing in air', NACA Technical Note 3179.
- [44] Ranz, W.E., and Marshall, W.R. 1952. 'Evaporation from drops—Parts I and II', Chem. Eng. Prog., 48(3), p. 141.
- [45] Gosman, A.D., and Ioannides, S.I. 1983. 'Aspects of computer simulation of liquid-fuelled combustors', AIAA, J. Energy, 7(6), pp. 482–490.
- [46] Magnussen, B.F., and Hjertager, B.W. 1981. 'On the structure of turbulence and a generalised eddy dissipation concept for chemical reaction in turbulent flow', 19th AIAA Aerospace Meeting, St. Louis, USA.
- [47] Migdal, D., and Agosta, V.D. 1967. 'A source flow model for continuum gas-particle flow', Trans. ASME, J. Appl. Mech., 34, pp. 860-865.
- [48] Badzioch, S., and Hawksley, P.G.W. 1970. 'Kinetics of thermal decomposition of pulverized coal particles', Ind. Eng. Chem. Process Des. Develop., 9(4), pp. 521-530.
- [49] Therssen, E., Gourichon, L., and Delfosse, L. 1995. 'Devolatilization of Coal Particles in a Flat Flame—Experimental and Modeling Study', Combustion and Flame, 103, pp. 115-128.
- [50] Niksa, S. 1995. 'Predicting the devolatilization behavior of any coal from its ultimate analysis', Combust. Flame, 100, pp. 384-394.
- [51] Field, M.A., Gill, D.W., Morgan, B.B., and Hawksley, P.G.W. 1967. 'Combustion of pulverised coal', The British Coal Utilization Research Association, Leatherhead, England.
- [52] Murphy, J.J., Shaddix, C.R. 2006. 'Combustion kinetics of coal chars in oxygen-enriched environments', Combust. Flame, 144, pp. 710-729.
- [53] Field, M.A., Gill, D.W., Morgan, B.B., and Hawksley, P.G.W. 1967. 'Combustion of pulverised coal', The British Coal Utilization Research Association, Leatherhead, England.

- [54] Flower, W.L., Hanson, R.K., and Kruger, C.H. 1975. 'Kinetics of the reaction of nitric oxide with hydrogen', 15th Symp. (Int.) on Combustion, The Combustion Institute, pp. 823-832.
- [55] Monat, J.P., Hanson, R.K., and Kruger, C.H. 1979. 'Shock tube determination of the rate coefficient for the reaction $N_2 + O \rightarrow NO + O'$ ' 17th Symp. (Int.) on Combustion, The Combustion Institute, p. 543-552.
- [56] Baulch, D.L., Drysdall, D.D., Horne, D.G., and Lloyd, A.C. 1973. "Evaluated Kinetic Data for High Temperature Reactions". Butterworth.
- [57] Westenberg, A.A. 1971. 'Kinetics of NO and CO in lean, premixed hydrocarbon-air flames', *Combust. Sci. and Tech.*, 4, pp. 59-64.
- [58] Hand, G., Missaghi, M., Pourkashanian, M., and Williams, A. 1989. 'Experimental studies and computer modelling of nitrogen oxides in a cylindrical natural gas fired furnace', 9th Members Conf., International Flame Research Foundation, Noordwijkerhout, The Netherlands.
- [59] De Soete, G.G. 1975. 'Overall reaction rates of NO and N₂ formation from fuel nitrogen', 15th Symp. (Int.) on Combustion, The Combustion Institute, pp. 1093-1102.
- [60] Peters, A.A.F. and Weber, R. 1995. 'Mathematical Modeling of a 2.25 MW, Swirling natural Gas Flame - Part 1', *Combust. Sci. and Tech.*, 110-111, pp. 67-101.
- [61] De Soete, G.G. 1990. 'Heterogeneous N₂O and NO formation from bound nitrogen atoms during coal char combustion', 23rd Symp. (Int.) on Combustion, The Combustion Institute, pp. 1257-1264.
- [62] Nelson, P. F., Nancarrow, P. C., Bus, J., Prokopiuk, A. 2002. 'Fractional conversion of char N to no in an entrained flow reactor', *Proceedings of the Combustion Institute*, 29 (2), pp. 2267-2274.
- [63] Lockwood, F.C., and Shah, N.G. 1981. 'A new radiation solution method for incorporation in general combustion prediction procedures', 18th Symp. (Int.) on Combustion, The Combustion Institute.

- [64] Kim, C., and Lior, N. 1995. 'Easily computable good approximations for spectral radiative properties of particle-gas components and mixture in pulverized coal combustors', *Fuel*, 12, pp. 1891-1902.
- [65] Gosman, A.D., Pun, W.M., Runchal, A.K., Spalding, D.B., and Wolfstein, M. 1969. "Heat and Mass Transfer in Recirculating Flows". Academic Press, London.
- [66] Patankar, S.V. 1980. "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow". Hemisphere, Washington, D.C.
- [67] Warsi, Z.V.A. 1981. 'Conservation form of the Navier-Stokes equations in general nonsteady coordinates', *AIAA Journal*, 19, pp. 240–242.
- [68] Lai, K.Y.M. 1983. "Numerical Analysis of Fluid Transport Phenomena". PhD Thesis, University of London.
- [69] Leschziner, M.A. 1980. 'Practical evaluation of three finite difference schemes for the computation of steady-state recirculating flows', *Comp. Meth. in Appl. Mech. and Eng.*, 23, pp. 293–312.
- [70] Hirsch, C. 1960. "Numerical Computation of Internal and External Flows-Vol. II: Computational Methods for Inviscid and Viscous Flows". John Wiley & Sons, New York.
- [71] Modest, M.F. 1993. "Radiative Heat Transfer." McGraw-Hill, New York.
- [72] Siegel, R., and Howell, J. 1992. "Thermal Radiation Heat Transfer". Hemisphere Publishing, Washington.
- [73] Patankar, S.V., and Spalding, D.B. 1972. 'A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows', *Int. J. Heat Mass Transfer*, 15, pp. 1787-1806.
- [74] Schmidt, D.P., Rutland, C.J., and Corradini, M.L. 1997. 'A numerical study of cavitating flow through various nozzle shapes', *SAE Technical Paper Series 971597*, pp. 117-126.
- [75] Drennan, S. 1999. 'First Co-Firing Gas Burner, Optimized on Computer, Reduces Particulate Emissions 24%, Saves \$0.13/MMBtu', *Journal article by fluent software users.*

- [76] Maloney, K., Maloney, S., Maloney, L.E., Maloney, J., Xie, A. 2007. 'Computational Fluid Dynamic Modeling and Field Results for Co-Firing Gas over Coal in a Stoker Boiler', International Conference on Power Engineering-2007, October 23-27, 2007, Hangzhou, China.
- [77] Heikkinen, J. M., Venneker, B.C.H., di Nola, G., de Jong, W., Spliethoff, H. 2008. 'CFD simulation and experimental validation of co-combustion of chicken litter and MBM with pulverized coal in a flow reactor', reactor, Fuel Processing Technology (2008), doi:10.1016/j.fuproc.2008.02.004.

