

## Simulación numérica de la combustión de carbón pulverizado

A. BERMÚDEZ<sup>1</sup>, J.L. FERRÍN<sup>1</sup>, A. LIÑÁN<sup>2</sup>, L. SAAVEDRA<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Dpto. Matemática Aplicada, Universidad de Santiago de Compostela, Apto. 15782, Santiago de Compostela. E-mails: mabermud@usc.es, maferrin@us.es, lauras@usc.es.*

<sup>2</sup> *E.T.S. Ingenieros Aeronáuticos, Universidad Politécnica de Madrid, Apto. 28040, Madrid. E-mail: linan@tupi.dmt.upm.es.*

**Palabras clave:** carbón pulverizado, elementos finitos

### Resumen

El objetivo de esta comunicación es presentar un modelo matemático de la combustión de carbón pulverizado y el correspondiente algoritmo para su resolución.

El modelo que se ha desarrollado consta de dos fases fuertemente acopladas: la fase gaseosa, para la que se utilizará una descripción Euleriana, que proporciona las distribuciones de temperatura y de las concentraciones de las distintas especies en el gas y la fase sólida, para la que se utiliza una descripción Lagrangiana, que trata los procesos simultáneos de evaporación de la humedad y la devolatilización, junto con las reacciones heterogéneas de gasificación del “char”. El acoplamiento de estas fases viene determinado por el hecho de que las partículas de carbón son fuentes y sumideros de masa y energía, mientras que la fase gaseosa determina el movimiento y la atmósfera en la que se produce la combustión de las partículas.

Ese modelo de combustión se va a incorporar al programa SC3D (Simulación de Calderas en 3 Dimensiones). Se trata de un programa de CFD (Mecánica de Fluidos Computacional) adaptado para la simulación de la zona del hogar de una caldera de carbón pulverizado utilizada en una Central Térmica.

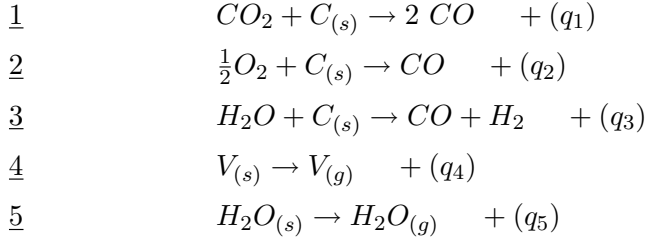
Para la resolución de las ecuaciones en derivadas parciales del modelo de fase gaseosa se utiliza un método de elementos finitos combinado con el método de las características. Los sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias y algebraicas del modelo de fase sólida se resuelven utilizando los métodos de Euler implícito o explícito y el método de Newton discretizado.

## 1. Modelo de combustión

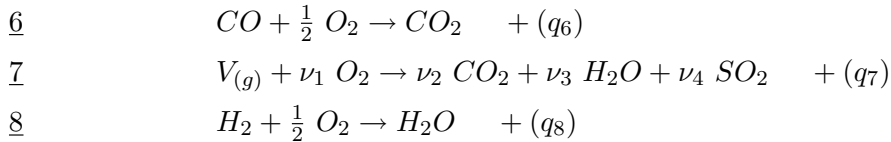
Los procesos físico-químicos a los que está sometida una partícula de carbón durante su combustión son de una gran complejidad. Ello obliga a desarrollar modelos simplificados

para la generación de volátiles, la gasificación del “char” y la posterior combustión de las especies gaseosas liberadas.

El modelo cinético simplificado que consideramos consiste en los siguientes procesos físico-químicos en el interior de las partículas porosas, expresados por las reacciones heterogéneas:



y por las siguientes reacciones de oxidación en fase gaseosa:



donde el índice  $s$  denota la fase sólida y  $g$  la fase gaseosa, mientras que  $q_i$  es el calor liberado en la reacción  $i$  por unidad de masa gasificada. Por simplicidad, se considerarán los volátiles como moléculas únicas,  $V_{(g)} = C_{\kappa_1}H_{\kappa_2}O_{\kappa_3}S_{\kappa_4}$ , de masa molecular  $M_{vol}$ , donde los coeficientes  $\kappa_1, \kappa_2, \kappa_3$  y  $\kappa_4$  se obtienen del análisis elemental del carbón.

Las tasas de gasificación,  $w_i, i = 1, \dots, 5$  para las reacciones heterogéneas se modelan usando leyes de Arrhenius globales y la tasa de gasificación del char,  $w_C$ , por unidad de volumen,  $w_C = w_1 + w_2 + w_3$ , queda determinada por las velocidades globales de las reacciones 1, 2 y 3.

Para la derivación de este modelo se ha generalizado el análisis de Burke-Schumann para tener en cuenta la competición por el oxígeno entre las especies combustibles. Así, se supone que las reacciones 6-8 o no ocurren o lo hacen infinitamente rápidas en una llama delgada (llama de difusión) que tiene lugar en el interior de la partícula, en el gas en la vecindad de la partícula, o en el gas lejos de la partícula. El tipo de combustión que ocurra depende de la temperatura y de las concentraciones locales de  $O_2$ ,  $CO$ , volátiles y  $H_2$  en el entorno gaseoso y será el propio modelo el que decidirá en que situación nos encontramos.

Entonces el modelo da la posibilidad de que existan zonas en las que se acabe el oxígeno, que denotaremos por  $\Omega_F$ , a diferencia de las zonas donde sí hay oxígeno que denotamos por  $\Omega_O$ . Cuando la partícula llega a  $\Omega_O$ , los volátiles,  $CO$  y  $H_2$  que se han producido por las reacciones de gasificación se queman completamente, en una llama de difusión, dentro de la partícula o fuera en el entorno de la misma. En este caso las partículas no representan fuentes de  $CO$ , volátiles o  $H_2$  para la fase gaseosa. Cuando la partícula está en  $\Omega_F$ , al no haber oxígeno, las reacciones homogéneas 6, 7 y 8 no tienen lugar. Entonces los volátiles,  $CO$  y  $H_2$  se unen a la fase gaseosa sin quemarse. Como suponemos que las reacciones homogéneas son infinitamente rápidas, estas especies se quemarán cuando encuentren oxígeno en una llama de difusión, ondulada por la turbulencia; es la superficie  $\Gamma_F$  en la figura 1, que separa la región  $\Omega_F$ , sin oxígeno, de la región  $\Omega_O$  donde los volátiles,  $H_2$  y  $CO$  se encuentran sólo en el entorno de las partículas de carbón dentro de la llama delgada que las rodea.

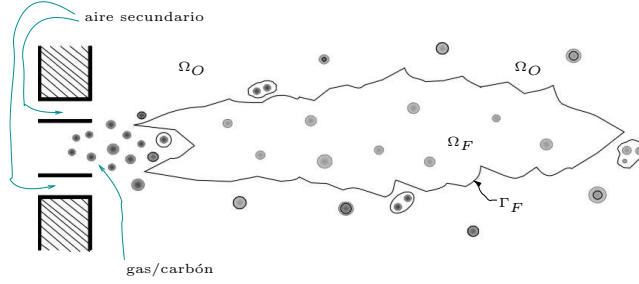


Figura 1: Llamas de difusión.

### 1.1. Modelo para la fase gaseosa

El modelo de combustión de partículas de carbón que presentamos está acoplado a una fase gaseosa de dos formas. Por un lado, el modelo de la fase gaseosa establece la temperatura, velocidad, presión y concentraciones que determinan la atmósfera en la que se mueven y queman las partículas. Por otro lado, las partículas debido a su combustión aparecen como fuentes o sumideros de masa y energía.

Sea  $\mathcal{L}_g$  el operador diferencial definido por  $\mathcal{L}_g(u) = \frac{\partial(\rho_g u)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g u \mathbf{v}_g) - \nabla \cdot (\rho_g \mathcal{D} \nabla u)$ , donde  $\mathcal{D}$  es el coeficiente de difusión de la fase gaseosa que, por simplicidad, se considerará igual para todas las especies e igual a la difusividad térmica. Entonces, las ecuaciones de conservación de la masa, de la masa de cada una de las especies gaseosas y de la energía, conocidas las fuentes debidas a las partículas, cuyas expresiones se pueden ver en Bermúdez *et al* [2], incluyen los términos  $w_6$ ,  $w_7$  y  $w_8$  debidos a las reacciones químicas 6, 7 y 8, que tienen lugar en la fase gaseosa.

Al considerar la hipótesis de Burke-Schuman, lo cual implica la no coexistencia de  $CO$ , volátiles y  $H_2$  con  $O_2$ , se pueden considerar los siguientes escalares conservados o combinaciones lineales de Shvab-Zeldovich:

$$\beta_1^g = Y_{O_2}^g - \frac{4}{7} Y_{CO}^g - \frac{32\nu_1}{M_{vol}} Y_V^g - 8Y_{H_2}^g, \quad (1)$$

$$\beta_2^g = Y_{CO_2}^g + \frac{11}{7} Y_{CO}^g + \frac{44\nu_2}{M_{vol}} Y_V^g, \quad (2)$$

$$\beta_3^g = Y_{H_2O}^g + \frac{18\nu_3}{M_{vol}} Y_V^g + 9Y_{H_2}^g, \quad (3)$$

$$\beta_4^g = Y_{SO_2}^g + \frac{64\nu_4}{M_{vol}} Y_V^g, \quad (4)$$

$$H^g = h_T^g + q_6 Y_{CO}^g + q_7 Y_V^g + q_8 Y_{H_2}^g, \quad (5)$$

y de esta forma se pueden eliminar esos términos de las reacciones gaseosas, obteniéndose

$$\mathcal{L}_g(\beta_1^g) = f_{O_2}^m - \frac{4}{7} f_{CO}^m - \frac{32\nu_1}{M_{vol}} f_V^m - 8f_{H_2}^m, \quad (6)$$

$$\mathcal{L}_g(\beta_2^g) = f_{CO_2}^m + \frac{11}{7} f_{CO}^m + \frac{44\nu_2}{M_{vol}} f_V^m, \quad (7)$$

$$\mathcal{L}_g(\beta_3^g) = f_{H_2O}^m + \frac{18\nu_3}{M_{vol}} f_V^m + 9f_{H_2}^m, \quad (8)$$

$$\mathcal{L}_g(\beta_4^g) = f_{SO_2}^m + \frac{64\nu_4}{M_{vol}} f_V^m, \quad (9)$$

$$\mathcal{L}_g(H^g) = f^e + q_6 f_{CO}^m + q_7 f_V^m + q_8 f_{H_2}^m - \nabla \cdot \mathbf{q}_{rg}. \quad (10)$$

Así pues, gracias a la hipótesis de Burke-Schuman, además de resolver menos ecuaciones y más sencillas, el propio modelo dice en qué región nos encontramos. Así, si  $X_1^g > 0$  habrá oxígeno y nos encontraremos en el dominio  $\Omega_O$  y si  $X_1^g < 0$  no habrá oxígeno y estaremos en la región  $\Omega_F$ . Las reacciones 6, 7 y 8 tienen lugar en una llama infinitamente delgada situada donde  $X_1^g = 0$ , con  $w_6$ ,  $w_7$  y  $w_8$  actuando como deltas de Dirac.

## 1.2. Modelo para la combustión de una partícula

El modelo de gasificación del char que proponemos es válido para partículas con un alto contenido en cenizas. Además, suponemos que la fracción de cenizas que tienen las partículas de carbón no se pierde durante la devolatilización ni la oxidación del char, es decir, no se produce fragmentación durante su combustión. De esta forma, consideraremos que cada partícula mantiene constante su radio y su densidad de cenizas,  $\rho_{ash}$ , aunque la densidad de  $H_2O$ , volátiles y char disminuye con el tiempo.

Para llevar a cabo un tratamiento más simple de los efectos de las reacciones de gasificación del char 1, 2 y 3, tendremos en cuenta que las energías de activación de estas reacciones son grandes. Los números de Damköhler, que pueden ser definidos para estas reacciones como  $Da_i = (a^2/\mathcal{D}_e)B_i e^{-E_i/\mathcal{R}T_p}$ ,  $i = 1, 2, 3$ , determinarán la etapa de la combustión en la que nos encontramos:

**Primera etapa.** Los números de Damköhler son menores que 1 y se pueden considerar las reacciones 1, 2 y 3 congeladas, por lo tanto debemos resolver el sistema:

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_V}{dt} &= -\frac{3\rho_g\mathcal{D}}{a^2}\lambda_4, & \lambda_4 &= \frac{a^2}{3\rho_g\mathcal{D}}B_4e^{-E_4/\mathcal{R}T_p}\rho_V, \\ \frac{d\rho_{H_2O}}{dt} &= -\frac{3\rho_g\mathcal{D}}{a^2}\lambda_5, & \lambda_5 &= \frac{a^2}{3\rho_g\mathcal{D}}B_5e^{-E_5/\mathcal{R}T_p}\rho_{H_2O}. \end{aligned} \quad (11)$$

**Segunda etapa.** Los números de Damköhler son mayores que 1 y se consideran las reacciones 1, 2 y 3 infinitamente rápidas. En esta etapa se pueden dar varias situaciones que determinan las ecuaciones para  $\lambda_1$  y  $\lambda_3$ .

1. Cuando la partícula está en la región  $\Omega_O$  y además  $Y_{O_2}^s$  es mayor que cero (es decir,  $r_c < r_f \leq a$ ) debemos resolver

$$\begin{aligned} e^{\lambda\frac{\mathcal{D}_e}{a}(a/r_f-1)+\lambda} &= \varphi + 1, \\ \frac{11}{3}\frac{\lambda_1}{\lambda} - \left[ \frac{22}{3}\frac{\lambda_1}{\lambda} + \frac{11}{3}\frac{\lambda_3}{\lambda} + \frac{44\nu_2}{M_{vol}}\frac{\lambda_4}{\lambda} \right] e^{\lambda\frac{\mathcal{D}_e}{a}(a/r_f-a/r_c)} & \\ &= \left\{ Y_{CO_2}^g - \frac{11}{3}\left(\frac{\lambda_1}{\lambda} + \frac{\lambda_3}{\lambda}\right) - \frac{44\nu_2}{M_{vol}}\frac{\lambda_4}{\lambda} \right\} e^{\lambda\frac{\mathcal{D}_e}{a}(1-a/r_c)-\lambda}, \\ \frac{3}{2}\frac{\lambda_3}{\lambda} - \frac{\lambda_5}{\lambda} - \left( \frac{3}{2}\frac{\lambda_3}{\lambda} + \frac{18\nu_3}{M_{vol}}\frac{\lambda_4}{\lambda} \right) e^{\lambda\frac{\mathcal{D}_e}{a}(a/r_f-a/r_c)} & \\ &= \left\{ Y_{H_2O}^g - \frac{\lambda_5}{\lambda} - \frac{18\nu_3}{M_{vol}}\frac{\lambda_4}{\lambda} \right\} e^{\lambda\frac{\mathcal{D}_e}{a}(1-a/r_c)-\lambda}, \end{aligned} \quad (12)$$

$$\frac{\rho_C^0}{\rho_g a \mathcal{D}} r_c^2 \frac{dr_c}{dt} = -(\lambda_1 + \lambda_3),$$

con  $\varphi = e^{\lambda a/r_f} - 1$ . La ecuación para la temperatura en este caso viene dada por

$$\begin{aligned} \frac{4}{3}\pi a^3 \rho_p c_s \frac{dT_p}{dt} &= 4\pi a^2 (q_p'' + q_r'') + 4\pi \rho_g a \mathcal{D} (q_1 \lambda_1 + q_3 \lambda_3 + q_4 \lambda_4 + q_5 \lambda_5 \\ &+ \frac{14}{3} q_6 \lambda_1 + \frac{7}{3} q_6 \lambda_3 + q_7 \lambda_4 + \frac{1}{6} q_8 \lambda_3). \end{aligned} \quad (13)$$

2. Si la partícula está en  $\Omega_O$  y además  $Y_{O_2}^s = 0$  (es decir,  $r_f > a$ ) debemos resolver

$$\begin{aligned} \frac{11}{3} \frac{\lambda_1}{\lambda} &= \left\{ Y_{CO_2}^g + \frac{11}{3} \frac{\lambda_1}{\lambda} + \left( \frac{22}{3} \frac{\lambda_1}{\lambda} + \frac{11}{3} \frac{\lambda_3}{\lambda} + \frac{44\nu_2}{M_{vol}} \frac{\lambda_4}{\lambda} \right) \varphi \right\} e^{\lambda \frac{\mathcal{D}}{\mathcal{D}_e} (1-a/r_c) - \lambda}, \\ \frac{3}{2} \frac{\lambda_3}{\lambda} - \frac{\lambda_5}{\lambda} &= \left\{ Y_{H_2O}^g + \frac{3}{2} \frac{\lambda_3}{\lambda} - \frac{\lambda_5}{\lambda} + \left( \frac{3}{2} \frac{\lambda_3}{\lambda} + \frac{18\nu_3}{M_{vol}} \frac{\lambda_4}{\lambda} \right) \varphi \right\} e^{\lambda \frac{\mathcal{D}}{\mathcal{D}_e} (1-a/r_c) - \lambda}, \quad (14) \\ \frac{\rho_C^0}{\rho_g a \mathcal{D}} r_c^2 \frac{dr_c}{dt} &= -(\lambda_1 + \lambda_3). \end{aligned}$$

Es este caso para obtener la temperatura debemos resolver

$$\begin{aligned} \frac{4}{3}\pi a^3 \rho_p c_s \frac{dT_p}{dt} &= 4\pi a^2 (q_p'' + q_r'') + 4\pi \rho_g a \mathcal{D} (q_1 \lambda_1 + q_3 \lambda_3 + q_4 \lambda_4 + q_5 \lambda_5 \\ &+ \frac{14}{3} q_6 \lambda_1 + \frac{7}{3} q_6 \lambda_3 + q_7 \lambda_4 + \frac{1}{6} q_8 \lambda_3). \end{aligned} \quad (15)$$

3. Si la partícula está en  $\Omega_O$  y el oxígeno llega a la superficie del “core” de la partícula, debido a que las reacciones en fase gaseosa están congeladas,

$$\begin{aligned} \frac{11}{3} \frac{\lambda_1}{\lambda} &= \left\{ Y_{CO_2}^g + \frac{11}{3} \frac{\lambda_1}{\lambda} \right\} e^{\lambda \frac{\mathcal{D}}{\mathcal{D}_e} (1-a/r_c) - \lambda}, \\ \frac{4}{3} \frac{\lambda_2}{\lambda} &= \left\{ Y_{O_2}^g + \frac{4}{3} \frac{\lambda_2}{\lambda} \right\} e^{\lambda \frac{\mathcal{D}}{\mathcal{D}_e} (1-a/r_c) - \lambda}, \\ \frac{3}{2} \frac{\lambda_3}{\lambda} - \frac{\lambda_5}{\lambda} &= \left\{ Y_{H_2O}^g + \frac{3}{2} \frac{\lambda_3}{\lambda} - \frac{\lambda_5}{\lambda} \right\} e^{\lambda \frac{\mathcal{D}}{\mathcal{D}_e} (1-a/r_c) - \lambda}, \quad (16) \\ \frac{\rho_C^0}{\rho_g} r_c^2 \frac{dr_c}{dt} &= -(\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3) \end{aligned}$$

Para la temperatura tenemos

$$\begin{aligned} \frac{4}{3}\pi a^3 \rho_p c_s \frac{dT_p}{dt} &= 4\pi a^2 (q_p'' + q_r'') + 4\pi \rho_g a \mathcal{D} (q_1 \lambda_1 + q_2 \lambda_2 + q_3 \lambda_3 + q_4 \lambda_4 + q_5 \lambda_5 \\ &+ \frac{14}{3} q_6 \lambda_1 + \frac{7}{3} q_6 \lambda_3 + q_7 \lambda_4 + \frac{1}{6} q_8 \lambda_3). \end{aligned} \quad (17)$$

4. Finalmente, cuando la partícula está en la región  $\Omega_F$ , debemos resolver

$$\begin{aligned} \frac{11}{3} \frac{\lambda_1}{\lambda} &= \left\{ Y_{CO_2}^g + \frac{11}{3} \frac{\lambda_1}{\lambda} \right\} e^{\lambda \frac{\mathcal{D}}{\mathcal{D}_e} (1-a/r_c) - \lambda}, \\ \frac{3}{2} \frac{\lambda_3}{\lambda} - \frac{\lambda_5}{\lambda} &= \left\{ Y_{H_2O}^g + \frac{3}{2} \frac{\lambda_3}{\lambda} - \frac{\lambda_5}{\lambda} \right\} e^{\lambda \frac{\mathcal{D}}{\mathcal{D}_e} (1-a/r_c) - \lambda}, \quad (18) \\ \frac{\rho_C^0}{\rho_g a \mathcal{D}} r_c^2 \frac{dr_c}{dt} &= -(\lambda_1 + \lambda_3) \end{aligned}$$

junto con la ecuación

$$\frac{4}{3}\pi a^3 \rho_p c_s \frac{dT_p}{dt} = 4\pi a^2 (q_p'' + q_r'') + 4\pi \rho_g a \mathcal{D} (q_1 \lambda_1 + q_3 \lambda_3 + q_4 \lambda_4 + q_5 \lambda_5). \quad (19)$$

Por último, las fuentes homogeneizadas en la fase gaseosa por unidad de volumen y tiempo, en un punto  $x$  de la caldera, se obtienen a partir de las fuentes individuales de cada partícula mediante la expresión

$$f^\alpha(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{N_e} \sum_{i=1}^{N_p} \tilde{q}_j \frac{p_{ij}}{100} \int_0^{t_f^{ij}} F_{ij}^\alpha(t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p^{ij}(t)) dt \quad (20)$$

donde  $F_{ij}^\alpha(t)$  es la contribución de una partícula de tipo  $i$  introducida por la entrada  $j$ , en el instante  $t$  (cuyas expresiones pueden verse en Bermúdez *et al* [2]),  $\mathbf{x}_p^{ij}(t)$  denota la posición ocupada por esa partícula en el instante  $t$ ,  $\delta(\mathbf{x})$  es la medida de Dirac en el punto 0,  $t_f^{ij}$  es el tiempo que necesita la partícula para quemarse completamente o abandonar la caldera,  $\tilde{q}_j$  es el caudal másico de carbón que entra por  $j$ ,  $p_{ij}$  es el porcentaje de partículas  $i$  que entran por  $j$ , y  $N_e$  y  $N_p$  son el número de entradas a la caldera y de partículas, respectivamente.

## 2. Resolución numérica

### 2.1. Algoritmo y métodos numéricos empleados

En esta sección se describe el algoritmo empleado para la resolución numérica de las ecuaciones del modelo descrito anteriormente. Mientras que para las ecuaciones de la fase gaseosa se utiliza una descripción Euleriana, para la fase sólida se sigue una descripción Lagrangiana. El algoritmo desarrollado sigue los siguientes pasos:

1. Se resuelven las ecuaciones (6)-(10) del modelo de fase gaseosa utilizando un método de elementos finitos P2 combinado con el método de las características, de orden 2, para el tratamiento del término convectivo. Dependiendo de si se está en una zona con  $O_2$  o sin él, el cálculo de la temperatura y de las fracciones másicas de las especies que componen la mezcla gaseosa se realiza de la siguiente forma:

a) En la región  $\Omega_F$ ,  $w_6 = w_7 = w_8 = 0$  y, por tanto:

$$Y_{CO_2}^g = X_2^g - \frac{11}{7} Y_{CO}^g - \frac{44\nu_2}{M_{vol}} Y_V^g, \quad (21)$$

$$Y_{H_2O}^g = X_3^g - \frac{18\nu_3}{M_{vol}} Y_V^g - 9Y_{H_2}^g, \quad (22)$$

$$Y_{SO_2}^g = X_4^g - \frac{64\nu_4}{M_{vol}} Y_V^g. \quad (23)$$

Además, para calcular  $Y_{CO}^g$ ,  $Y_V^g$  y  $Y_{H_2}^g$ , la ecuación (6) para  $X_1^g$  tiene que ser complementada con dos ecuaciones de conservación para  $Y_{CO}^g$ ,  $Y_V^g$  o  $Y_{H_2}^g$ . Por ejemplo, con las ecuaciones  $\mathcal{L}_g(Y_V^g) = f_V^m$  y  $\mathcal{L}_g(Y_{H_2}^g) = f_{H_2}^m$  en  $\Omega_F$ , que deben ser integradas usando las condiciones de contorno  $Y_V^g = 0$  y  $Y_{H_2}^g = 0$  en la superficie  $\Gamma_F$  dada por  $X_1^g = 0$ , que separa las regiones  $\Omega_O$  y  $\Omega_F$ .

- b) En la región  $\Omega_O$  se tiene que  $Y_{CO}^g = Y_V^g = Y_{H_2}^g = 0$  y, además,  $Y_{O_2}^g = X_1^g$ ,  $Y_{CO_2}^g = X_2^g$ ,  $Y_{H_2O}^g = X_3^g$ ,  $Y_{SO_2}^g = X_4^g$  y  $h_T^g = H^g$ .
2. Se calculan los datos de la fase gaseosa que determinan la concentración de  $O_2$ ,  $H_2O$  y  $CO_2$  en el entorno de la partícula y, utilizando la ecuación del movimiento de la partícula, se calcula su posición.
  3. Se resuelven las ecuaciones (11) utilizando un método de diferencias finitas de un paso (Euler implícito), obteniéndose los valores de  $\lambda_4^{n+1}$  y  $\lambda_5^{n+1}$ .
  4. Una vez calculados los valores de  $\rho_V^{n+1}$ ,  $\rho_{H_2O}^{n+1}$ ,  $\lambda_4^{n+1}$  y  $\lambda_5^{n+1}$ , si  $r_c^n > 0$  (lo que equivale a decir que todavía hay carbono fijo en la partícula) hay dos posibilidades:
    - a) Si los números de Damköhler  $Da_i$ ,  $i = 1, 2, 3$ , son menores que 1 se considera que las reacciones 1, 2 y 3 no tienen lugar y, por lo tanto  $\lambda_1^{n+1} = \lambda_2^{n+1} = \lambda_3^{n+1} = 0$ .
    - b) Si los números de Damköhler  $Da_i$ ,  $i = 1, 2, 3$  son mayores que 1, las reacciones 1, 2 y 3 se consideran infinitamente rápidas y, pueden ocurrir dos casos dependiendo de la atmósfera en la que se encuentra la partícula:
      - Si  $Y_{O_2}^g = 0$  la partícula está en la región  $\Omega_F$  y se resuelve el sistema (12).
      - Si  $Y_{O_2}^g \neq 0$  la partícula está en la región  $\Omega_O$ . Se resuelve en primer lugar el sistema (14) correspondiente a la situación en la que la llama está fuera de la partícula ( $r_f > a$ ). Si al resolver este sistema resulta que  $r_f \leq a$  es que nos encontramos en la situación en la que la llama está dentro de la partícula y se resolvería el sistema (18), comprobando que, efectivamente  $r_f \leq a$  (y por tanto la consistencia en el modelo).

Para resolver cualquiera de estos tres sistemas se utiliza el mismo método. En primer lugar discretizamos la ecuación que determina la evolución de  $r_c$  utilizando el método de Euler explícito con la condición inicial  $r_c^0 = a$ . En segundo lugar se utiliza el método de Newton discretizado para resolver el sistema de ecuaciones correspondiente, que nos proporciona  $\lambda_1^{n+1}$  y  $\lambda_3^{n+1}$ .

Si  $r_c^n = 0$  se ha consumido todo el carbono fijo y, por lo tanto, no tendrían lugar las reacciones de gasificación del char, lo que implica que  $\lambda_1^{n+1} = \lambda_2^{n+1} = \lambda_3^{n+1} = r_c^{n+1} = r_f^{n+1} = 0$ .

5. Se resuelve la ecuación de la energía que corresponda. Para su discretización se utiliza el método de Euler implícito. Debido al término de calor por radiación, representado por la ley de Stefan-Boltzmann, queda una ecuación no lineal que se resuelve mediante el método de Newton.
6. Se calculan las fuentes para la fase gaseosa dadas por la expresión (20).

## 2.2. Algunos resultados obtenidos

Hemos aplicado la resolución del modelo de combustión a la simulación de una caldera de carbón pulverizado de una Central Térmica (ver Saavedra [5]).

En primer lugar mostraremos algunos resultados obtenidos para una partícula de 500 micras que entra en la caldera (Figura 2). A continuación se muestra en un plano de la

caldera la fuente de energía homogeneizada y se compara con la obtenida mediante Fluent (Figuras 3 y 4).

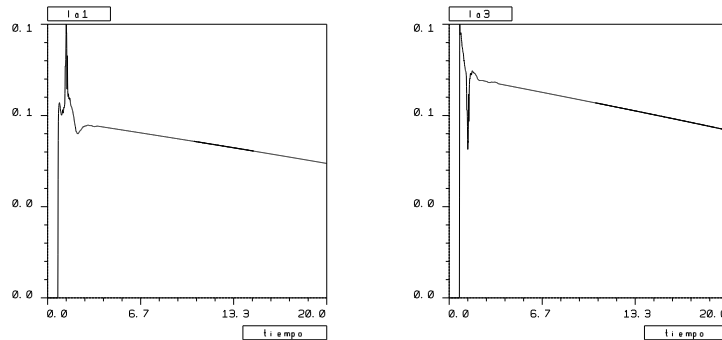


Figura 2: Velocidades adimensionales de gasificación del “char”

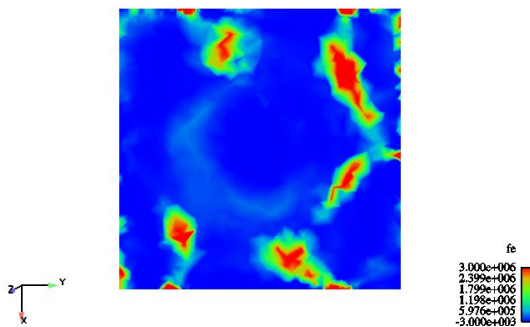


Figura 3: SC3D

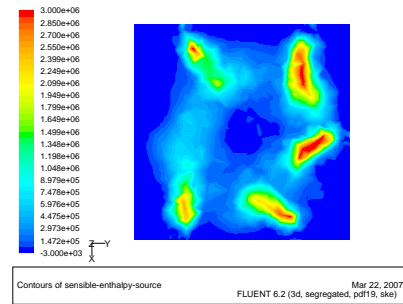


Figura 4: Fluent

## Agradecimientos

Parte de este trabajo ha sido financiado por el MEC a través del proyecto ENE2005-09190-C04-01/CON.

## Referencias

- [1] A. Bermúdez de Castro. *Continuum thermomechanics*. Birkhäuser, Verlag, Berlin, 2005.
- [2] A. Bermúdez de Castro, J. L. Ferrín y A. Liñán. The modelling of the generation of volatiles,  $H_2$  and  $CO$ , and their simultaneous diffusion controlled oxidation, in pulverised furnaces. Aceptado en *Combust. Theory Model*.
- [3] S.P. Burke and T.E.W. Schumann. Diffusion flames. *Ind. and Eng. Chemistry*, 20:998-1004 (1928).
- [4] J. L. Ferrín. Algunas contribuciones a la modelización matemática de procesos de combustión de carbón. Tesis. Universidade de Santiago de Compostela, 1999.
- [5] L. Saavedra. Simulación numérica de la combustión de partículas de carbón y simulación numérica en Mecánica de Fluidos. Trabajo de Investigación Tutelado. USC, 2006.