

UNIVERSIDAD DE ANTIOQUIA

Análisis teórico y experimental de la combustión sin llama con mezclas carbón-gas natural

Tesis presentada para la obtención del título de:
Doctor en Ingeniería Ambiental

Autor:

Juan Camilo Lezcano Benítez

Director de la tesis:

Andrés Amell Arrieta

Profesor titular del departamento de ingeniería mecánica
Investigador *Senior* en el Sistema Nacional de Ciencia y Tecnología

18 de agosto de 2017



Agradecimientos

Agradezco de forma entrañable a todas las personas que durante estos años han acompañado este proceso: familia, amigos y compañeros, quienes de una u otra forma han contribuido a que esta tesis llegara a una culminación exitosa.

Al profesor Andrés Amell Arrieta, asesor de este trabajo y líder del grupo de investigación Ciencia y Tecnología del Gas y Uso Eficiente y Racional de la Energía (GASURE).

Al profesor Alejandro Molina de la Universidad Nacional y a Ethan Hecht, por su gran colaboración en la consecución del software SKIPPY y en su posterior guía para manejar dicho programa.

Al departamento administrativo de Ciencia, Tecnología e Innovación “COLCIENCIAS” por la financiación de mi beca doctoral y a la red nacional de combustión UT-Incombustión, en cuyo programa de investigación se realizó el proyecto “Desarrollo y Evaluación de un Quemador de 5 kW que Opere en el Régimen de Combustión sin Llama y que Emplee Como Combustible Carbón o una Mezcla de Éste con Gas Natural”, del cual la presente tesis hace parte.

Al instituto de transferencia de calor y masa de la universidad RWTH Aachen, Alemania. En especial al Profesor Dr-ing Reinhold Kneer, al Dr-ing Oliver Hatzfeld, Martin Habermehl y Tim Gronarz.

A amigos y compañeros: Julián Obando, Alex García, Carlos Arrieta, Juan Pablo Gómez, Jennifer Laverde, Alexander Yepes, Arley Cardona y en general a todos los integrantes del grupo GASURE.

A mi familia, personas que desde el primer momento me brindaron y me brindan todo su apoyo colaboración y cariño sin ningún interés.

A los profesores del grupo GASURE y QUIREMA: Iván Bedoya, Andrés Colorado, Wilson Ruíz y especialmente al profesor Francisco Cadavid (q.e.p.d.).

Resumen

El estudio de la combustión de mezclas de carbón pulverizado con gas natural en condiciones de combustión sin llama cobra importancia debido principalmente a la disminución de emisiones contaminantes de NO, gases de efecto invernadero y material particulado, así como por la reducción del factor de emisión del carbón al realizar la mezcla de ambos combustibles, y por la flexibilidad que supone la capacidad de realizar mezclas de estos combustibles acorde a los precios y disponibilidad de los mismos. Entonces, en este trabajo se ha realizado el análisis experimental y numérico de la combustión sin llama de mezclas de un carbón sub-bituminoso pulverizado (CP) con gas natural (GN), donde las mezclas analizadas (en base energética) fueron 0 % CP-100 % GN, 25 % CP-75 % GN, 50 % CP-50 % GN, 75 % CP-25 % GN y 100 % CP-0 % GN, donde los porcentajes están en base energética.

Adicionalmente, las condiciones de combustión sin llama se compararon con condiciones de combustión convencional con 100 % gas natural y con 100 % carbón pulverizado. También, para todas las condiciones evaluadas la potencia térmica en base al poder calorífico inferior se mantuvo constante en 28 kW y el factor de aireación se fijó en 1.2.

En cuanto a los objetivos, se tiene como objetivo principal analizar numérica y experimentalmente la combustión de la mezcla carbón pulverizado y gas natural en proporciones de 0 % a 50 % gas natural (en base energética), en condiciones de combustión sin llama para una potencia térmica constante de 28 kW. Para dar cumplimiento al objetivo principal se plantearon 3 objetivos específicos donde el primero consiste en realizar un estudio numérico de la combustión sin llama de las mezclas planteadas anteriormente, por medio del software Fluent, esto con el fin de identificar la mejor configuración geométrica del quemador. El segundo objetivo específico se enfoca en tomar la configuración geométrica obtenida por medio de las simulaciones y evaluar ésta experimentalmente como mínimo para 3 mezclas de carbón-gas natural. Por último, el tercer objetivo específico consta de realizar nuevamente un análisis numérico, pero esta vez por medio del software SKIPPY, esto con el fin de dar algo de claridad acerca del proceso de quemado del carbonizado en una atmósfera con metano, empleando mecanismos de reacción detallados.

En relación a la metodología desarrollada, en primer lugar, se realizó una revisión del estado del arte tanto de trabajos experimentales como de trabajos numéricos de fluido-dinámica computacional (CFD), donde se evidenció que hasta el momento no se han realizado trabajos que involucren la combustión de ambos combustibles en condiciones de combustión sin llama, sino que los trabajos realizados implementan o solo combustibles gaseosos o solo combustibles sólidos, entre ellos principalmente el carbón pulverizado.

Por otro lado, en base a la revisión del estado del arte de trabajos numéricos se hizo una selección de los modelos más adecuados para realizar las simulaciones numéricas y además también se seleccionaron algunos parámetros cinéticos, los cuales no se tienen disponibles para el carbón usado.

Con el fin de realizar la comparación de los distintos regímenes de combustión se realizó primero un trabajo bastante intensivo de simulación numérica en el software Fluent, donde se evaluaron las condiciones mencionadas anteriormente tanto de combustión sin llama como de combustión convencional para las mezclas de carbón pulverizado y gas natural. En dichas simulaciones se evaluaron principalmente condiciones geométricas del quemador como las distancias entre las boquillas de aire y el diámetro de dichas boquillas; y para realizar la comparación se evaluaron parámetros como la uniformidad del campo de temperatura, el tamaño de la zona de reacción, el factor de recirculación y el grado de quemado del carbón en la chimenea, esto con el propósito de determinar las condiciones aerodinámicas óptimas que garantizaran la obtención del régimen de combustión sin llama en las mezclas gas natural-carbón pulverizado.

Adicionalmente, se realizaron simulaciones en el software SKIPPY para el quemado del carbonizado, donde las condiciones de frontera fueron obtenidas a partir de las simulaciones realizadas en Fluent, a lo largo de las trayectorias de las partículas. En dichas simulaciones, para las reacciones de la fase gaseosa, se usó el mecanismo GRI 3.0, y para la fase sólida se usó un mecanismo de reacción de 5 pasos que incluye las reacciones de oxidación y gasificación del carbonizado. Los resultados de estas simulaciones se compararon

con los resultados de Fluent, y adicionalmente se evaluaron casos hipotéticos donde en la condición de frontera se aumentó de forma sistemática la concentración de CH_4 o la temperatura en la capa límite, encontrándose que para las temperaturas típicas de combustión sin llama obtenidas en este trabajo (1200 K) la variación del porcentaje de metano en la capa límite tiene un efecto insignificante sobre el quemado de las partículas de carbonizado, pero al aumentar la temperatura de dicha capa límite el efecto es mucho más significativo ya que la concentración de oxígeno al interior de la partícula tiende a cero, de tal forma que la tasa de consumo de la partícula de carbonizado es mucho mayor.

Por otro lado, una componente bastante importante del trabajo incluyó mediciones experimentales, donde las condiciones geométricas evaluadas fueron seleccionadas en base a las simulaciones realizadas en Fluent. Las mediciones se realizaron para las mismas condiciones de mezclas mencionadas en párrafos anteriores, tanto para combustión sin llama como para combustión convencional. Se realizaron mediciones de temperatura y especies al interior de la cámara de combustión, así como en la chimenea, donde también se evaluó el grado de quemado del carbón (*coal burnout*) para cada una de las condiciones que contenía carbón. Adicionalmente, se realizaron mediciones de quimioluminiscencia espontánea a lo largo de la cámara de combustión y de *Mie scattering*.

Se encontró que en todas las condiciones que se evaluaron de combustión sin llama los resultados obtenidos fueron bastante prometedores, en el sentido de que se obtuvo el régimen de manera estable utilizando mezclas de ambos combustibles, con temperaturas bastante uniformes y adicionalmente el grado de quemado del carbón en todos los casos fue bastante alto (superior al 98 %). Por otro lado, para los casos de combustión sin llama se obtuvo una zona de reacción muy distribuida, lo cual se evidenció por medio de las señales de CH^* y OH^* obtenidas por medio de quimioluminiscencia espontánea.

Adicionalmente, aunque experimentalmente para todas las mezclas se obtuvo un quemado del carbón bastante alto, resalta el hecho de que el mayor grado de quemado se obtuvo para el caso de 25 %CP-75 %GN, lo cual indica que al menos para las mayores concentraciones de gas natural ha habido un aporte de este en el quemado del carbón pulverizado, aunque es difícil determinar si esto ha sido un efecto cinético-químico o un efecto térmico.

En cuanto a la comparación de los resultados obtenidos por medio de las simulaciones en Fluent y los resultados experimentales se obtuvieron muy buenas predicciones para la temperatura y las concentraciones de O_2 y CO_2 al interior de la cámara de combustión, mientras que para el CO el modelo tiende a sobreestimar de forma significativa las concentraciones. Adicionalmente, en cuanto al grado de quemado del carbón, por medio de las simulaciones se obtuvieron valores cercanos al 90 %, lo cual está algo por debajo de los resultados experimentales, donde se obtuvieron valores superiores a 98 %, donde esto se debe probablemente a que las constantes cinéticas del modelo fueron seleccionadas en base a datos tomados de la literatura.

Índice general

Agradecimientos	III
Resumen	v
Índice de figuras	IX
Índice de tablas	XIII
Nomenclatura	XV
1. Introducción	1
1.1. Motivación y contexto	1
1.2. Combustión sin llama	2
1.3. Carbón pulverizado y combustión sin llama	3
1.4. Co-firing de carbón pulverizado/gas natural en combustión sin llama	3
1.5. Hipótesis	4
1.6. Objetivos de la investigación	4
2. Estado del Arte	7
2.1. Combustión sin llama de combustibles gaseosos	7
2.2. Trabajos experimentales de la combustión sin llama de carbón pulverizado.	7
2.2.1. Distribución de tamaños de partículas de carbón pulverizado	10
2.2.2. Medición de especies químicas.	11
2.2.3. Medición de temperatura	12
2.2.4. Quimioluminiscencia espontánea.	12
2.2.5. Mie <i>scattering</i>	14
2.2.6. Conclusiones del estado del arte con trabajos experimentales	14
2.3. Simulación numérica de la combustión sin llama	15
2.3.1. Simulación de combustión heterogénea de carbón pulverizado	15
2.3.2. Combustión de fase homogénea	19
2.3.3. Simulaciones en el software SKIPPY	24
2.3.4. Conclusiones del estado del arte numérico	25
3. Simulaciones numéricas en Fluent.	27
3.1. Geometrías evaluadas.	27
3.2. Modelo empleado en Fluent	29
3.3. Condiciones de frontera	30
3.4. Criterios de convergencia	32
3.5. Análisis de independencia del mallado	33
3.6. Resultados numéricos	37
3.6.1. Contornos de temperatura y líneas de corriente (<i>streamlines</i>)	37
3.6.2. Parámetros de uniformidad de la temperatura	39
3.6.3. Contornos de fracción másica de CO	40
3.6.4. Análisis del factor de recirculación	41
3.6.5. Grado de quemado del carbón	43
3.6.6. Contribución de las reacciones de gasificación	44

3.7. Conclusiones de las simulaciones numéricas en Fluent	45
4. Simulaciones numéricas en SKIPPY	47
4.1. Descripción del modelo	47
4.2. Metodología usada para las simulaciones	50
4.3. Resultados de las simulaciones en SKIPPY	52
4.4. Conclusiones de las simulaciones numéricas en SKIPPY	54
5. Investigación experimental	55
5.1. Instalación experimental	55
5.2. Condiciones de operación	57
5.3. Técnicas de medición	58
5.3.1. Medición de gases	59
5.3.2. Medición de temperatura	60
5.3.3. Análisis de inquemados en las cenizas	60
5.3.4. Quimioluminiscencia espontánea	60
5.3.5. Mie scattering	61
5.4. Resultados Experimentales	62
5.4.1. Temperatura al interior de la cámara de combustión	63
5.4.2. Especies al interior de la cámara de combustión	64
5.4.3. Temperatura y especies en la chimenea	69
5.4.4. Inquemados en la ceniza	71
5.4.5. Validación del modelo numérico	72
5.4.6. Quimioluminiscencia espontánea	76
5.4.7. Mie scattering	79
5.5. Conclusiones de los resultados experimentales	81
6. Conclusiones	85
A. Detalle del modelo matemático implementado en Fluent	89
B. Código tratamiento de imágenes de quimioluminiscencia	95
C. Funciones Definidas por el Usuario (UDF's)	99
Bibliografía	103

Índice de figuras

1.1. Ejemplo esquemático de combustión sin llama con recirculación interna.	2
1.2. Comparación visual de la combustión convencional y la combustión sin llama con gas natural y con carbón pulverizado.	3
1.3. Comparación del proceso de quemado del carbón pulverizado en combustión convencional y en combustión sin llama.	4
2.1. Tipos de quemadores normalmente usados para obtener la combustión sin llama con carbón pulverizado.	8
2.2. Diagrama de Van Krevelen para los carbones usados en trabajos de combustión sin llama. . .	8
2.3. Porcentaje de conversión del carbón para aplicaciones de combustión sin llama.	10
2.4. Distribución de tamaños de partículas usados por diferentes autores para combustión sin llama y combustión convencional	11
2.5. Ejemplo esquemático de la sonda de succión de gases para la medición de especies usada en este trabajo.	11
2.6. Ejemplo esquemático del pirómetro de succión usado en este trabajo para medir la temperatura. .	13
2.7. Intensidad espectral normalizada del OH*, CH* y cuerpo negro (BB) a 1173 K y 1273 K en función de la longitud de onda. Transmisividad de los filtros FB430, y F10.	13
2.8. Tasas de volatilización en función del inverso de la temperatura para el modelo <i>single rate</i> . . .	17
2.9. Tasas de volatilización k_1 y k_2 en función del inverso de la temperatura para el modelo de 2 tasas tipo Arrhenius.	17
2.10. Comparación de diferentes modelos de volatilización para diferentes tasas de calentamiento. . .	18
2.11. Regímenes de quemado de partículas de carbonizado.	19
2.12. Gráfica de las tasas cinéticas de la reacción $C + 0.5O_2 \rightarrow CO$, usadas por diferentes autores. .	19
2.13. Tasas cinéticas de la reacción $C + CO_2 \rightarrow 2CO$ usadas por diferentes autores.	21
2.14. Tasas cinéticas de la reacción $C + H_2O \rightarrow CO + H_2$, usadas por diferentes autores.	21
2.15. Frecuencia relativa del porcentaje de CH ₄ en el gas natural que llega a Medellín para el periodo comprendido entre el 1 de enero de 2016 hasta 29 de diciembre de 2016.	22
2.16. Tasas cinéticas de reacción de volátiles usadas por diferentes autores.	24
3.1. Esquema del horno (a) y del quemador (b) usados para realizar las simulaciones numéricas y las mediciones experimentales.	28
3.2. Ejemplo de mallados usados para las simulaciones numéricas en Fluent para modo sin llama (a, b y c) y para modo llama (d y e)	28
3.3. Coeficiente de arrastre en función del número de Reynolds de la partícula.	30
3.4. Distribución de tamaños de partículas en porcentaje de volumen y acumulada.	32
3.5. Criterios usados para determinar la convergencia de las simulaciones.	33
3.6. Líneas sobre las cuales se realiza la comparación para la independencia del mallado.	34
3.7. Análisis independencia del mallado caso 1 (100 % gas natural, Tabla 3.6).	35
3.8. Análisis independencia del mallado caso 14 (75 % Carbón, Tabla 3.6).	35
3.9. Análisis independencia del mallado caso 16 (100 % gas natural, Tabla 3.6).	36
3.10. Análisis independencia del mallado caso 27 (25 % carbón, Tabla 3.6).	36
3.11. Contornos de temperatura (K) en el plano horizontal para una boquilla de aire de 16 mm (Casos del 1 al 15 de la Tabla 3.1)	38
3.12. Contornos de temperatura en el plano horizontal para una boquilla de aire de 10.9 mm (Casos del 16 al 30 de la Tabla 3.1)	39

3.13. Contornos de temperatura en el plano de simetría y en el plano horizontal para los casos de modo llama (Casos 31 y 32 de la Tabla 3.1)	39
3.14. Comparacion temperatura promedio	40
3.15. Contornos de fracción másica de CO en el plano horizontal para una boquilla de aire de 16 mm (Casos del 1 al 15 de la Tabla 3.1)	41
3.16. Contornos de fracción másica de CO en el plano horizontal para una boquilla de aire de 10.9 mm (Casos del 16 al 30 de la Tabla 3.1)	42
3.17. Contornos de fracción másica de CO en el plano de simetría y en el plano horizontal para los casos de modo llama (Casos 31 y 32 de la Tabla 3.1)	42
3.18. Factor de recirculación a lo largo de la cámara de combustión para las diferentes configuraciones analizadas numéricamente.	43
3.19. Comparación de porcentaje de quemado del carbón (<i>coal burnout</i>).	44
3.20. Comparación del porcentaje de quemado del carbón incluyendo y sin incluir las reacciones de gasificación caso del 27 al 30.	45
4.1. Esquema del modelo de SKIPPY.	47
4.2. Trayectorias de partículas para una de la simulaciones realizadas en Fluent. (a) Muestra representativa de las trayectorias que constituyen el jet de partículas. (b) Detalle de 3 de las trayectorias de las partículas, donde los cubos representan los puntos donde se muestrea la atmósfera que rodea las partículas.	50
4.3. Condiciones a las que están sometidas las partículas en el momento donde inicia el proceso de carbonizado para el caso 27 (Tabla 3.1), con diámetro de partículas de 15.2 μm	51
4.4. Condiciones a las que están sometidas las partículas 300 ms después de iniciar el proceso de carbonizado para el caso 27 (Tabla 3.1), con diámetro de partículas de 15.2 μm	51
4.5. Comparación del <i>char burnout</i> obtenido por medio de SKIPPY con respecto al porcentaje de carbón para los 3 diámetros de partículas analizados.	52
4.6. Comparación del quemado del carbonizado entre las simulaciones de SKIPPY y las simulaciones de Fluent para los diferentes porcentajes de carbón y tamaños de partícula analizados.	53
4.7. Perfiles de temperatura y fracción másica de oxígeno para una partícula de 95 μm , modificando la fracción másica de metano en la capa límite.	53
4.8. Perfiles de temperatura normalizada y fracción másica de oxígeno para una partícula de 95 μm , modificando la temperatura de la capa límite.	54
5.1. Quemador del horno de combustión sin llama del laboratorio de combustión - GASURE. (a) Configuración del quemador para operar en combustión sin llama, (b) Configuración del quemador para operar en combustión convencional.	56
5.2. Horno de combustión sin llama del grupo GASURE	56
5.3. Diagrama del suministro de flujos e instrumentación de la cámara de combustión del laboratorio de combustión del grupo GASURE.	57
5.4. Esquema de las posiciones donde se realizaron las mediciones de especies y temperatura al interior de la cámara de combustión.	60
5.5. (a) Esquema del montaje usado para las mediciones de quimioluminiscencia espontánea, (b) Foto del montaje real detallando la cámara ICCD.	61
5.6. (a) Esquema del montaje para la mediciones de Mie Scattering, (b) Foto del montaje donde se puede apreciar parte del rayo láser antes de formar el plano.	62
5.7. Perfil de energía normalizado del plano láser	63
5.8. Temperatura al interior de la cámara de combustión para las diferentes condiciones evaluadas. Cada columna corresponde a una línea de medición diferente.	64
5.9. Porcentaje volumétrico de metano en base seca al interior de la cámara de combustión para las tres líneas medidas.	65
5.10. Porcentaje volumétrico de oxígeno al interior de la cámara de combustión (base seca).	66
5.11. Concentración de CO al interior de la cámara de combustión (base seca).	67
5.12. Concentración de CO ₂ al interior de la cámara de combustión (base seca).	69
5.13. Concentración de NO al interior de la cámara de combustión (base seca).	70
5.14. Temperatura y especies medidas en la chimenea.	70
5.15. Resultados del porcentaje de quemado del carbón (<i>coal burnout</i>) en la chimenea	72

5.16. Comparación de los resultados experimentales y de simulación de la temperatura para los casos de combustión sin llama.	73
5.17. Comparación de los resultados experimentales y de simulación de la concentración de CH ₄ para los casos de combustión sin llama.	73
5.18. Comparación de los resultados experimentales y de simulación para la concentración de O ₂ en las condiciones de combustión sin llama.	74
5.19. Comparación de los resultados experimentales y de simulación para la concentración de CO (en base seca) para las condiciones de combustión sin llama.	75
5.20. Comparación de los resultados experimentales y de simulación para la concentración de CO ₂ en condiciones de combustión sin llama.	76
5.21. Comparación de datos experimentales y de simulación.	77
5.22. Resultados de mediciones de quimioluminiscencia de CH* empleando un filtro óptico centrado en 430 nm.	78
5.23. Resultados de mediciones de quimioluminiscencia de OH* con un filtro centrado en 308 nm.	79
5.24. Imagen del plano láser al interior de la cámara de combustión tomada con una cámara convencional.	80
5.25. Algunas imágenes individuales de Mie <i>scattering</i> obtenidas con la cámara ICCD para las condiciones en las cuales se empleó esta técnica.	81
5.26. Resultados de Mediciones de Mie Scattering para los accesos ópticos con imágenes promedio en las 3 condiciones en las cuales se empleó esta técnica de medición.	82

Índice de tablas

2.1. Resumen de trabajos experimentales de combustión sin llama con carbón pulverizado.	9
2.2. Resumen de modelos usados para la combustión de carbón pulverizado por diferentes autores para aplicaciones de combustión sin llama.	20
2.3. Composiciones de gas natural promedio, para 4 periodos diferentes del año 2016.	22
2.4. Composición normalizada de los diferentes gases naturales excluyendo moléculas más pesadas que C_3H_8	23
2.5. Tasas cinéticas de las diferentes reacciones de los mecanismos de reacción para el CH_4	23
2.6. Tasas cinéticas para las reacciones R4 y R5.	24
3.1. Configuraciones de las simulaciones numéricas realizadas en fluent.	29
3.2. Resumen de los modelos usados en las simulaciones numéricas en Fluent.	31
3.3. Análisis último y análisis próximo del carbón usado en este trabajo.	31
3.4. Fracción y tamaños de partículas usados en las simulaciones numéricas en Fluent.	32
3.5. Flujos y temperaturas para diferentes porcentajes de carbón usados en las simulaciones numéricas, para una potencia térmica de 28 kW y un factor de aireación de 1.2.	33
3.6. Configuraciones seleccionadas para realizar el análisis de independencia del mallado.	34
4.1. Mecanismo de reacción heterogénea usado en las simulaciones con el software SKIPPY.	49
4.2. Parámetros de entrada a las simulaciones de SKIPPY.	49
5.1. Niveles a usar para los factores independientes.	58
5.2. Factores constantes.	58
5.3. Factores de ruido.	58
5.4. Flujos y temperaturas experimentales.	59
5.5. Equipos usados para la medición de especies.	59

Nomenclatura

Abreviaciones

CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
CPD	Modelo de volatilización Chemical Percolation Devolatilization
daf	<i>Dry ash free</i> , base seca libre de cenizas
DO	Modelo de radiación de Ordenadas Discretas.
EDC	Modelo de interacción química/turbulencia Eddy Dissipation Concept.
FRED	Modelo de interacción química/turbulencia Finite Rate-Eddy Dissipation.
P1	Modelo de radiación
PCD	Poder Calorífico Inferior
RWM	Modelo de dispersión de partículas Random Walk model.
TGA	<i>Thermogravimetric analysis</i>
UDF	<i>User Defined Function</i>
WSGG	<i>Weighted Sum of Gray Gases</i>

Símbolos generales

\dot{m}_a	Flujo másico de comburente	$kg \cdot s^{-1}$
\dot{m}_f	Flujo másico de combustible gaseoso	$kg \cdot s^{-1}$
\dot{m}_r	Flujo másico de gases recirculados	$kg \cdot s^{-1}$
\dot{S}_k	Tasa de producción molar por unidad de área	$mol \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$
A	Factor pre-exponencial	s^{-1}
D_b	Diámetro de boquilla de aire	m
D_{10}	Diámetro de partícula para el cual la distribución acumulada es igual a 10 %	—
D_{50}	Diámetro de partícula para el cual la distribución acumulada es igual a 50 %	—
D_{90}	Diámetro de partícula para el cual la distribución acumulada es igual a 90 %	—
D_{pitch}	Distancia diametral de boquillas de aire	m
E	Energía de Activación	$J \cdot kmol^{-1}$
h	Tamaño característico de las celdas	m
k	Energía cinética turbulenta	$m^{-2} \cdot s^{-2}$
K_v	Factor de recirculación	—
N	Número de celdas del mallado	—
p	Presión absoluta	Pa
Re_p	Número de Reynolds de la partícula	—
T_w	Temperatura de paredes	K
T_{alr}	Temperatura de los alrededores	K
T_{sp}	Temperatura de la superficie de las partículas	K
X_a	Fracción de ceniza en la muestra recolectada después de ser quemada	—

X_a^0	Fracción de ceniza en el carbón fresco	—
A	En el modelo de SKIPPY $A=4\pi r^2$	m^2
A_{act}	Área superficial activa	$m^2 \cdot g^{-1}$
h_k	Entalpía específica	$J \cdot kg^{-1}$
r_p	Radio de la partícula porosa	m
r_{CL}	Radio de la capa límite	m
r_{pore}	En el modelo de <i>skippy</i> corresponde a la porosidad	—
T_{avg}	Temperatura promedio evaluada sobre una serie de partículas	K
V_k	Velocidad de difusión de la especie k	$m \cdot s^{-1}$
W_k	Peso molecular de la especie k	$kg \cdot mol^{-1}$
X_{char}	Porcentaje de quemado del carbonizado	—
Letras griegas		
α_1	Factor de ponderación del modelo de volatilización two competing rates	—
α_2	Factor de ponderación del modelo de volatilización two competing rates	—
ΔV_i	Volumen de la celda <i>i</i> – <i>esima</i>	m^3
$\dot{\omega}_k$	Tasa molar de producción de la especie k por unidad de volumen	$mol \cdot m^{-3} \cdot s^{-1}$
ϵ	Emisividad de las partículas	—
λ	Factor de aireación	—
λ_t	Conductividad térmica total	$W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$
μ	viscosidad de los gases	$Pa \cdot s$
ϕ	En el modelo de <i>skippy</i> corresponde a la porosidad	—
ϕ	Esfericidad de la partícula	—
ρ_p	Densidad aparente de la partícula de carbonizado	$kg \cdot m^{-3}$
σ	Constante de Stefan Boltzman $\sigma = 5.670373 \times 10^{-8}$	$W \cdot m^{-2} \cdot K^{-4}$
σ_r	Área superficial específica para las reacciones heterogéneas	$m^2 \cdot m^{-3}$
τ	Tortuosidad	—
ϵ	Disipación de la energía cinética turbulenta	$m^{-2} \cdot s^{-3}$

Capítulo 1

Introducción

La complementariedad entre el carbón y el gas natural puede proporcionar una mayor confiabilidad en el suministro de energía, atenuando la emisión de gases de efecto invernadero, debido al menor índice de emisión del gas natural, y reduciendo las emisiones contaminantes así como las emisiones de material particulado. Esto con respecto a un escenario basado solo en carbón.

En este sentido, en las últimas décadas ha surgido una tecnología llamada combustión sin llama, que ha sido originalmente desarrollada para combustibles gaseosos [1,2], y en años recientes también ha sido aplicada a combustibles líquidos con una reducción exitosa de las emisiones de NO_x [3]. Con esta tecnología se genera una recirculación interna de productos de combustión por medio del diseño del quemador, lo cual tiene como efecto la uniformización del campo de temperatura en la cámara de combustión, llevando a una reducción de las emisiones de NO_x y a una mayor intensidad en el flujo por unidad de área (*flux*) de calor radiado, manteniendo la eficiencia de combustión [4,5].

Al usar la tecnología de combustión sin llama con carbón pulverizado se podrían reducir las emisiones de NO_x , pero se puede presentar el inconveniente de una disminución en la eficiencia de combustión, causada por la menor temperatura en la zona de reacción y por la baja concentración de oxígeno, lo que conllevaría a una mayor cantidad de carbono sin quemar en las cenizas. Por esta razón, debe buscarse la forma de mejorar la combustión del carbón bajo estas condiciones.

Dado que la combustión sin llama hasta ahora ha sido investigada de forma separada con combustibles gaseosos por un lado y por otro lado con carbón pulverizado, es entonces conveniente estudiar cuales son las condiciones aerodinámicas para la obtención de dicho régimen empleando mezclas de ambos combustibles. Además, es importante determinar cómo se afecta dicho régimen al hacer la combustión de ambos combustibles, partiendo de que cuando se tiene 100% gas natural existen condiciones de combustión sin llama.

1.1. Motivación y contexto

La disponibilidad de grandes reservas de carbón y el surgimiento de fuentes no convencionales de gas natural, como el *shale gas*, hacen que la demanda de energía mundial aún pueda ser suplida por un periodo relativamente largo por medio del uso de combustibles fósiles a un costo inferior del que se tiene con las tecnologías de energía alternativa [6,7]. En este contexto, la investigación de la combustión de mezclas carbón pulverizado y gas natural, en particular en nuevos tipos de tecnologías de combustión, se torna pertinente y con un gran potencial de impactos científicos, tecnológicos, económicos y ambientales.

Adicionalmente, este trabajo hace parte de la unión temporal Red Incombustion, la cual fue creada con el objetivo de desarrollar investigaciones fenomenológicas que conduzcan al desarrollo de tecnologías avanzadas de combustión. Dicha unión temporal es financiada por Colciencias bajo el código de programa 111554331906.

Por otro lado, el grupo de investigación GASURE de la Universidad de Antioquia ha desarrollado dos proyectos de investigación en combustión sin llama, donde, en el primero se construyó una cámara de combustión y un quemador autoregenerativo con el objetivo de obtener el régimen de combustión sin llama con gas natural usando aire como comburente [8]. En el segundo proyecto se realizó un nuevo diseño del quemador para hacer combustión sin llama con enriquecimiento de oxígeno en el comburente [9].

Adicionalmente, el grupo GASURE participó en la dirección de la tesis doctoral de Alvarado [10], donde se evaluó el comportamiento de un carbón lignítico y un carbón sub-bituminoso en condiciones de combustión

sin llama, obteniendo que las emisiones de NO_x fueron relativamente bajas usando carbón, pero la cantidad de quemados fue relativamente alta, esto si se hace la comparación con una tecnología de combustión convencional de carbón pulverizado.

Debido a estos trabajos previos, desarrollados por el grupo GASURE, surge este proyecto con el fin de estudiar cual es el impacto que tiene el carbón pulverizado sobre la combustión del gas natural en condiciones de combustión sin llama.

1.2. Combustión sin llama

La combustión sin llama puede ser definida como un régimen de combustión en el cual las reacciones químicas entre el combustible y el comburente se llevan a cabo en condiciones diluidas y con temperaturas por encima de la temperatura de autoignición del combustible, donde, debido a la dilución de los reactivos se produce un fenómeno en el que la visibilidad de la llama desaparece. Adicionalmente, la misma dilución de los reactivos, conlleva a que las reacciones sean más lentas, haciendo que la temperatura máxima en la zona de reacción disminuya y sea más uniforme a lo largo de toda la cámara de combustión. De esta forma, se tiene una reducción de las emisiones de NO_x en la cámara de combustión [1, 11, 12].

Una forma de lograr la adecuada dilución de los reactivos es por medio del diseño del quemador, lo cual se logra descargando el aire de combustión a una velocidad relativamente alta (del orden de 100 m/s) y manteniendo una distancia apropiada con respecto a la boquilla de descarga del combustible. Dicha descarga del aire a alta velocidad genera un *jet*, el cual en su recorrido absorbe productos de combustión a alta temperatura. Si la velocidad y la distancia entre los *jets* de aire y combustible son adecuadas, entonces la dilución alcanzada es suficiente para que en el momento en que se mezcle el oxidante y el combustible las reacciones químicas sean lentas y la llama desaparezca. En la Figura 1.1 se muestra un ejemplo esquemático del funcionamiento de la combustión sin llama para un combustible gaseoso como el gas natural.

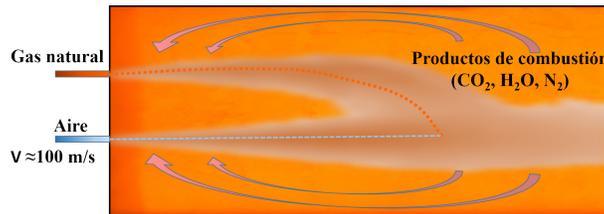


Figura 1.1. Ejemplo esquemático de combustión sin llama con recirculación interna.

Para el caso de carbón pulverizado, el diseño del quemador y el principio de funcionamiento es bastante similar al que se tiene con el combustible gaseoso, con la diferencia de que el *jet* de combustible es una mezcla de partículas de carbón y gas de arrastre. Por lo general, el gas de arrastre más usado es aire, pero también puede ser usado CO_2 o N_2 , esto debido principalmente a que cuando se usa aire como gas de arrastre la zona de reacción continúa con algún grado de visibilidad.

En la Figura 1.2 se muestra a modo de comparación, la visualización de la cámara de combustión del grupo GASURE quemando gas natural en modo convencional y en modo combustión sin llama. Adicionalmente, también se muestran los casos quemando carbón pulverizado en modo convencional y en modo combustión “sin llama”.

Por otro lado, para la obtención de la combustión sin llama, la dilución juega un papel determinante, y un parámetro bastante usado para estimar el grado de dilución es el factor de recirculación (K_v) [1], el cual se define como el flujo másico de gases recirculados, dividido el flujo másico de aire y de combustible que entran a la cámara de combustión (Ecuación 1.1), el cual normalmente es calculado numéricamente debido a la dificultad que se tiene para medir el flujo másico de gases recirculados.

$$K_v = \frac{\dot{m}_r}{\dot{m}_a + \dot{m}_f} \quad (1.1)$$

Wüning y Wüning [1] mostraron que para obtener el fenómeno de combustión sin llama de forma estable con gas natural, el factor de recirculación debe ser mayor a 3.5, lo cual es importante tener en cuenta en el momento de diseñar este tipo de quemadores, aunque este valor debe ser visto más como un valor de referencia ya que en realidad dicho umbral podría ser mayor o menor dependiendo de las condiciones

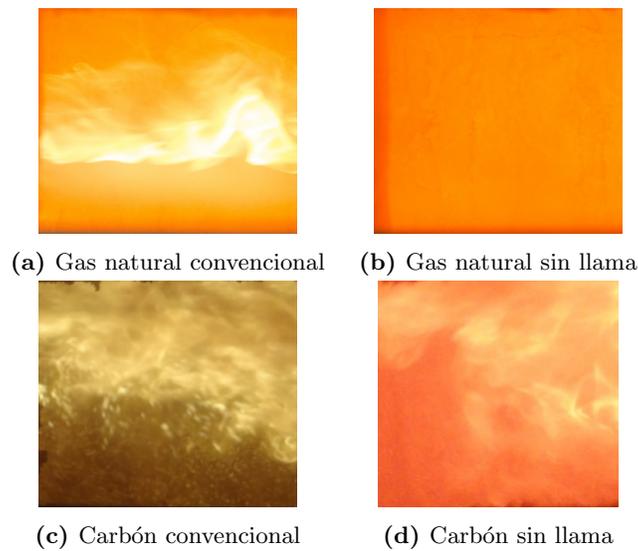


Figura 1.2. Comparación visual de la combustión convencional y la combustión sin llama con gas natural y con carbón pulverizado.

geométricas del quemador y de la cámara de combustión, y adicionalmente, también puede depender del tipo de combustible.

1.3. Carbón pulverizado y combustión sin llama

Generalmente, es aceptado que la combustión convencional del carbón pulverizado está compuesta por 3 procesos principales, los cuales son: el secado y la volatilización de las partículas, y el quemado del carbonizado. Adicionalmente, de forma simultánea ocurre la combustión de los volátiles en la fase gaseosa. De estos 3 procesos, el que más tiempo toma en completarse es el quemado del carbonizado, y básicamente es el que determina la longitud que debe tener la cámara de combustión con el fin de que el quemado del carbón sea completo.

En la Figura 1.3 se muestra de forma esquemática el quemado del carbón en combustión convencional [13] (línea continua), suponiendo que los tres procesos ocurren en serie, lo cual es ampliamente usado en el modelado de este tipo de combustión. Adicionalmente, el quemado del carbonizado ocurre principalmente por la reacción heterogénea con oxígeno.

Para el caso de combustión sin llama, se puede suponer que el proceso es bastante similar al proceso descrito anteriormente, con la diferencia de que la temperatura máxima que alcanzan las partículas en su trayectoria dentro de la cámara de combustión es menor en comparación con el caso convencional. Por otra parte, debido a la recirculación de productos de combustión, la concentración de oxígeno en la atmósfera que rodea las partículas es menor que en combustión convencional y, así mismo, la concentración de CO_2 y H_2O es mayor. Debido a estas condiciones, debería entonces considerarse también las reacciones de gasificación y no solo la reacción de oxidación de las partículas de carbonizado. Por otro lado, debido a las menores temperaturas, se puede esperar que el tiempo que le toma a las partículas de carbón consumirse completamente sea mayor en comparación con el tiempo en combustión convencional.

1.4. Co-firing de carbón pulverizado/gas natural en combustión sin llama

Hasta el momento no se han encontrado trabajos que indiquen cual es el comportamiento de la mezcla de ambos combustibles en condiciones de combustión sin llama, y aunque hay algunos reportes como los de Green et al [14], Liu et al [15], Bayless et al [16] y Rubtsov et al [17], que muestran que la mezcla de ambos combustibles puede conducir a una disminución en el tiempo requerido para completar el quemado del

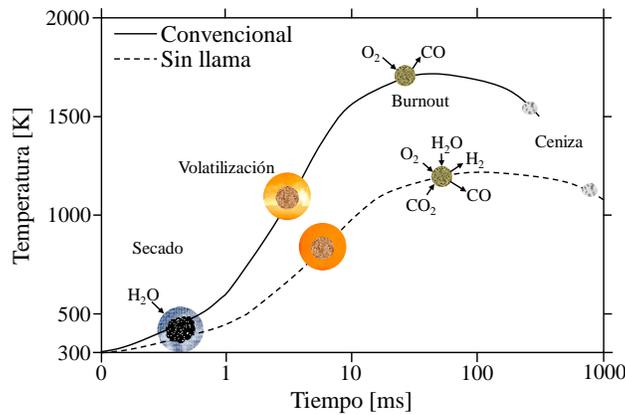


Figura 1.3. Comparación del proceso de quemado del carbón pulverizado en combustión convencional y en combustión sin llama. Adaptado de [13].

carbonizado, lo cierto es que estos trabajos han sido desarrollados para co-firing en combustión convencional o en quemadores de prueba donde las partículas de carbón son inyectadas a una llama de premezcla de gas natural.

En realidad, no es claro cuál es el comportamiento que puede tener la mezcla de carbón pulverizado y gas natural en condiciones de combustión sin llama, aunque se espera que el gas natural contribuya positivamente en el quemado del carbonizado.

1.5. Hipótesis

Cuando se quema carbón pulverizado en temperaturas uniformes del orden de 1200 K, en una atmósfera con baja concentración de oxígeno y con una concentración de CO₂ y H₂O relativamente altas (condiciones de combustión sin llama), la cantidad de inquemados en la ceniza disminuye al hacer mezclas con gas natural, pero se mantienen los beneficios de la combustión sin llama (temperatura uniforme, y bajas emisiones de NO_x).

1.6. Objetivos de la investigación

Este trabajo tiene como objetivo general analizar numérica y experimentalmente la combustión de la mezcla carbón pulverizado y gas natural en proporciones de 0% a 50% gas natural (en base energética), en condiciones de combustión sin llama para una potencia térmica constante de 28 kW.

Con el fin de lograr el objetivo general, se tienen los siguientes objetivos específicos:

- Determinar numéricamente, por medio del software FLUENT, las condiciones aerodinámicas óptimas del flujo de aire, del flujo bifásico (carbón pulverizado y gas de arrastre) y del gas natural, para la obtención del régimen de combustión sin llama del sistema gas natural carbón pulverizado para una potencia térmica de 28 kW y un factor de aireación constante. Identificadas las condiciones óptimas se procederá con la verificación experimental de la obtención del régimen de manera estable y eficiente.
- Comparar experimentalmente como mínimo 3 mezclas de carbón-gas natural en proporciones de 0% a 50% gas natural, buscando encontrar la influencia de la concentración de gas natural sobre los siguientes parámetros: la estabilidad del régimen, la morfología de la zona de reacción, las emisiones de CO y NO_x, y la presencia de carbono sin quemar en las cenizas para la mejor configuración geométrica analizada numéricamente.
- Analizar numéricamente, por medio del software SKIPPY, la combustión del carbonizado en una atmósfera con gas natural, baja concentración de oxígeno y altas concentraciones de vapor de agua

y CO₂, para encontrar la influencia de las condiciones de dilución sobre las emisiones de CO, NO_x, y la presencia de carbono sin quemar en las cenizas.

Capítulo 2

Estado del Arte

Antes de iniciar a desarrollar esta sección, debe tenerse claro que este trabajo involucra la combustión conjunta de carbón pulverizado con gas natural, pero debido a la complejidad de la combustión del carbón se hace especial énfasis en éste último.

Este trabajo está dividido en una componente de simulación y en una componente experimental, y en este capítulo se hace principalmente un análisis del estado del arte tanto de los trabajos experimentales de carbón pulverizado en combustión sin llama (Sección 2.2), así como de los trabajos de simulación de carbón pulverizado también en combustión sin llama (Sección 2.3).

2.1. Combustión sin llama de combustibles gaseosos

La combustión sin llama con combustibles gaseosos ha sido bastante estudiada por diferentes autores desde la década de los 90's. Una de las primeras publicaciones realizadas fue la de Wüning y Wüning [1], quienes mostraron las ventajas en reducción de emisiones de NO_x de dicho régimen de combustión, y además mostraron el importante papel que juega el factor de recirculación (K_v , Ecuación 1.1) en la obtención de dicho régimen.

Después de este trabajo muchos otros trabajos han sido desarrollados, como por ejemplo [12, 18–27], en los cuales se han investigado diferentes aspectos de la combustión sin llama, tanto experimental como numéricamente, como por ejemplo, el efecto de diferentes tipos de combustibles gaseosos y mezclas de algunos de estos. Adicionalmente, se han evaluado diferentes tipos de quemadores, desde escala de laboratorio hasta escala semi-industrial e industrial.

2.2. Trabajos experimentales de la combustión sin llama de carbón pulverizado.

Con respecto a la combustión sin llama de carbón pulverizado, se han realizado diversos trabajos experimentales desde aproximadamente el año 2000, y por lo general, estos trabajos han estado enfocados en evaluar la formación de NO_x . Adicionalmente, los diseños de los quemadores en su mayoría están basados en los mismos conceptos usados en quemadores de combustión sin llama de combustibles gaseosos [1, 19, 20, 22], donde se hace uso de *jets* de aire de alta velocidad con el fin de generar una zona de recirculación de productos de combustión y de esta forma disminuir la concentración de oxígeno en la zona de reacción.

En la Figura 2.1 se muestran de forma esquemática los diseños de quemadores más comunes que son usados en la literatura para combustión sin llama de carbón pulverizado. Donde los círculos azules representan las boquillas de aire y los círculos naranja representan los jets de carbón. Estos quemadores pueden ser caracterizados por el tipo de boquilla central (carbón, aire, o carbón anular), la distancia de las boquillas periféricas al centro del quemador y por la cantidad de boquillas periféricas. Cabe notar que de todos los diseños el más usado es el quemador A (boquilla de carbón central y boquillas de aire periféricas). Por otro lado el quemador D no es propiamente usado para obtener combustión sin llama, sino que es más bien usado para hacer pruebas con la tecnología HiTAC [28], en la cual el aire de combustión es precalentado a altas temperaturas y en algunas ocasiones el oxígeno en dicho aire es diluido de forma externa, con lo cual se puede

emular el fenómeno de combustión sin llama.

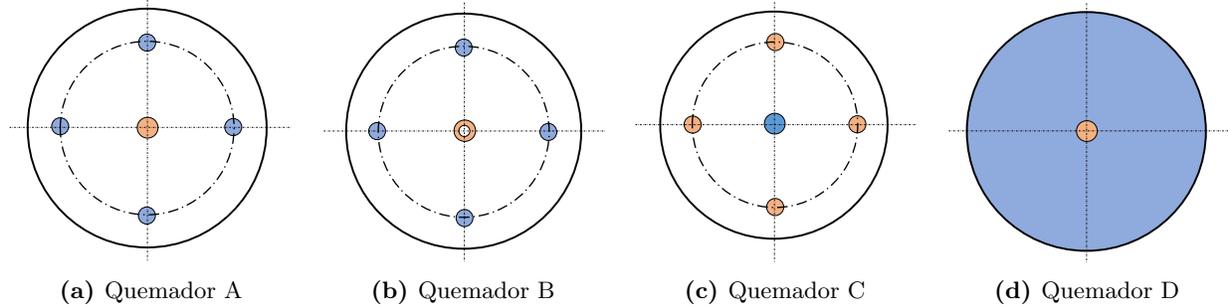


Figura 2.1. Tipos de quemadores normalmente usados para obtener la combustión sin llama con carbón pulverizado.

En la Tabla 2.1 se presenta un resumen de los trabajos experimentales de combustión sin llama con carbón pulverizado, donde se puede apreciar la diversidad de potencias usadas, que van desde 5 kW hasta una potencia de nivel industrial de 12 MW. Adicionalmente, la mayoría de trabajos han usado cámaras de combustión verticales con el quemador ubicado en la parte superior de la misma, lo cual es debido principalmente a la facilidad de recolección de las cenizas. También, se observa que la velocidad de descarga de los jets de aire de combustión (aire secundario) es del orden de 100 m/s. Pero hay trabajos, como el Stadler [29], con velocidades tan altas como 200 m/s. Por otro lado, el tipo de quemador más usual, es el quemador tipo A (Figura 2.1) y el factor de aireación oscila entre 1.04 y 1.3, siendo 1.2 el valor más usado.

A pesar de que en la Tabla 2.1 se presenta el tipo de carbón usado en cada trabajo, con el fin de hacer una mejor comparación de los carbones que han sido usados en los trabajos experimentales de combustión sin llama, en la Figura 2.2 se muestra un diagrama de Van Krevelen [46], donde se recopilan la relación hidrógeno/carbono vs la relación oxígeno/carbono de los carbones usados por diferentes autores. Se resalta el hecho de que en su mayoría los carbones usados tienen una relación O:C cercana o menor a 0.10, la cual corresponde a carbones bituminosos y antracíticos. Por otro lado, se observa que el carbón usado en este trabajo está algo alejado del tipo de carbón que normalmente se ha empleado para este tipo de experimentos, pero es cercano a los carbones tipo lignito usados en pruebas de baja potencia. En la Sección 3.3 se presenta una información más detallada acerca del carbón usado en este trabajo, el cual es un carbón sub-bituminoso de la cuenca carbonífera del Sinifaná.

Adicionalmente, en la Figura 2.2 también se muestra una región sombreada, la cual corresponde a una zona que contiene alrededor de 70 muestras de carbón tomadas de la misma cuenca del carbón usado en este trabajo, las cuales están referenciadas en [47]. Se observa que aunque el carbón usado en este trabajo no está dentro de la región sombreada, éste no está muy alejado de dicha zona.

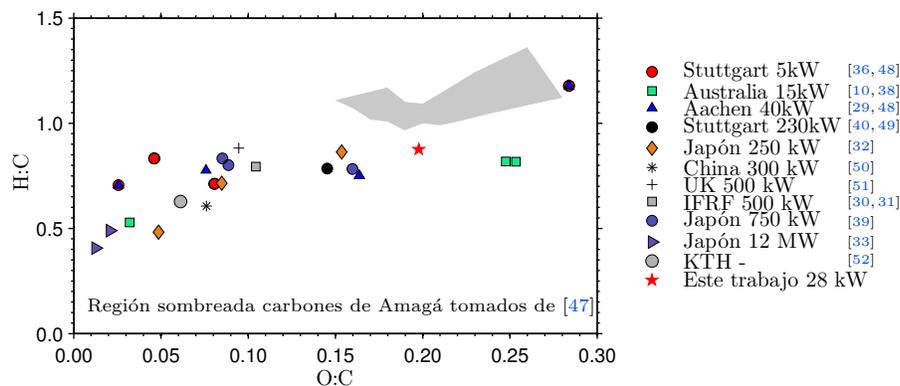


Figura 2.2. Diagrama de Van Krevelen para los carbones usados en trabajos de combustión sin llama.

Por otro lado, en la Figura 2.3 se muestran los resultados del grado de conversión del carbón (*coal burnout*), obtenidos por diferentes autores para aplicaciones de combustión sin llama. Los datos han sido agrupados en función de la potencia térmica (menores a 100 kW, entre 100 y 500 kW y mayores a 500 kW), y los colores indican que el trabajo corresponde al mismo autor o fue realizado en la misma cámara de combustión. En

Tabla 2.1. Resumen de trabajos experimentales de combustión sin llama con carbón pulverizado.

Autor/Año	Lugar o Institución	Potencia (kW)	Configuración	Quemador	Carbón	Jet Carbón	Jet Aire	λ^{\dagger}	Distancia entre jets (mm) ^{††}	Aire por etapas	Remoción de calor [‡]
Weber et al [30, 31]/1999	IFRF	580	Horizontal	C	Bituminoso	2 boquillas, 27 m/s, 313 K, Arrastre Aire	85 m/s, 1623 K	1.2	280	No	Refrigeración con Agua
Suda [32]/2002	Japón	250	Vertical hacia arriba	D	Bituminoso y Antracita	24 m/s, 300 K	623 K y 1073 K	1.2	No aplica	No	-
Zhang et al [33]/2007	Japón	12000	Lateral	Otro	Antracita y Coke de pretroleo	448 K, Arrastre aire	453 K	1.2	No aplica	No	Refrigeración con Agua
Ristic et al [34-36]/2010	Stuttgart	5-10	Vertical hacia abajo	A	Bituminoso y Lignito	10 m/s, 300 K, Arrastre Aire	3 boquillas, 150 m/s, 573 K	1.15	10	No	Calentamiento eléctrico
Stadler [29]/2010	Aachen	40 y 60	Vertical hacia abajo	A	Lignito, Bituminoso	10 m/s, Arrastre Aire o N ₂	3 boquillas, 60 - 200 m/s	1.3	45	No	Calentamiento eléctrico
Saffari [37]/2014	KTH	-	Vertical hacia abajo	D	Bituminoso	9 - 30 m/s, 300 K	1423 K	-	No aplica	No	-
Alvarado [10], Saha [38]/2014	Australia	17.7	Vertical hacia arriba	A	Lignito, Antracita	7.9 m/s, 300 K	4 boquillas, 86.2 m/s, 300 K	1.12	110	No	Refrigeración con Agua
Tamura et al [39]/2015	Japón	750	Horizontal	A	Bituminoso	300 K	2 boquillas, 453 K y 753 K	1.2	301	Si	Refrigeración con Agua
Weidmann et al [40, 41]/2015	Stuttgart	230	Vertical hacia abajo	B	Bituminoso	10 m/s, 328 K	2 boquillas, 95 m/s, 418 K	1.15	130	No	Refrigeración con Agua
Saha et al [42, 43]/2016	Australia	10	Vertical hacia arriba	D	Lignito	8.84 m/s, 325 K	1.56 m/s, 1248 K	1.04	No aplica	No	Ninguno
Li et al [44, 45]/2017	China	300	Vertical hacia abajo	A	Bituminoso	450 K	2 boquillas, 450 K	-	200	No	Refrigeración con Agua
Este trabajo/2017	Colombia	28	Horizontal	A	Sub-bituminoso	10 m/s, 303 K	2 boquillas, 363 K	1.2	120	No	Refrigeración con Aire

† Factor de aireación.

†† Distancia de las boquillas laterales al centro del quemador.

‡ En algunos casos en lugar de removerse calor, se adiciona por medio de resistencias eléctricas.

primer lugar, se observa que para bajas potencias se obtiene un grado de conversión alto con un carbón bituminoso si las paredes son calentadas externamente a alta temperatura ($T_w \geq 1373\text{K}$). Igualmente, para bajas potencias el grado de conversión es realmente malo ($< 30\%$) cuando se usa un carbón antracítico sin precalentamiento ni del aire ni de las paredes, pero la conversión mejora significativamente si se usa lignito, e incluso, se obtiene un grado de conversión comparable al caso con calentamiento de las paredes, si el lignito es arrastrado por N_2 .

Con respecto a las potencias intermedias (entre 100 y 500 kW) los datos reportados corresponden solamente a carbones bituminosos, donde se observa que no hay un comportamiento muy claro, debido a que hay una conversión casi del 100% con una temperatura del aire de 418 K, pero hay dos casos con temperaturas mayores a 418 K con conversiones apenas cercanas al 80%. Además, como era de esperarse para una temperatura alta del aire (1173 K) la conversión es mayor a 95%. Lo anterior hace suponer que el diseño del quemador y de la cámara de combustión deben jugar un papel importante con el fin de obtener mejores resultados en la conversión del carbón.

Por último, para el caso de potencias mayores a 500 kW en general se tienen conversiones del carbón muy altas, aunque hay un caso (750 kW) donde la conversión es un poco menor a pesar de que la temperatura del aire es relativamente alta. Además, es importante resaltar que para 12 MW se han obtenido conversiones muy altas aunque se tienen temperaturas de precalentamiento del aire relativamente bajas, y se usan coque de petróleo y antracita, los cuales son difíciles de quemar.

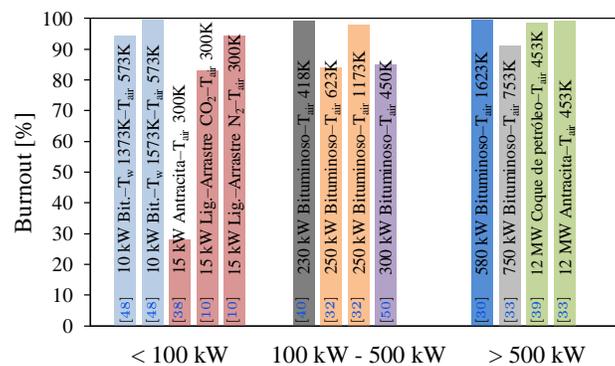


Figura 2.3. Porcentaje de conversión del carbón para aplicaciones de combustión sin llama.

2.2.1. Distribución de tamaños de partículas de carbón pulverizado

En la Figura 2.4 se muestra una comparación de la distribución de partículas de carbón pulverizado usadas en la literatura en trabajos de combustión sin llama. Además, con el fin de comparar, también se presentan datos para combustión convencional. La comparación se hace en base a los parámetros D_{10} , D_{50} y D_{90} , los cuales se definen como los diámetros de partícula para los cuales la fracción de masa acumulada es igual a 10%, 50% y 90% respectivamente. Para el caso de combustión sin llama los datos analizados son tomados de [36, 48, 53–58], mientras que para el caso de combustión convencional las referencias analizadas son [59–62]. En dicha figura, los datos de la literatura son presentados en términos del valor medio de todos los datos analizados y el valor máximo y mínimo de dichos datos, los cuales corresponden a las barras alrededor de los datos medios. Adicionalmente, se muestran los parámetros para la distribución de partículas usada en este trabajo.

Se observa que el parámetro D_{10} , de los datos de la literatura, para ambos regímenes de combustión (combustión sin llama y combustión convencional) es bastante similar, mientras que los parámetros D_{50} y D_{90} son menores para el caso de combustión sin llama. Esto se debe principalmente al hecho de que las temperaturas y la concentración de oxígeno en la zona de reacción son menores en combustión sin llama, y por estas razones se hace uso de partículas más pequeñas con el fin de mantener una conversión alta del carbón. En general el parámetro D_{90} para combustión sin llama es menor a $100\ \mu\text{m}$ e incluso hay autores que han usado distribuciones de partículas con un D_{90} tan pequeño como $58\ \mu\text{m}$. Esto es algo que es importante y debe ser tenido en cuenta a la hora de tamizar el carbón que se usa en este trabajo, esto con el fin de obtener distribuciones de partículas similares a las usadas en la literatura.

Adicionalmente, se observa que para el caso de combustión sin llama hay un solo trabajo (Li et al [44]) que ha usado una distribución de partículas similar a las distribuciones de partículas de combustión convencional.

Debido a que esta distribución de partículas es bastante diferente a la usualmente encontrada en combustión sin llama, se opta por excluir los datos de estos autores en el cálculo del valor medio, y más bien se presentan explícitamente en la figura.

También, En la Figura 2.4 se observa que para la distribución de partículas usada en este trabajo, el parámetro D_{90} está por encima de los valores usualmente usados en la literatura, pero los parámetros D_{50} y D_{10} se acomodan mejor a éstos. A pesar de que el carbón usado en este trabajo tiene un parámetro D_{90} mayor al máximo de la literatura, se opta por hacer uso de esta distribución de carbón pulverizado, debido principalmente a la dificultad que representa obtener un carbón que tenga un D_{90} menor a $100\ \mu\text{m}$. Vale aclarar que la distribución de tamaños de partícula usada en este trabajo se muestra con más detalle en la Sección 3.3.

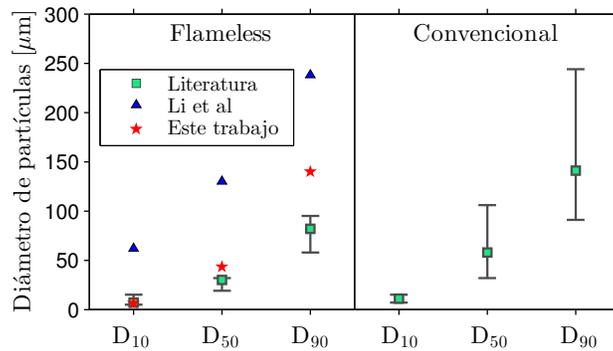


Figura 2.4. Distribución de tamaños de partículas usados por diferentes autores. Para flameless las referencias analizadas son [36, 48, 53–58]. Para combustión convencional las referencias analizadas son [59–62].

2.2.2. Medición de especies químicas.

La medición de la concentración de especies químicas en zonas de reacción confinadas, es ampliamente llevada a cabo por medio de sondas de succión [26, 60, 63–66] las cuales en su mayoría son refrigeradas con agua, esto con el fin de evitar que las reacciones químicas continúen al interior de la misma. En la Figura 2.5 se muestra un esquema de la sonda usada en este trabajo.

Por otro lado, hay que tener en cuenta que el uso de esta técnica de medición viene acompañada de algunas incertidumbres, que en menor o mayor grado, si no se toman las precauciones necesarias, pueden conducir a que los resultados obtenidos estén alejados de lo que realmente sucede al interior de la cámara de combustión.

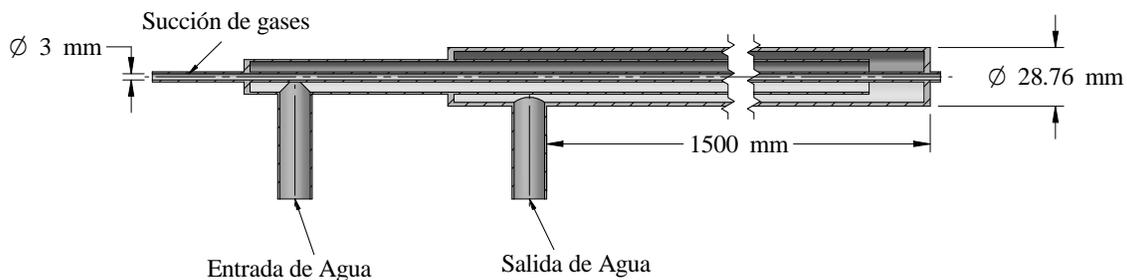


Figura 2.5. Ejemplo esquemático de la sonda de succión de gases para la medición de especies usada en este trabajo.

En general, las incertidumbres generadas por el uso de sondas para la medición de especies corresponden a: la perturbación del campo de flujo debido a la sonda, la cantidad de gases succionados, la continuación de las reacciones químicas al interior de la sonda, reacciones químicas de la muestra con el material de la sonda o con el ducto por el cual es transportada hasta los analizadores de gases, condensación de los gases antes del acondicionador del analizador, y un posicionamiento inadecuado de la sonda al interior de la cámara de combustión.

Algunas de estas incertidumbres son controlables en alguna medida, mientras que otras como por ejemplo la perturbación del flujo, es difícil de establecer como la sonda afecta el flujo y ésto a su vez la concentración de especies químicas. Aunque, este efecto puede ser minimizado con un adecuado diseño de la sonda.

El efecto de promediación de la medición, generado por la cantidad de gases succionados, hace que en lugar de tener mediciones en un punto, estas más bien sean en un volumen de tamaño y forma desconocido. Para efectos de comparación con resultados numéricos, esto debe ser tenido en cuenta.

Para minimizar la posibilidad de que las reacciones químicas continúen desarrollándose al interior de la sonda, por lo general se emplean sondas refrigeradas con agua [10, 26, 38, 44, 63, 67, 68], lo cual puede tener el inconveniente de condensación de productos de combustión conduciendo a absorción de gases en el agua, o incluso a la destrucción de NO. Debido a estos inconvenientes, hay autores que hacen uso de sondas refrigeradas por aceite precalentado a 200°C [4, 29, 34, 35], lo cual parece ir en contra del principio de enfriamiento súbito de la muestra de gases para detener las reacciones químicas, pero se tiene como ventaja la no condensación de agua en los gases. Adicionalmente, también existe la posibilidad de que la condensación ocurra en el ducto que lleva los gases al analizador. Este efecto es despreciable si el ducto es corto (menor a 1 m) como expone Alvarado [10]. Por otro lado, también se puede hacer uso de ductos que son calentados eléctricamente, donde en este sentido, se han usado ductos a una temperatura de 200°C [29, 35] o a 60°C [18].

Por experiencia con el uso de la sonda refrigerada con agua, se debe tener cuidado en su uso, ya que debido al tamaño de la misma, puede tener un impacto significativo sobre las temperaturas dentro de la cámara de combustión debido a la remoción de calor, lo cual conduce a una modificación del campo de especies químicas, cuyas reacciones son altamente dependientes de la temperatura. Por esto, se debe tener cuidado en el diseño de la sonda de tal forma que la remoción de calor sea mínima.

Con el fin de evitar la interacción química de la muestra con el material de la sonda o con el ducto que transporta los gases al analizador, hay algunos diseños en los cuales la primera zona de succión es de cuarzo [64], pero este tipo de diseño difícilmente es viable en este trabajo. Por otro lado, White [69] mostró que el efecto de interacción de los gases con el acero inoxidable es minimizado si el acero permanece a baja temperatura. Adicionalmente, se usa un ducto de teflón para transportar los gases desde la sonda al analizador, con el fin de evitar que haya interacciones químicas de los gases con el material del ducto, el cual, según White [69], es inerte para muestreo de gases.

En cuanto al posicionamiento de la sonda, es algo a lo que se debe prestar atención. Por ejemplo, para una sonda de muestreo con una longitud de 1 m, la desviación de 1° en el posicionamiento de la misma conduce a una diferencia de casi 2 cm con respecto al punto en el cual debería realmente estar ubicada la sonda, por lo cual, es necesario algún sistema sencillo, que garantice el alineamiento de la sonda, especialmente cuando se estén haciendo mediciones en la zona cercana a la descarga del quemador, que está sometida a mayores gradientes.

2.2.3. Medición de temperatura

De forma similar a la medición de especies, la medición de temperatura al interior de cámaras de combustión es ampliamente realizada por medio de pirómetros de succión [60, 63, 66, 67, 70, 71], donde se usan termopares tipo K, R, o S, los cuales son protegidos por medio de escudos cerámicos o metálicos para reducir los errores de medición ocasionados por la radiación. Adicionalmente, las velocidades de succión de gases oscilan entre 5 m/s hasta 100 m/s. En la Figura 2.6 se muestra de forma esquemática, la sonda que ha sido usada en este trabajo para medir la temperatura al interior de la cámara de combustión.

Por otro lado, las principales incertidumbres en la medición de temperatura con el pirómetro de succión se deben a la perturbación del campo de flujo, la velocidad de los gases succionados alrededor del termopar y una posible desviación en el posicionamiento del pirómetro con respecto al punto sobre el cual se quiere realizar la medición. En general, la minimización y tratamiento de dichas incertidumbres es bastante similar al tratamiento usado con la sonda de medición de especies, y por esta razón no se hace un análisis más detallado para el pirómetro.

2.2.4. Quimioluminiscencia espontánea.

Para el caso de combustión de carbón pulverizado y más específicamente en combustión sin llama hay algunos autores que han usado la técnica de quimioluminiscencia espontánea [29, 35, 40, 49], la cual está basada en el hecho de que cuando se tiene una reacción química se forman moléculas en un estado excitado las cuales al volver a su estado de reposo (*ground state*) emiten luz en una longitud de onda que es característica del tipo de molécula. La implementación de esta técnica, requiere del uso de una cámara ICCD y filtros ópticos que

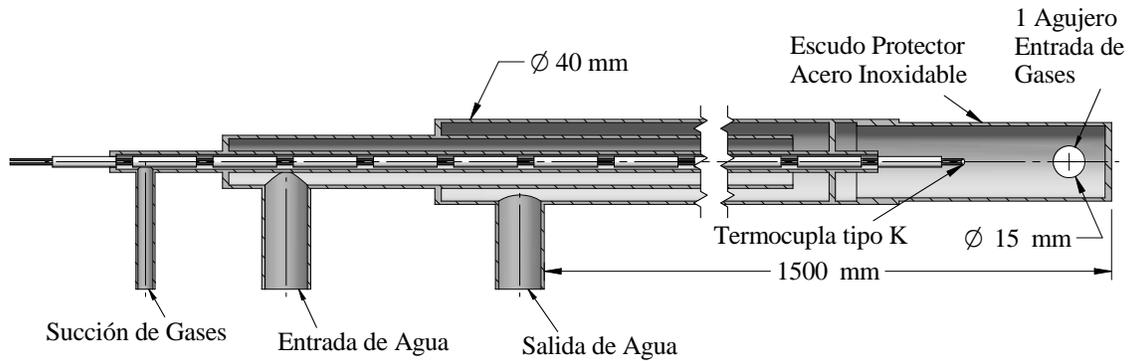


Figura 2.6. Ejemplo esquemático del pirómetro de succión usado en este trabajo para medir la temperatura.

permitan el paso de la radiación solo en la longitud de onda deseada.

El espectro de radiación emitido por la llama puede ser clasificado en dos tipos [72]: emisiones de banda amplia, las cuales son producidas por hollín, por las partículas de carbón y por las paredes de la cámara de combustión, y se asemejan en su forma a la emisión producida por un cuerpo negro, y por lo tanto son predichas por medio de la ley de Plank [73]; y emisiones de banda discreta, las cuales son producidas por moléculas en estado excitado como el OH^* . Las especies que emiten quimioluminiscencia que son típicamente de interés en llamas de hidrocarburos son OH^* , C_2^* y CH^* [74].

En la Figura 2.7 se muestra la intensidad espectral normalizada para el OH^* (denotada como $I_{\lambda N} \text{OH}^*$) y el CH^* (denotada como $I_{\lambda N} \text{CH}^*$) calculadas con el software LIFBASE [75], y también se muestra la intensidad espectral normalizada para un cuerpo negro con temperatura de 1173 K y 1273 K ($I_{\lambda N} \text{BB-1173 K}$ y $I_{\lambda N} \text{BB-1273 K}$). Adicionalmente, se presentan las curvas de transmisividad de los filtros ópticos FB430 y F10 que son usados en este trabajo para captar las señales de quimioluminiscencia.

Se observa que las curvas de transmisividad de los filtros usados en este trabajo abarcan bastante bien las zonas de emisividad del OH^* y el CH^* , aunque la transmisividad del filtro de OH^* es bastante baja (cerca a 15 %).

Por otro lado, debe tenerse presente que para el filtro de CH^* , probablemente la señal que se obtiene no va a corresponder solamente a la señal producida por el CH^* , sino que dicha señal va a estar superpuesta con una parte de emisión de cuerpo negro, la cual puede ser corregida en parte restando el background de las paredes, pero que no puede ser completamente corregida para la emisión producida por las propias partículas de carbón pulverizado.

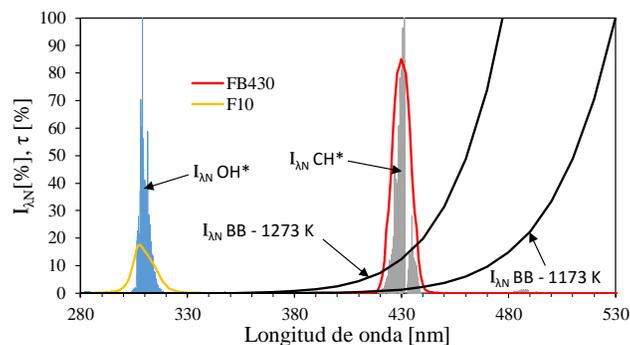


Figura 2.7. Intensidad espectral normalizada del OH^* , CH^* y cuerpo negro (BB) a 1173 K y 1273 K en función de la longitud de onda. Transmisividad de los filtros FB430, y F10.

Otra parte importante con respecto a la medición de quimioluminiscencia tiene que ver con el tratamiento de las imágenes que son tomadas con la cámara ICCD. En primer lugar se requiere tomar una cantidad adecuada de imágenes para realizar el tratamiento estadístico de las mismas (como por ejemplo para obtener una imagen promedio). Con el fin de garantizar que la cantidad de imágenes que se toman es la adecuada, es necesario cerciorarse que la imagen promedio es convergente, es decir, que dicha imagen promedio no difiera al aumentar el número de imágenes tomadas. En este sentido, el número de imágenes que deben ser tomadas depende del grado de turbulencia del sistema que se está analizando, y se han encontrado trabajos con

cantidades entre 45 y 400 imágenes [29, 35, 72, 76] o incluso con cantidades mayores a 2000 imágenes [77, 78]. Debido a que la cámara ICCD que se tiene para realizar este trabajo toma una imagen por segundo, entonces se debe buscar que la cantidad de imágenes a tomar sea del orden de 100 a 500 imágenes, esto con el fin de minimizar el tiempo requerido para realizar las mediciones.

Posterior a la obtención de las imágenes promedio, también deben tomarse imágenes sin combustión, pero con el horno aún a alta temperatura, para obtener lo que se conoce como la señal del *background*. Usualmente se toma también alguna cantidad de imágenes del *background*, las cuales son promediadas y posteriormente dicha imagen promedio del *background*, es sustraída de la imagen promedio. Debido a que estas imágenes deben ser tomadas justo cuando se apaga la cámara de combustión, entonces la cantidad de imágenes que se pueden tomar es pequeña, debido a que cuando se apaga el horno, la temperatura de la cámara de combustión desciende rápidamente.

Adicional al restado de la imagen del background, también debe hacerse un adecuado filtrado de las imágenes, debido a que usualmente las imágenes tienen un ruido electrónico [78]. Para más detalles acerca de como se realiza el filtrado de las imágenes, en el Anexo B se muestra el código de Matlab desarrollado para realizar dicho tratamiento.

2.2.5. Mie scattering

Al igual que la técnica de quimioluminiscencia espontánea, la técnica de Mie *scattering* es una técnica óptica no intrusiva y puede ser usada para el diagnóstico de llamas que contienen material particulado. Dicha técnica se basa en el cambio de dirección que sufre la luz al pasar a través de un obstáculo, en este caso las partículas de carbón pulverizado. Además, la mayoría de la luz dispersada (*scattered*) por las partículas tiene una longitud de onda idéntica que la longitud de onda de la luz incidente sobre las partículas.

Sung et al [61] analizan por medio esta técnica la zona de recirculación interna de un quemador tipo doble swirl de 10 kW, con el fin de observar en que zonas se encuentran mayores concentraciones de partículas de carbón pulverizado, aunque no dan muchos detalles de la forma en la que han empleado la técnica.

Balusamy et al [79] usan varias técnicas ópticas, entre ellas la medición de Mie *scattering*, para estudiar el efecto de la dilución del oxidante y la variación de la carga de carbón en un quemador de 21 kW quemando carbón pulverizado y metano. Hacen uso de un láser Nd:Yag (532 nm y 20 mJ/pulso), generando un plano láser con un juego de lentes y captan la señal proveniente de la luz dispersada por las partículas por medio de una cámara CCD (1024 × 1024 pixeles) equipada con un filtro de interferencia (532 nm, ancho de banda 9.42 nm y pico de transmisión 64%), obteniendo una resolución espacial aproximada de 59 μm/pixel y tomando 1000 imágenes para hacer análisis estadístico. Comparan un caso sin combustión y otro con combustión, mostrando que en este último la mayor parte de la señal de Mie *scattering* desaparece en la zona de reacción.

Hayashi et al [80] emplean la técnica de Mie *scattering* de forma simultánea con otras técnicas ópticas para diagnosticar la combustión de carbón pulverizado en un quemador a escala de laboratorio, usando un láser Nd:YAG con longitud de onda de 532 nm, generando un plano láser de 40 mm de ancho y captando la señal con una cámara de alta velocidad CMOS, a la cual acoplan un filtro de interferencia con longitud de onda centrada en 532 nm y ancho de banda de 30 nm. El tiempo de apertura de la cámara se puso en 72 ns y la resolución espacial fue de 78 μm/pixel, encontrando de forma similar a Balusamy que la señal de Mie *scattering* prácticamente desaparece en la zona de reacción.

De forma similar a la técnica de quimioluminiscencia, en este caso las imágenes deben ser corregidas por el *background*, pero adicionalmente, deben ser corregidas por la distribución de energía del plano láser.

2.2.6. Conclusiones del estado del arte con trabajos experimentales

Se concluye que la mayoría de trabajos experimentales en combustión sin llama con carbón pulverizado han sido realizados en cámaras de combustión verticales, con el quemador ubicado en la parte superior de la misma. Además el tipo de quemador más común es el quemador tipo A (boquilla de carbón central y boquillas de aire periféricas, Figura 2.1). Las potencias probadas en este tipo de equipos oscilan entre 5 kW hasta 300 kW, donde para la potencia más baja existe calentamiento eléctrico de las paredes con el fin de ayudar a sostener la combustión y para tener control en la temperatura de las mismas.

Para medir las especies químicas al interior de la cámara de combustión la mayoría de autores hacen uso de sondas de succión refrigeradas por agua. Adicionalmente, para medir la temperatura se usan pirómetros de succión, los cuales tienen escudos que cubren el termopar, con el fin de evitar los errores causados por la radiación.

En las mediciones de quimioluminiscencia espontánea, se va a usar un filtro F10 para captar la señal

proveniente del OH^* , y para captar la señal de CH^* se va a hacer uso de un filtro FB430.

Es importante destacar el hecho de que no se encontraron trabajos experimentales que involucren el estudio de la combustión sin llama con mezclas de carbón pulverizado y gas natural.

2.3. Simulación numérica de la combustión sin llama

Dado que una parte importante de este trabajo involucra el análisis numérico de diferentes configuraciones geométricas de un quemador de combustión sin llama para quemar mezclas de carbón y gas natural, entonces, se realiza un análisis de diferentes trabajos encontrados en la literatura los cuales están enfocados en la simulación numérica de dicho régimen de combustión y principalmente con carbón pulverizado.

2.3.1. Simulación de combustión heterogénea de carbón pulverizado

La combustión del carbón involucra una serie de fenómenos que representan una gran dificultad en su modelado, lo cual es ocasionado principalmente por la interacción de la fase sólida con la fase gaseosa. Debido a esto, diferentes autores han propuesto una serie de modelos simplificados, con el fin de hacer predicciones aceptables del proceso de combustión con tiempos de cálculo moderados.

Adicional a lo anterior, el problema que se plantea en este trabajo no solo implica la combustión del carbón pulverizado, sino que también involucra la combustión del gas natural, la cual debe modelarse adecuadamente, para obtener resultados satisfactorios.

Para el caso del modelado de la combustión sin llama con carbón pulverizado, usualmente se usan los mismos modelos empleados para simular la combustión de carbón pulverizado en condiciones de combustión convencional, exceptuando por la inclusión de las reacciones de gasificación. Sin embargo, para el caso de la combustión sin llama de fase gaseosa, cuando se emplea un mecanismo de reacción global, se hacen algunos ajustes a las constantes cinéticas de dichos mecanismos, con el fin de que las predicciones sean más acertadas bajo estas condiciones.

Normalmente es aceptado que la combustión del carbón pulverizado involucra 3 procesos principales, los cuales son: el secado de las partículas, la volatilización y el quemado del carbonizado (ver Figura 1.3). Dependiendo de las condiciones bajo las cuales se queman las partículas de carbón, estos procesos pueden tener lugar de forma simultánea o al menos puede haber algún grado de solapamiento entre sí, pero por lo general, en lo que se refiere a la simulación de estos procesos, la mayoría de autores asumen que ocurren en serie. Adicional a estos 3 procesos, de forma paralela ocurre la combustión de los volátiles en la fase gaseosa.

Antes de continuar con los procesos de combustión del carbón y el modelamiento de los mismos, es necesario decidir cómo van a ser modeladas las partículas de carbón. En ese sentido se tienen 2 opciones: modelar la combustión del carbón como si fuese una fase continua (marco de referencia Euleriano) o modelar ésta como una fase discreta (marco de referencia Lagrangiano). La primera opción, tiene como beneficio que el tiempo de cálculo requerido es bajo, pero tiene la dificultad de carecer de sustento físico, ya que las partículas en realidad no se comportan como un continuo, y además es difícil introducir el efecto de, por ejemplo, la distribución de tamaños de partículas. Debido a estas dificultades, el número de trabajos que usan este enfoque es reducido y para combustión sin llama solo se encontró el trabajo de Kim et al [53], en el cual se hace la simulación de una cámara de combustión con carbón pulverizado, obteniendo una predicción relativamente buena con respecto a resultados experimentales.

La segunda opción, modelar la combustión del carbón como una fase discreta, requiere el seguimiento de la trayectoria de miles de partículas a lo largo de la cámara de combustión, implicando que los tiempos de cálculo son relativamente altos. El cálculo de las trayectorias se hace en base al balance de fuerzas sobre las partículas suponiendo que las partículas son esféricas y por lo general se asume que las únicas fuerzas a las que éstas están sometidas son la fuerza de arrastre y la fuerza de gravedad.

Por otro lado, la fase homogénea se calcula en base a las ecuaciones promediadas de Navier Stokes en estado estable, por lo cual se pierde la información debida a las fluctuaciones turbulentas. De esta forma, diferentes partículas que ingresan al dominio de cálculo desde un mismo punto de inyección, siempre estarían sometidas a las mismas fuerzas y por lo tanto sus trayectorias serían iguales. Debido a esto, debe usarse un modelo que genere una variación aleatoria en el campo de velocidad, con el fin de generar la dispersión de las partículas debida a la turbulencia. En este sentido el modelo más usado es el modelo *Random Walk* [81], en el que se modifica la velocidad en cada celda del dominio, en base a un número aleatorio distribuido normalmente alrededor de la velocidad en dicha celda y en base a las variables de energía cinética turbulenta (k) y disipación de la energía cinética turbulenta (ϵ), obtenidas por medio del modelo de turbulencia. De esta

forma, cada vez que se calcula la trayectoria de una partícula el resultado es diferente, generando así una dispersión en el jet de partículas.

Debido a que para la combustión de carbón pulverizado el enfoque Lagrangiano tiene más sentido físico y a que se pueden introducir más fácil efectos como la distribución del tamaño de partículas, la mayoría de trabajos de simulación de carbón pulverizado en combustión sin llama han usado este enfoque (ver Tabla 2.2).

Teniendo claro que para la simulación de las trayectorias de las partículas se va a usar el enfoque Lagrangiano, entonces a continuación se describe la forma en que se modelan los procesos que sufren las partículas bajo este enfoque.

2.3.1.1. Secado

Para el secado, dependiendo de si la cantidad de humedad que contiene el carbón es baja, podría ser omitido este proceso ya que el efecto del secado sería pequeño. Por el contrario si la cantidad de humedad del carbón es relativamente alta, entonces debe modelarse dicho proceso. Para esto, debido a que las partículas de carbón pulverizado son pequeñas, se asume que la humedad se transporta hacia la superficie de la partícula, manteniendo de esta forma una capa líquida en dicha superficie, por lo cual la tasa de evaporación es independiente de la naturaleza de la partícula y es calculada en base a la correlación de Ranz y Marshall [82, 83], entonces puede decirse que el proceso de secado de las partículas de carbón se asume como si fueran gotas de agua con el diámetro de las partículas de carbón, cuyo proceso termina en el momento en que la cantidad de agua es consumida completamente.

En este trabajo debe tenerse en cuenta el proceso de secado, debido a que el carbón usado tiene una humedad de 11.4% en base másica (Ver Tabla 3.3, Sección 3.3).

2.3.1.2. Volatilización

Este es un proceso de mucha importancia durante la combustión del carbón pulverizado y para calcular la tasa a la cual lo volátiles son liberados hay diferentes modelos disponibles. A continuación se describen y se comparan diferentes modelos de volatilización con el fin de seleccionar el más adecuado, donde los modelos descritos (exceptuando el *Chemical Percolation Devolatilization*) requieren definir una temperatura a partir de la cual empieza dicho proceso, la cual en este trabajo es fijada en 600 K [84].

2.3.1.2.1. Tasa de liberación constante [84]. Este es el modelo más simple, en el cual la tasa de liberación de volátiles se asume como constante, y algunos valores recomendados para dicha tasa de volatilización son 12 s^{-1} [85] o la usada por Cadavid [86] (50 s^{-1}). El uso de este modelo tiene el inconveniente de que las partículas se volatilizan a la misma velocidad sin importar su tamaño o la tasa de calentamiento a la que es sometida la partícula.

2.3.1.2.2. Tasa de liberación tipo Arrhenius (*single rate*). Otro modelo bastante usado [38, 86–89] es el modelo de una tasa de volatilización tipo Arrhenius (*single rate*) [90], el cual considera que la volatilización es función de la temperatura y de la cantidad de volátiles que permanecen en la partícula. Para su uso deben conocerse los parámetros de energía de activación y el factor pre-exponencial. En la Figura 2.8 se muestra una gráfica tipo Arrhenius con diferentes curvas que corresponden a tasas de volatilización principalmente usadas en aplicaciones de combustión sin llama. Con el fin de realizar una posterior comparación de los modelos de volatilización, se selecciona la curva negra continua, para la cual los parámetros cinéticos son $A=4.92 \text{ E}+04 \text{ s}^{-1}$ y $E=7.40 \text{ E}+07 \text{ J/kmol}$.

2.3.1.2.3. Dos tasas de liberación tipo Arrhenius que compiten entre sí (*two competing rates*). Otro modelo de volatilización que es muy usado [29, 87, 89, 91, 92] es el modelo de dos tasas tipo Arrhenius que compiten entre sí [93]. Estas tasas pueden controlar el proceso de volatilización en diferentes rangos de temperaturas, por lo cual se puede mejorar la predicción de la tasa de volatilización global. Para hacer uso de este modelo se requiere conocer 6 parámetros diferentes, los cuales son las energías de activación y factores pre-exponenciales de las 2 tasas tipo Arrhenius y adicionalmente se requieren dos factores de ponderación (α_1 y α_2) los cuales usualmente se toman como la fracción de volátiles obtenida del análisis próximo del carbón (α_1) y el otro se calcula como $2\alpha_1$.

En la Figura 2.9 se muestran curvas de tasas cinéticas para este modelo, empleadas por diferentes autores, donde Christ [89] mostró que con los valores propuestos por Ubhayakar et al [94] ($A_1 = 3.70\text{E}+05$, $E_1 =$

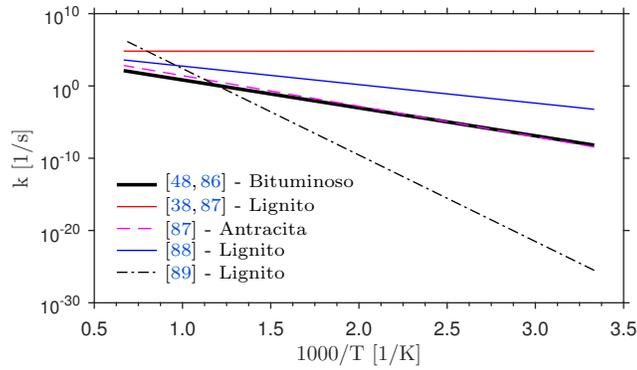


Figura 2.8. Tasas de volatilización en función del inverso de la temperatura para el modelo *single rate*.

$7.36\text{E}+07$, $\alpha_1 = 0.39$, $A_2 = 1.46\text{E}+13$, $E_2 = 2.51\text{E}+08$ y $\alpha_2 = 0.8$, línea negra continua en dicha figura), los resultados se ajustan mejor a los datos experimentales.

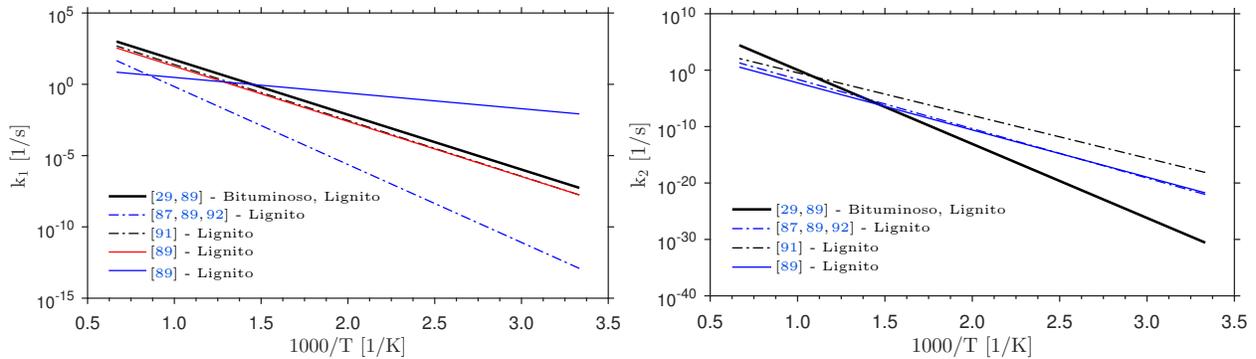


Figura 2.9. Tasas de volatilización k_1 y k_2 en función del inverso de la temperatura para el modelo de 2 tasas tipo Arrhenius.

2.3.1.2.4. CPD (Chemical Percolation Devolatilization). Los modelos anteriores tienen como ventaja que su implementación para cálculos computacionales es relativamente sencilla, y el tiempo de cálculo con dichos modelos es bajo. Por otro lado, hay modelos de volatilización más complejos que se basan en la estructura del carbón, entre los cuales uno de los más usados es el CPD [95]. En este modelo se asume que el carbón es una estructura macromolecular la cual está unida por una variedad de enlaces químicos, donde algunos son débiles, y se rompen fácilmente, mientras que otros son más estables. Para su uso se requieren 5 parámetros, los cuales son obtenidos de mediciones ^{13}C NMR (*Carbon-13 Nuclear Magnetic Resonance*), pero debido a que es difícil disponer de este tipo de datos para un carbón en particular, entonces, en la mayoría de trabajos donde se emplea este modelo se hace uso de la correlación de Genetti et al [96].

La versión del modelo CPD que está en la página web de sus desarrolladores [97] además de permitir calcular la tasa de volatilización para diferentes tasas de calentamiento, también permite calcular la cantidad de volátiles que se producen para determinada temperatura, además de la producción de gases livianos y alquitranes (*tar*).

Según [95, 98], de los modelos de volatilización con el que mejores predicciones se obtienen es con el CPD, pero dado que el tiempo de cálculo con este modelo es excesivamente alto y además la versión que está disponible en Fluent solo permite calcular la tasa de volatilización, entonces en este trabajo se descarta el uso de este modelo.

Para comparar los diferentes modelos de volatilización, se ha simulado un caso base con una temperatura uniforme de 1273 K, lo cual es una aproximación relativamente buena para el caso de combustión sin llama. Se han introducido partículas de 10 μm , 30 μm y 100 μm para las cuales se obtuvieron tasas de calentamiento del orden de 10^6 , 10^5 y 10^4 K/s y se evaluó el comportamiento de los diferentes modelos de volatilización bajo esas condiciones usando los constantes seleccionadas en las secciones anteriores. Para el caso del modelo CPD, se calcularon los parámetros en base a la correlación de Genetti [96] empleando el análisis próximo y

último del carbón usado en este trabajo (ver Tabla 3.3).

En la Figura 2.10 se muestran los resultados obtenidos. Se observa, que para los modelos de tasa de volatilización constante de 12 s^{-1} y 50 s^{-1} la masa que pierde la partícula por volatilización no depende de la tasa de calentamiento, por lo cual para los 3 tamaños de partícula se tiene que la volatilización se completa en el mismo tiempo. Adicionalmente si se toma como referencia el resultado obtenido con el modelo CPD. Entonces se puede decir que con el modelo de una sola tasa de volatilización, con los valores seleccionados de la literatura, se obtienen resultados muy alejados a la predicción hecha por el modelo CPD, especialmente para las partículas más pequeñas o las tasas de calentamiento más altas.

Por otro lado, se observa que las predicciones hechas por el modelo de 2 tasas son más cercanas a los resultados obtenidos con el CPD, por lo cual se opta por usar este modelo para realizar las simulaciones numéricas.

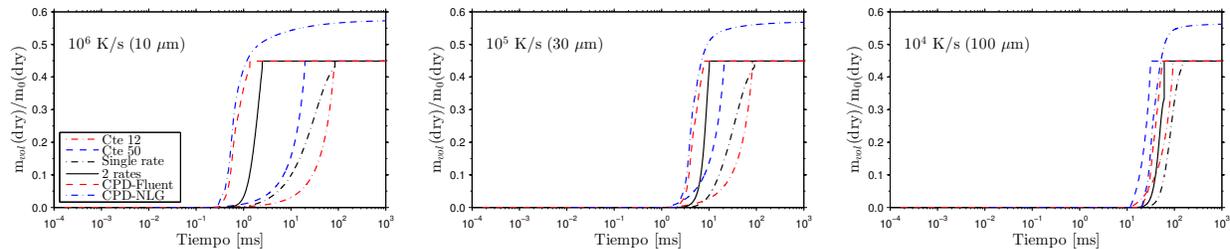


Figura 2.10. Comparación de diferentes modelos de volatilización para diferentes tasas de calentamiento.

De la Figura 2.10 también se puede apreciar que ninguno de los modelos de volatilización que están programados en Fluent tienen la capacidad de predecir la cantidad de volátiles final, sino que siempre se obtiene como valor final, el introducido del análisis próximo. Para esto, en cada una de las figuras también se muestra el resultado obtenido con el modelo CPD en su versión *stand-alone* (CPD-NLG) [97], donde se observa que la producción de volátiles es bastante más alta que la que se obtiene por medio del análisis próximo. Entonces, una forma de mejorar la predicción hecha por los modelos de volatilización que tiene incorporados Fluent, es usar el modelo CPD-NLG para predecir la cantidad final de volátiles y hacer uso de este valor para las simulaciones en Fluent, en lugar de la cantidad de volátiles del análisis próximo.

Debido a que la predicción del modelo CPD-NLG muestra que la producción de volátiles es mayor al 50 % entonces se espera que esto tenga un impacto grande en las simulaciones si se hace la corrección necesaria ya que la cantidad de carbonizado sería menor, y por lo tanto el tiempo para consumir dicho carbonizado también se reduciría.

2.3.1.3. Quemado del carbonizado (*Char burnout*)

En la combustión del carbón este es el proceso más importante ya que el tiempo que le toma al carbonizado consumirse es bastante mayor que el tiempo que le toma a las partículas volatilizarse. Dependiendo de la temperatura este proceso puede ser controlado por la química intrínseca del carbonizado lo cual ocurre principalmente para temperaturas bajas y altas concentraciones de oxidante (régimen 1, Figura 2.11), o puede ser controlado solo por la tasa a la cual se difunde el oxígeno en la capa límite que rodea las partículas de carbón, lo cual ocurre a altas temperaturas (régimen 3). También hay una zona de temperatura intermedia donde no hay un mecanismo específico que domine la tasa de quemado del carbonizado (régimen 2). Dado que en la combustión sin llama las temperaturas son moderadas o relativamente bajas pero la concentración de oxígeno también es baja entonces se presume que los modelos que deben emplearse deben tener en cuenta tanto la difusión como la química intrínseca.

Adicionalmente, para el caso de la combustión sin llama de carbón pulverizado no solo se debe tener en cuenta la reacción de oxidación del carbonizado, como es usualmente hecho en el caso de combustión convencional, sino que también debe tenerse en cuenta las reacciones de gasificación con CO_2 y H_2O , esto debido a que bajo las condiciones de combustión sin llama las presiones parciales del CO_2 y del H_2O son mayores que en combustión convencional y adicionalmente, la presión parcial del oxígeno es menor, lo cual es debido a la recirculación de gases de combustión a la zona de reacción, de tal forma que las reacciones del carbonizado con CO_2 y H_2O pueden contribuir a la tasa de consumo del mismo.

En base a lo anterior, de los modelos disponibles en Fluent que cumplen con las condiciones anteriores debe usarse el modelo de múltiples reacciones de superficie, el cual es equivalente al modelo cinético/difusivo [84,99], pero con la posibilidad de incluir las reacciones de gasificación. En este modelo se hace una ponderación entre

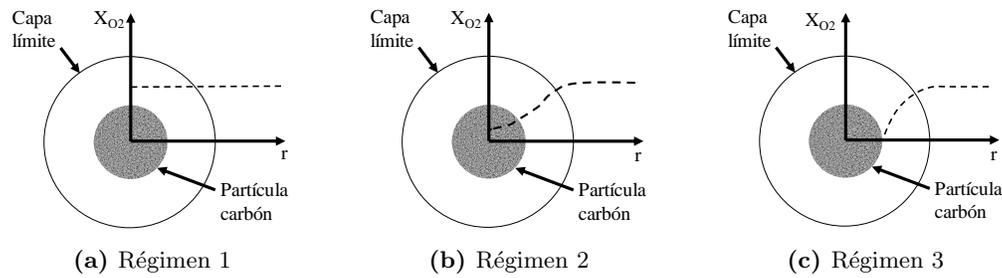


Figura 2.11. Regímenes de quemado de partículas de carbonizado.

la tasa cinética (tipo Arrhenius) y la tasa debida a la difusividad del O_2 , CO_2 y H_2O en la capa límite.

En la Tabla 2.2 se muestra un resumen de los modelos empleados por diferentes autores principalmente en simulaciones de combustión sin llama con carbón pulverizado. Se observa que la gran mayoría de trabajos hacen uso del enfoque Lagrangiano. Las potencias térmicas en dichos trabajos son diversas, y en su mayoría han empleado carbón bituminoso.

2.3.1.3.1. Reacción $C + 0.5O_2 \rightarrow CO$. Dado que no se tienen datos de los parámetros cinéticos del carbón usado en este trabajo, entonces se revisan los parámetros usados por diferentes autores, con el fin de escoger los que se van a usar en las simulaciones. En la Figura 2.12 se muestra una gráfica tipo Arrhenius donde se recopila la tasa cinética usada por diferentes autores para combustión sin llama y para combustión convencional. Es evidente que hay una gran dispersión de estas tasas por lo cual se seleccionan los valores $A=5.00 \text{ E-}03$ y $E=7.40 \text{ E+}07 \text{ J/kmol}$, los cuales son los más usados.

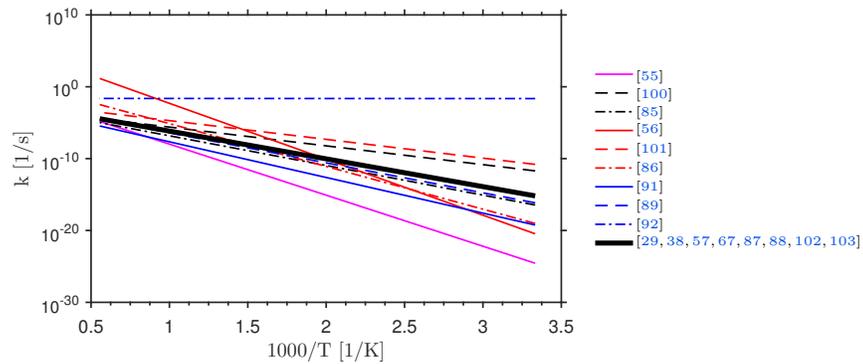


Figura 2.12. Gráfica de las tasas cinéticas de la reacción $C + 0.5O_2 \rightarrow CO$, usadas por diferentes autores.

2.3.1.3.2. Reacción $C + CO_2 \rightarrow 2CO$. De la misma forma que con la reacción de oxidación, para la reacción de gasificación del carbonizado con CO_2 no se dispone de datos experimentales específicos para el carbón empleado en este trabajo, entonces nuevamente se revisan parámetros cinéticos usados por diferentes autores, lo cual se muestra en la Figura 2.13 donde se presenta la variación de estos datos cinéticos con respecto al inverso de la temperatura. En este caso no se observa una dispersión similar a la ocurrida con la reacción de oxidación, y se selecciona $A=6.35 \text{ E-}03$ y $E=1.62 \text{ E+}08 \text{ J/kmol}$, debido a que son las constantes que más se usan.

2.3.1.3.3. Reacción $C + H_2O \rightarrow CO + H_2$ En la Figura 2.14 se muestra la variación de las tasas cinéticas para esta reacción con diferentes parámetros cinéticos usados por diferentes autores. De dicha gráfica seleccionan los parámetros $A=1.92 \text{ E-}03$ y $E=1.47 \text{ E+}08 \text{ J/kmol}$ debido a que son las constantes que más se usan para esta reacción.

2.3.2. Combustión de fase homogénea

Paralelo a los procesos anteriormente descritos se lleva a cabo el proceso de combustión turbulenta de los volátiles y en este caso, también se lleva a cabo la combustión turbulenta del gas natural. En los trabajos

Tabla 2.2. Resumen de modelos usados para la combustión de carbón pulverizado por diferentes autores para aplicaciones de combustión sin llama.

Autor/año	Aplicación	Enfoque	Potencia Térmica (kW)	Carbón	Secado	Volatilización	Char burnout	Dispersión de partículas	Reacciones de carbonizado	Secuencia de los procesos	Reacciones fase homogénea	Turbulencia	Radiación
Kim et al [53]/2007	Flameless	Euleriano	581.9	Bituminoso	No	Single rate	Extended resistance equation	-	1	Serie	EDC - 8 pasos	S k-ε	DO
Stadler et al [48]/2009	Flameless	Lagrangiano	40	Bituminoso	Si	Single rate	-	RWM	3	Paralelo	EDC - 3 pasos	R k-ε	DO
Schaffel et al [54]/2009	Flameless	Lagrangiano	581.9	Bituminoso	No	CPD	Intrinseco	RWM	1	Serie	FRFD - 2 pasos	S k-ε	DO
Vascellari y Cau [55]/2012	Flameless	Lagrangiano	581.9	Bituminoso	Si	CPD	Cinético/difusivo	RWM	3	Serie	FRFD - 2 pasos	R k-ε	P1
Vascellari et al [56]/2014	Flameless	Lagrangiano	581.9	Bituminoso	Si	Single rate ajustado con CPD	VH-Z-SF	RWM	3	Serie	EDC - DRM22	R k-ε	P1
Saha et al [38]/2014	Flameless	Lagrangiano	15.2	lignito	No	Single rate	Reacciones Múltiples	RWM	3	Serie	EDC - 3 pasos y 4 pasos	R k-ε	DO
Saha et al [87]/2015	Flameless	Lagrangiano	15.2	Lignito, antracita	No	Single rate, Two rates, y CPD	Reacciones Múltiples	RWM	3	Serie	EDC - 3 pasos y 4 pasos	R k-ε	DO
Tu et al [58]/2015	Oxy-Flameless	Lagrangiano	581.9	Bituminoso	Si	CPD	Cinético/difusivo	RWM	3	Serie	EDC - 4 pasos	S k-ε	P1
Tu et al [57]/2015	Oxy-Flameless	Lagrangiano	518.9	Bituminoso	Si	CPD	Cinético/difusivo	RWM	3	Serie	EDC - 4 pasos	S k-ε	P1

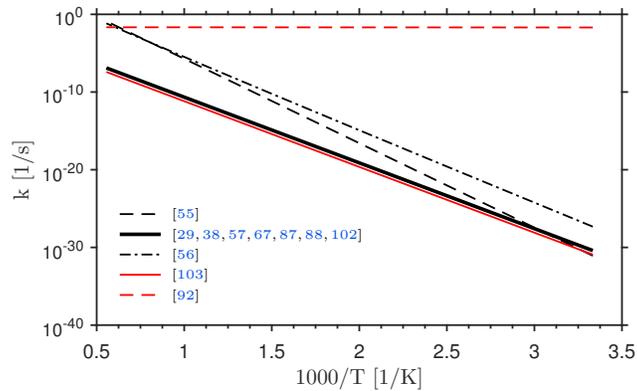


Figura 2.13. Tasas cinéticas de la reacción $C + CO_2 \rightarrow 2CO$ usadas por diferentes autores.

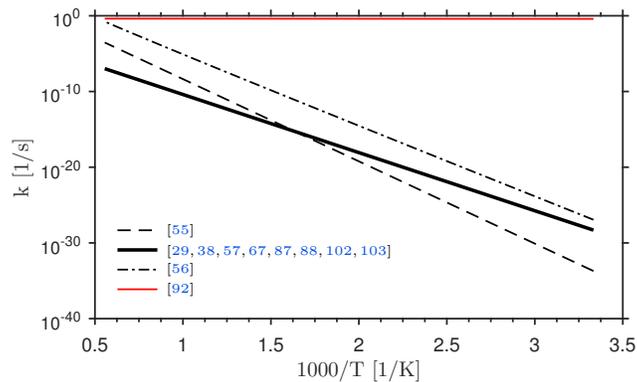


Figura 2.14. Tasas cinéticas de la reacción $C + H_2O \rightarrow CO + H_2$, usadas por diferentes autores.

encontrados de simulación de combustión sin llama de carbón pulverizado, no se ha encontrado ninguno que tenga en cuenta el efecto cinético que podría tener la combustión de los volátiles o del gas natural sobre la combustión de superficie del carbonizado. Esto se puede deber principalmente al hecho de que los trabajos de simulación en combustión sin llama con carbón pulverizado no involucran la mezcla de combustibles gaseosos, y además, en la mayoría se considera que el quemado del carbonizado ocurre después del proceso de volatilización (ver Tabla 2.2), por lo cual en esos trabajos no es necesario tener en cuenta algún tipo de interacción entre la cinética de la fase homogénea y de la fase heterogénea.

Para el caso de este trabajo, dependiendo de la configuración geométrica y de las condiciones bajo las cuales ocurra la combustión del carbón, podría suceder que en una misma posición coexistan la combustión homogénea del gas natural y la combustión de superficie del carbonizado y bajo estas condiciones la cinética de ambos procesos podría afectarse mutuamente, pero debido a que no se han encontrado modelos que den cuenta de dicho efecto, entonces, la combustión de la fase homogénea se va a modelar de acuerdo a lo encontrado en la literatura para la combustión de carbón pulverizado.

De acuerdo a la Tabla 2.2, se observa que para modelar la combustión turbulenta de la fase homogénea (volátiles, gas natural y productos de la reacción del carbonizado) el modelo más usado es el EDC (*Eddy Dissipation Concept*) [104], y aunque este modelo tiene la capacidad de emplear mecanismos detallados, en su mayoría todos los autores han hecho uso de mecanismos globales, esto debido principalmente a que el tiempo de cálculo con este modelo es bastante alto. Solo hay un trabajo (Vascellari y Cau [55]) que hizo uso de un mecanismo detallado (DRM 22 [105]) obteniendo un campo de temperatura más uniforme que con mecanismos globales, pero a pesar de esto, la predicción de especies como el CO no tiene una mejora importante, e incluso en comparaciones con datos experimentales la predicción es un poco más acertada con el mecanismo global de Jones and Lindstedt [106].

En base a esto, en este trabajo se hace uso del modelo EDC para la combustión turbulenta de la fase homogénea, y aunque lo ideal sería usar un mecanismo detallado, se opta por hacer uso de un mecanismo de reacción global para el metano y para los volátiles, debido principalmente a las limitaciones de tiempo de cálculo y a la cantidad de simulaciones que deben realizarse.

2.3.2.1. Selección de la composición del gas natural.

Antes de seleccionar un mecanismo de reacción, debe seleccionarse la composición del gas natural que va a ser usado en las simulaciones numéricas. Esto, debido a la variabilidad en la composición del gas natural que llega a la ciudad de Medellín. Para esto, se tomaron los datos de composición diaria del gas natural que llega a dicha ciudad (Estación de entrega de gas natural Sebastopol) para un periodo de aproximadamente 1 año, desde el 1 de enero de 2016 hasta el 29 de diciembre de 2016, los cuales fueron tomados de [107].

En la Figura 2.15 se muestra el resultado de dicho análisis para el porcentaje de metano en el gas natural, el cual se analizó en 4 diferentes periodos: año 2016, último semestre del año 2016, último trimestre del año 2016, y diciembre del 2016. Como se puede observar en dicha figura, cuando se observa todo el año 2016, se ve que en un alto porcentaje de los días analizados el gas natural presentó una concentración de gas natural mayor a 94 %, pero cuando se analizan los periodos más recientes, se ve que el porcentaje de metano en el gas natural estuvo rondando entre un 81 % y un 92 %. Por este motivo es muy probable que cuando se realicen las pruebas experimentales, el porcentaje de metano oscile en este rango, razón por la cual, en las simulaciones numéricas se selecciona una composición del gas natural representativa de dicho rango.

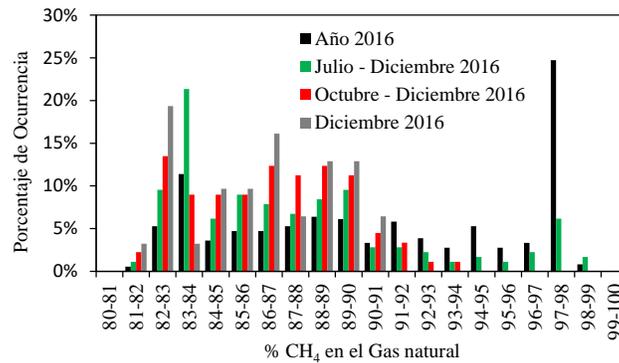


Figura 2.15. Frecuencia relativa del porcentaje de CH_4 en el gas natural que llega a Medellín para el periodo comprendido entre el 1 de enero de 2016 hasta 29 de diciembre de 2016, datos tomados de [107].

En la Tabla 2.3 se muestran las composiciones promedio de gas natural obtenidas para los 4 diferentes periodos analizados, observándose que en el último semestre del año 2016 el porcentaje de metano estuvo aproximadamente en 87.53 %, además hay contenidos importantes de etano y propano con 6.99 % y 2.47 % respectivamente, de tal forma que para las simulaciones numéricas se selecciona la composición del gas natural en base a la composición promedio del último semestre del año 2016, pero como se muestra en la Tabla 2.4, la composición del gas natural realmente usada en las simulaciones, no considera las moléculas con peso molecular mayor al propano, las cuales representan menos del 1 %.

Tabla 2.3. Composiciones de gas natural promedio, para 4 periodos diferentes del año 2016 (% en volumen) [107]

		Año 2016	Último semestre 2016	Último trimestre 2016	Diciembre 2016
Metano	CH_4	90.8822	87.5285	86.5310	86.2260
Nitrógeno	N_2	0.9980	0.7466	0.7892	0.7941
Dióxido de carbono	CO_2	0.9995	1.3914	1.5118	1.5417
Etano	C_2H_6	4.8130	6.9946	7.5899	7.7760
Propano	C_3H_8	1.6891	2.4743	2.6548	2.7252
i-Butano	C_4H_{10}	0.2653	0.3780	0.4042	0.4125
n-Butano	C_4H_{10}	0.2517	0.3632	0.3877	0.3939
i-Pentano	C_5H_{12}	0.0527	0.0688	0.0718	0.0720
n-Pentano	C_5H_{12}	0.0278	0.0346	0.0355	0.0351
n-Hexano	C_6H_{14}	0.0207	0.0200	0.0241	0.0235

Tabla 2.4. Composición normalizada de los diferentes gases naturales excluyendo moléculas más pesadas que C₃H₈.

	Último trimestre 2016	Composición normalizada
CH ₄	86.5310	87.3374
N ₂	0.7892	0.7965
CO ₂	1.5118	1.5259
C ₂ H ₆	7.5899	7.6606
C ₃ H ₈	2.6548	2.6795
Total	99.0766	100.00

2.3.2.2. Selección del mecanismo de reacción global para metano.

Se revisaron los trabajos de Kim et al [108] y Wang et al [109] quienes comparan los mecanismos reaccionales de 2 pasos de Westbrook y Dryer [110] y de 4 pasos de Jones y Lindstedt [106], con algunas modificaciones en las constantes cinéticas de dichos mecanismos con el fin de mejorar las predicciones en simulaciones de combustión sin llama con metano. De estos trabajos se toma el mecanismo con el que mejores predicciones obtuvieron dichos autores, el cual es una modificación del mecanismo de 2 pasos de Westbrook y Dryer, que también involucra una tercera reacción para el hidrógeno.

A continuación se presenta el mecanismo de reacción global seleccionado para la combustión de CH₄ y en la Tabla 2.5 se muestran las tasas cinéticas de cada reacción.

**Tabla 2.5.** Tasas cinéticas de las diferentes reacciones de los mecanismos de reacción para el CH₄ [109].

Reacción	A	β	E (J/kmol)	Orden
R1	5.03E+11	0	2.00E+08	$[CH_4]^{0.7} [O_2]^{0.8}$
R2 _f	2.24E+06	0	4.18E+07	$[CO] [O_2]^{0.25} [H_2O]^{0.5}$
R2 _b	1.10E+13	-0.97	3.28E+08	$[CO_2] [O_2]^{-0.25} [H_2O]^{0.5}$
R3 _f	7.91E+10	0	1.46E+08	$[H_2] [O_2]^{0.5}$
R3 _b	3.48E+13	0	3.98E+08	$[H_2O]$

Adicionalmente, del mismo trabajo de Westbrook y Dryer [110] se han seleccionado las reacciones globales para el etano y el propano, las cuales se muestran en las reacciones R4 y R5, respectivamente, y en la Tabla 2.6 se muestran las constantes cinéticas de dichas reacciones.

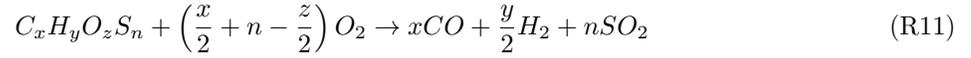
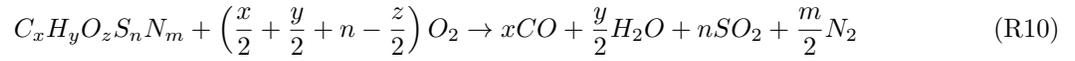
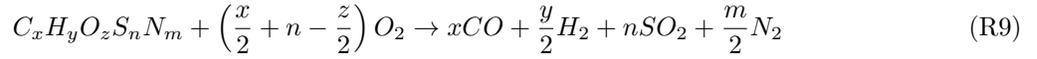
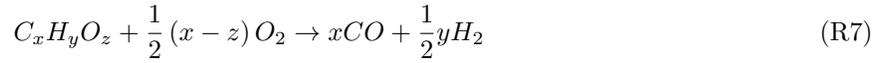
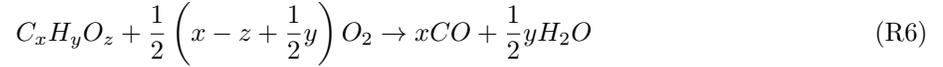
**2.3.2.3. Reacción de volátiles**

Los volátiles usualmente son representados por una molécula equivalente C_xH_yO_zS_nN_m, donde los coeficientes de dicha molécula son obtenidos por medio de un balance de masa asumiendo que el carbonizado está compuesto por 100 % carbono (en base seca libre de cenizas).

Tabla 2.6. Tasas cinéticas para las reacciones R4 y R5 [110].

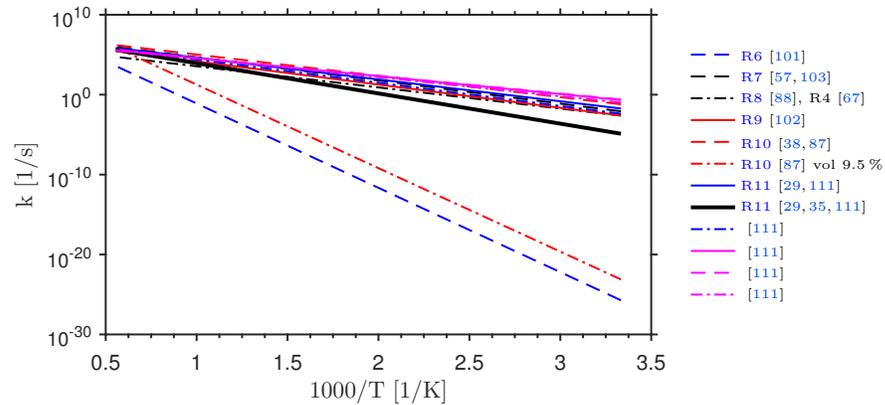
Reacción	A	β	E (J/kmol)	Orden
R4	7.31E+09	0	1.26E+08	$[C_2H_6]^{0.1} [O_2]^{1.65}$
R5	5.62E+09	0	1.26E+08	$[C_3H_8]^{0.1} [O_2]^{1.65}$

A continuación se muestran las reacciones que diferentes autores han usado para representar la forma en que los volátiles son consumidos. Debe notarse que no es necesario que la molécula contenga todos los elementos, sino que es posible que algunos sean omitidos en la composición de la molécula.



En la Figura 2.16 se presentan las tasas cinéticas usadas por diferentes autores en función del inverso de la temperatura, las cuales en su mayoría corresponden a aplicaciones de combustión sin llama con carbón pulverizado, y han sido aplicadas con carbones desde lignito hasta antracita. Se observa que con algunas excepciones en su mayoría todas las tasas cinéticas son similares.

En base a esto, para la reacción de volátiles se selecciona la reacción R11 con las constantes cinéticas de [29, 35, 111] (línea negra continúa) las cuales son $A=5.23 \text{ E}+07$, $E=7.24 \text{ E}+07 \text{ J/kmol}$.

**Figura 2.16.** Tasas cinéticas de reacción de volátiles usadas por diferentes autores.

2.3.3. Simulaciones en el software skippy

Puesto que en este trabajo se tiene como uno de los objetivos realizar simulaciones numéricas en el software SKIPPY para analizar el proceso de quemado del carbonizado en condiciones de combustión sin llama, entonces se hace un estudio de algunos de los trabajos previos llevados a cabo por otros autores. Adicionalmente, la descripción detallada del modelo se hace posteriormente, en la Sección 4.

De forma básica, SKIPPY es un programa que permite obtener perfiles de temperatura, especies y tasas de gasificación para una partícula porosa en estado estable. Dicha partícula, es esférica pero se modela de forma unidimensional en la dirección radial y se encuentra embebida en una capa límite no perturbada.

Para describir las reacciones en la capa límite y al interior de los poros, el mecanismo de reacción detallado GRI-MECH 3.0 [112] ha sido comunmente usado por diferentes autores [113–118], mientras que para describir la cinética de las reacciones heterogéneas se han usado principalmente mecanismos que consideran tanto las reacciones de oxidación como las de gasificación [113, 115, 116]. En este trabajo entonces se hace uso del mecanismo GRI-MECH 3.0 para modelar las reacciones en la fase homogénea y un mecanismo de 6 reacciones [113, 115] que incluye las reacciones de oxidación y gasificación para las reacciones heterogéneas. Dicho mecanismo se presenta posteriormente en la Sección 4, Tabla 4.1.

2.3.4. Conclusiones del estado del arte numérico

Del estado del arte de trabajos numéricos de combustión sin llama, se concluye que en el modelado de la combustión de carbón pulverizado la mayoría de trabajos han empleado el modelo Lagrangiano, donde se asume que las partículas están sometidas a los procesos de secado, volatilización y quemado del carbonizado, los cuales tienen lugar en serie. Adicionalmente, de manera paralela ocurre la combustión homogénea de los volátiles.

De los modelos disponibles para la volatilización se va a hacer uso del modelo de dos tasas tipo Arrhenius que compiten entre sí (Sección 2.3.1.2.3), pero la cantidad máxima que se libera de volátiles se calcula previamente en base al modelo CPD.

Por otro lado para el quemado del carbonizado se va a hacer uso del modelo de múltiples reacciones de superficie, esto con el fin de poder incluir las reacciones de gasificación del carbonizado con CO_2 y H_2O (Sección 2.3.1.3).

También, para la composición del gas natural en las simulaciones numéricas se va a usar una composición promedio calculada en base a las composiciones de gas natural del último semestre del año 2016 (Sección 2.3.2.1).

Para las reacciones de la fase gaseosa de gas natural se va a usar un mecanismo modificado de Westbrook y Dryer [110], el cual ha sido probado por Wang et al [109] en aplicaciones de combustión sin llama. Además para la combustión de los volátiles, se ha seleccionado la reacción R11.

Capítulo 3

Simulaciones numéricas en Fluent.

En este capítulo se hace el análisis de los resultados de una serie de simulaciones numéricas realizadas en el software Fluent para diferentes mezclas de carbón pulverizado con gas natural, donde los modelos usados fueron seleccionados en base al análisis hecho en la Sección 2.3.

Antes de hablar acerca de los resultados de las simulaciones, se hace una descripción de las geometrías evaluadas, resaltando sus principales características.

3.1. Geometrías evaluadas.

Aunque la mayoría de trabajos de carbón pulverizado en combustión sin llama encontrados en la literatura tienen una configuración de cámara de combustión vertical (ver Tabla 2.1, Sección 2.2) que facilita la recolección de las cenizas, en este trabajo se ha optado por seleccionar una configuración de cámara de combustión horizontal, por el hecho de que el laboratorio del grupo GASURE ya cuenta con una cámara de combustión sin llama horizontal, diseñada para quemar combustibles gaseosos, la cual puede ser adaptada para quemar la mezcla de carbón y gas natural.

En la Figura 3.1 se muestra de forma esquemática la configuración geométrica de la cámara de combustión y del quemador, que sirvieron como base para hacer los mallados necesarios para realizar las simulaciones numéricas. Se observa que la cámara de combustión tiene una longitud de 1350 mm y una sección transversal cuadrada de 600 mm de lado. Además, al interior de la cámara de combustión se encuentran 4 ductos, localizados en las esquinas de la cámara de combustión, por los cuales ingresa aire en el lado opuesto al quemador. Este aire es usado para remover calor de la cámara de combustión y actuar de esa forma como una carga térmica al interior del horno.

Adicionalmente, el quemador se encuentra localizado en un extremo de la cámara de combustión, y está compuesto por una boquilla central por la cual se descarga gas natural, y encima de dicha boquilla central, a una distancia de 32 mm, se localiza un ducto por el cual se suministra el aire de arrastre junto con el carbón pulverizado. También, lateralmente se ubican dos boquillas por las cuales se suministra el aire de combustión.

En las simulaciones numéricas se optó por dejar fija la geometría de la cámara de combustión, y se evaluó el efecto de la distancia de las boquillas de aire de combustión, para las cuales se probaron distancias diametrales de 96 mm, 168 mm, y 240 mm. También se probaron dos diferentes diámetros de boquilla (10.9 mm y 16 mm), lo cual permite ver el efecto de la velocidad de descarga del aire de combustión. Adicionalmente, se evalúan diferentes mezclas de carbón pulverizado-gas natural, cuyo porcentaje es calculado en base energética con el poder calorífico inferior (PCI) de los combustibles. Las mezclas evaluadas son: 0 %, 25 %, 50 %, 75 % y 100 % de carbón, donde el complemento es gas natural.

Por otro lado, en la Figura 3.2 se muestra un ejemplo de un mallado típico, usado para realizar las simulaciones numéricas. Los mallados fueron construidos por medio del software Icem CFD, usando la estrategia de división por bloques, lo cual permite obtener mallados estructurados con celdas hexaédricas de muy buena calidad. Se observa que el mallado corresponde solamente a la mitad de la cámara de combustión, lo cual se debe a que hay simetría tanto geométrica como fluidodinámica en el plano vertical central de la cámara de combustión. Los mallados construidos tienen celdas con una razón de aspecto máxima de 12.5, la cual aunque está un poco por encima del valor recomendado de 10 [85], se usó este valor con el fin de evitar que la cantidad de celdas fuera demasiado alta. Adicionalmente, para todos los mallados, la deformación de las celdas (*equiangle skewness*) ha sido menor a 0.8, con lo cual se garantiza que la calidad de los mallados es

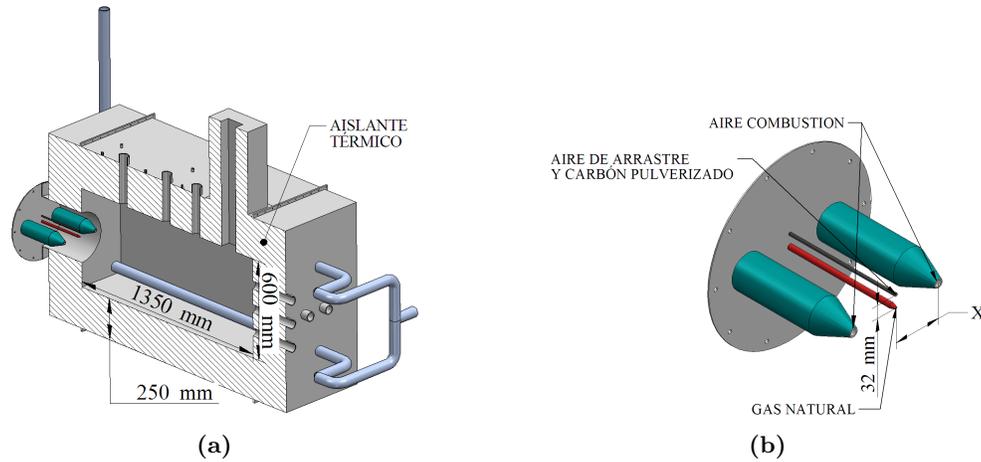


Figura 3.1. Esquema del horno (a) y del quemador (b) usados para realizar las simulaciones numéricas y las mediciones experimentales.

adecuada para realizar las simulaciones numéricas. Debe notarse que para los casos de combustión sin llama se usó un tipo de mallado, el cual es representado por las imágenes mostradas en las Figuras 3.2a, 3.2b y 3.2c, donde básicamente la diferencia entre éstos radica en que tienen un diámetro y distancia en la boquilla del aire de combustión distintos. Por otro lado, también se evaluaron algunos casos en modo llama, para lo cual el mallado es diferente en la parte del quemador con respecto a los de modo sin llama, esto debido a que cuando el quemador funciona en modo llama, el aire de combustión ingresa por un coflujo en el centro del quemador, además el gas natural es descargado radialmente a través de 10 agujeros (5 agujeros en el mallado debido a la simetría) y el carbón sigue entrando por el mismo ducto usado para modo sin llama (Figuras 3.2d y 3.2e).

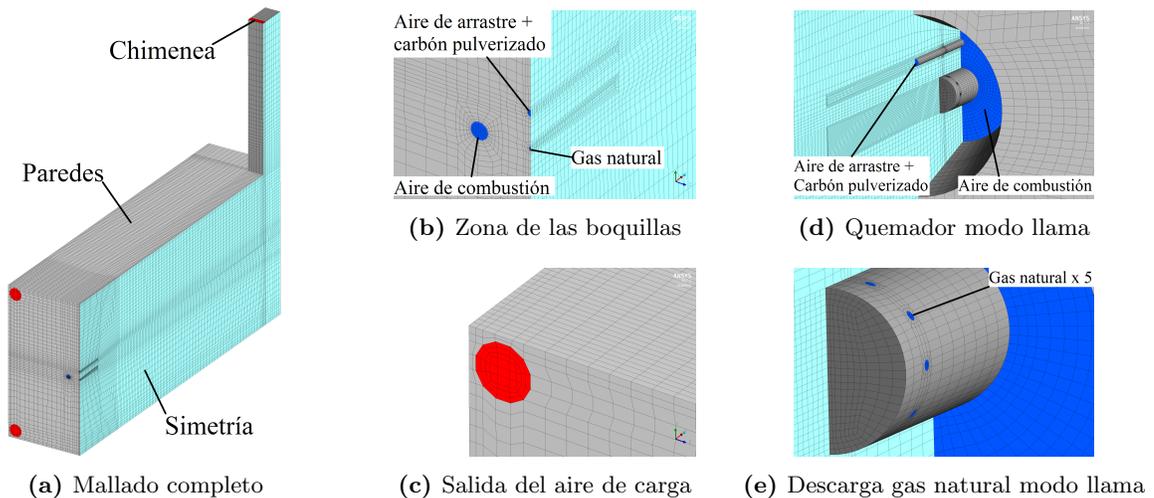


Figura 3.2. Ejemplo de mallados usados para las simulaciones numéricas en Fluent para modo sin llama (a, b y c) y para modo llama (d y e)

En la Tabla 3.1 se muestran las características principales de las simulaciones realizadas en Fluent, las cuales comprenden un total de 32 simulaciones, de las cuales, 30 tienen una configuración de combustión sin llama (señaladas como modo F) y 2 simulaciones tienen una configuración con el quemador para modo llama (señaladas como modo LL).

Tabla 3.1. Configuraciones de las simulaciones numéricas realizadas en fluent.

ID	Diámetro de boquilla de aire (mm)	Distancia boquillas de aire (mm)	% carbón	Modo [†]	ID	Diámetro de boquilla de aire (mm)	Distancia boquillas de aire (mm)	% carbón	Modo
1	16.0	96	0	F	16	10.9	96	0	F
2	16.0	96	25	F	17	10.9	96	25	F
3	16.0	96	50	F	18	10.9	96	50	F
4	16.0	96	75	F	19	10.9	96	75	F
5	16.0	96	100	F	20	10.9	96	100	F
6	16.0	168	0	F	21	10.9	168	0	F
7	16.0	168	25	F	22	10.9	168	25	F
8	16.0	168	50	F	23	10.9	168	50	F
9	16.0	168	75	F	24	10.9	168	75	F
10	16.0	168	100	F	25	10.9	168	100	F
11	16.0	240	0	F	26	10.9	240	0	F
12	16.0	240	25	F	27	10.9	240	25	F
13	16.0	240	50	F	28	10.9	240	50	F
14	16.0	240	75	F	29	10.9	240	75	F
15	16.0	240	100	F	30	10.9	240	100	F
31	-	-	0	LL	32	-	-	100	LL

[†] F: Modo flameless, LL: Modo llama.

3.2. Modelo empleado en Fluent

Los modelos que se usaron para las simulaciones numéricas en su totalidad se encuentran disponibles de forma estándar en Fluent y el detalle de las ecuaciones que son resueltas por dicho programa se presenta en el Anexo A. Para calcular la fase homogénea se empleó el enfoque de promediación temporal de las ecuaciones de transporte, conocido como RANS (Reynolds Average Navier Stokes). Por esta razón, se requiere de un modelo de turbulencia para tener en cuenta el efecto de dicha turbulencia sobre el flujo medio. Con este fin se empleó el modelo $k-\varepsilon$ estándar [119], el cual es quizás el modelo de turbulencia más popular que existe, debido a que las estimaciones que se obtienen con él son bastante aceptables, y el tiempo de cálculo es relativamente bajo.

Por otro lado, para modelar la radiación se usó el modelo de ordenadas discretas [120], y la absorptividad se calculó como la suma de la absorptividad de los gases y de las partículas, donde para los gases se usó el modelo de suma ponderada de gases grises (WSGG) [121] en base a la longitud media que recorre el haz de energía radiada, o como es mejor conocido *domain based*.

Para la combustión de la fase homogénea, tanto del gas natural como de los volátiles se hizo uso del modelo EDC, con un mecanismo de 3 reacciones para la combustión del metano, el cual es un mecanismo de Westbrook y Dryer modificado [109, 110] (ver Sección 2.3.2.2, Tabla 2.5), y a este mecanismo se le adicionaron las reacciones R4 y R5, para la combustión del etano y el propano, respectivamente. También, el mecanismo de reacción homogénea incluyó la reacción global R11 para la combustión de los volátiles (ver Sección 2.3.2.3).

En cuanto a las partículas de carbón, se usó el modelo de fase discreta, y se asumió que la combustión de dichas partículas está compuesta por los procesos de secado, volatilización y quemado del carbonizado, y que estos ocurren en serie.

El secado es calculado por medio de la correlación de Ranz y Marshall [82, 83]. Para la volatilización se usó el modelo de 2 tasas que compiten entre sí [93], cuyos parámetros cinéticos se muestran en la Sección 2.3.1.2.3, y se asumió una temperatura de inicio de la volatilización de 600 K [84]. En cuanto al quemado del carbonizado, se empleó el modelo de reacciones múltiples el cual está basado en el modelo cinético-difusivo [84, 99], pero con la posibilidad de incluir las reacciones de gasificación con CO_2 y H_2O , donde las constantes cinéticas usadas para este modelo se muestran en la Sección 2.3.1.3.

Adicionalmente, se asume que las partículas son esféricas y la trayectoria de las mismas se calcula integrando el balance de fuerzas sobre las mismas. En este sentido, las fuerzas que se tienen en cuenta son la fuerza de arrastre y la fuerza de gravedad, siendo normalmente la fuerza de arrastre la más importante. También, para generar el efecto de dispersión de las partículas debido a la turbulencia, se usó el modelo

RWM (Random Walk Model).

Para calcular la fuerza de arrastre que se ejerce sobre las partículas, debe emplearse un coeficiente de arrastre adecuado, y para esto, se hizo uso de la correlación de Haider y Levenspiel [122], la cual es útil para partículas no esféricas haciendo uso del concepto de esfericidad (ϕ), que para partículas de carbón, los valores típicos están entre 0.7 y 0.8 [123, 124]. En la Figura 3.3 se muestran datos experimentales de Morsi [125] para el coeficiente de arrastre en función del número de Reynolds para partículas esféricas. También, se muestra la correlación para flujo de Stokes ($24/Re_p$), la correlación de Morsi [125], así como la correlación de Haider y Levenspiel [122] para partículas con esfericidad de 0.7 y 0.8.

Se observa, que cuando el número de Reynolds de la partícula (Re_p) es pequeño (< 1) la diferencia entre todas las correlaciones es insignificante e incluso se podría hacer uso de la ley de Stokes, mientras que cuando el número de Reynolds de la partícula es grande (> 100) debe incluso tenerse en cuenta el efecto de la esfericidad de las partículas sobre el coeficiente de arrastre.

Adicionalmente, en la Figura 3.3 también se muestran, a modo de ejemplo, datos de frecuencia relativa de Re_p , calculados a partir de una de las simulaciones numéricas desarrolladas en este trabajo, observándose que en ningún caso las partículas tienen números de Reynolds de partícula mayores a 100, además, el porcentaje más grande (aproximadamente 66 %) está en un rango de número de Reynolds de partícula menor a 0.01 (no mostrado). Debido a esto, no sería necesario hacer uso de la correlación de Haider y Levenspiel [122], sino que incluso se podría hacer uso de una correlación tan simple como la dada por Wallis [126]. A pesar de esto, las simulaciones son realizadas con la correlación de Haider y Levenspiel [122] usando una esfericidad de 0.7 para las partículas de carbón pulverizado.

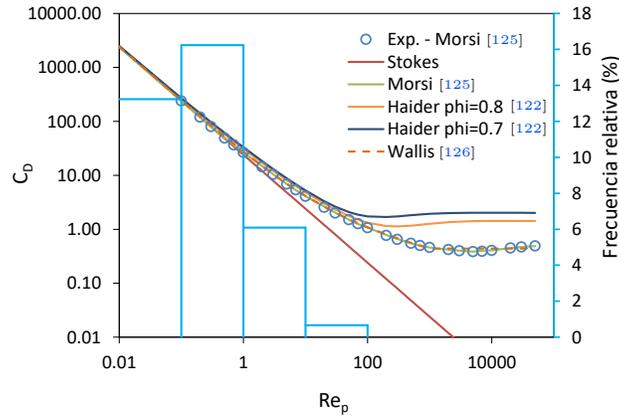


Figura 3.3. Coeficiente de arrastre en función del número de Reynolds de la partícula.

El calor específico de las partículas se asume constante (1046 J/kg K) debido a que se ha mostrado que para altas tasas de calentamiento se obtienen resultados de temperatura de las partículas más cercanos a resultados experimentales [127]. La conductividad térmica de las partículas también se asume constante (0.2092 W/m K) [127]. La densidad inicial aparente del carbón se asume igual a 1200 kg/m³. Además, se asume que la resistencia térmica de las partículas es despreciable, es decir, que la temperatura es uniforme al interior de las partículas y que es igual a la temperatura de la superficie, lo cual no es completamente cierto, al menos no en los primeros milisegundos cuando la partícula entra a la cámara de combustión, ya que ésta está sometida a un fuerte gradiente de temperatura, a pesar de esto se asume dicha condición con el fin de simplificar el problema. También, se ha tenido en cuenta el efecto de la radiación sobre las partículas, para las cuales se asumió una emisividad igual a 0.9.

Adicionalmente, en la Tabla 3.2 se muestra un resumen de los modelos seleccionados para realizar las simulaciones numéricas de Fluent, para las mezclas de carbón pulverizado y gas natural.

3.3. Condiciones de frontera

Para todas las simulaciones numéricas realizadas se mantuvo constante la potencia térmica en 28 kW en base al PCI, igualmente se fijó la tasa de aireación en 1.2. La composición del carbón usado en este trabajo, tanto en las simulaciones numéricas como en las pruebas experimentales, se muestra en la Tabla 3.3, el cual es un carbón sub-bituminoso de la región de Amagá. Se observa que este carbón tiene una cantidad de ceniza

Tabla 3.2. Resumen de los modelos usados en las simulaciones numéricas en Fluent.

Ecuaciones	RANS
Modelo de turbulencia	k- ϵ estándar [119]
Modelo de radiación	Ordenadas discretas [120]
Absortividad de gases	WSGG basado en el dominio [121]
Interacción Química-turbulencia	EDC
Mecanismo de reacción de metano	Westbrook and Dryer modificado (ver Tabla 2.5) [109,110]
Reacción de volátiles	Reacción R11
Trayectoria de partículas	Modelo Lagrangiano
Secado	Ranz - Marshall [82,83]
Volatilización	<i>Two competing rates</i> [93]
<i>Char Burnout</i>	Reacciones múltiples, basado en modelo cinético-difusivo [84,99]
Dispersión de partículas	<i>Random Walk Model</i>
Coefficiente de arrastre	Correlación de Haider y Levenspiel [122] con esfericidad de 0.7
Emisividad de las partículas	0.9

relativamente alta (8.65 %), pero además la cantidad de humedad no es despreciable (11.40 %), por esta razón en las simulaciones numéricas debe considerarse también el proceso de secado del carbón. Adicionalmente, debe tenerse en cuenta que para la volatilización se usó el modelo de dos tasas de reacción que compiten entre sí y como cantidad máxima de volátiles no se usó el valor del análisis próximo, sino que se realizó un calculo previo con el modelo CPD (ver sección 2.3.1.2.4), donde se obtuvo que las cantidades de material volátil y carbono fijo, para las tasas de calentamiento que se esperan dentro del horno de combustión sin llama, son de aproximadamente 55.00 % y 45.00 % (en base daf), respectivamente.

Tabla 3.3. Análisis último y análisis próximo del carbón usado en este trabajo.

	Análisis último		
	Como es recibido	Base seca	Base seca libre de cenizas (daf)
Carbono (%)	58.40	65.91	73.05
Hidrógeno (%)	4.29	4.84	5.37
Nitrógeno (%)	1.42	1.60	1.78
Azufre (%)	0.45	0.51	0.56
Oxígeno (%)	15.39	17.37	19.25
	Análisis próximo		
Humedad (%)	11.40	-	-
Ceniza (%)	8.65	9.76	-
Volátil (%)	39.77	44.89	49.74
Carbono fijo (%)	40.19	45.36	50.27
PCS (kJ/kg)	22366.8		
PCI (kJ/kg)	21100.1		

Por otro lado, para realizar las simulaciones numéricas se requiere conocer la distribución de tamaños de partículas. Para esto, se hizo uso de un análisis de difracción de rayos láser, cuyo resultado se presenta en la en la Figura 3.4.

Con el fin de representar en las simulaciones numéricas la distribución de partículas obtenidas experimentalmente, se optó por hacer una división de la distribución de partículas en 10 rangos, los cuales tienen un tamaño de partícula característico y donde a cada rango le corresponde una fracción de masa de partículas basado en la distribución obtenida experimentalmente. Las fracciones de masa usadas para estos 10 tamaños de partícula se muestran en la Tabla 3.4.

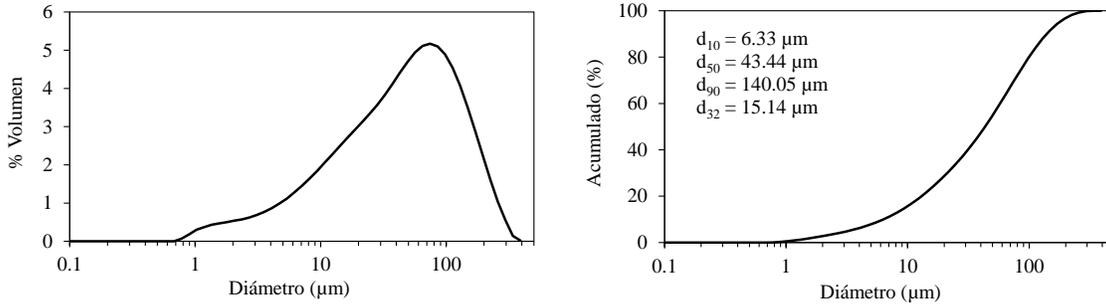


Figura 3.4. Distribución de tamaños de partículas en porcentaje de volumen y acumulada.

Tabla 3.4. Fracción y tamaños de partículas usados en las simulaciones numéricas en Fluent.

ID	Rango de diámetros (μm)	Diámetro medio (μm)	Fracción de masa (%)
Clase 1	0 - 8	3.8	11.22
Clase 2	8 - 23	15.2	19.03
Clase 3	23 - 46	34.2	19.26
Clase 4	46 - 76	60.8	19.91
Clase 5	76 - 114	95.0	14.53
Clase 6	114 - 160	136.8	7.57
Clase 7	160 - 213	186.2	5.12
Clase 8	213 - 274	243.2	2.66
Clase 9	274 - 342	307.8	0.70
Clase 10	342 - 418	380.0	0.02

Con respecto a la composición del gas natural que se ha usado en las simulaciones numéricas, en la Sección 2.3.2.1 se hizo un análisis de la selección de dicha composición, la cual se presentó en la Tabla 2.4.

Por otro lado, en la Tabla 3.5 se muestran los flujos de aire de combustión, de gas natural y de carbón pulverizado para las diferentes porcentajes de carbón usados en las simulaciones numéricas, manteniendo una potencia fija de 28 kW y un factor de aireación de 1.2. Debe aclararse que los flujos mostrados son los flujos totales, pero los flujos usados realmente corresponden a la mitad, debido a que solo se simuló la mitad de la cámara de combustión. Adicionalmente, también se muestra el flujo de aire de arrastre, que es igual para todas las configuraciones, incluso para los casos que no tienen carbón, debido a que experimentalmente se debe mantener el flujo por el ducto donde ingresa el carbón con el fin de evitar que los gases calientes ingresen a dicho ducto. Además, se muestra el flujo del aire de carga, el cual se usa experimentalmente para emular un sumidero de calor al interior del horno, y éste se mantiene igual para todas las configuraciones, lo cual se hace así con el fin de mantener constante la carga térmica dentro del horno.

Por otro lado, las paredes son simuladas con una condición de temperatura constante, igual a 1100 K, la cual se ha fijado en este valor en base a pruebas experimentales preliminares hechas tanto con gas natural como con mezclas de gas natural con carbón pulverizado, en el horno de combustión sin llama del grupo GASURE de la Universidad de Antioquia, y se ha usado un valor de emisividad en las paredes igual a 0.55.

Con respecto a las partículas de carbón pulverizado, se mencionó anteriormente (ver Sección 3.2) que se usó el modelo Lagrangiano junto con el modelo *Random Walk* con el fin de generar la dispersión del jet de partículas ocasionada por la turbulencia. Adicionalmente, en las simulaciones, se inyectaron alrededor de 200,000 partículas por cada iteración del modelo de fase discreta. Fue inyectada esta cantidad de partículas con el fin de obtener una mejor representación estadística de la dispersión del jet de carbón al interior de la cámara de combustión.

3.4. Criterios de convergencia

En la Figura 3.5 se presenta el diagrama de flujo con el cual se puede describir la forma en la que se ha determinado en este trabajo si las simulaciones realizadas han alcanzado la convergencia. En primer lugar se

Tabla 3.5. Flujos y temperaturas para diferentes porcentajes de carbón usados en las simulaciones numéricas, para una potencia térmica de 28 kW y un factor de aireación de 1.2.

% Carbón	Flujo de gas natural (kg/h)	Flujo aire secundario (kg/h)	Flujo de carbón (kg/h)
0	2.14	38.63	0.00
25	1.61	39.07	1.19
50	1.07	39.50	2.39
75	0.54	39.94	3.58
100	0.00	40.37	4.78
Flujo aire de arrastre (kg/h)			2.62
Flujo aire de carga (kg/h)			164.88
Temperatura del CH ₄ (K)			306.15
Temperatura del aire de combustión (K)			365.15
Temperatura del aire de arrastre (K)			306.15
Temperatura del aire de carga (K)			306.15

hace un chequeo de los residuales normalizados, donde para las ecuaciones de especies se ha usado el criterio de que estos deben ser menores a 10^{-5} ; mientras que para la ecuación de energía y radiación el criterio usado ha sido que estos deben ser menores a 10^{-6} ; de forma similar para las ecuaciones de cantidad de movimiento en las 3 direcciones coordenadas y para la ecuación de continuidad, el criterio usado es que los residuales deben ser menores a 10^{-3} .

Por otro lado, lo anterior no es suficiente para decidir si la solución ha alcanzado la convergencia, por esta razón también se colocan monitores de diferentes variables (velocidad en la dirección de descarga de los jets, temperatura, y fracción másica de CO) En el centro de la cámara de combustión, donde estos deben ser estables para ayudar en la decisión de que la solución ha alcanzado la convergencia.

Adicionalmente, a pesar de que las condiciones anteriores se cumplan, también se debe revisar el balance de energía y este debe ser menor a 5%. Si todas estas condiciones se cumplen entonces el calculo iterativo puede detenerse y aceptar la solución obtenida como una solución válida.

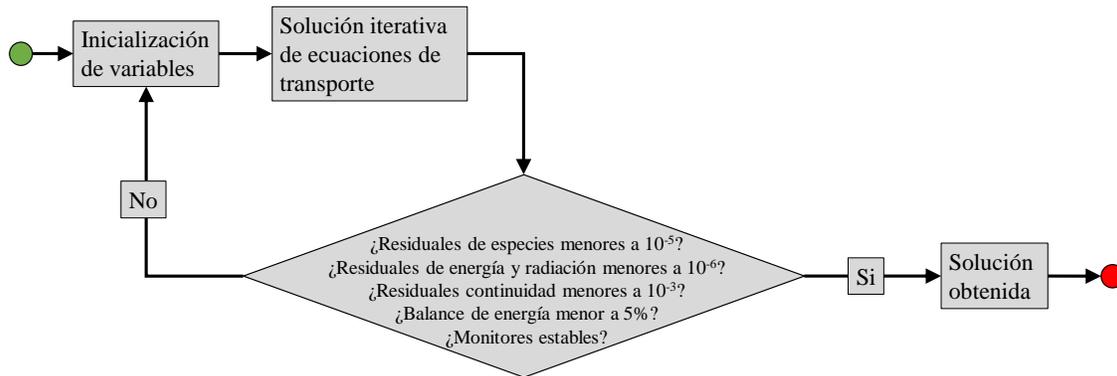


Figura 3.5. Criterios usados para determinar la convergencia de las simulaciones.

3.5. Análisis de independencia del mallado

Una parte fundamental en el proceso de simulación numérica es el análisis de independencia del mallado, por medio del cual se puede determinar cual es la cantidad adecuada de celdas en los mallados con el fin de asegurar que la solución obtenida no es afectada de forma considerable al aumentar la cantidad de celdas.

Para este fin, se ha usado la metodología del índice de convergencia del mallado, la cual es expuesta en [128]. Para aplicar dicha metodología se requiere hacer 3 mallados diferentes donde para cada uno se calcula un tamaño característico de las celdas (h), el cual para un mallado 3D puede ser obtenido por medio de la Ecuación 3.1. Para poder aplicar esta metodología se necesita que el parámetro h cumpla la siguiente

condición: $h_3 \geq 1.3 \times h_2$ y $h_2 \geq 1.3 \times h_1$, donde h_1 , h_2 y h_3 son los tamaños característicos de las celdas para el mallado más fino, el mallado de tamaño intermedio, y el mallado más burdo, respectivamente.

$$h = \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\Delta V_i) \right]^{\frac{1}{3}} \quad (3.1)$$

Al aplicar este criterio a los mallados usados en este trabajo y partiendo de una cantidad de celdas base para el mallado intermedio de aproximadamente 550,000 celdas, se obtiene que el mallado burdo debe tener alrededor de 260,000 celdas o menos, y el mallado fino debe tener 1,250,000 o más.

Debido a que la cantidad de simulaciones que deben realizarse es bastante grande, es inviable hacer el análisis de independencia del mallado a cada configuración. Así, para llevar a cabo dicho análisis se seleccionaron 4 configuraciones de forma aleatoria, y solo a éstas se les aplicó dicha metodología, de tal forma que en base a los resultados obtenidos, se encuentra una cantidad de celdas adecuada con el fin de realizar las simulaciones restantes con una cantidad de celdas similar. Esto último está basado en la suposición de que debido a que la configuración geométrica de todas las simulaciones es bastante similar, entonces la independencia del mallado se obtendría con una cantidad de celdas parecida para todas las configuraciones.

En base a lo anterior, por medio de un generador de números aleatorios se seleccionaron las configuraciones que se muestran en la Tabla 3.6.

Tabla 3.6. Configuraciones seleccionadas para realizar el análisis de independencia del mallado.

ID	Diámetro de boquilla de aire	Distancia radial boquilla de aire	% carbón	Modo [†]
1	16.0	96	0	F
14	16.0	240	75	F
16	10.9	96	0	F
27	10.9	240	25	F

[†] F: Modo flameless.

Para realizar el análisis de independencia del mallado, se comparó la velocidad, la temperatura y la fracción másica de CO, sobre el eje central de la cámara de combustión y sobre el eje de descarga de la boquilla de aire de combustión (ver Figura 3.6).

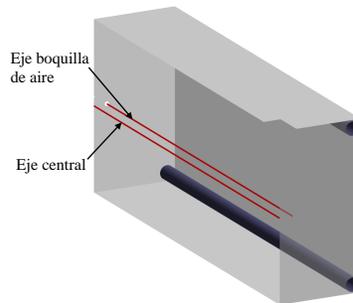


Figura 3.6. Líneas sobre las cuales se realiza la comparación para la independencia del mallado.

Como ventaja adicional de aplicar esta metodología para realizar el análisis de independencia del mallado, se tiene el hecho de que se obtiene también una estimación de la incertidumbre que tienen los resultados de las simulaciones con respecto a lo que se conoce como “solución verdadera”, la cual se puede poner en forma de barra de error.

A continuación se muestran los resultados obtenidos de temperatura, velocidad y fracción másica de CO para cada una de las líneas mostradas en la Figura 3.6, en los diferentes casos seleccionados, mostrados en la Tabla 3.6.

Se observa que para el caso 1 (Figura 3.7, 100 % gas natural) los resultados de temperatura y velocidad son bastante similares con los 3 mallados en las 2 líneas evaluadas, y por este motivo la barras de error son bastante estrechas.

Para la fracción másica de CO ocurre algo un poco diferente, ya que se nota que con el mallado burdo, hay unas diferencias con respecto a los otros 2 mallados, lo cual se nota tanto en el eje central como en el eje de la boquilla de aire, aunque se observa que dichas diferencias no son muy grandes y si no se requiere de mucha precisión en los cálculos, para este caso sería suficiente usar el mallado más burdo (aproximadamente 260.000 celdas) para realizar los cálculos numéricos.

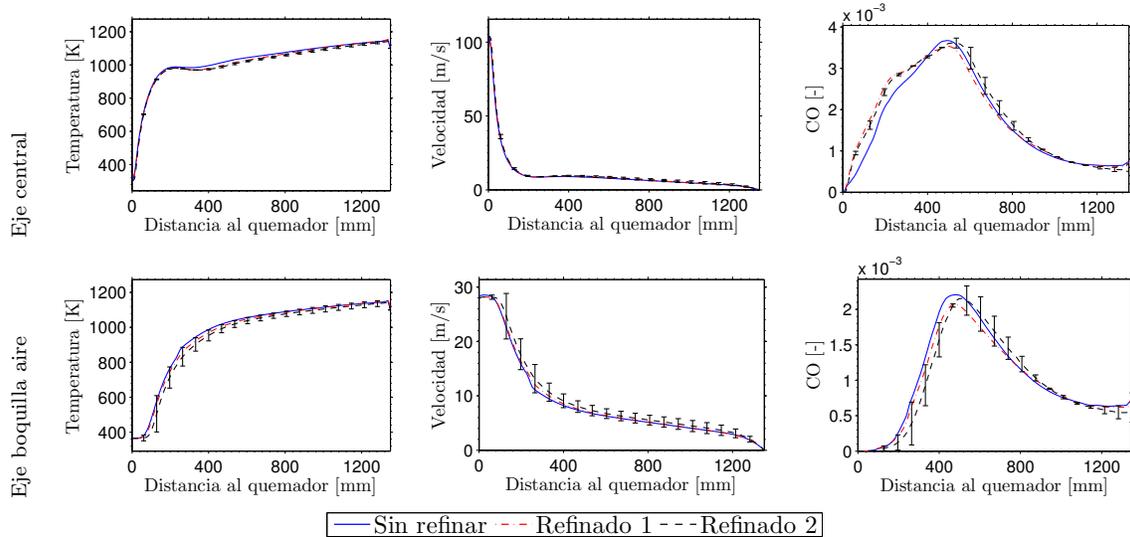


Figura 3.7. Análisis independencia del mallado caso 1 (100 % gas natural, Tabla 3.6).

Con respecto al caso 14 (Figura 3.8, 75 % carbón), los resultados de independencia del mallado son algo similares a los expuestos para el caso 1, donde las diferencias obtenidas para la temperatura y la velocidad con los 3 mallados son bastante reducidas, pero para la fracción másica de CO, las diferencias son más notables, a pesar de esto, los resultados obtenidos con el mallado intermedio (Refinado 1) siguen siendo aceptables, esto en comparación con los resultados obtenidos con el mallado fino (Refinado 2).

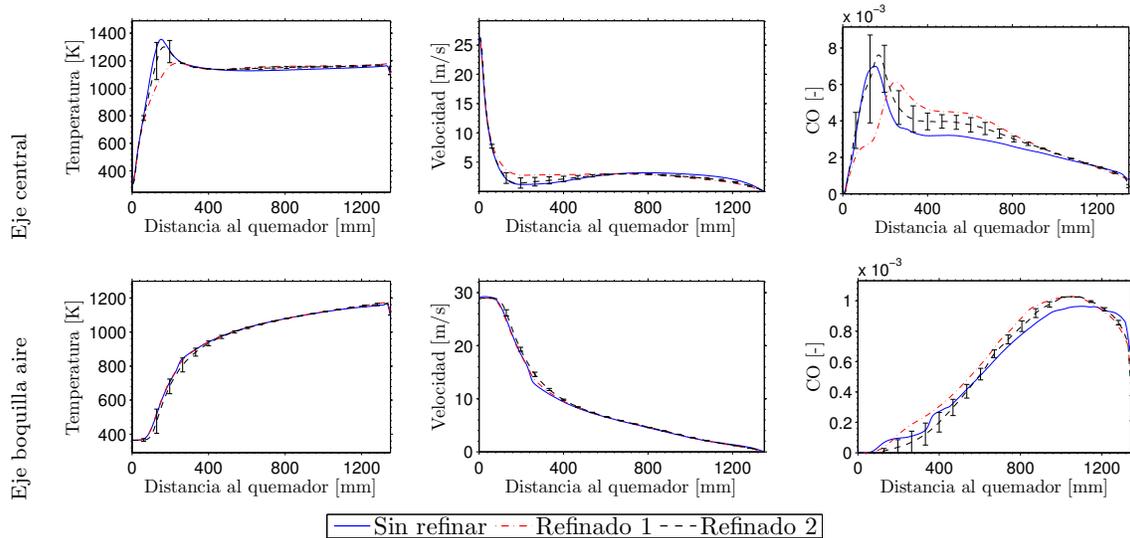


Figura 3.8. Análisis independencia del mallado caso 14 (75 % Carbón, Tabla 3.6).

En cuanto al caso 16 (Figura 3.9, 100 % gas natural), se sigue manteniendo la misma tendencia donde la temperatura y la velocidad obtenidas con los 3 mallados son muy cercanas, pero la fracción másica de CO difiere de forma significativa especialmente para el mallado más burdo (Sin refinar).

Por último, con respecto al caso 27 (Figura 3.10, 25 % carbón), se observa un comportamiento parecido a los demás casos analizados, notándose que las mayores diferencias ocurren para la fracción másica de CO,

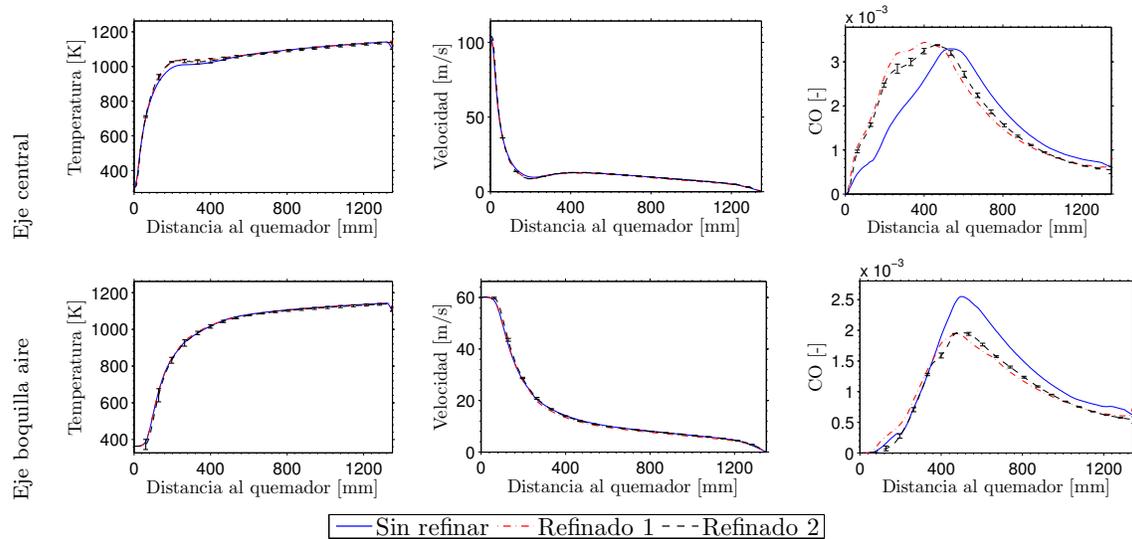


Figura 3.9. Análisis independencia del mallado caso 16 (100% gas natural, Tabla 3.6).

lo cual conduce a que la incertidumbre en esta variable sea mayor. Aunque para este caso quizás lo más conveniente sea usar el mallado más fino (refinado 2), lo cierto es que el tiempo requerido para realizar los cálculos con dicho mallado es demasiado alto, razón por la cual se opta por usar el mallado refinado 1 el cual tiene un tiempo de cálculo moderado y los resultados obtenidos son relativamente aceptables en cuanto a la fracción másica de CO se refiere.

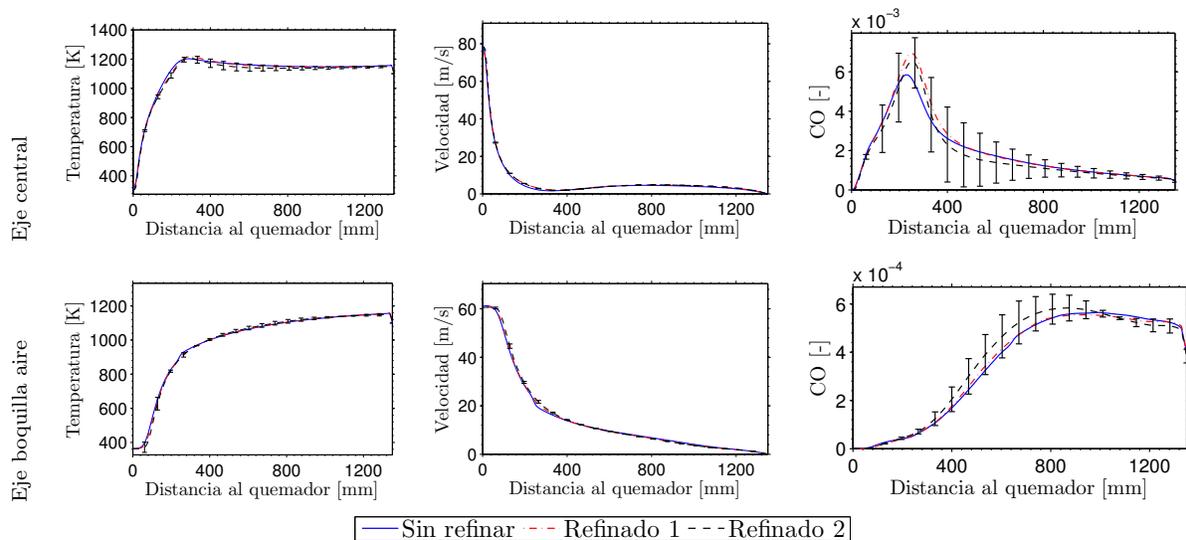


Figura 3.10. Análisis independencia del mallado caso 27 (25% carbón, Tabla 3.6).

De este análisis, se concluye que con el mallado refinado 1 (aproximadamente 550,000 celdas) es suficiente para realizar los cálculos numéricos de las simulaciones restantes, obteniéndose resultados especialmente similares al mallado más fino para la temperatura y para la velocidad. Aunque al comparar la fracción másica de CO del mallado refinado 1 con respecto al mallado más fino se obtienen algunas diferencias, se opta por usar el mallado refinado 1, debido al menor tiempo de cálculo requerido.

Así, todos los demás casos de la Tabla 3.1 se realizan con mallados de aproximadamente 550,000 celdas, por lo cual se debe ser consciente de que hay cierto grado de incertidumbre, especialmente en la fracción másica de CO.

3.6. Resultados numéricos

En las siguientes secciones se procede entonces a mostrar los resultados obtenidos numéricamente por medio del software Fluent, analizando principalmente los campos de temperatura, fracción másica de CO y el factor de recirculación. En base a estos resultados, se hace la selección de la geometría (distancia entre boquillas del aire de combustión y diámetro de dichas boquillas) que es usada para realizar las mediciones experimentales.

Para realizar la selección de la mejor geometría, se busca que la temperatura esté lo mejor distribuida posible y que no se presenten picos de esta variable. También se busca que los contornos de fracción másica de CO estén muy distribuidos a lo largo de la cámara de combustión, y que el factor de recirculación sea el más alto posible. Esto con el fin de aumentar las posibilidades de obtener de forma experimental el régimen de combustión sin llama, tanto para 100 % gas natural, como para las diferentes mezclas con carbón pulverizado.

3.6.1. Contornos de temperatura y líneas de corriente (*streamlines*)

En la Figura 3.11 se muestran los contornos de temperatura en el plano horizontal central de la cámara de combustión, obtenidos en las simulaciones numéricas para los casos con boquillas de aire de 16 mm (casos del 1 al 15, Tabla 3.1). Los resultados se presentan para los diferentes porcentajes de mezclas carbón pulverizado-gas natural donde cada fila corresponde a un porcentaje de mezcla, mientras que cada columna corresponde a una distancia entre las boquillas de aire. También, en dichos contornos se han superpuesto las líneas de corriente, las cuales dan una idea acerca de la zona de recirculación, la cual juega un papel importante en la obtención del régimen de combustión sin llama. Debe aclararse que adicional a las líneas de corriente, en la Sección 3.6.4 se hace un análisis más profundo del tema de recirculación por medio del cálculo del factor de recirculación.

Se observa que con respecto a la temperatura, para las boquillas de aire de 16 mm, sin importar el porcentaje de carbón, los contornos de temperatura son más uniformes para el caso donde las boquillas de aire de combustión están más cerca (96 mm, primera columna). Esto se debe a que cuando las boquillas se encuentran más cerca los *jets* se unen rápidamente, lo que conforma un *jet* único dentro de la cámara de combustión.

Para el caso de las boquillas más alejadas (240 mm, tercera columna) parece generarse una zona con una temperatura más elevada en el centro de la cámara de combustión, la cual parece corresponder a la zona de reacción del gas natural. Además, esa zona de mayor temperatura se acerca cada vez más a la zona del quemador al aumentar el porcentaje de carbón. El acercamiento de esta zona de alta temperatura al quemador se debe a que cuando aumenta el porcentaje de carbón, disminuye el impulso del jet de gas natural, haciendo que este no se diluya lo suficiente con los gases circundantes, conduciendo a una temperatura.

Por otro lado, con respecto a las líneas de corriente, la zona de recirculación, al menos en el plano horizontal, se ve mucho más definida para los casos con distancia entre boquillas de aire de 96 mm y de 168 mm. A pesar de esto, no se puede realizar un juicio *a priori* acerca del comportamiento del factor de recirculación, ya que no necesariamente una zona de recirculación más definida implica un factor de recirculación mayor ya que solo estamos observando un plano y en realidad la recirculación ocurre volumétricamente.

Adicionalmente, aunque en los casos con boquillas de aire más alejadas (240 mm) hay zonas con temperaturas más altas, la magnitud de dicha temperatura no es lo suficientemente alta como para decir que es una zona de reacción con combustión convencional. Llevando ésto al caso experimental, lo que podría ocurrir es que se genere una zona de combustión sin llama con el régimen inestable, donde aparece y desaparece la luminosidad de la zona de reacción.

Con respecto a la temperatura para los casos con boquillas de aire de 10.9 mm (Figura 3.12) se realizó la misma cantidad de simulaciones que las realizadas con las boquillas de 16 mm, esto es, se modificó la distancia entre las boquillas de aire y se modificaron los porcentajes de gas natural y carbón. Para estos casos, resalta el hecho de que sin importar el porcentaje de carbón o la distancia entre boquillas de aire, la temperatura se ve mucho más uniforme, e incluso para los casos de 240 mm ya no se observan las zonas de mayor temperatura cerca al quemador, como ocurría en los casos con boquillas de aire de 16 mm. Esto se debe principalmente al hecho de que al reducir el diámetro de las boquillas de aire, se aumenta el impulso de dichos *jets*, lo cual conduce a un mayor arrastre de gases recirculados y por lo tanto la dilución del oxígeno de los *jets* de aire es mayor haciendo que se atenúe la intensidad de las reacciones.

Al observar las líneas de corriente de los casos con boquillas de aire de 10.9 mm (Figura 3.12), al igual que en los casos con boquillas de 16 mm, se nota que la zona de recirculación en el plano horizontal, es más

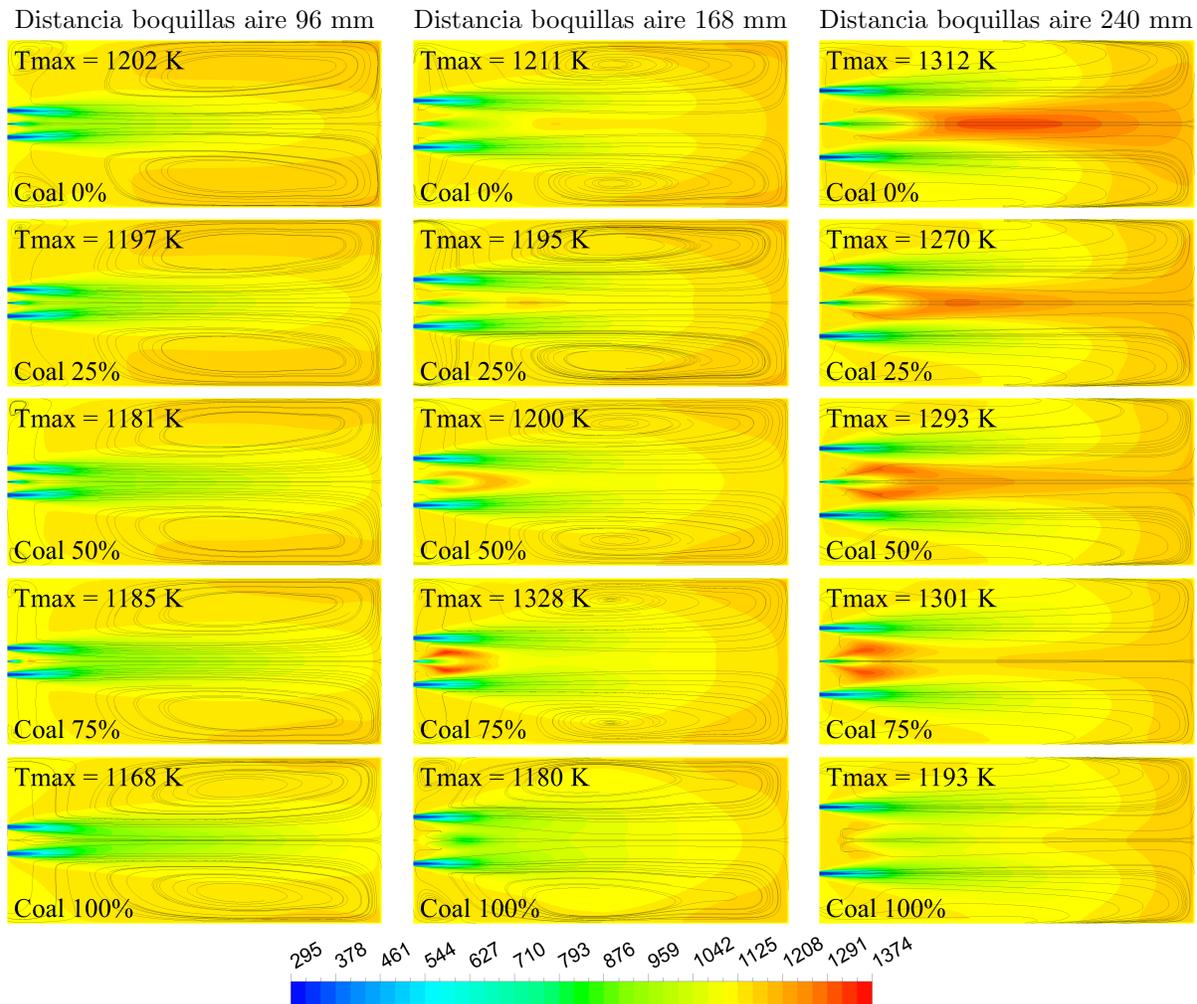


Figura 3.11. Contornos de temperatura (K) en el plano horizontal para una boquilla de aire de 16 mm (Casos del 1 al 15 de la Tabla 3.1)

definida para los casos con distancia de boquillas de aire de 96 mm y 168 mm. A pesar de esto, debe revisarse el factor de recirculación para poder determinar realmente cual distancia entre boquillas conduce a un mayor valor en este parámetro.

En la Figura 3.13 se presentan los resultados de temperatura para los dos casos donde se emplea el quemador con la configuración para modo llama, los cuales tienen 100 % gas natural y 100 % carbón pulverizado, respectivamente. Debe aclararse que para estos 2 casos no se obtuvieron resultados satisfactorios empleando el modelo EDC para la interacción turbulencia y química, de tal forma que los contornos presentados corresponden a simulaciones empleando el modelo de fracción de mezclado (*mixture fraction*).

Se observa que para el caso con 100 % gas natural se obtiene una zona de reacción bastante intensa, la cual está anclada al quemador. Además, resalta el hecho de que la temperatura máxima es mayor a 2000 K y que la zona de recirculación es bastante débil.

Por otro lado, para el caso con 100 % carbón se observa que la zona de reacción está desprendida del quemador, lo cual es algo que también sucede en los casos con combustión sin llama, la diferencia es que en este caso la zona de reacción del carbón se encuentra a una distancia mayor al quemador en comparación a los casos de combustión sin llama. Esto se debe principalmente al hecho de que todo el aire de combustión, el cual está a una temperatura relativamente baja, ingresa al horno por un coflujo que rodea el *jet* de carbón, haciendo que el tiempo que le toma a las partículas en calentarse y empezar a volatilizarse sea mayor que cuando se tiene la configuración de combustión sin llama, donde el *jet* de carbón está rodeado de gases a alta temperatura.

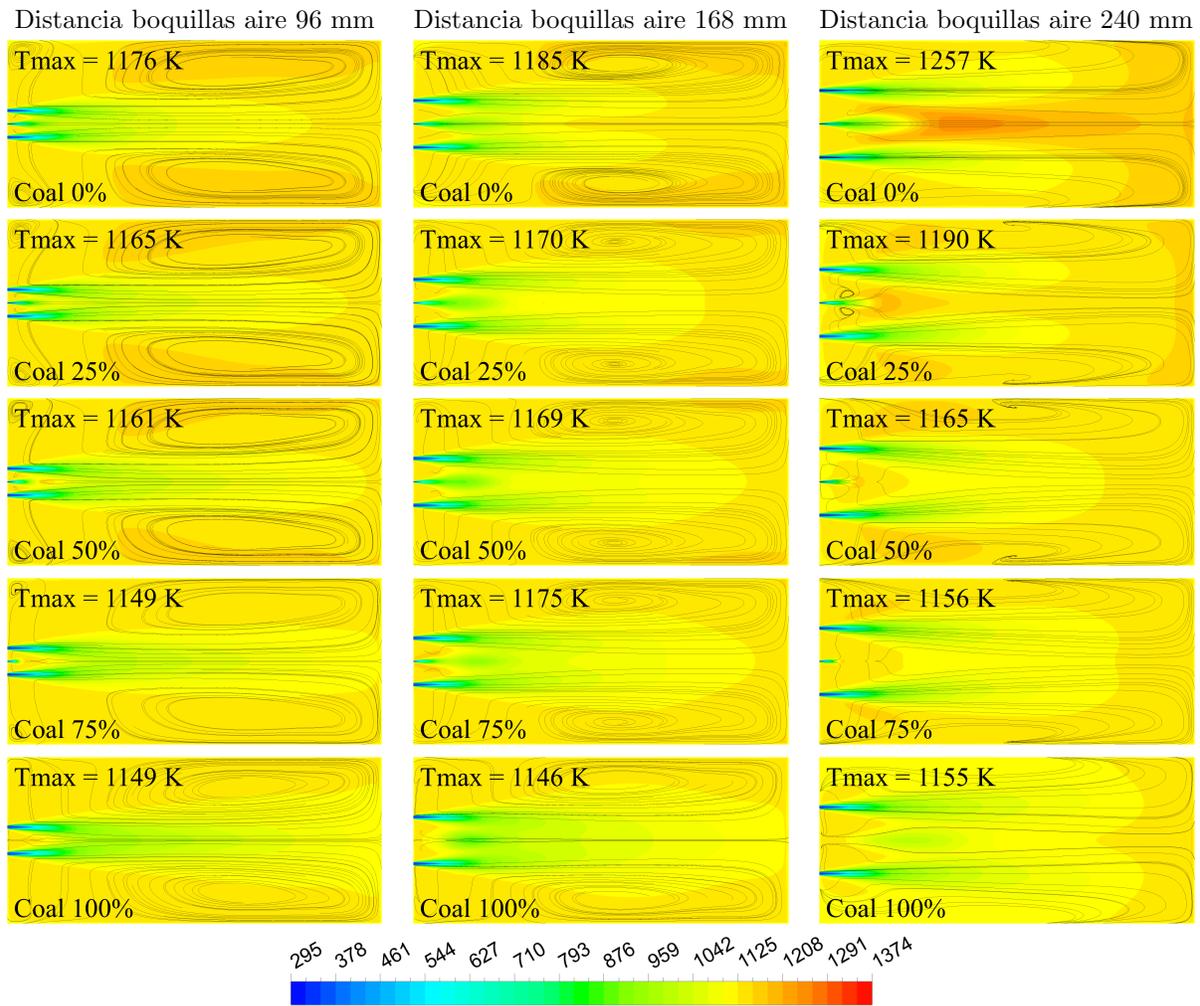


Figura 3.12. Contornos de temperatura en el plano horizontal para una boquilla de aire de 10.9 mm (Casos del 16 al 30 de la Tabla 3.1)

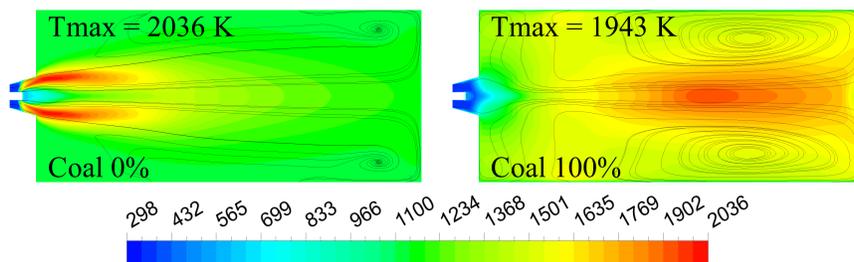


Figura 3.13. Contornos de temperatura en el plano de simetría y en el plano horizontal para los casos de modo llama (Casos 31 y 32 de la Tabla 3.1)

3.6.2. Parámetros de uniformidad de la temperatura

En la Figura 3.14 se muestra un análisis de las temperaturas al interior de la cámara de combustión para todas las simulaciones, donde se presenta la temperatura promedio para cada configuración (barras de colores), la desviación estándar de dicha temperatura promedio, y la temperatura máxima en la cámara de combustión para cada configuración simulada.

Resalta el hecho de que la temperatura promedio de toda la cámara de combustión es bastante similar para todas las configuraciones incluyendo el caso de modo llama con 100 % gas natural (0 % carbón), además

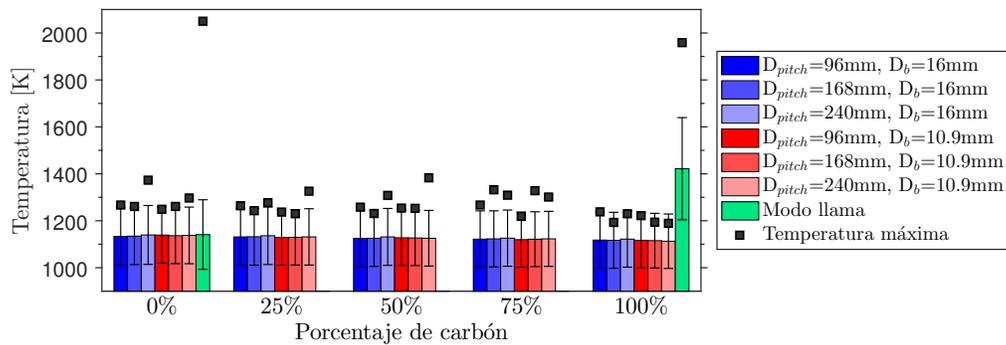


Figura 3.14. Comparación temperatura promedio

se observa que la desviación estándar de la temperatura en todas las configuraciones es bastante similar y está alrededor de 100 K. La diferencia principal en los modos de combustión sin llama con respecto al modo de combustión convencional radica en el hecho de que la temperatura máxima en las configuraciones de combustión sin llama, está bastante cerca a la desviación estándar de la temperatura, mientras que la temperatura máxima en modo llama es mucho más alta que la temperatura promedio y que la desviación estándar de dicha temperatura.

Debe notarse, que para el caso de modo llama con 100% carbón pulverizado se ha obtenido una temperatura promedio bastante más alta que en los demás casos, y así mismo, la desviación estándar en este caso es mucho mayor que la desviación estándar de los demás casos incluyendo el caso de combustión convencional con 100% gas natural (0% carbón), aunque debe tenerse en cuenta que los resultados en modo llama son más bien una guía de lo que puede ocurrir, puesto que el modelo de combustión en estos casos es diferente al modelo usado para los casos de combustión sin llama.

3.6.3. Contornos de fracción másica de CO

En la Figura 3.15 se muestran los contornos de fracción másica de CO sobre el plano horizontal central de la cámara de combustión para los casos con boquillas de aire de 16 mm. De forma similar a los contornos de temperatura, los resultados son presentados en función del porcentaje de carbón pulverizado (filas), y en función de la distancia entre las boquillas de aire (columnas).

Se observa que la zona de reacción se encuentra más distribuida para los casos con distancia de boquillas de aire de 96 mm ya que los contornos tienen valores más cercanos, aunque se nota que para 100% carbón, la zona de reacción está muy desplazada hacia el final de la cámara de combustión, lo cual podría conducir a una mayor cantidad de inquemados en las cenizas.

También, se observa que cuando la distancia entre las boquillas de aire es mayor (los casos de 240 mm), para 100% carbón pulverizado la zona de reacción continúa estando cerca al quemador, lo cual indica que el carbón se calienta rápidamente, empezando el proceso de volatilización y quemado antes, en comparación con las otras 2 distancias entre boquillas.

En general, se puede decir que para todos los casos la zona de reacción se encuentra muy distribuida al interior de la cámara de combustión, ya que como se puede ver, el CO ocupa una gran porción del plano horizontal.

En la Figura 3.16 se presentan los contornos de fracción másica de CO, también sobre el plano horizontal central, pero para los casos con boquillas de aire de 10.9 mm, observándose en general que la zona de reacción en todos los casos también se encuentra muy distribuida en la cámara de combustión, lo cual es algo característico de la combustión sin llama.

También, se nota que para los casos con las boquillas de aire más alejadas (Figura 3.16, tercera columna) al aumentar el porcentaje de carbón, hasta 75% carbón, se va generando una zona cercana al quemador donde la concentración de CO es alta, la cual corresponde a la reacción del gas natural. A pesar de esto no se considera que esto genere algún tipo de inconveniente en la obtención del régimen de combustión sin llama, ya que en esos casos el porcentaje de gas natural es bajo, por lo que tiene mucha más importancia la combustión del carbón pulverizado, la cual ocurre a una mayor distancia del quemador.

Adicionalmente, nuevamente resalta el hecho de que con la distancia de boquillas de 240 mm y para 100% carbón pulverizado, se ha obtenido una zona de CO más amplia e intensa en comparación a las otras 2 distancias de boquillas, donde el carbón inicia su proceso de combustión rápidamente al entrar a la cámara

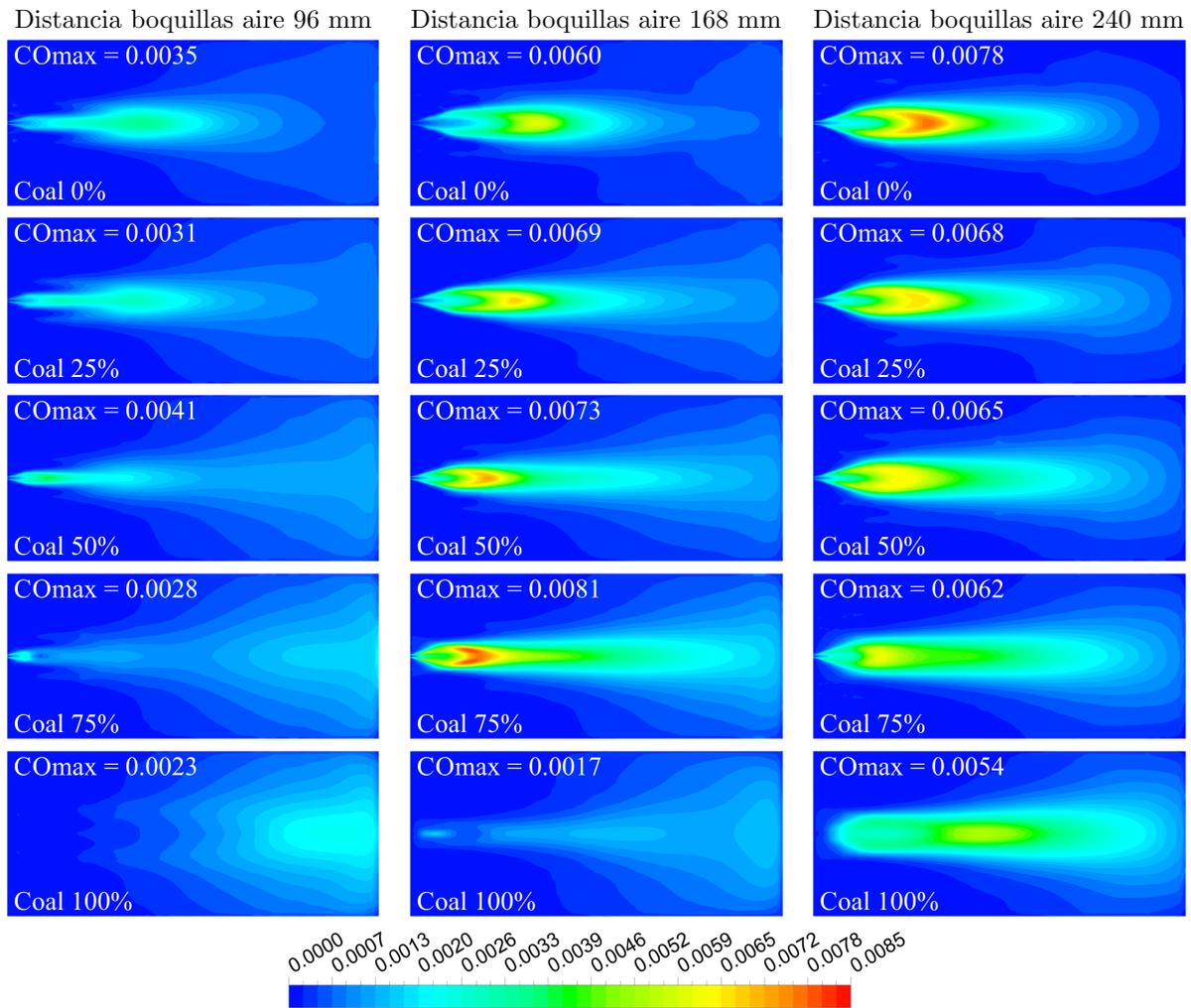


Figura 3.15. Contornos de fracción másica de CO en el plano horizontal para una boquilla de aire de 16 mm (Casos del 1 al 15 de la Tabla 3.1)

de combustión, lo cual puede ser explicado porque en este caso el carbón se encuentra rodeado de una mayor cantidad de gases calientes, aumentando rápidamente la temperatura del mismo, permitiéndole así volatilizarse más cerca al quemador.

Con respecto a los casos de modo llama, en la Figura 3.17 se presentan los contornos de CO para estos casos, observándose que con gas natural, efectivamente la zona de reacción se encuentra anclada al quemador, donde el gas natural se descarga de forma radial, mientras que para 100 % carbón en modo llama la cámara de combustión al parecer no es lo suficientemente larga ya que hay una alta concentración de CO cerca a la pared más alejada del quemador, donde aparentemente el carbón pulverizado está chocando sin haberse quemado completamente, lo cual sucede principalmente por el hecho de que en este caso el carbón, al entrar a la cámara de combustión, se encuentra rodeado de aire a una temperatura relativamente baja, retardando el calentamiento de las partículas de carbón y por consiguiente la volatilización y el quemado del carbonizado inician a una distancia mayor del quemador en comparación a los casos de combustión sin llama.

3.6.4. Análisis del factor de recirculación

En la obtención del régimen de combustión sin llama, un parámetro muy importante es el factor de recirculación el cual fue calculado para cada una de las simulaciones realizadas siguiendo la metodología expuesta en [129]. Dicho factor de recirculación se definió en la Ecuación 1.1, donde la variable más difícil de hallar es la masa de gases recirculados, razón por la que normalmente dicho parámetro se obtiene por medio de simulaciones numéricas. En la Figura 3.18 se presentan los resultados del factor de recirculación a

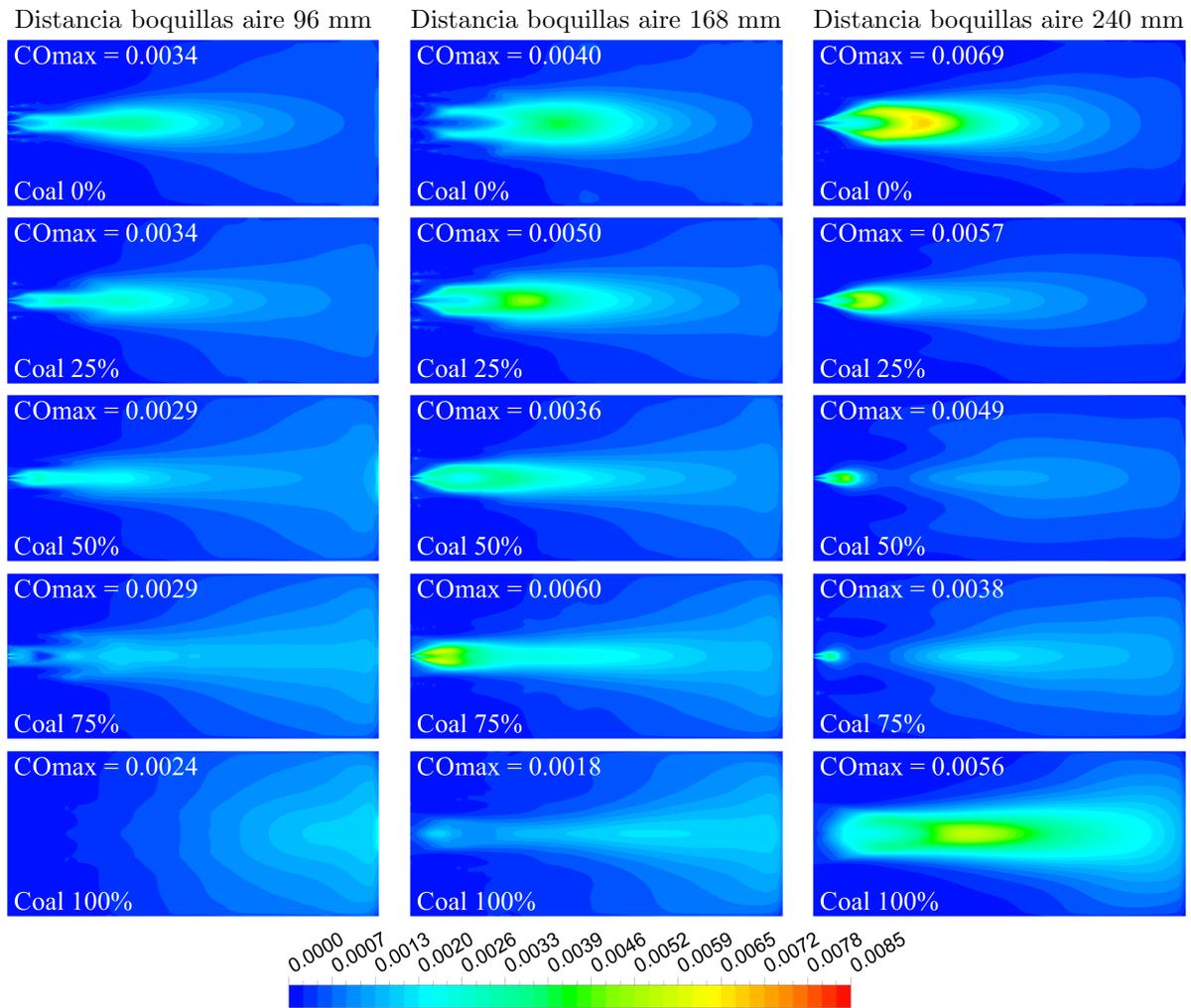


Figura 3.16. Contornos de fracción másica de CO en el plano horizontal para una boquilla de aire de 10.9 mm (Casos del 16 al 30 de la Tabla 3.1)

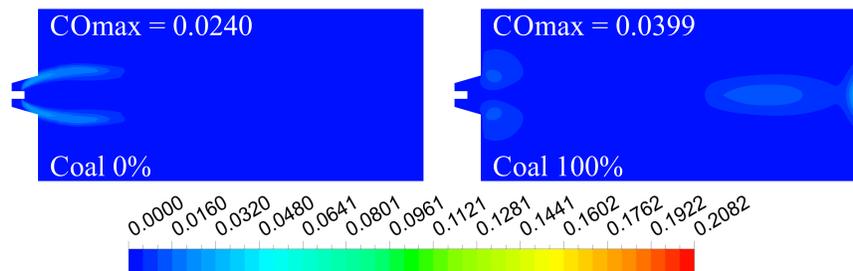


Figura 3.17. Contornos de fracción másica de CO en el plano de simetría y en el plano horizontal para los casos de modo llama (Casos 31 y 32 de la Tabla 3.1)

lo largo de la cámara de combustión para las diferentes simulaciones realizadas. En dicha figura, cada gráfica corresponde a una configuración geométrica específica, de tal forma que en la primera fila se encuentran las configuraciones con boquillas de aire de 16 mm, mientras que la segunda fila corresponde a las configuraciones geométricas con boquillas de aire de 10.9 mm. Las columnas corresponden a las 3 distancias que se simularon para las boquillas de aire de combustión, la cual se denota como D_{pitch} . Por último, en la tercera fila se muestran los resultados del factor de recirculación para los 2 casos simulados en modo llama.

Se observa que para los casos donde la distancia entre las boquillas es de 96 mm, el factor de recirculación

tiende a ser más bajo, esto sin importar el porcentaje de carbón que se tenga en la mezcla, lo cual no es algo deseable debido a que lo que se busca es maximizar dicho factor con el fin de obtener de una manera confiable el régimen de combustión sin llama. Debe notarse que cuando se observaron las líneas de corriente para estos casos (Figuras 3.11 y 3.12), la zona de recirculación estaba más definida en comparación a los otras 2 distancias entre boquillas, pero a pesar de esto, el factor de recirculación es menor especialmente cuando se compara con la distancia de boquillas de aire de 240 mm.

Por otro lado, también resalta el hecho de que los mayores factores de recirculación se han obtenido con una distancia entre boquillas de aire de 240 mm y especialmente con el diámetro de boquillas de aire de 10.9 mm, donde los factores de recirculación máximos oscilan entre 1.5 y 2 para los diferentes porcentajes de carbón pulverizado, lo cual es importante porque eso nos indica que esta geometría sería la idónea para realizar las pruebas experimentales.

Adicionalmente, para los casos de combustión sin llama los factores de recirculación máximos son obtenidos en el primer tercio de la cámara de combustión, indicando que efectivamente la recirculación se encuentra en la zona adecuada, de tal forma que hace su función de diluir y calentar de forma temprana los reactivos. Por otro lado, para los casos de modo llama, si bien la recirculación máxima se encuentra cerca al quemador, esta no es lo suficientemente alta como para diluir los reactivos, más aun teniendo en cuenta que para esta configuración, dichos reactivos entran en contacto rápidamente al interior de la cámara de combustión.

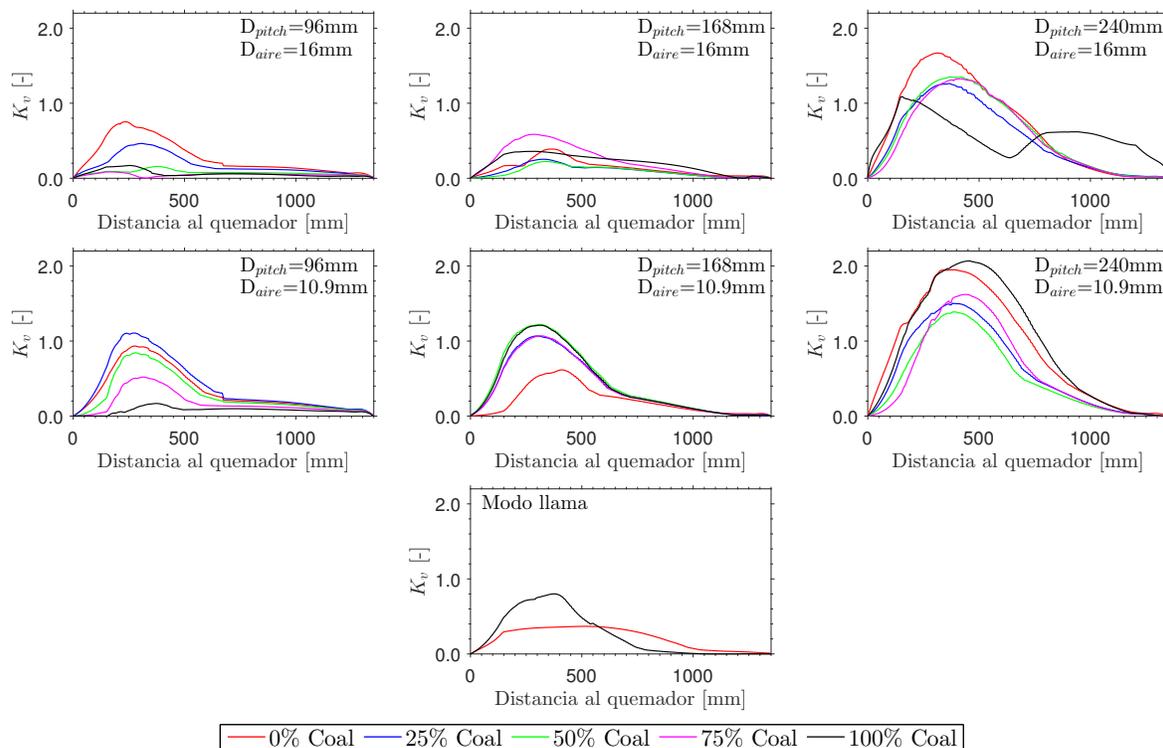


Figura 3.18. Factor de recirculación a lo largo de la cámara de combustión para las diferentes configuraciones analizadas numéricamente.

3.6.5. Grado de quemado del carbón

En la Figura 3.19 se presenta el grado de quemado del carbón (*coal burnout*) obtenido numéricamente en la salida de la chimenea tanto para los casos de combustión sin llama como para combustión convencional en función del porcentaje de carbón en la mezcla carbón pulverizado - gas natural. Las barras azules corresponden al diámetro de boquilla de aire de 16 mm, y la diferencia en el tono de azul detallan diferentes distancias entre las boquillas de aire. De forma similar, las barras rojas representan los resultados con las boquillas de aire de 10.9 mm y la diferencia entre el tono de los colores rojos corresponden a una distancia específica entre las boquillas de aire. Adicionalmente, la barra de color verde corresponde al caso de modo llama con 100 % carbón pulverizado.

Se observa que para los casos de combustión sin llama, para una misma configuración geométrica (mismo

color de barra), en general se obtiene un mayor grado de quemado del carbón a medida que aumenta el porcentaje de carbón en la mezcla. Adicionalmente, se ha obtenido que el grado de quemado del carbón en modo llama es superior en comparación a los casos de combustión sin llama, lo cual se debe principalmente al hecho de que en modo llama el carbón está sometido a temperaturas y concentraciones de O_2 superiores y la reacción de oxidación del carbonizado es altamente dependiente de la temperatura y la concentración de oxígeno.

Por otro lado, cuando se comparan las diferentes configuraciones de combustión sin llama, se observa que en general el mayor grado de quemado del carbón, para todos los porcentajes de carbón en la mezcla, se obtiene con la mayor distancia entre las boquillas de aire de combustión ($D_{pitch} = 240$ mm) y menor diámetro de boquillas de aire ($D_b = 10.9$ mm). Adicionalmente para el diámetro de boquilla de 10.9 mm en general el porcentaje de quemado del carbón aumenta al incrementar la distancia entre las boquillas de aire. Este comportamiento es probablemente debido a que para la mayor distancia de boquillas se obtiene un mayor factor de recirculación, el cual facilita que las partículas puedan tener un mayor tiempo de residencia al interior de la cámara de combustión.

En general, según el modelo usado en este trabajo, el porcentaje de *burnout* para los casos de combustión sin llama es relativamente bajo encontrándose para la mayoría de los casos entre un 89 y un 95 %, lo cual es algo un poco por debajo de lo esperado, contribuyendo de esta forma a que se tenga una disminución de la eficiencia de combustión, siendo algo no deseable. A pesar de esto, posteriormente se mostrará que experimentalmente el porcentaje de *burnout* es bastante mayor.

A pesar de que el modelo empleado no tiene en cuenta algún efecto químico del metano sobre el carbón pulverizado, se observa que según el modelo al disminuir el porcentaje de gas natural (o al aumentar el porcentaje de carbón) el grado de quemado del carbón tiende a aumentar, lo cual significaría un efecto adverso de la concentración del CH_4 sobre la combustión del carbón pulverizado, que en este caso es tal vez causado por el hecho de que el gas natural consume parte del O_2 disponible rápidamente, conduciendo a que el carbón pulverizado esté sometido a menores concentración de O_2 y por lo tanto disminuyendo su tasa de reacción.

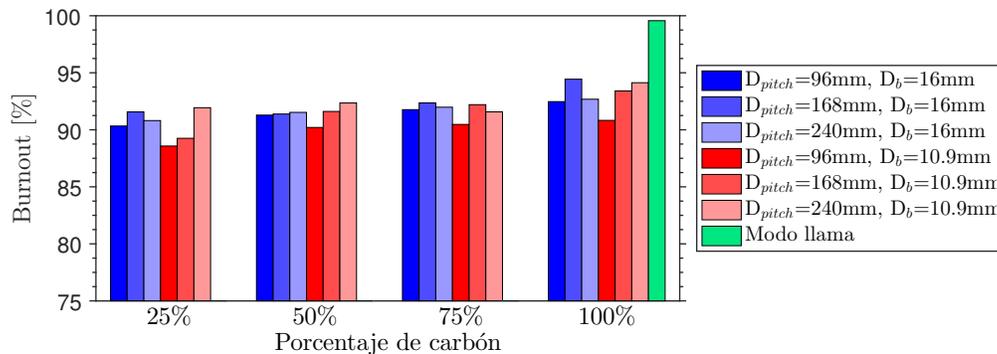


Figura 3.19. Comparación de porcentaje de quemado del carbón (*coal burnout*).

3.6.6. Contribución de las reacciones de gasificación

Adicionalmente, con el fin de verificar si para las simulaciones realizadas, las reacciones de gasificación realmente tienen un aporte significativo en el consumo del carbonizado, entonces se realizaron algunas simulaciones donde solo se tuvo en cuenta la reacción de oxidación (ver Sección 2.3.1.3.1). En la Figura 3.20 se presenta la comparación del grado de quemado del carbón incluyendo las reacciones de gasificación (Secciones 2.3.1.3.2 y 2.3.1.3.3) y sin incluir dichas reacciones. Este análisis solo se realizó para los casos del 27 al 30 de la Tabla 3.1 ($D_{pitch} = 240$ mm y $D_b = 10.9$ mm). Se observa que aunque la mayoría de autores incluyen las reacciones de gasificación (ver Tabla 2.2), en realidad el efecto que éstas tienen sobre el quemado del carbón es muy pequeño, lo cual se puede deber principalmente al hecho de que las temperaturas características de este trabajo no son lo suficientemente altas para que las reacciones de gasificación cobren importancia.

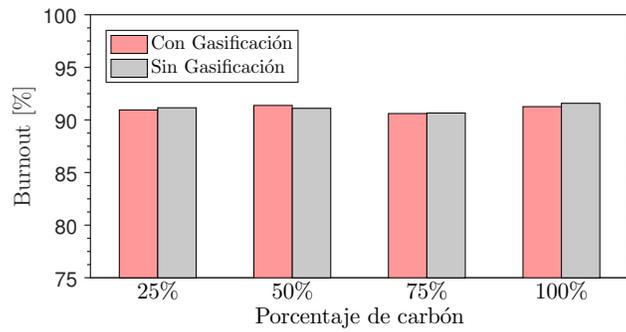


Figura 3.20. Comparación del porcentaje de quemado del carbón incluyendo y sin incluir las reacciones de gasificación caso del 27 al 30.

3.7. Conclusiones de las simulaciones numéricas en Fluent

De los resultados de las simulaciones fluido-dinámicas realizadas en el software Fluent para diferentes configuraciones geométricas del quemador, donde se varió la distancia de las boquillas del aire de combustión y el diámetro de las mismas, se concluye que aunque en general con todas las configuraciones probadas para combustión sin llama se obtienen temperaturas uniformes y zonas de reacción muy distribuidas, se opta por seleccionar la geometría donde la distancia de las boquillas de aire es mayor (240 mm) y donde el diámetro de dichas boquillas es menor (10.9 mm) debido principalmente al hecho de que esto maximiza el factor de recirculación, lo cual experimentalmente debe conducir a obtener de forma estable el régimen de combustión sin llama para las diferentes mezclas de carbón pulverizado con gas natural.

Por otro lado, según el modelo empleado en Fluent, a mayor concentración de CH_4 en la mezcla de gas natural-carbón pulverizado, se tiene un efecto adverso sobre el quemado de carbón pulverizado (*coal burnout*), lo cual se debe a que el CH_4 consume parte del oxígeno rápidamente haciendo que la concentración de O_2 a la que está sometido el carbón sea menor y por lo tanto disminuya la tasa a la que se consume el carbonizado.

Capítulo 4

Simulaciones numéricas en SKIPPY

Con el fin de hacer una mejor descripción del quemado del carbonizado en condiciones de combustión sin llama y en una atmósfera con CH_4 , entonces se realizan simulaciones numéricas con el software SKIPPY (*Surface Kinetics in Porous Particles*) [130], el cual es un código que describe las reacciones heterogéneas de una partícula porosa, esférica y reactiva, a su vez que también tiene en cuenta las reacciones homogéneas en la capa límite.

El SKIPPY, es un programa escrito en Fortran y desarrollado en la Universidad de Sydney, el cual resuelve las ecuaciones de conservación de la masa, conservación de las especies y conservación de la energía en estado estable para una partícula porosa y reactiva en un ambiente gaseoso que puede ser también reactivo, considerando un dominio esférico que es unidimensional en la dirección radial.

Por medio del SKIPPY se pueden predecir concentraciones de especies y temperatura al interior del carbonizado, en la superficie externa, y en la capa límite que rodea el carbonizado, considerando tanto las reacciones homogéneas como las heterogéneas.

Adicionalmente, Como características adicionales de este código, se tiene que las tasas de reacción homogénea y heterogénea son calculadas por medio de subrutinas de Chemkin II [131] y Surface Chemkin [132].

4.1. Descripción del modelo

En la Figura 4.1 se muestra de forma esquemática como funciona el modelo que está implementado en dicho software, el cual está compuesto de 2 zonas principales: Una zona central donde se encuentra la partícula porosa, cuyo radio (r_p) es definido por el usuario; y una segunda zona, la cual corresponde a la capa límite que rodea a la partícula porosa, donde el radio de esta zona (r_{CL}) usualmente se define con un tamaño 100 veces más grande que el de la partícula porosa [116], esto con el fin de minimizar el efecto de las condiciones de frontera sobre el quemado del carbonizado.

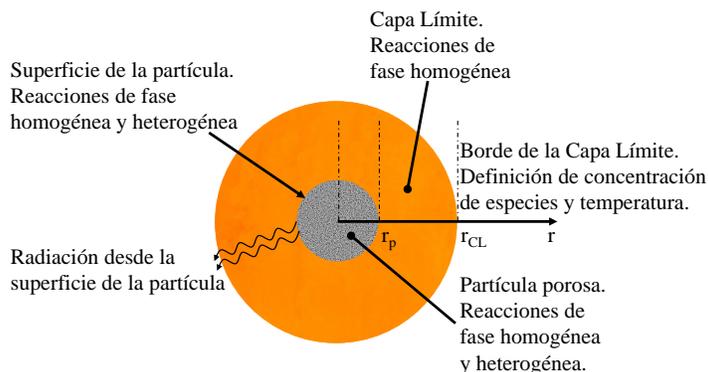


Figura 4.1. Esquema del modelo de SKIPPY.

Adicionalmente, al interior de la partícula porosa y en su superficie se pueden llevar a cabo reacciones tanto homogéneas como heterogéneas, mientras que en la capa límite solo pueden ocurrir reacciones homogéneas.

A continuación se hace una descripción de las ecuaciones que resuelve el software SKIPPY, las cuales están detalladas en [115]. Debido a que las reacciones heterogéneas pueden adicionar masa a la fase gaseosa, entonces la ecuación de conservación de la masa viene dada por la Ecuación 4.1.

$$\frac{d\dot{m}}{dr} = \sum_{k=1}^{K_g} \dot{S}_k W_k \sigma_r A \quad (4.1)$$

donde \dot{S}_k es la tasa de producción molar por unidad de área debida a las reacciones de superficie de la especie k [mol/m²s] con K_g especies de fase gaseosa; W_k , es el peso molecular de la especie k [kg/mol]; σ_r , es el área superficial específica para las reacciones heterogeneas [m²/m³], que se calcula como $\rho_p A_{act}$, siendo ρ_p la densidad de la partícula [kg/m³] y A_{act} es el área superficial activa [m²/g]; por último, $A=4\pi r^2$, es el área normal a la dirección del flujo [m²].

Para describir el flujo, se considera que por fuera de la partícula ($r > r_p$), las reacciones químicas causan solo pequeñas variaciones espaciales en la velocidad ponderada por la masa, por este motivo los términos convectivos son despreciados en el balance de cantidad de movimiento. Además, al interior de la partícula porosa, la ley de Darcy o ecuación de Hagen-Poiseuille es usada para describir el flujo. De esta forma el balance de cantidad de movimiento está dado por la Ecuación 4.2.

$$\frac{dp}{dr} = -\frac{\dot{m}}{\rho A} \frac{8\mu}{r_{pore}^2} \frac{\tau}{\phi} \quad (4.2)$$

Donde p es la presión [Pa]; μ , es la viscosidad promedio de la mezcla [Pa s]; τ , la tortuosidad; ϕ , la porosidad; y r_{pore} , el radio promedio de los poros [m]. Cabe notar que por fuera de la partícula ($r > r_p$), la tortuosidad es cero, lo que reduce la Ecuación 4.2 a $dp/dr = 0$.

Por otro lado, la conservación de las especies está dada por la Ecuación 4.3

$$\frac{1}{A} \frac{d}{dr} (\dot{m} + \rho V_k A) Y_k = \dot{S}_k W_k \sigma_r + \dot{\omega}_k W_k \phi \quad (4.3)$$

Donde V_k es la velocidad de difusión de la especie k [m/s] y $\dot{\omega}_k$ es la tasa molar de producción por unidad de volumen de la especie k [mol/m³s] debido a reacciones de fase gaseosa. Para calcular V_k , SKIPPY usa la difusión multicomponente.

Adicionalmente, en la Ecuación 4.4 se muestra el balance de energía, donde se considera despreciable el efecto de la radiación de la fase gaseosa.

$$\frac{1}{A} \frac{d}{dr} \sum_{k=1}^{K_g} (\dot{m} + \rho V_k A) Y_k h_k + \frac{1}{A} \frac{d}{dr} \left(-\lambda_t A \frac{dT}{dr} \right) = \sum_{k=K_s^f}^{K_b^l} \dot{S}_k h_k W_k \sigma_r \quad (4.4)$$

Donde h_k es la entalpía específica de la especie k [J/kg]; $\lambda_t = \lambda\phi + \lambda_p(1 - \phi)$, es la conductividad térmica total [W/mK]; λ , es la conductividad térmica promedio de la mezcla gaseosa [W/mK]; λ_p es la conductividad térmica de la partícula sólida [W/mK]; K_s^f , es la primera especie de superficie; y K_b^l , es la última especie de *bulk*.

Debido a que la solución obtenida con SKIPPY está en estado estable, entonces la tasa de producción neta de las especies de superficie deben ser iguales a cero, esto es:

$$\dot{S}_k = 0, \text{ para } k = K_s^f, \dots, K_s^l. \text{ Donde } K_s^l \text{ es la última especie de superficie.}$$

Por otro lado, debe decirse que cuando se hace la discretización de la ecuación de conservación de la energía (Ecuación 4.4) se incluye el efecto de la radiación de la superficie de la partícula a los alrededores, agregando el término $4\epsilon\sigma\pi r_p^2 (T_{sp}^4 - T_{alr}^4)$, al lado izquierdo de la Ecuación 4.4, para el nodo que corresponde a la superficie de la partícula.

Para las reacciones de fase homogénea se ha usado el mecanismo de reacción GRI-mech 3.0 [112], mientras que para las reacciones de fase heterogénea se ha usado el mecanismo que se presenta en la Tabla 4.1, el cual ha sido usado por [113, 115] para realizar el cálculo de quemado de carbonizado con el software SKIPPY, e incluye tanto las reacciones de oxidación como las de gasificación del carbono.

SKIPPY también tiene la posibilidad de incluir el efecto de la radiación para calcular la temperatura de la partícula, para lo cual se requiere definir la temperatura de los alrededores, donde en este caso dicha temperatura correspondería a la temperatura de las paredes de la cámara de combustión, la cual en base a resultados experimentales se asume como 1173 K.

Tabla 4.1. Mecanismo de reacción heterogénea usado en las simulaciones con el software SKIPPY [113, 115].

Reacción	A	b	E (cal/mol)
$C(s) + O_2 \Rightarrow CO + O(s)$	3.30E+15	0.00	40000
$O(s) + 2C(b) \Rightarrow CO + C(s)$	1.00E+08	0.00	0.
$C(s) + O_2 \Rightarrow O_2(s) + C(b)$	9.50E+13	0.00	34000
$O_2(s) + 2C(b) \Rightarrow C(s) + CO_2$	1.00E+08	0.00	0.
$C(s) + CO_2 \Rightarrow CO + O(s) + C(b)$	3.60E+15	0.00	60000
$C(s) + H_2O \Rightarrow H_2 + O(s) + C(b)$	4.35E+14	0.00	53000

Por otro lado, el usuario define la concentración de las especies y la temperatura en el borde de la capa límite, las cuales son usadas como condiciones de frontera para resolver el problema.

Como se observa, las ecuaciones anteriores involucran el parámetro σ_r el cual está relacionado con el área superficial activa (A_{act}), que es un parámetro sobre el cual no hay un consenso en la literatura, siendo reportados valores muy diversos. Por ejemplo en trabajos que también han usado el software SKIPPY, los valores usados oscilan entre 1 y 10 m²/g [115, 116, 118], lo cual es soportado por resultados como el de Laine et al [133] quienes encuentran que A_{act} está entre el 0.3 y el 3.2% del área superficial total (BET). Pero hay trabajos donde reportan valores mucho mayores de A_{act} , por ejemplo Causton et al [134] encuentran un valor de A_{act} cercano a 30 m²/g, el cual corresponde aproximadamente a un 70% del área BET del carbonizado que usan. De forma similar, Khan [135] reporta un valor de A_{act} igual a 70 m²/g para una muestra de char preparada a 1223 K, y valores tan altos de A_{act} como 253 m²/g para una muestra preparada a 773 K.

En este trabajo, se hicieron pruebas preliminares con un valor de A_{act} igual a 10, 70, y 250 m²/g, para ver como diferían los resultados con respecto a los resultados obtenidos con Fluent, encontrándose que con el valor de 10 m²/g el tiempo que le tomaba al carbonizado consumirse era mucho mayor al obtenido con el modelo de Fluent. Por este motivo, se seleccionó un valor de 70 m²/g, el cual también ha sido reportado en la literatura y los tiempos calculados para el consumo del carbonizado son comparables a los obtenidos en Fluent.

En la Tabla 4.2 se presenta un resumen de los parámetros inicialmente usados para realizar las simulaciones en SKIPPY.

Tabla 4.2. Parámetros de entrada a las simulaciones de SKIPPY.

Mecanismo de fase gaseosa	GRI MECH 3.0
Mecanismo de superficie	6 reacciones, Tabla 4.1
Temperatura en capa límite	Valor variable tomado de Fluent. Valor medio 1180 K.
O ₂ en capa límite	Valor variable tomado de Fluent. Valor medio 3.6% vol.
CO ₂ en capa límite	Valor variable tomado de Fluent. Valor medio 14.5% vol.
H ₂ O en capa límite	Valor variable tomado de Fluent. Valor medio 9% vol.
CH ₄ en capa límite	Valor variable tomado de Fluent. Valor medio 0.08% vol.
N ₂ en capa límite	Obtenido por balance
% Carbono inicial en <i>char</i>	82.3%
Área superficial inicial (A_0)	70 m ² /g
Porosidad inicial (ε_0)	0.55
Tortuosidad inicial (τ_0)	5
Densidad inicial del carbonizado	726 kg/m ³
Diámetros de partícula	15.2, 95 y 243.2 μ m

4.2. Metodología usada para las simulaciones

Las simulaciones numéricas en SKIPPY fueron desarrolladas en base a los resultados de las simulaciones de Fluent, en el sentido de que las condiciones de frontera para las simulaciones de SKIPPY se basaron en los resultados de Fluent. Esto se hizo solo para las simulaciones 27, 28, 29 y 30 (ver Tabla 3.1), las cuales tienen 25, 50, 75 y 100 % carbón, respectivamente.

Los resultados de Fluent se tomaron de las simulaciones mencionadas anteriormente, pero esto no se hizo para todos los tamaños de partícula (ver Tabla 3.4), sino que solo se hizo para 3 tamaños, los cuales son: $15.2 \mu\text{m}$, $95 \mu\text{m}$, y $243.2 \mu\text{m}$, donde se seleccionaron éstos al considerar que representan bien la amplitud de la distribución de tamaños de partículas del carbón usado en este trabajo.

Con el fin de explicar como se tomaron las condiciones de frontera para las simulaciones de SKIPPY a partir de las simulaciones de Fluent, en la Figura 4.2a se presenta, a modo de ejemplo, una muestra representativa de las trayectorias de las partículas para el caso 27, con partículas de $15.2 \mu\text{m}$ (recordar que para cada tamaño de partícula se tienen en total alrededor de 20000 trayectorias o partículas diferentes), donde para obtener las condiciones a las cuales está sometida cada partícula a lo largo de la cámara de combustión se usó una UDF (*User Defined Function*, presentada en el Anexo C), la cual extrae de Fluent la información requerida en el momento en que empieza el proceso de quemado del carbonizado y después de esto hace lo mismo cada 100 ms para cada partícula y así sucesivamente hasta que la partícula se consume completamente o es atrapada en la pared inferior o posterior. Esto se puede ver mejor en la Figura 4.2b, donde se ejemplifica, para solo 3 trayectorias, que a lo largo del recorrido de las partículas se toman los datos deseados de las variables en la posición donde se encuentra la partícula, lo cual se representa por medio de cajas de diferentes colores, donde cada color de la caja señala un instante de tiempo después de que inicia el proceso de quemado del carbonizado para cada trayectoria.

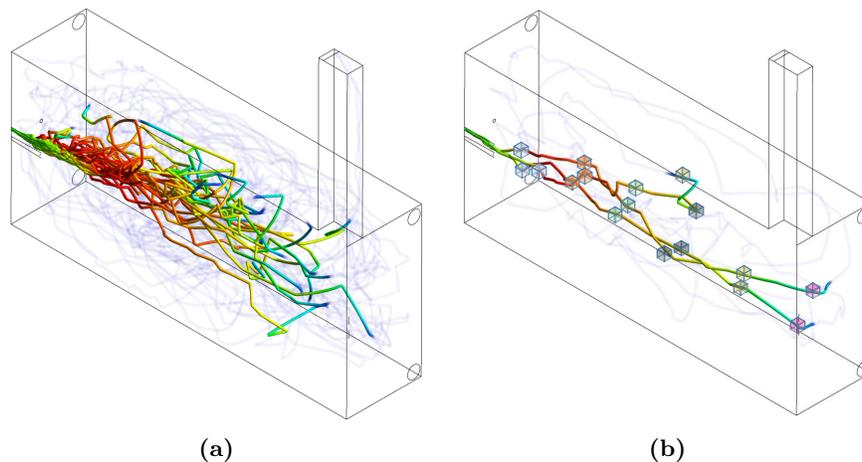


Figura 4.2. Trayectorias de partículas para una de la simulaciones realizadas en Fluent. (a) Muestra representativa de las trayectorias que constituyen el jet de partículas. (b) Detalle de 3 de las trayectorias de las partículas, donde los cubos representan los puntos donde se muestrea la atmósfera que rodea las partículas.

En base a lo anterior, se obtienen una serie de datos de temperatura y concentración de especies que rodean a las partículas en un momento determinado y de esta forma se obtiene una distribución de estas variables, lo cual se muestra a modo de ejemplo en las Figuras 4.3 y 4.4, que corresponden a las distribuciones de las variables de interés (temperatura y especies) para un tiempo de 0 ms y 300 ms después de iniciado el proceso de quemado del carbonizado.

De estas distribuciones se extrae principalmente el valor promedio, el cual se indica en las figuras como T_{avg} y estos datos son los que se usan como condición de frontera en las simulaciones de SKIPPY.

Adicionalmente, debe recordarse que SKIPPY solo permite realizar simulaciones en estado estable, entonces para poder realizar un análisis temporal se hace uso del método expuesto por Molina [118], donde se realiza una simulación inicial en estado estable y en base a la tasa de consumo obtenida en dicha simulación, se actualizan las propiedades de la partícula con un paso de tiempo deseado y de esta forma se realiza una nueva simulación en estado estable con las propiedades de la partícula actualizada, y se repite este proceso hasta que la partícula es consumida.

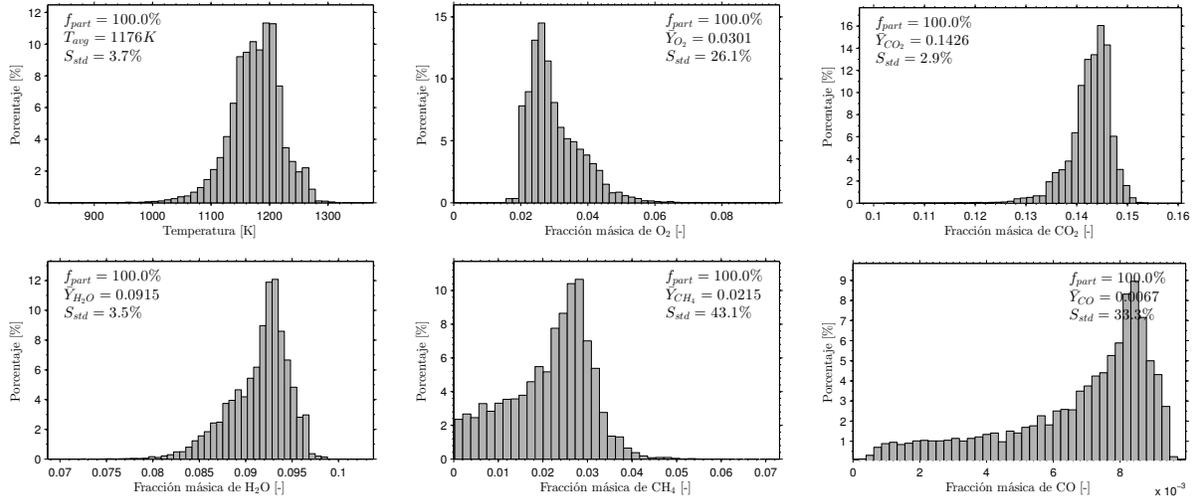


Figura 4.3. Condiciones a las que están sometidas las partículas en el momento donde inicia el proceso de carbonizado para el caso 27 (Tabla 3.1), con diámetro de partículas de $15.2 \mu\text{m}$.

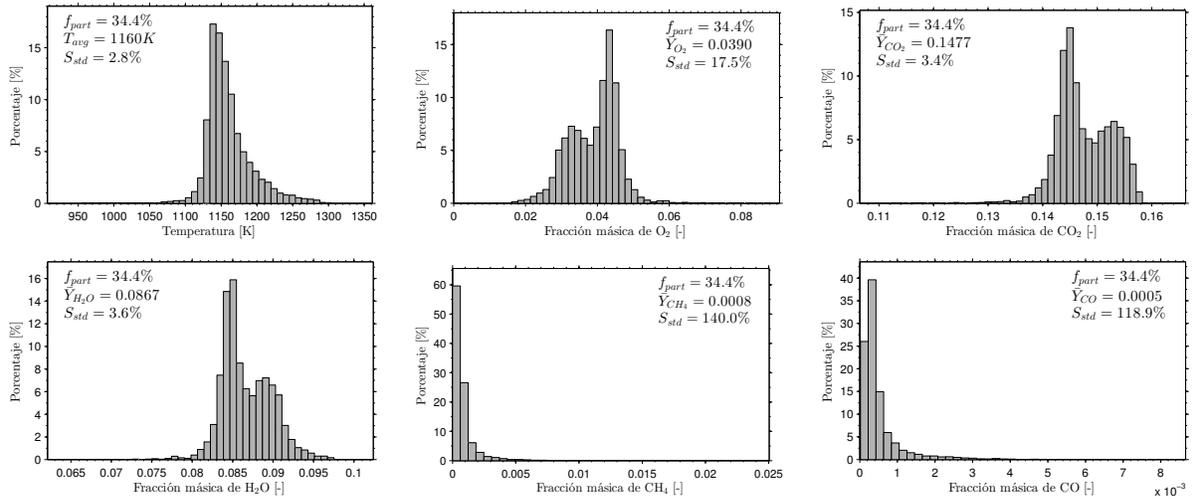


Figura 4.4. Condiciones a las que están sometidas las partículas 300 ms después de iniciar el proceso de carbonizado para el caso 27 (Tabla 3.1), con diámetro de partículas de $15.2 \mu\text{m}$.

Las propiedades de la partícula que son modificadas en cada paso temporal son el área superficial activa, la tortuosidad, la porosidad y el diámetro de la partícula, lo cual se hace de acuerdo a las Ecuaciones 4.5, 4.6, 4.7 y 4.8, las cuales son función del área superficial activa inicial (A_{act0}), la tortuosidad inicial (τ_0), la porosidad inicial (ε_0), el diámetro inicial de la partícula (d_0), el burnout (X_{char}) y de una constante empírica (b) igual a 2.5 [136].

$$A_{act} = A_{act0} (1 + b \times X_{char}) (1 - X_{char}) \quad (4.5)$$

$$\tau = 1 + (\tau_0 - 1) \times \frac{A_{act}}{A_{act0}} \quad (4.6)$$

$$\varepsilon = \varepsilon_0 + X_{char} (1 - \varepsilon_0) \quad (4.7)$$

$$d = d_0 (1 - X_{char})^{0.27} \quad (4.8)$$

4.3. Resultados de las simulaciones en skippy

En la Figura 4.5 se presentan los resultados obtenidos por medio de las simulaciones realizadas en SKIPPY para el quemado del carbonizado (*char burnout*) en función del tiempo, para los 3 diámetros de partícula analizados (15.2, 95, y 243.2 μm). Cada una de las subfiguras tiene cuatro curvas, las cuales corresponden a los porcentajes de carbón que tenían las simulaciones de Fluent usadas para poner las condiciones de frontera de las simulaciones de SKIPPY.

En primer lugar, se observa que en todos los casos nunca se alcanza un quemado del carbonizado igual a 100 %, lo cual se debe a que a medida que avanza el quemado este tiende a volverse asintótico a causa de la reducción del área superficial activa, lo cual hace que deba finalizarse el proceso de simulaciones consecutivas cuando se alcanza un quemado del carbonizado entre 90 % y 95 %.

Por otro lado se observa que para las partículas más pequeñas (15.2 μm), parece que a medida que aumenta el porcentaje de carbón, el tiempo que tarda el quemado del carbonizado es un poco mayor, lo cual nos da indicio de que el porcentaje de gas natural favorecería el quemado del carbonizado, pero recordando que el mecanismo de reacción de superficie usado no tiene en cuenta ningún efecto cinético químico por parte del metano sobre la reacción del carbonizado, sino que el efecto tiene que ser visto más desde un punto de vista térmico, es decir, por aumento de la temperatura de la capa límite a causa del quemado del CH_4 o por una modificación de las concentraciones de especies que sí reaccionan con el carbonizado (O_2 , CO_2 , y H_2O).

Cuando se observan los diámetros de partículas más grandes (95 y 243.2 μm) se ve un comportamiento muy similar en el quemado del carbonizado para los porcentajes de carbón de 25 % y 50 %, mientras que con 75 % carbón se observa que el tiempo es mayor puesto que la curva siempre permanece por debajo de las curvas con menor porcentaje de carbón. Además, es notable que para 100 % carbón, los porcentajes de *burnout* se encuentran muy por encima de las demás curvas, lo cual se debe principalmente a que la concentración de oxígeno a la que están sometidas las partículas en esta condición es mayor que la concentración de oxígeno para las demás condiciones, lo cual se debe a que en Fluent el gas natural reacciona rápidamente con parte del oxígeno disponible y disminuye la concentración de oxígeno a la cual están expuestas las partículas de carbón.

Además, se observa que en general para un mismo diámetro de partícula, el tiempo de quemado tiende a ser similar al modificar el porcentaje de carbón, y esto se debe principalmente al hecho de que a altos porcentajes de quemado del carbonizado la tasa de consumo disminuye de forma significativa debido a la disminución del área superficial activa.

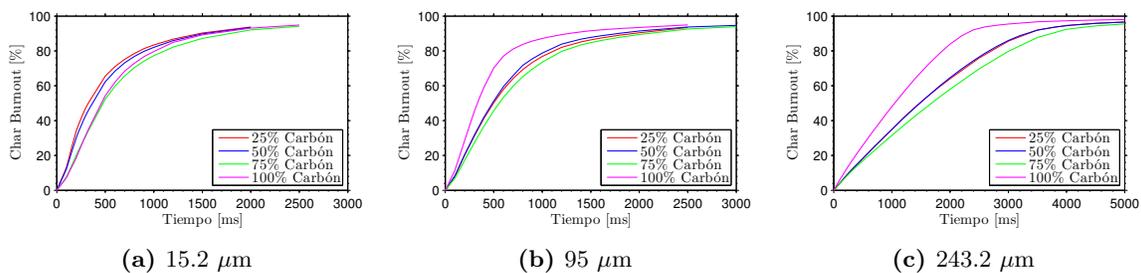


Figura 4.5. Comparación del *char burnout* obtenido por medio de SKIPPY con respecto al porcentaje de carbón para los 3 diámetros de partículas analizados.

En la Figura 4.6 se hace una comparación de los resultados obtenidos con Fluent y con SKIPPY para los diferentes porcentajes de carbón, y para cada porcentaje de carbón se muestran curvas que corresponden a los diferentes diámetros de partícula tanto en Fluent como en SKIPPY. En primer lugar, debe aclararse que para los diámetros de partícula de 243 μm de Fluent la curva se trunca rápidamente, y esto es debido a que estas partículas atraviesan rápidamente la cámara de combustión y son atrapadas en la pared posterior. En este caso, puesto que las condiciones a las que están sometidas estas partículas son usadas también como condición de frontera para las partículas correspondientes de SKIPPY, entonces a partir de ese momento se fijan las condiciones de frontera para coincidan con las condiciones un poco antes de que las partículas fueran atrapadas por la pared.

Adicionalmente, se observa que en Fluent las partículas pequeñas (15 μm) se consumen mucho más rápido que las partículas medianas (95 μm), pero cuando se comparan estos tamaños de partícula para las simulaciones de SKIPPY se observa que para estos tamaños el tiempo que tardan las partículas en consumirse

no tiene una diferencia tan marcada y son más bien comparables. Por otro lado en todos los casos las partículas grandes ($243 \mu\text{m}$) tienen un tiempo de consumo mucho mayor, el cual es del orden de 4 a 5 segundos.

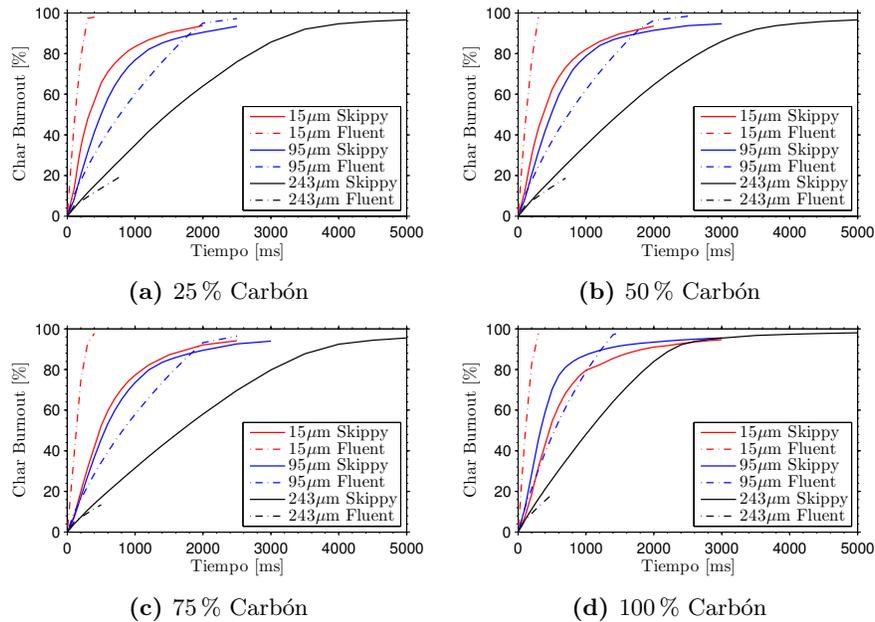


Figura 4.6. Comparación del quemado del carbonizado entre las simulaciones de SKIPPY y las simulaciones de Fluent para los diferentes porcentajes de carbón y tamaños de partícula analizados.

Además de las simulaciones de SKIPPY donde las condiciones de frontera estuvieron basadas en su totalidad en las condiciones tomadas de las simulaciones de Fluent, también fueron realizadas algunas simulaciones de SKIPPY donde las condiciones de frontera son modificadas de forma sistemática, partiendo de unas condiciones base las cuales corresponden a condiciones medias obtenidas de las simulaciones de Fluent. En las Figuras 4.7a y 4.7b se presentan los resultados de temperatura y fracción másica de oxígeno en la capa límite y al interior de la partícula para un diámetro de partícula de $95 \mu\text{m}$, donde el eje horizontal está normalizado en función del radio de la partícula, de tal forma que el valor de 1 corresponde a la superficie de la misma. En estas simulaciones todas las condiciones en la frontera permanecen iguales, excepto por la fracción másica de metano, la cual es aumentada en valores de aproximadamente 0.0025, partiendo desde 0.0023 hasta 0.015 (0.0023 es el valor base obtenido de las simulaciones de Fluent), esto con el fin de observar si al aumentar la fracción másica de metano en la condición de frontera tiene alguna incidencia significativa sobre los perfiles de temperatura y de oxígeno.

Se observa que al aumentar la fracción másica de metano en la capa límite los perfiles de temperatura y de oxígeno permanecen casi inalterados, incluso se ve que hay una pequeña reducción de la temperatura al interior de la partícula. Esto significa que para este nivel de temperatura y concentración de oxígeno en la capa límite, la reacción del metano es muy lenta lo cual hace que no se aprecie un efecto significativo sobre la tasa de consumo de la partícula.

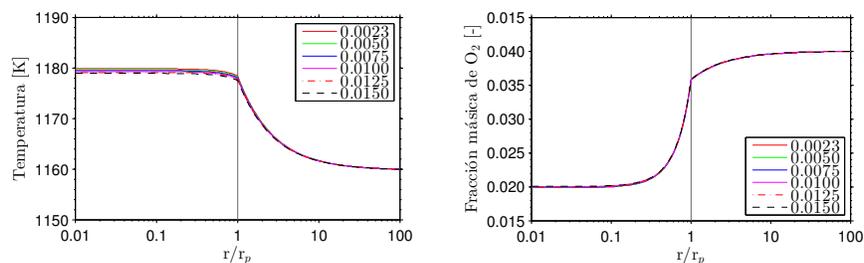


Figura 4.7. Perfiles de temperatura y fracción másica de oxígeno para una partícula de $95 \mu\text{m}$, modificando la fracción másica de metano en la capa límite.

También, en la Figura 4.8 se muestra el efecto de variar la temperatura de la capa límite manteniendo

todas las demás condiciones de frontera iguales. En este caso no se presentan los perfiles de temperatura, sino que se presentan unos perfiles de temperatura normalizados por la temperatura de la capa límite (T_b), esto con el fin de facilitar la comparación de los resultados. La temperatura de la capa límite fue variada desde 1160 K (temperatura aproximada de los casos de combustión sin llama obtenidos en Fluent) hasta una temperatura de 1550 K. Se observa que la temperatura de la capa límite si tiene un efecto significativo sobre la temperatura de la partícula, la cual tiende a aumentar de forma significativa con respecto a la temperatura de la capa límite. Adicionalmente, se observa que para el caso de 1550 K hay incluso un cambio en el comportamiento del perfil de temperatura, que sufre un aumento rápidamente en la capa límite, lo cual se debe a la reacción del oxígeno con el metano, que al parecer a este nivel de temperatura dicha mezcla, con baja concentración de estos reactivos, aumenta su reactividad de forma significativa.

Por otro lado, en la misma Figura 4.8, también se muestran los perfiles de oxígeno para las diferentes temperaturas de la capa límite, observándose que a medida que la temperatura de la capa límite aumenta, la fracción másica de oxígeno al interior de la partícula tiende a cero, lo cual correspondería al régimen 3 de quemado del carbonizado (ver Figura 2.11). Adicionalmente, se observa que para la condición con temperatura de combustión sin llama (1160 K), el régimen de quemado del carbonizado si corresponde al régimen 2 como se presumió en la Sección 2.3.1.3. También, debe notarse que para la temperatura de 1550 K, de forma similar, hay un cambio en el comportamiento del perfil de fracción másica de oxígeno, ya que justo en el borde de la capa límite hay una reducción rápida del oxígeno, lo cual se debe a la reacción con el metano.

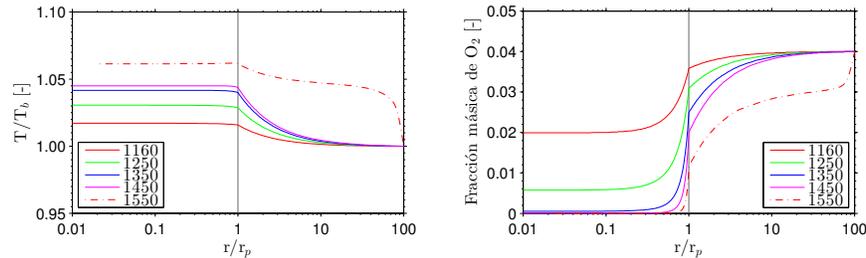


Figura 4.8. Perfiles de temperatura normalizada y fracción másica de oxígeno para una partícula de $95 \mu\text{m}$, modificando la temperatura de la capa límite.

4.4. Conclusiones de las simulaciones numéricas en skippy

De las simulaciones numéricas en SKIPPY se concluye que para las partículas pequeñas ($15.2 \mu\text{m}$) el quemado del carbonizado tiende a disminuir a medida que aumenta el porcentaje de carbón, lo cual indicaría un efecto positivo del metano para ayudar a quemar el carbón, pero para las partículas más grandes (95 y $243.2 \mu\text{m}$) este comportamiento se conserva solo hasta 75 % carbón, ya que para 100 % carbón el quemado del carbonizado es significativamente más rápido en comparación a los otros porcentajes de carbón y esto se debe a que en dicha condición el porcentaje de oxígeno medio a lo largo la trayectoria de las partículas se mantiene en un valor algo mayor en comparación a los otros porcentajes de carbón.

También es notable que en SKIPPY, para las partículas pequeñas, el tiempo que éstas tardan en consumirse es bastante mayor que el resultado obtenido en Fluent, aunque cuando se observa el comportamiento con las partículas medianas el tiempo final obtenido no difiere mucho del de Fluent, pero en las primeras etapas del quemado del carbonizado el consumo de la partícula es más rápido para las simulaciones de SKIPPY.

Finalmente, se observó que en base al modelo de SKIPPY, el aumento de la concentración de metano en la condición de frontera de la capa límite no tiene un efecto muy significativo ni sobre los perfiles de temperatura ni sobre la fracción másica de oxígeno, pero al aumentar la temperatura de la capa límite si se notó un efecto importante, lo cual cambió el régimen de quemado del carbonizado de un régimen 2 (mixto) a un régimen 3, el cual es controlado por la tasa de difusión del oxígeno en la capa límite.

Debe tenerse en cuenta, que a pesar de que el modelo de SKIPPY hace uso de mecanismos detallados tanto para la fase homogénea como para la fase heterogénea, en realidad no hay una interacción directa de la cinética del CH_4 con la del carbonizado, y esto se debe al hecho de que el mecanismo de fase heterogénea empleado solo tiene en cuenta las reacciones de oxidación y de gasificación.

Capítulo 5

Investigación experimental

En este capítulo se hace una descripción de la metodología experimental y las técnicas usadas para realizar las mediciones, así como un análisis de los resultados obtenidos. En primer lugar, se hace una descripción de la cámara de combustión y del quemador que han sido usados en este trabajo para evaluar las diferentes mezclas.

En cuanto a las técnicas experimentales usadas, se hicieron mediciones de temperatura y concentración de especies (CO , CO_2 , CH_4 , O_2 , y NO) al interior de la cámara de combustión y en la chimenea, esto con el fin de caracterizar y comparar el régimen de combustión sin llama empleando diferentes proporciones de gas natural y carbón pulverizado. Adicionalmente, para las diferentes configuraciones medidas, se recolectó ceniza en la chimenea con el fin de analizar la cantidad de inquemados.

Por otro lado, también se hizo uso de la técnica de medición de quimioluminiscencia espontánea de radicales OH^* y CH^* . Esto, con el fin de profundizar en la comparación de la zona de reacción con las diferentes mezclas de carbón pulverizado y gas natural en los regímenes de combustión sin llama y combustión convencional.

Y por último, también se empleó la técnica de medición láser conocida como Mie *scattering*, la cual fue usada para ver de forma cualitativa la concentración de partículas de carbón pulverizado a lo largo de la cámara de combustión, y confrontar estos resultados con los obtenidos con quimioluminiscencia espontánea.

5.1. Instalación experimental

Como se explicó en las Sección 3.6, para realizar las mediciones experimentales se seleccionó una geometría de quemador para combustión sin llama correspondiente a una distancia entre boquillas de aire de combustión de 240 mm y un diámetro de dichas boquillas de 10.9 mm, con la cual se obtuvieron, vía simulación numérica, buenos resultados de uniformidad del campo de temperatura y el mayor factor de recirculación para las diferentes mezclas de gas natural y carbón pulverizado en combustión sin llama.

En la Figura 5.1 se muestra una foto del quemador usado para realizar las mediciones experimentales con las mezclas de gas natural y carbón pulverizado, tanto en combustión sin llama como en combustión convencional. En la Figura 5.1a se señalan las partes del quemador que corresponden a la operación para combustión sin llama, donde el gas natural se descarga de manera axial en el centro del quemador; el carbón pulverizado con el aire de arrastre ingresan también de forma axial por un ducto que se encuentra a 32 mm, encima del centro de la boquilla de gas natural. Adicionalmente, el aire de combustión ingresa por dos boquillas de 10.9 mm de diámetro, las cuales están ubicadas a una distancia diametral de 240 mm. Vale aclarar que el quemador también tiene 2 boquillas similares ubicadas de forma vertical (como se aprecia en dicha figura), pero éstas no son usadas para las pruebas experimentales realizadas en este trabajo. Cabe decir que la distribución de boquillas de aire y combustible, tienen un diseño bastante similar a los diseños tradicionales de quemadores de combustión sin llama como se presentó en la Figura 2.1.

También, en la 5.1b se detalla la zona central del quemador, la cual contiene los elementos que son usados para realizar la combustión en condiciones convencionales. Esta parte consta de la boquilla de gas natural, donde a diferencia de la operación del quemador en combustión sin llama, en este caso el gas natural es descargado de forma radial por 10 pequeños agujeros que están distribuidos en la circunferencia de la boquilla. Además, en este caso el aire de combustión es suministrado en su totalidad por el ducto que rodea la boquilla de gas natural a modo de co-flujo. Además, de forma similar al modo combustión sin llama,

también se puede suministrar carbón pulverizado más aire de arrastre por el ducto ubicado encima de la boquilla de gas natural.

Hay que tener en cuenta que el quemador no está descubierto como se muestra en las imágenes, sino que está correctamente protegido por una capa de aislamiento térmico, tipo manta cerámica.

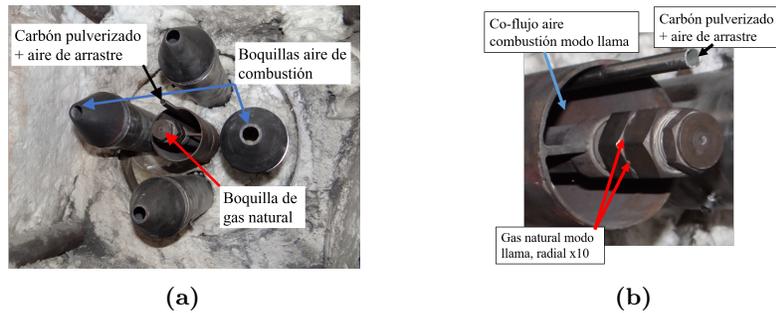


Figura 5.1. Quemador del horno de combustión sin llama del laboratorio de combustión - GASURE. (a) Configuración del quemador para operar en combustión sin llama, (b) Configuración del quemador para operar en combustión convencional.

Es importante mencionar que la cámara de combustión fue originalmente diseñada para quemar gas natural, pero fue adaptada en este trabajo para permitir adicionar carbón pulverizado. La cámara de combustión es horizontal, con una longitud interna de 1350 mm desde la descarga del quemador, tiene sección transversal cuadrada de 600 mm de lado, y en las esquinas están ubicados 4 ductos de acero inoxidable por los cuales fluye aire que es usado para emular condiciones de carga dentro del horno. En la chimenea se puso un ciclón con el fin de capturar la mayor parte de la ceniza que escapa de la cámara de combustión. Adicionalmente, cada cierta cantidad de mediciones la cámara de combustión debe limpiarse de la ceniza, esto debido a que ésta tiende a acumularse en la cámara por su diseño horizontal.

Como se aprecia en la Figura 5.2, la cámara de combustión tiene 3 accesos ópticos laterales, con ventanas de cuarzo, que son usadas para tomar las imágenes, por medio de una cámara ICCD, para las mediciones de quimioluminiscencia espontánea y de Mie scattering. También, en la parte superior de la cámara de combustión se encuentran 2 accesos ópticos de vidrio de cuarzo, por los cuales ingresa el plano láser al interior del horno en las mediciones de Mie scattering.

En dicha figura también se aprecia que alrededor de la cámara de combustión se encuentra una estructura móvil, en la cual están ubicados los elementos necesarios para generar el plano láser, que es usado para realizar las mediciones de Mie scattering. En las próximas secciones se explica con más detalle en que consiste este montaje.

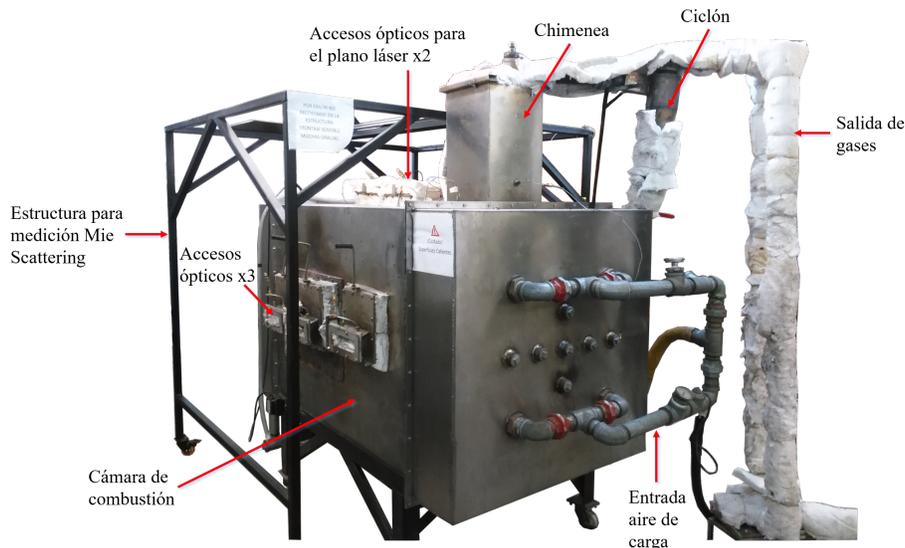


Figura 5.2. Horno de combustión sin llama del grupo GASURE

En la Figura 5.3 se presenta un diagrama del suministro de los diferentes flujos a la cámara de combustión tanto para modo llama como para modo combustión sin llama. El sistema de suministro consta de un ventilador principal, el cual aporta el aire de combustión para ambos modos de operación (modo llama y modo sin llama) y dicho flujo es medido por medio de una placa orificio. Adicionalmente, hay otro ventilador, el cual tiene un variador de velocidad, cuyo aire es usado para arrastrar el carbón pulverizado, donde el flujo de aire es medido por medio de un medidor de hilo caliente. El carbón pulverizado es alimentado por un dosificador tipo tornillo, también con un motor de velocidad variable, el cual fue calibrado previo a las mediciones. También, hay otro ventilador adicional, el cual se encarga de suministrar el aire de carga, que sirve para emular condiciones de remoción de calor al interior de la cámara de combustión, el flujo de este aire es medido por medio de un medidor tipo hilo caliente.

Por otro lado, el gas natural se encuentra comprimido en pipetas y es suministrado a partir de éstas a la cámara de combustión, donde el flujo es medido por dos medidores: un rotámetro y un medidor tipo coriolis, principalmente para efectos de tener más certeza en la medida de dicho flujo.

En la pared superior de la cámara de combustión se encuentra un set de termopares los cuales ingresan a la cámara de combustión y se encuentran a tope con el lado interno de dicha pared. Estos termopares son usados para monitorear el régimen de combustión, ya que es sabido que la estabilidad del régimen de combustión sin llama depende en gran parte de que las paredes se encuentren a una temperatura lo suficientemente alta como para hacer que el combustible se autoencienda.

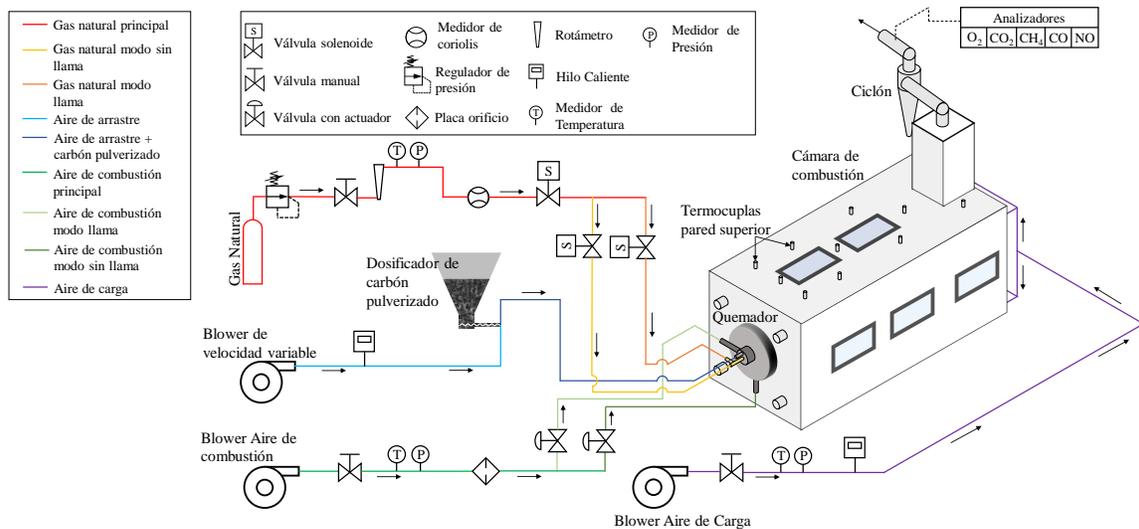


Figura 5.3. Diagrama del suministro de flujos e instrumentación de la cámara de combustión del laboratorio de combustión del grupo GASURE.

5.2. Condiciones de operación

Experimentalmente se evaluaron diferentes condiciones de operación, tanto en combustión sin llama como en combustión convencional. Para el caso de combustión sin llama se probaron condiciones tanto con los combustibles individuales (gas natural y carbón pulverizado) como con las mezclas de los mismos.

Las condiciones evaluadas para combustión sin llama corresponden a las simulaciones numéricas de la número 26 a la 30 (ver Tabla 3.1), las cuales tienen una distancia entre boquillas de aire de 240 mm y un diámetro de dichas boquillas de 10.9 mm, con mezclas de gas natural-carbón pulverizado que van desde 100 % gas natural hasta 100 % carbón.

En la Tabla 5.1 se muestra que para los experimentos se seleccionó como factor independiente la composición de la mezcla, la cual para los casos de combustión sin llama se evaluaron en 5 niveles, que van desde 100 % gas natural (o 0 % carbón), hasta 100 % carbón pulverizado con aumentos de porcentaje en la mezcla de 25 %, donde dichos porcentajes corresponden a la potencia aportada por cada uno de los combustibles en base al poder calorífico inferior de los mismos; Mientras que para los casos de combustión en modo llama se seleccionaron 2 niveles, los cuales son: 100 % gas natural (o 0 % carbón) y 100 % carbón pulverizado. Por otro lado, en la Tabla 5.2 se muestran los factores que se considera permanecen constantes

y son comunes a todas las mediciones experimentales, donde la potencia térmica es de 28 kW y la tasa de aireación para todos los casos es 1.2, además la configuración geométrica tanto del quemador, como de la cámara de combustión permanecen sin modificaciones para todas las mediciones.

Tabla 5.1. Niveles a usar para los factores independientes.

Factores independientes	Niveles
Composición de la mezcla en combustión sin llama	5 (0 %, 25 %, 50 %, 75 % y 100 %)
Composición de la mezcla en modo llama	2 (0 % y 100 %)

Tabla 5.2. Factores constantes.

Factor	Valor
Potencia térmica en base al PCI	28 kW
Tasa de aireación	1.2
Tipo de carbón	Sub-bituminoso
Temperatura aire de combustión	92°C
Distribución diámetro de partículas	-
Configuración geométrica	-

Adicionalmente, en la Tabla 5.3 se muestran los factores que se consideran de ruido, los cuales se dividen en factores de ruido medibles y factores de ruido no controlables, donde destaca como principal factor de ruido no controlable, la composición del gas natural, la cual está sujeta a la composición del gas natural que llega a Medellín.

Tabla 5.3. Factores de ruido.

Factores de ruido medibles
Humedad ambiente
Temperatura ambiente
Presión ambiente
Factores de ruido no controlables
Composición del gas natural

En la Tabla 5.4 se muestran los flujos máxicos y las temperaturas de los diferentes flujos que ingresan a la cámara de combustión para los cinco diferentes porcentajes de carbón evaluados, debe observarse que de forma similar a los casos de simulación numérica, tanto el flujo de aire de arrastre, como el flujo de aire de carga son iguales para todos los porcentajes de carbón evaluados. Adicionalmente, para las mediciones de especies y temperatura al interior de la cámara de combustión se realizaron solo 2 réplicas de las mediciones para cada condición de mezcla considerada, esto debido a que la medición de ambas variables para una sola condición tardaba alrededor de 6 horas.

5.3. Técnicas de medición

A continuación se hace una descripción de las técnicas de medición usadas en este trabajo, las cuales están enfocadas a caracterizar principalmente el régimen de combustión sin llama de las mezclas carbón pulverizado-gas natural, y compararlos con el régimen de combustión convencional con 100 % gas natural y 100 % carbón pulverizado.

Tabla 5.4. Flujos y temperaturas experimentales.

% Carbón	Flujo de gas natural (kg/h)	Flujo de carbón (kg/h)	Flujo aire secundario (kg/h)
0	2.14±0.04	0.00±0.00	38.63±0.77
25	1.61±0.04	1.19±0.02	39.07±0.78
50	1.07±0.03	2.39±0.04	39.50±0.79
75	0.54±0.04	3.58±0.06	39.94±0.80
100	0.00±0.00	4.78±0.08	40.37±0.81
Flujo aire de arrastre (kg/h)			2.56±0.21
Flujo aire de carga (kg/h)			158.8±3.1
Temperatura del gas natural (K)			304.2±2.1
Temperatura del aire de combustión (K)			365.5±1.8
Temperatura del aire de arrastre (K)			305.7±3.1
Temperatura del aire de carga (K)			314.9±3.4
Factor de aireación			1.2
Temperatura ambiente (K)			303.7±3.8
Presión atmosférica (mbar)			849

Las mediciones realizadas consisten en mediciones de especies químicas al interior de la cámara de combustión, temperatura al interior de la cámara de combustión, quimioluminiscencia espontánea a lo largo del horno y Mie scattering también a lo largo del horno. Adicionalmente, en la chimenea de la cámara de combustión se realizan mediciones de especies químicas y temperatura, y por otro lado se recolectan las cenizas por medio del ciclón, las cuales son analizadas posteriormente para verificar la cantidad de inquemados.

5.3.1. Medición de gases

La medición de especies químicas al interior del horno se llevaron a cabo por medio de una sonda refrigerada (mostrada en la Sección 2.2.2, Figura 2.5), la cual fue introducida en diferentes posiciones a lo largo de la cámara de combustión. A través de la sonda son succionados gases al interior del horno y llevados a un acondicionador de gases para remover la humedad y de allí los gases se distribuyen a dos analizadores, donde uno de ellos mide las concentraciones en base seca de CO, CO₂, CH₄ y O₂ y el otro mide la concentración en base seca de NO. En la Tabla 5.5 se muestran las principales características de los equipos usados para medir estas especies. Es importante mencionar que los gases son transportados de la sonda al acondicionador a través de un ducto de teflón calentado eléctricamente a una temperatura de 150°C, esto con el fin de evitar la condensación de los gases antes del acondicionador.

Tabla 5.5. Equipos usados para la medición de especies.

Especie	Equipo	Técnica de medición	Resolución	Error
CO ₂	Maihak S710	NDIR	0.01 vol. %	1 % del valor medido
CO	Maihak S710	NDIR	1 ppm	1 % del valor medido
CH ₄	Maihak S710	NDIR	0.1 vol. %	1 % del valor medido
O ₂	Maihak S710	Paramagnético	0.1 vol. %	1 % del valor medido
NO	Thermo Scientific 42i	Quimioluminiscencia	1 ppm	1 % Escala completa, Escala de 0 a 1000 ppm.

En la Figura 5.4 se muestran los puntos hasta los cuales se introdujo la sonda para realizar las mediciones de especies. Estas mediciones se realizaron a lo largo de tres líneas a lo largo de la cámara de combustión, donde una está ubicada en el centro de la cámara y las otras dos líneas se encuentran alineadas con las boquillas de aire de combustión. En cada línea se realizó un total de 7 mediciones, con una distancia constante entre cada punto de medición, lo que da un total de 49 puntos medidos por condición evaluada.

Los analizadores de gases se encontraban conectados a un computador y las mediciones para cada punto se realizaron por un periodo de 1 minuto, cuyos datos para cada punto fueron almacenados en el computador, y los archivos obtenidos fueron tratados posteriormente para obtener los datos de concentración media y desviación estándar de cada especie medida.

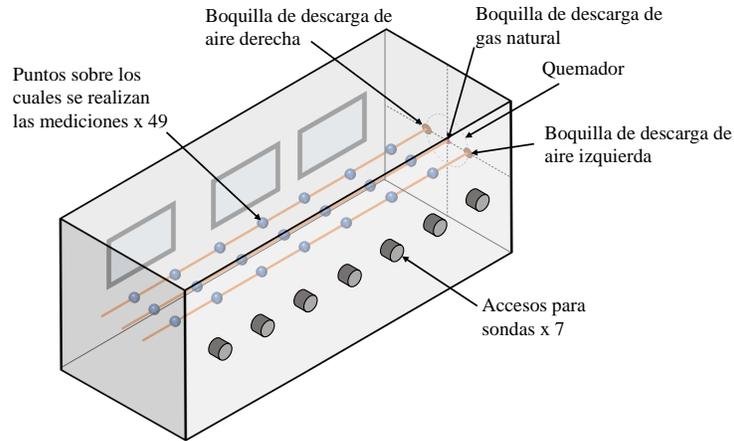


Figura 5.4. Esquema de las posiciones donde se realizaron las mediciones de especies y temperatura al interior de la cámara de combustión.

5.3.2. Medición de temperatura

De forma similar a la medición de especies, también se realizó la medición de temperatura al interior de la cámara de combustión y esto se hizo por medio de un pirómetro de succión refrigerado por agua y con un doble escudo protector en la punta del pirómetro (Sección 2.2.3, Figura 2.6), esto con el fin de disminuir los errores de medición debidos a la radiación, donde en dicha punta se usó un termopar tipo K con rango de medición de -200° a 1250°C y un error de 0.75 % del valor medido. Las mediciones de temperatura se realizaron en las mismas posiciones al interior de la cámara de combustión mostradas en la Figura 5.4.

Por otro lado, el termopar del pirómetro se conectó a un computador, esto con el fin de almacenar los datos medidos y para realizar la medición, en cada punto se esperó hasta que la temperatura oscilara alrededor de un mismo valor y a partir de ese momento se almacenaron entre 30 seg a 1 minuto de datos tomando 1 dato/sec.

5.3.3. Análisis de inquemados en las cenizas

Para los casos que incluyeron carbón pulverizado, se recolectaron las cenizas en la parte inferior del ciclón, las cuales fueron analizadas posteriormente por medio de la técnica TGA (*Thermo Gravimetric Analysis*) para determinar la cantidad inquemados y se usó el método de rastreo de ceniza (*ash tracer*) para calcular el *burnout* del carbón, donde se hizo uso de la Ecuación 5.1 para calcular este parámetro.

$$\text{Burnout} = \frac{1 - \frac{X_a^0}{X_a}}{1 - X_a^0} \quad (5.1)$$

Donde X_a^0 es la fracción másica de ceniza en el carbón fresco, y X_a es la fracción másica de ceniza en la muestra recolectada después de ser quemada.

Debe tenerse en cuenta que al usar este método se hace el supuesto de que durante la combustión la ceniza no sufre evaporación, sino que la masa de ceniza en las partículas de carbón permanece constante. Esta suposición es aceptable debido a que las temperaturas a las que se encuentra la cámara de combustión son relativamente bajas (del orden de 1200 K).

5.3.4. Quimioluminiscencia espontánea

Para caracterizar la zona de reacción se realizaron mediciones de quimioluminiscencia espontánea tanto en combustión sin llama como en modo de combustión convencional. En la Figura 5.5a, se muestra de forma esquemática en que consiste el montaje para realizar estas mediciones, el cual consta principalmente de una cámara ICCD PI-max de segunda generación con una resolución de 1024×1024 pixeles, la cual está conectada a un computador para registrar los datos. Esta cámara es refrigerada con agua, y para protegerla de la radiación proveniente del interior del horno se puso un escudo con material reflectivo en frente de la cámara ICCD (Figura 5.5b).

También, en las ventanas se suministró una pequeña cantidad de aire, con el fin de ayudar a que los vidrios de cuarzo no se ensuciaran demasiado rápido con las partículas de carbón pulverizado y ceniza. A pesar de esto, antes de la medición en cada una de las 3 ventanas se removían los vidrios y se limpiaban manualmente.

Al frente de la cámara ICCD se ubicaron filtros ópticos, donde para estas mediciones se usaron 2 filtros diferentes: Un filtro de interferencia centrado en una longitud de onda de 308 nm, con un ancho de banda de 10 nm, el cual es usado para captar la radiación proveniente de los radicales OH*; y el segundo filtro, es un filtro centrado en una longitud de onda de 430 nm, y también con un ancho de banda de 10 nm, el cual se usó con el fin de captar la radiación proveniente de los radicales CH*. En la Figura 2.7 se presentaron las transmisividades de ambos filtros, y además se mostró que con el filtro de CH* podría tenerse el inconveniente de no captar solo la señal proveniente de los radicales CH*, sino que podía también captar parte de la señal de cuerpo negro proveniente de las paredes de la cámara de combustión y de las propias partículas de carbón pulverizado. A pesar de esto son usados estos filtros con el fin de hacer un análisis de la zona de reacción con las diferentes configuraciones de mezclas de carbón pulverizado-gas natural en combustión sin llama y en modo llama.

Las mediciones con el filtro de OH* se realizaron con un tiempo de exposición de 80 ms, y una ganancia igual a 10, mientras que con el filtro de CH*, el cual tiene una transmisividad mayor que el de OH*, se usó un tiempo de exposición de 20 ms, e igualmente una ganancia de 10.

Las mediciones se realizaron enfocando el centro de la cámara de combustión, donde las imágenes corresponden a un tamaño de 89 mm \times 89 mm, de tal forma que cada pixel tiene un tamaño aproximado de 87 μ m. Cabe aclarar que aunque la cámara ICCD se enfoca al centro del horno, la luz que capta la cámara no proviene solamente del plano central vertical del horno, sino que la luz proviene del volumen que está en frente de la cámara, ya que el espesor de la zona del foco de la cámara, es de aproximadamente 15 cm.

Para cada ventana se realizaron 2 mediciones, donde se garantizó que las zonas de medición en el centro de la cámara de combustión fueran adyacentes. Además, con el fin de obtener imágenes promediadas, se tomó en cada posición un total de 300 imágenes, lo cual corresponde a un tiempo de medición de más de 5 minutos por punto, ya que el tiempo que tarda la cámara en tomar cada imagen es de aproximadamente 1 segundo.

Adicionalmente, para cada posición y cada filtro se tomaron 10 imágenes del background, lo cual se hace justo después de apagar la cámara de combustión, de tal forma que la imagen promedio del *background* es restada de la imagen promedio con combustión para una misma posición de la cámara.

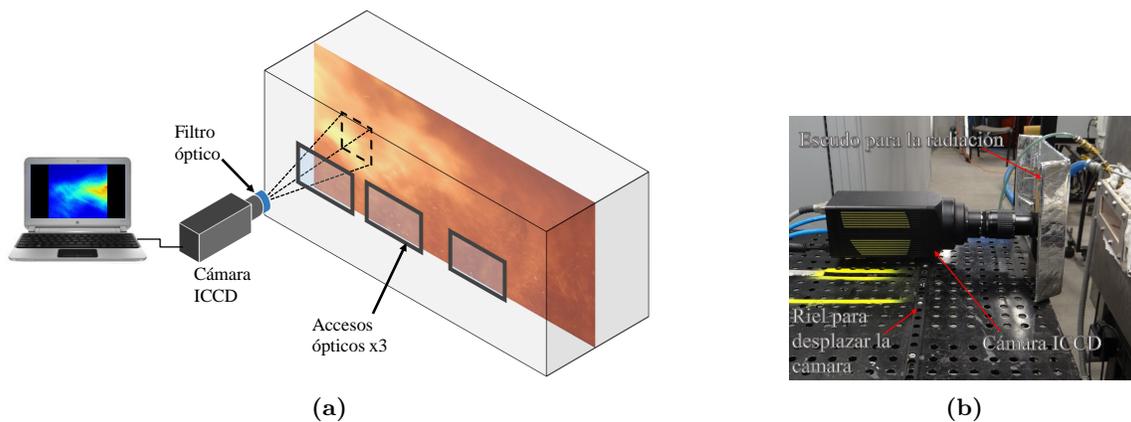


Figura 5.5. (a) Esquema del montaje usado para las mediciones de quimioluminiscencia espontánea, (b) Foto del montaje real detallando la cámara ICCD.

5.3.5. Mie scattering

En la Figura 5.6a se muestra un esquema del montaje usado para realizar las mediciones con la técnica *Mie scattering* para ver de forma cualitativa la concentración de las partículas de carbón pulverizado a lo largo de la cámara de combustión. Para estas mediciones se hizo uso de un láser Nd-YAG, marca Quantel, referencia brilliant B, el cual tiene un generador de armónicos que permite obtener una longitud de onda de 532 nm y una energía de aproximadamente 400 mJ. Esta energía fue reducida a tan solo 16 mJ por medio de un vidrio, donde la mayoría de la luz atraviesa dicho vidrio y la parte reflejada es la que se ha usado para la medición

de Mie Scattering.

El láser ha sido direccionado por medio de un juego de espejos hasta la parte superior de la cámara de combustión, donde se encuentra un sistema de lentes montados en un sistema móvil, los cuales generan el plano láser y permiten que el plano láser sea desplazado a diferentes posiciones a lo largo de la cámara de combustión.

El ancho del plano láser es de 50 mm y el espesor del mismo en la zona de medición es de aproximadamente 1 mm. Adicionalmente, el láser se encuentra sincronizado con la cámara ICCD, donde se usó un tiempo de retraso de 214000 ns en la cámara, de tal forma que esta última pudiera captar la señal en el momento donde el pulso del láser llega a la zona de medición. También, se puso un tiempo de apertura en la cámara de 10 ns, de tal forma que abarcara el pulso completo del láser que es de aproximadamente 4 ns y pudiera captar la señal de forma correcta.

Al frente de la cámara ICCD, se puso un filtro óptico el cual solo permite pasar la longitud de onda del láser (532 nm).

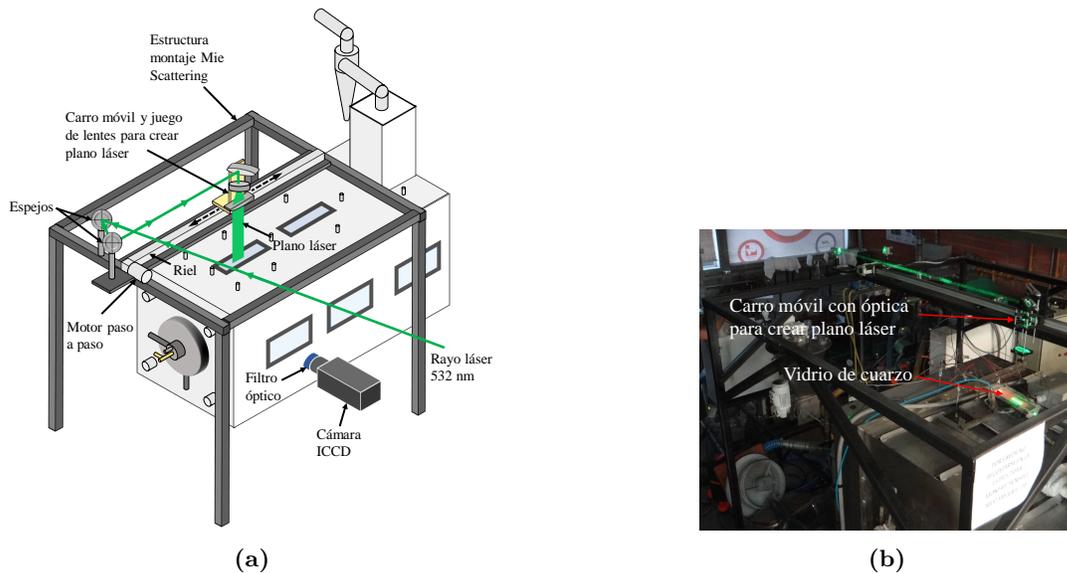


Figura 5.6. (a) Esquema del montaje para la mediciones de Mie Scattering, (b) Foto del montaje donde se puede apreciar parte del rayo láser antes de formar el plano.

Para estas mediciones solo se usaron las 2 primeras ventanas de la pared lateral del horno, esto debido a que por limitaciones constructivas en la parte superior del mismo solo se disponía de 2 accesos ópticos para el láser. Adicionalmente, en cada ventana se realizaron mediciones en 3 posiciones adyacentes, lo cual implica que se midieron 6 posiciones por condición evaluada, las cuales para estas mediciones solamente fueron 50 % carbón y 100 % carbón en combustión sin llama y también 100 % carbón en combustión convencional.

Adicionalmente, Se tomaron en total 500 imágenes por cada posición, esto con el fin de obtener de forma adecuada las imágenes promedio. Por otro lado, las imágenes fueron corregidas en base a la distribución de la energía del plano láser, cuyo perfil fue medido con un medidor de energía, para lo cual se obstruyó parte del plano láser y después se hizo un barrido de dicho plano, con lo cual se obtuvo el perfil de la curva de energía del plano láser, el cual se muestra en la Figura 5.7, y es usado para corregir las imágenes obtenidas.

También en la Figura 5.6b se muestra una imagen donde se puede apreciar parte del montaje, con el plano láser incidiendo sobre el vidrio de cuarzo en la parte superior de la cámara de combustión.

5.4. Resultados Experimentales

En las siguientes secciones se presentan los resultados y el análisis de los mismos, para las diferentes mediciones realizadas. Se empezará por mostrar los resultados de temperatura y especies, obtenidos al interior de la cámara de combustión. Después se hace el análisis de los resultados medidos en la chimenea, incluyendo los inquemados en la ceniza y, en base a estos, se hacen los cálculos de eficiencia. Adicionalmente, se hace la comparación de los datos medidos experimentalmente con los resultados obtenidos por medio de las

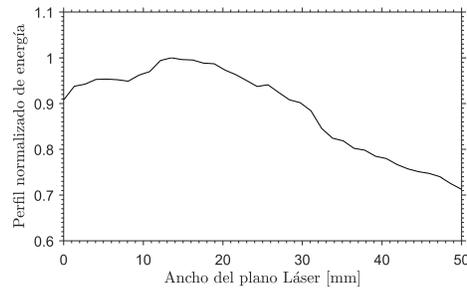


Figura 5.7. Perfil de energía normalizado del plano láser

simulaciones numéricas de Fluent, esto con el fin de validar la capacidad de predicción del modelo empleado.

Por otro lado también se muestran y se analizan los resultados de quimioluminiscencia espontánea y Mie *scattering*.

5.4.1. Temperatura al interior de la cámara de combustión

En la Figura 5.8 se presentan los resultados de temperatura a lo largo de la cámara de combustión para las tres líneas evaluadas (boquilla de aire izquierda, línea central, y boquilla de aire derecha), donde para cada línea se muestran los resultados para las diferentes condiciones evaluadas, tanto en modo llama como en modo sin llama. Además se presentan las barras de error con un nivel de confianza del 95 %. Con el fin de facilitar la visualización de los resultados, estos han sido agrupados en diferentes sub-figuras, de tal forma que las condiciones de modo llama se presentan juntas. Similarmente, las condiciones con un porcentaje de carbón de 0 % a 50 % se muestran en una misma figura y lo mismo se hace con los porcentajes de 75 % y 100 % carbón.

Debe notarse que para los casos de 100 % gas natural tanto en modo llama como en modo sin llama, no se realizaron réplicas de las mediciones y es por esta razón que las barras de error en estos casos son casi imperceptibles, debido a que el mayor aporte a la incertidumbre de las mediciones viene dado por la propia variabilidad de los experimentos.

En primer lugar, se observa que por lo general, para modo llama (Figuras 5.8a, b y c) las temperaturas no son notablemente superiores a las temperaturas obtenidas en combustión sin llama, aunque para el caso de modo llama con gas natural (círculos rojos, línea roja punteada), las temperaturas en las tres líneas tienen un comportamiento en el que la temperatura es mayor cerca al quemador y disminuye al final de la cámara de combustión, lo cual era esperado dado que en este caso la zona de reacción permanece anclada al quemador, aunque se esperaba que el gradiente de temperaturas para este caso fuera mayor.

Con respecto al caso de 100 % carbón en modo llama (rombos rojos, línea verde punteada) se observa que para las tres líneas la temperatura es especialmente baja cerca a la zona del quemador, lo cual parece indicar que para este caso el carbón tiende a quemarse a partir de la mitad de la cámara de combustión y esto tal vez se debe al hecho de que el quemador no tiene algún diseño especial que permita optimizar el quemado de carbón pulverizado en modo llama, como por ejemplo la inclusión de *swirl* en el flujo de aire de combustión. Adicionalmente, estas bajas temperaturas en la zona cercana al quemador para el caso de 100 % carbón modo llama, pueden deberse a que en este caso la recirculación de gases es mucho más débil en comparación con los casos de combustión sin llama. También se observa que para este caso, en la línea central, la temperatura tiene una fluctuación bastante alta, cercana a 250 K, y algo similar sucede en la zona central de la cámara de combustión para la línea derecha (Figura 5.8c), lo cual indica que la estabilidad de la combustión para este caso no es muy buena.

Cuando miramos los casos de combustión sin llama se observa que en los casos que tienen la mezcla carbón pulverizado-gas natural, la temperatura tiene una variabilidad importante en la zona cercana al quemador, lo cual se debe principalmente a que en dicha zona se encuentran los *jets* de aire, de gas natural y de carbón pulverizado, lo cual hace que haya altos gradientes y fluctuaciones debidas a la turbulencia.

También, se observa que para 100 % gas natural en modo sin llama (cuadros azules, línea azul continua, Figuras 5.8d, e y f), la temperatura media en el primer tercio de la cámara de combustión tiende a ser más baja en comparación a los demás casos de combustión sin llama, pero a pesar de eso, al final de la cámara de combustión la temperatura es similar a la de los otros casos de combustión sin llama. Esto se debe principalmente a que el gas natural se descarga a alta velocidad, de tal forma que la zona de reacción

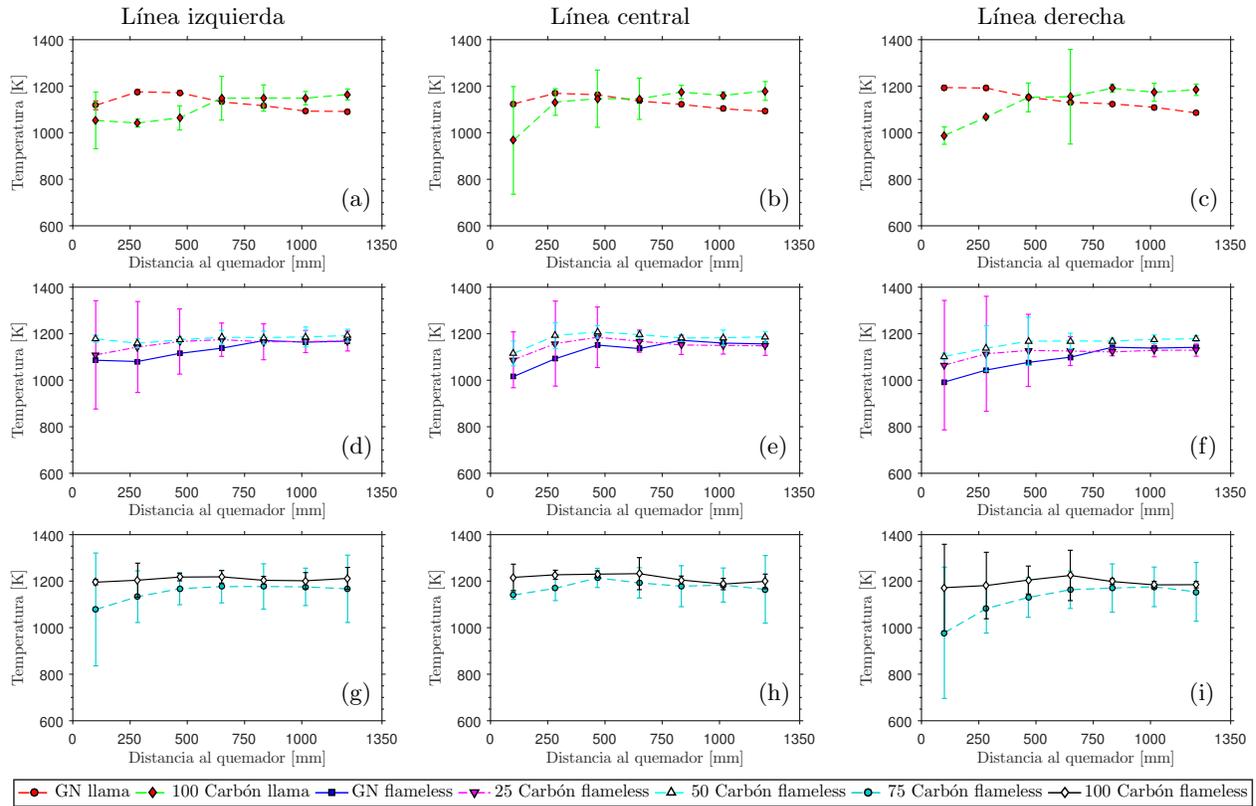


Figura 5.8. Temperatura al interior de la cámara de combustión para las diferentes condiciones evaluadas. Cada columna corresponde a una línea de medición diferente.

tiende a estar ubicada a partir de la mitad de la cámara de combustión para este caso, mientras que para los casos que incluyen carbón pulverizado, la temprana volatilización del mismo contribuye al aumento de la temperatura en las zonas cercanas al quemador.

Desde el punto de vista de la temperatura a interior de la cámara de combustión, en todos los casos de combustión sin llama ha sido bastante uniforme, lo que indica que el régimen de combustión sin llama es obtenido de forma satisfactoria para todas las mezclas, aunque dicho régimen es mucho más estable cuando opera solamente con gas natural.

5.4.2. Especies al interior de la cámara de combustión

Con respecto a las especies químicas al interior de la cámara de combustión, los resultados también han sido agrupados de la misma forma como se hizo para temperatura, esto con el fin de facilitar la visualización de los resultados, dado que de lo contrario muchas de las curvas serían difícilmente diferenciadas de otras.

En esta sección se presentan los resultados de las mediciones de CH_4 , O_2 , CO , CO_2 y NO al interior de la cámara de combustión.

5.4.2.1. Concentración de CH_4

En la Figura 5.9 se muestran los resultados de la concentración de metano al interior de la cámara de combustión para las tres líneas evaluadas. En primer lugar, debe notarse que el eje y , para los casos de combustión sin llama en la línea central (Figuras 5.9e y 5.9h), no es comparable con el eje y de las otras figuras, debido a que en los primeros casos el eje y es más amplio (hasta 21 % Vol. seco), lo cual se debe a que en el eje central para los casos de combustión sin llama, la concentración de CH_4 es mucho mayor que para las otras dos líneas o para los casos con combustión convencional en la zona cercana al quemador, y esto es causado por la descarga axial del gas natural en el centro del mismo.

Para el caso con 100 % gas natural en modo llama, donde el gas natural se descarga de forma radial en el quemador, se observa que la concentración de metano es prácticamente cero a lo largo de toda la cámara

de combustión, exceptuando en el primer punto de las líneas izquierda y derecha, donde se detecto una pequeña concentración de metano entre 0.1 y 0.2 %, lo cual significa que el gas natural se ha consumido casi completamente en una distancia menor a 250 mm del quemador, implicando una zona de reacción bastante intensa.

Por otro lado, con respecto al caso de 100 % carbón pulverizado en modo llama, se observa que la concentración de metano es próxima a cero a lo largo de toda la cámara de combustión para las tres líneas (Figuras 5.9a, 5.9b y 5.9c), lo cual significa que la cantidad de metano liberado en el proceso de volatilización es muy pequeño y está en límite de detección del analizador de gases usado en este trabajo.

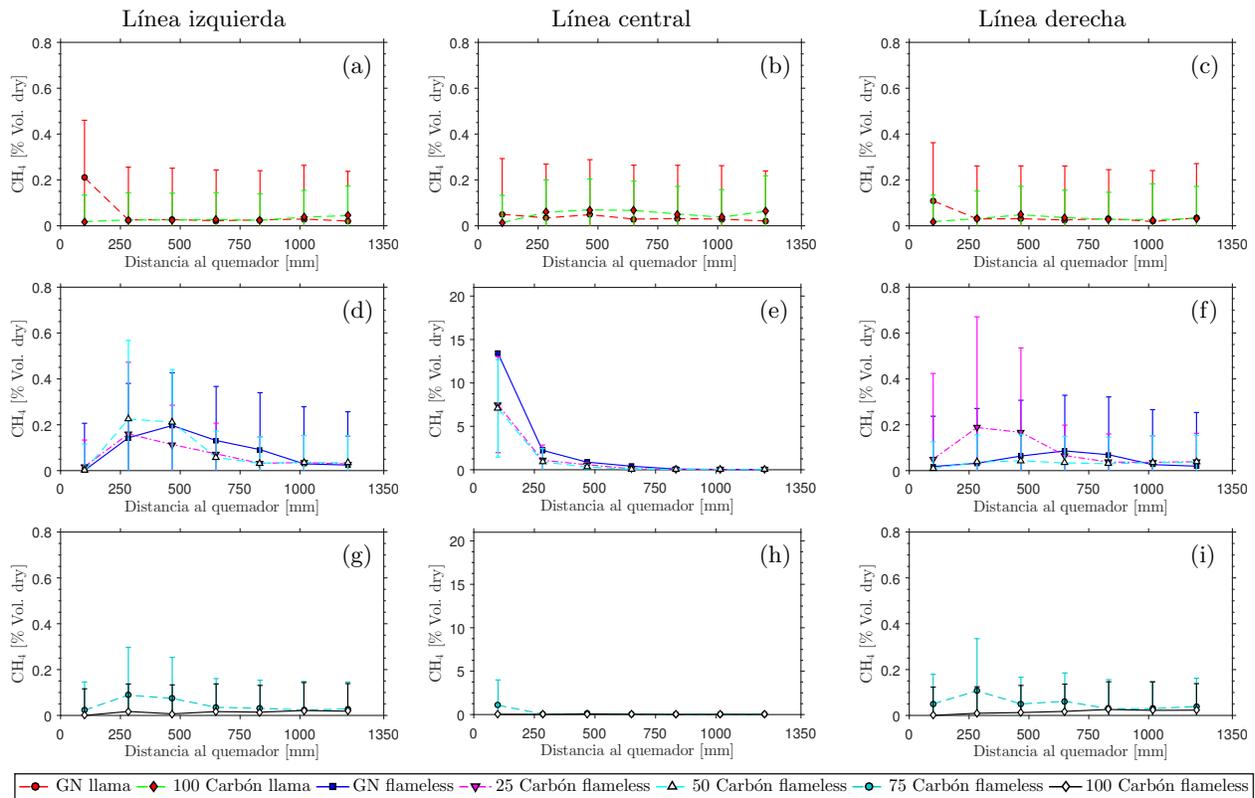


Figura 5.9. Porcentaje volumétrico de metano en base seca al interior de la cámara de combustión para las tres líneas medidas.

Al observar los casos de combustión sin llama, debe notarse que para la línea central y para los porcentajes de carbón de 0 %, 25 % y 50 % (Figura 5.9e), las concentraciones de metano son bastante altas en la zona cercana al quemador, donde incluso hasta distancia de 500 mm dicha concentración es cercana a 1 %, lo cual implica que al menos en esta zona hay un superposición de la combustión del gas natural y del carbón pulverizado, que puede favorecer el quemado de las partículas de carbón. También, debe notarse, en la misma figura, que en el primer punto de medición hay una variabilidad muy importante en la concentración de metano, lo cual es debido principalmente a la turbulencia generada por el *jet* de gas natural.

Adicionalmente, Para todos los casos de combustión sin llama en las líneas izquierda y derecha, los porcentajes de metano son bastante bajos (menores a 1 %), y para 100 % carbón en modo sin llama la concentración de metano es prácticamente cero, lo que implica que la volatilización del carbón en combustión sin llama también produce una cantidad de metano que está en límite de detección del analizador.

5.4.2.2. Concentración de O₂

En la Figura 5.10 se presentan los resultados de concentración de oxígeno a lo largo de la cámara de combustión para las diferentes condiciones evaluadas. Dichos resultados son presentados siguiendo el mismo formato que se usó para la temperatura y para el metano, razón por la cual esto no es explicado nuevamente. Dado que para la concentración de O₂ el orden de magnitud es similar en todos los casos entonces los ejes verticales tienen los mismos límites, razón por la cual todas las sub-figuras son comparables directamente entre sí.

Para el caso de modo llama con 100 % gas natural, donde el aire de combustión ingresa por un co-flujo rodeando el flujo de combustible en el centro del quemador, se observa que para la línea izquierda y línea derecha, el porcentaje de oxígeno es bastante uniforme a lo largo de toda la cámara de combustión, con un porcentaje de oxígeno que está entre 3 a 7 % volumétrico en base seca, Mientras que en la línea central, se alcanzan porcentajes de oxígeno cercanos a 15 %, en el punto de medición más cercano al quemador.

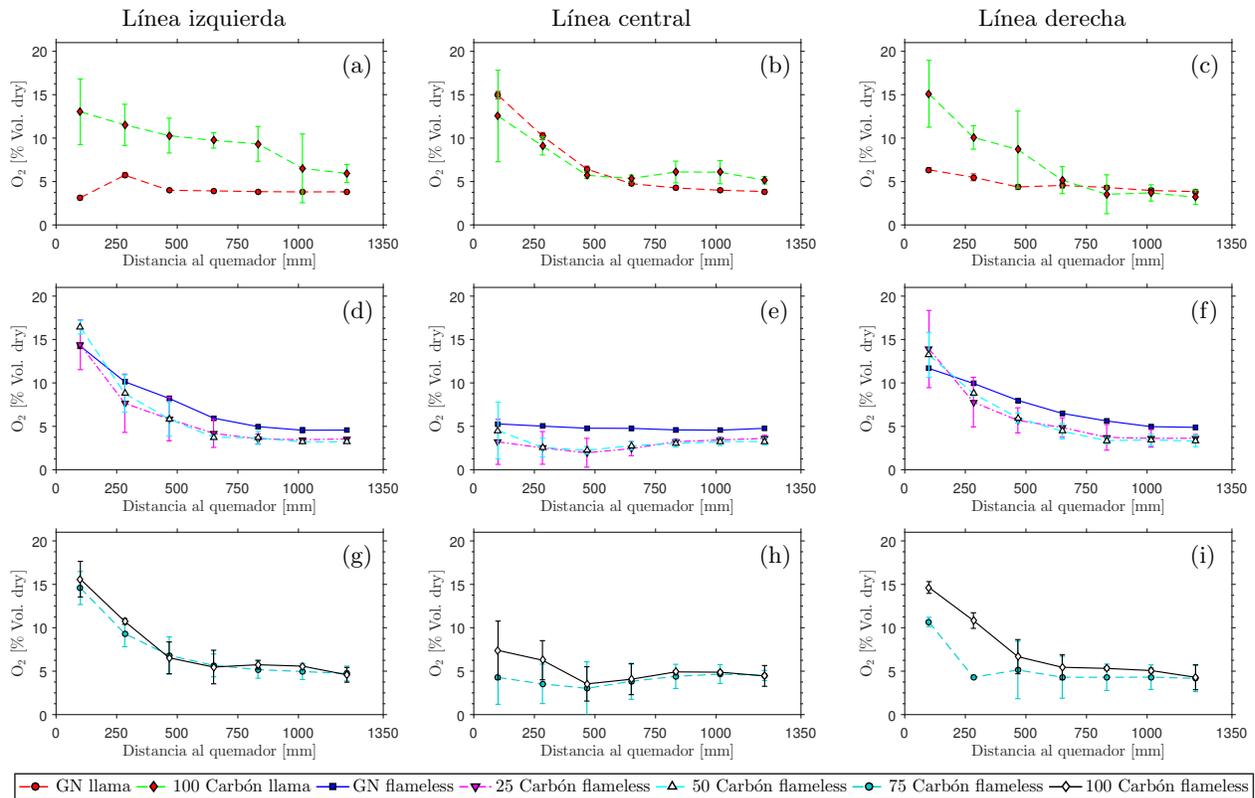


Figura 5.10. Porcentaje volumétrico de oxígeno al interior de la cámara de combustión (base seca).

Por otro lado, para el caso de 100 % carbón pulverizado en modo llama (Figuras 5.10a, b y c), se observa que en las líneas laterales el comportamiento es algo diferente al de 100 % gas natural, puesto que para la línea izquierda hay una concentración de oxígeno bastante alta a lo largo de casi toda la cámara de combustión, mientras que para la línea derecha hay una concentración alta de oxígeno hasta una distancia de aproximadamente 500 mm del quemador, lo cual significa que el carbón en este caso tiende a tener mayor actividad de reacción en la parte final de la cámara de combustión.

Con respecto a los casos de combustión sin llama, se observa que para las líneas laterales (línea izquierda y línea derecha, Figuras 5.10d, f, g y i) se tiene un comportamiento bastante similar para todos los casos, donde la concentración de oxígeno va disminuyendo desde un valor cercano a 15 %, en la zona cercana al quemador, hasta un porcentaje final de aproximadamente 5 % en base seca. Dicha disminución, al menos en la zona cercana al quemador se debe principalmente a la dilución de los *jets* de aire con los productos de combustión que rodean dicho *jets*.

De otro lado, para la línea central en los casos de combustión sin llama (Figuras 5.10e y h), se observa que la concentración de oxígeno tiende a ser muy uniforme, y de hecho se ve que para los casos que incluyen carbón pulverizado hay una disminución de la concentración de oxígeno en la zona cercana al quemador y un posterior aumento de dicha concentración al final de la cámara de combustión. Esta disminución de oxígeno es posiblemente debido a la reacción de los volátiles del carbón en dicha zona.

Es importante notar que para todos los casos de combustión sin llama la concentración de oxígeno a lo largo de toda la cámara de combustión ha sido muy similar y además no se observa una excesiva variabilidad en dicha concentración, lo cual es una muestra de que el régimen de combustión sin llama ha sido obtenido de una forma estable para todos los casos evaluados y además el régimen de combustión no ha sido modificado de forma significativo al realizar las mezclas de carbón pulverizado con gas natural.

5.4.2.3. Concentración de CO

Los resultados de concentración de CO a lo largo de la cámara de combustión para las diferentes condiciones evaluadas son presentados en la Figura 5.11 para las tres diferentes líneas donde se realizaron las mediciones. La forma en que los resultados son presentados conservan la misma estructura que se usó para las especies mostradas anteriormente.

Para el caso de modo llama con 100 % gas natural (círculos rojos, con línea roja discontinua, Figuras 5.10a, b y c) se observa que a partir de una distancia al quemador de aproximadamente 500 mm la concentración de CO es prácticamente igual a cero, mientras que en la zona cercana al quemador se midieron valores entre 400 a 1000 ppm de CO en base seca. Este resultado es completamente esperado dado que para modo llama con gas natural la zona de reacción se encuentra anclada al quemador, produciendo una llama convencional en dicha zona.

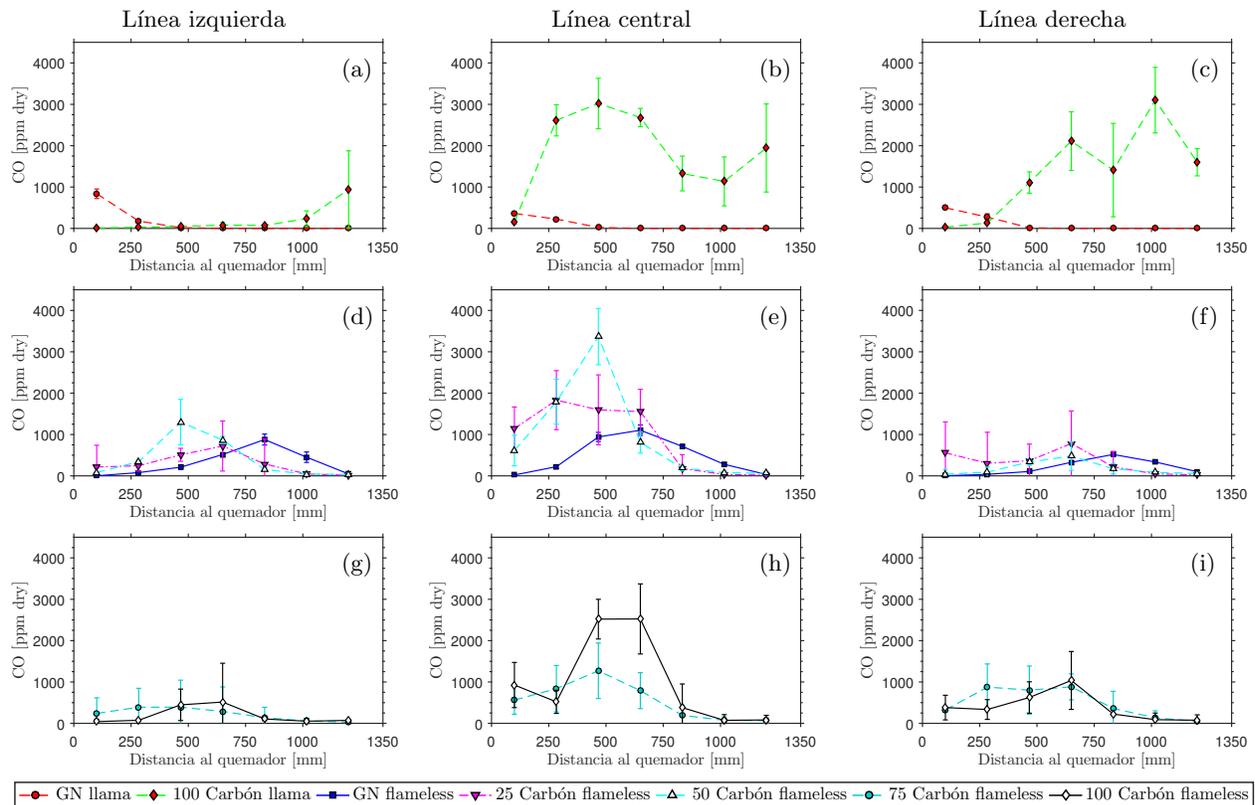


Figura 5.11. Concentración de CO al interior de la cámara de combustión (base seca).

Por otro lado, con respecto al caso de 100 % carbón pulverizado en modo llama (rombos rojos con línea verde discontinua) se observa un resultado muy diferente, donde para la línea izquierda hay una alta concentración de CO solamente hacia el final de la cámara de combustión con una variabilidad muy importante, lo cual es denotado por la amplia barra de error en el último punto. Adicionalmente, Para la línea central se observa que a partir de una distancia de aproximadamente 250 mm del quemador se produce una alta concentración de CO, la cual disminuye hacia el final de la cámara de combustión, pero en el último punto medido vuelve a aumentar y además se amplía también la barra de error en dicho punto. Finalmente, para la línea derecha se obtienen también altas concentraciones de CO, con concentraciones del mismo orden a las obtenidas en la línea central. Debe notarse, que para este caso, en el último punto medido la concentración de CO, permanece bastante alta para las tres líneas medidas lo cual significa que el carbón en esta zona está siendo quemado de forma importante y tal vez en este modo de operación, la longitud de la cámara de combustión no es suficiente, tendiendo el carbón a quemarse cerca a la pared final del horno. Además, se ve una gran asimetría en la forma como se produce el CO en este caso, puesto que teóricamente el resultado en la línea izquierda debe ser muy similar al resultado de la línea derecha, pero se observa que esto no ha sucedido y posiblemente el carbón en este caso se esté desviando más hacia la derecha.

Para los casos de combustión sin llama, tanto con gas natural como con las mezclas de gas natural con

carbón pulverizado y de igual forma para 100 % carbón pulverizado, se observa un comportamiento bastante similar entre sí, donde la simetría obtenida en estos casos es mucho mejor, lo cual se ve al comparar los resultados de la línea izquierda con los de la línea derecha, observándose que la similitud en los resultados en estos casos es mucho mejor, empezando con una concentración de CO bastante baja (cerca a 0), luego teniendo un incremento en la zona media de la cámara de combustión hasta una concentración en un rango entre 500 y 2000 ppm, y después con una disminución de la concentración hasta valores cercanos a 0 ppm.

De forma similar, para los casos de combustión sin llama en la línea central se obtiene un comportamiento similar al descrito anteriormente con la diferencia de que la concentración al inicio es bastante mayor, y la concentración en la mitad de la cámara de combustión es mucho más alta, con valores entre 1000 y 4000 ppm, pero al final de la cámara de combustión la concentración de CO disminuye hasta valores cercanos a cero, lo cual es muy importante porque significa que el carbón y el gas natural se están quemando completamente antes de llegar al final de la cámara de combustión.

5.4.2.4. Concentración de CO₂

Con respecto a la concentración de CO₂ al interior de la cámara de combustión, en la Figura 5.12 se muestran las diferentes curvas obtenidas para los diferentes casos evaluados en la línea central y en las líneas izquierda y derecha, donde al igual que para las otras especies ya mostradas, se ha seguido el mismo formato para la presentación de los resultados.

En primer lugar es importante recordar que para los casos que tienen 100 % gas natural tanto en modo llama como en modo sin llama no se realizó sino una réplica, razón por la cual las barras de error en estos casos es apenas perceptible, lo cual también ocurrió al analizar las demás especies e incluso la temperatura.

Empezando por los casos de modo llama (Figuras 5.12a, 5.12b y 5.12c), en el caso de 100 % gas natural se observa que para la línea izquierda la concentración de CO₂ permanece muy uniforme a lo largo de casi toda la cámara de combustión, pero para las otras dos líneas la concentración aumenta desde aproximadamente 5 % (volumen base seca) hasta aproximadamente 10 %, aunque para la línea derecha esto sucede de una forma mucho más abrupta. En cuanto al caso de modo llama con 100 % carbón pulverizado, se observa que para todas las tres líneas el porcentaje de CO₂ aumenta de forma progresiva a lo largo de la cámara de combustión, pero con una diferencia importante entre la línea izquierda y la línea derecha, en la cual la concentración medida ha sido mayor, y nuevamente se observa la asimetría de los resultados para el caso de modo llama con 100 % carbón.

Con respecto a los casos de combustión sin llama, al comparar los resultados en la línea izquierda con los resultados de la línea derecha, se observa que hay simetría mucho mejor en comparación a los casos en modo llama, lo cual es una muestra adicional de que la operación del quemador en combustión sin llama para las mezclas de gas natural y carbón pulverizado ocurre de una forma estable.

En cuanto al comportamiento de la curva de CO₂ para las diferentes condiciones de operación en combustión sin llama, se observa que hay una tendencia a que la concentración de CO₂ aumente a medida que aumenta el porcentaje de carbón, lo cual se ve más claro al comparar la parte final de la cámara de combustión. Además en las líneas laterales el comportamiento del CO₂ es que tiende a aumentar de forma progresiva a medida que aumenta la distancia al quemador, mientras que en la línea central la concentración de CO₂ es mucho más uniforme a lo largo de toda la cámara de combustión.

5.4.2.5. Concentración de NO

Uno de los resultados más importantes de este trabajo está relacionado con la medición de NO a lo largo de la cámara de combustión para las diferentes condiciones evaluadas. En la Figura 5.13 se muestran los resultados de las mediciones de NO al interior de la cámara de combustión, para las tres líneas medidas, donde en las Figuras 5.13a, 5.13b y 5.13c, se presentan los resultados para los casos en modo llama tanto con 100 % gas natural como con 100 % carbón pulverizado. De inmediato salta a la vista la gran diferencia en la cantidad de NO producido cuando se tiene carbón pulverizado, en comparación con el gas natural, donde para el gas natural el NO tiende a llegar a un valor cercano a 50 ppm y permanece estable a partir de una distancia de aproximadamente 600 mm del quemador. Por otro lado, para 100 % carbón pulverizado en modo llama, en todas las líneas se obtiene una alta concentración de NO, la cual en la zona cercana al quemador están entre 100 y 250 ppm, pero que aumenta hasta alcanzar valores cercanos a 500 ppm en la zona final de la cámara de combustión.

Al observar los resultados de NO en los casos de combustión sin llama, se observa en primer lugar que para 100 % gas natural (cuadros azules con línea azul continua), la concentración de NO es prácticamente 0 a lo largo de toda la cámara de combustión para las 3 líneas evaluadas. Por otro lado, en los casos

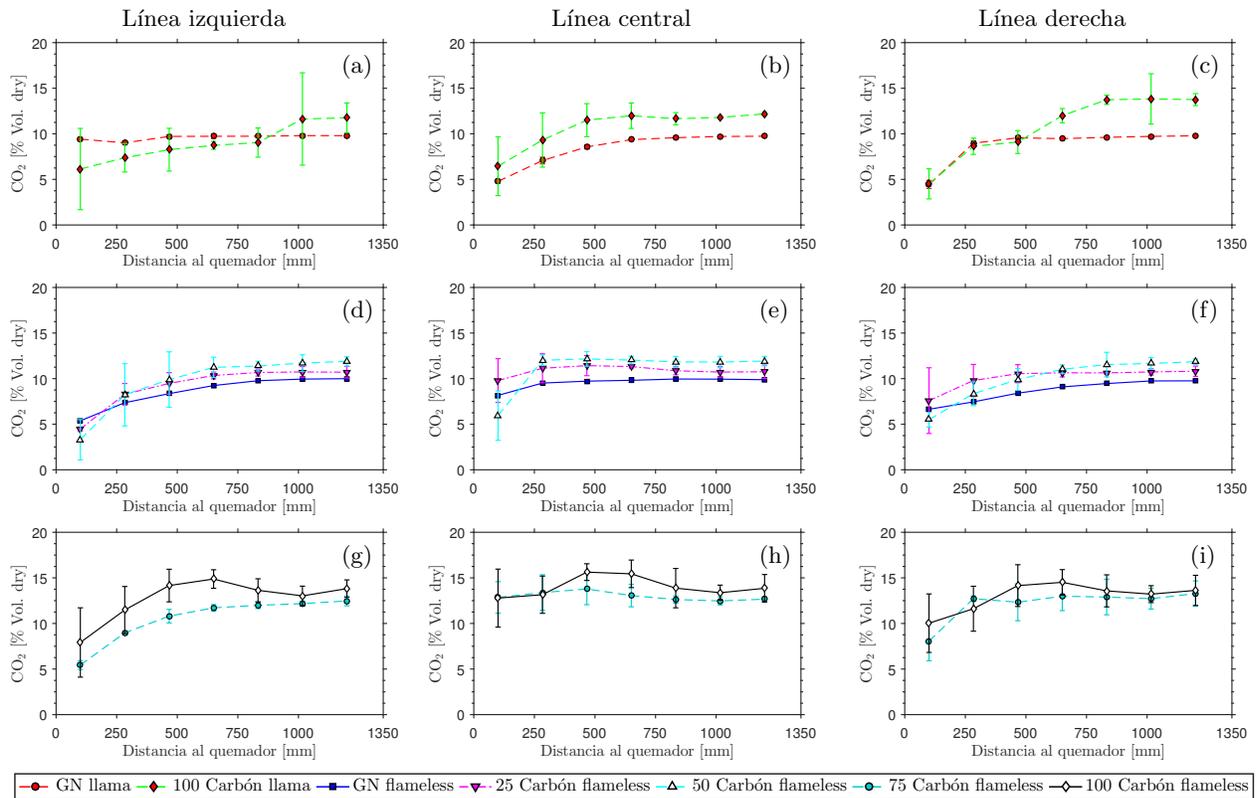


Figura 5.12. Concentración de CO_2 al interior de la cámara de combustión (base seca).

que incluyen carbón pulverizado en combustión sin llama, se observa que la producción de NO es bastante mayor en comparación con el caso de 100 % gas natural en modo sin llama, lo cual se debe básicamente al nitrógeno que está incluido en el carbón pulverizado, que es liberado durante la volatilización y el quemado del carbonizado. Adicionalmente, se observa que la concentración de NO , para los casos de combustión sin llama con carbón pulverizado es incluso menor a la mitad de la concentración de NO obtenida con 100 % carbón pulverizado en modo llama, lo cual es un resultado muy importante que apoya el hecho de que la combustión sin llama conduce a una reducción importante de las emisiones de NO incluso con combustibles como el carbón pulverizado.

También, se observa un comportamiento bastante particular para los casos de combustión sin llama que incluyen carbón pulverizado, donde las curvas de NO son bastante similares entre sí para una misma línea, a pesar de que la cantidad de carbón en cada caso es diferente. En este sentido, parece haber un mecanismo que está reduciendo el NO para los casos con mayor porcentaje de carbón (en los cuales domina el mecanismo de formación de NO_x del combustible (*fuel NO_x*)).

5.4.3. Temperatura y especies en la chimenea

Adicional a los resultados anteriores, los cuales fueron obtenidos al interior de la cámara de combustión, se realizaron mediciones de temperatura y especies en la chimenea para las diferentes condiciones evaluadas, donde los resultados de dichas mediciones son presentados en la Figura 5.14.

Para empezar, en la Figura 5.14a se muestran los resultados de temperatura para cada una de las condiciones evaluadas, con sus correspondientes barras de error. Se observa que para el caso de modo llama con 100 % gas natural, la temperatura obtenida es menor que la temperatura en la chimenea para los demás casos. Por otro lado, el caso de modo llama con 100 % carbón pulverizado tiene la temperatura más alta y además presenta mayor variabilidad en los resultados.

Con respecto a los casos de combustión sin llama se observa que a medida que aumenta el porcentaje de carbón la temperatura media en la chimenea tiene un aumento leve, aunque para 100 % en combustión sin llama la temperatura media ha disminuido. A pesar de esto, es difícil decir de manera contundente que la temperatura aumenta con el porcentaje de carbón, ya que como se puede apreciar, las barras de error

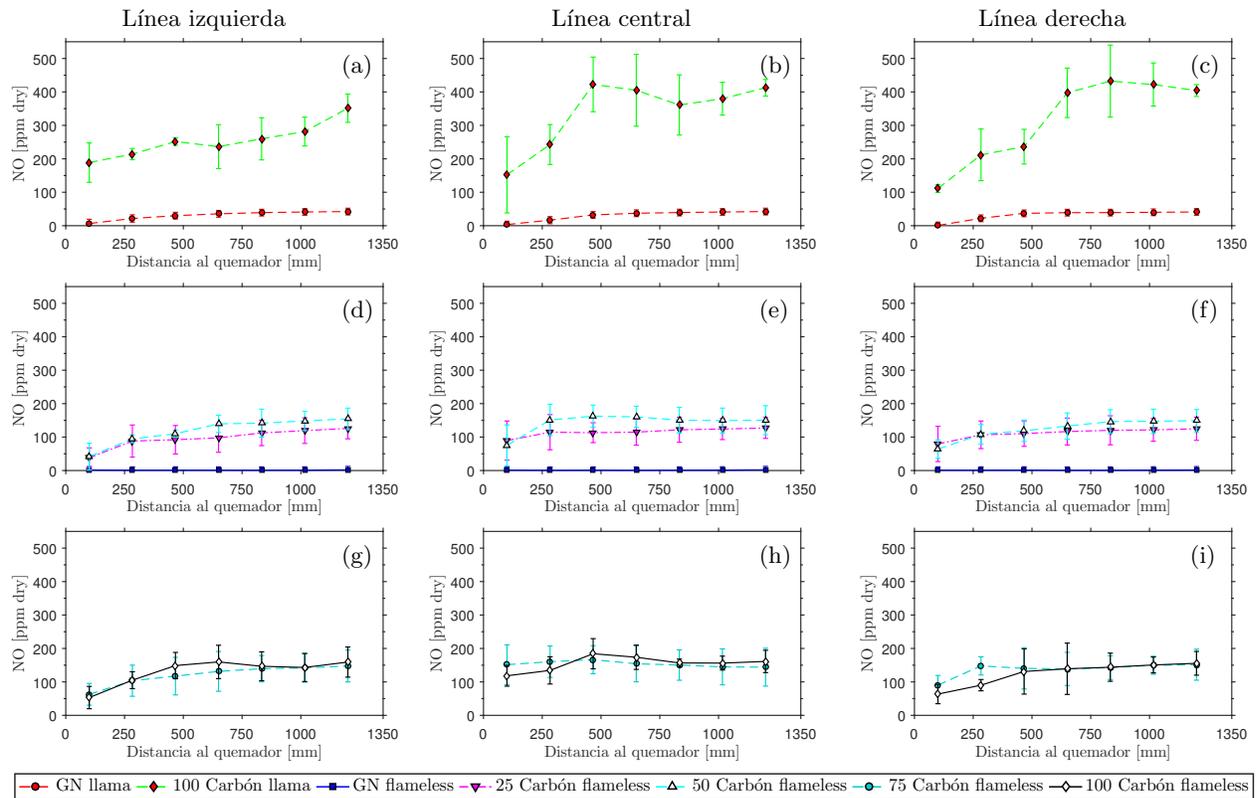


Figura 5.13. Concentración de NO al interior de la cámara de combustión (base seca).

también aumentan su tamaño, por lo que en realidad los rangos en los que la temperatura oscila en dichos casos es muy similar.

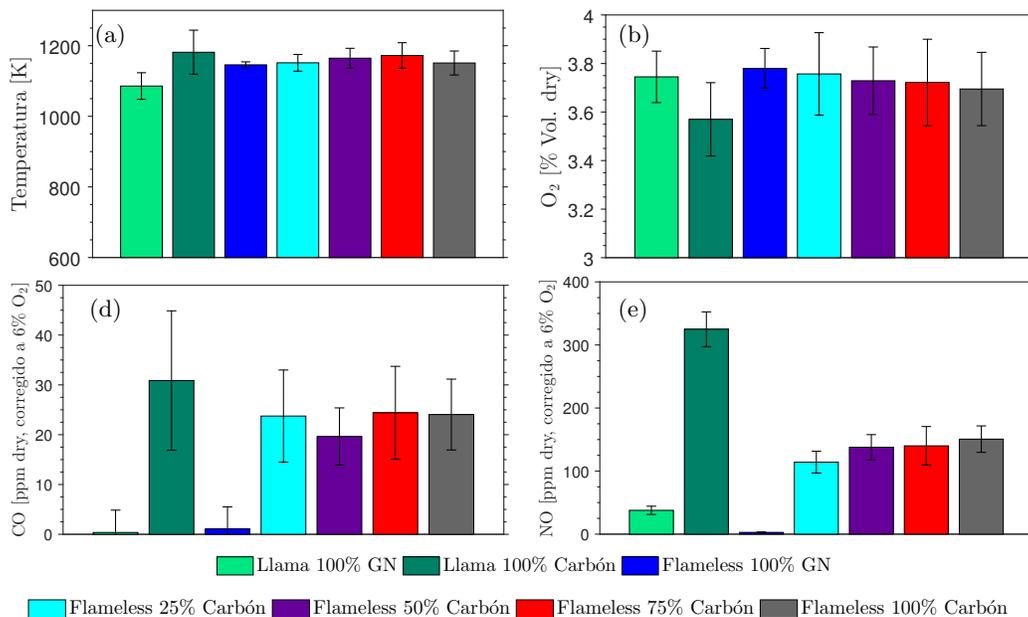


Figura 5.14. Temperatura y especies medidas en la chimenea.

En la Figura 5.14b se muestra el resultado de porcentaje volumétrico de oxígeno en base seca medido en la chimenea. En general, se observa que el porcentaje de oxígeno medio disminuye a medida que aumenta el

porcentaje de carbón, lo cual se debe a que para todas las condiciones se intenta mantener la tasa de aireación en 1.2, donde el carbón requiere menor cantidad de aire para ser quemado con la misma tasa de aireación que el gas natural.

Adicionalmente, en la Figura 5.14d se presentan los resultados de CO en base seca medidos en ppm y corregidos a un porcentaje de O₂ del 6%. En primer lugar se observa que para todos los casos las emisiones de CO son relativamente bajas (menores a 50 ppm), pero para los casos con 100% gas natural tanto en combustión con llama como en combustión sin llama, las emisiones de CO son especialmente bajas, menores a 5 ppm. Por otro lado para los casos que incluyen carbón pulverizado en combustión sin llama, las emisiones de CO tienden a ser bastante estables con un valor medio que está entre 20 y 25 ppm de CO. Por último, para el caso de 100% carbón pulverizado en modo llama, se observa que las emisiones de CO son un poco más altas (cercasas a 30 ppm), pero su variabilidad es mayor que en los casos con combustión sin llama. El hecho de que se haya obtenido una concentración tan baja de CO en las emisiones es muy importante porque nos muestra que incluso con 100% carbón, este se está quemando adecuadamente al interior de la cámara de combustión.

Finalmente, en la Figura 5.14e son mostrados los resultados de concentración de NO en la chimenea, los cuales están en base seca y son medidos en ppm corregidos a 6% de O₂. Analizando los casos que incluyen 100% gas natural, se observa que para modo llama hay alrededor de 30 ppm de NO, mientras que para modo sin llama se obtiene un valor de 3 ppm, lo cual es una reducción muy significativa en las emisiones de NO. Por otro lado para los casos que incluyen carbón pulverizado con combustión sin llama se observa que a medida que aumenta el porcentaje de carbón, las emisiones tienden a aumentar hasta llegar a unas emisiones cercanas a 150 ppm para el caso de 100% carbón en combustión sin llama.

Es notable el hecho de que el incremento en las emisiones de NO en combustión sin llama con condiciones que contienen carbón pulverizado no corresponden con los porcentajes de carbón en la mezcla, de tal forma que por ejemplo para 25% carbón se obtienen emisiones de NO de 114 ppm, pero para 50% carbón las emisiones de NO apenas aumentan hasta 138 ppm a pesar de que la masa de carbón se duplicó, lo cual significa que posiblemente el gas natural en mayores proporciones conduce a inhibir algún mecanismo de reducción del NO.

También, con respecto al caso de 100% carbón pulverizado en combustión convencional o con llama se han obtenido unas emisiones mucho mayores a las obtenidas para los casos de combustión sin llama, con una concentración de 325 ppm de NO en la chimenea, lo cual es más del doble con respecto al caso de 100% carbón en combustión sin llama. Este es un resultado muy importante, que soporta el uso de la tecnología de combustión sin llama con mezclas de gas natural-carbón pulverizado, desde un punto de vista de reducción de emisiones de NO.

5.4.4. Inquemados en la ceniza

En la Figura 5.15 se presentan los resultados de grado de quemado del carbón (*coal burnout*) calculado a partir de los quemados en las muestras de ceniza que fueron tomadas en el ciclón después de la chimenea. Las muestras fueron analizadas por medio de la técnica TGA y el cálculo del porcentaje de burnout se hizo por medio del método de rastreo de ceniza (Ecuación 5.1).

En primer lugar, se observa que para todos los casos evaluados tanto de combustión sin llama así como de combustión convencional se obtiene un porcentaje de quemado del carbón muy alto, con valores mayores a 98%. Adicionalmente, al observar las tendencias se ve que para el caso de modo llama con 100% carbón se ha obtenido un resultado bastante cercano al caso de 100% carbón en modo sin llama, lo cual es importante puesto que nos muestra que con combustión sin llama para 100% carbón no habría una reducción de la eficiencia a pesar de que las temperaturas pueden ser menores.

Por otro lado, se observa que el mayor porcentaje de quemado del carbón se obtiene para el caso de combustión sin llama con 25% carbón pulverizado, lo cual indica que hay una contribución de la combustión del gas natural en el quemado del carbón, conduciendo a una leve mejora en el quemado del mismo. Al aumentar el porcentaje de carbón en combustión sin llama, el grado de quemado del carbón disminuye como se observa para los casos de 50% y 75% carbón, pero cuando se tiene 100% carbón pulverizado en combustión sin llama hay un incremento en el porcentaje de quemado del carbón.

Este comportamiento tal vez se deba a que para bajos porcentajes de carbón (y altos porcentajes de gas natural), hay una cantidad importante de radicales que se derivan de la combustión del gas natural, lo cuales también pueden favorecer la reacciones de superficie en el carbonizado (*char*), pero cuando el porcentaje de carbón aumenta (y disminuye la cantidad de gas natural) dicho radicales disminuyen, pero adicionalmente, también puede haber una disminución local del oxígeno disponible debido a que el gas

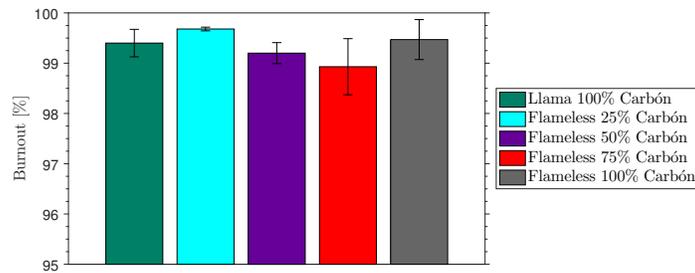


Figura 5.15. Resultados del porcentaje de quemado del carbón (*coal burnout*) en la chimenea

natural consume parte de dicho oxígeno y en estos casos puede primar la reducción local de oxígeno sobre la producción de radicales conduciendo a un menor quemado del carbonizado. Finalmente, el aumento del porcentaje de *burnout* para 100 % carbón en combustión sin llama, es probablemente debido a que el gas natural ya no se encuentra presente y por lo tanto no hay consumo de oxígeno por parte del gas, conduciendo a que las partículas de carbonizado se encuentren sometidas en zonas más grandes a concentraciones de oxígeno mayores en comparación a los otros casos. Esto último podría ser soportado, por ejemplo, en base al resultado de concentración de oxígeno al interior de la cámara de combustión para 100 % carbón pulverizado en combustión sin llama (Figuras 5.10a, 5.10b y 5.10c), donde la concentración de oxígeno es por ejemplo un poco mayor que en los otros casos.

5.4.5. Validación del modelo numérico

Para la validación del modelo numérico se han comparado los resultados experimentales y de simulación al interior de la cámara de combustión para las condiciones de combustión sin llama con las diferentes mezclas de gas natural y carbón. Debe tenerse en cuenta que con el fin de tener una comparación más adecuada, para las simulaciones numéricas no se han usado los resultados puntuales, sino que se hizo una promediación en esferas de un tamaño de 50 mm a lo largo de los ejes de las boquillas, lo cual permite tener una comparación más cercana a los datos experimentales (especialmente en las zonas de altos gradientes) debido a que las sondas no miden realmente un punto sino más bien una región de tamaño desconocido alrededor de la ubicación de la sonda. Los datos promediados a lo largo de los ejes se obtuvieron por medio de una UDF mostrada en el Anexo C.

Las figuras que se muestran a continuación presentan nuevamente los resultados experimentales mostrados anteriormente, con la diferencia de que se adicionan las curvas correspondientes a los datos de simulación. Aunque esto puede ser redundante, se hizo de esta forma con el fin de facilitar la lectura de las gráficas ya que si se ponían todos los resultados experimentales (con las barras de error) y de simulación era difícil diferenciar las curvas.

En la Figura 5.16 se presentan los resultados de temperatura tanto experimental como de simulación, para condiciones de combustión sin llama a lo largo de la cámara de combustión para las diferentes mezclas de gas natural y carbón pulverizado usadas en este trabajo. Las columnas corresponden a los diferentes ejes donde se realizaron las mediciones, mientras que para las filas las curvas se separaron en bajos porcentajes de carbón (primera fila) y altos porcentajes de carbón (segunda fila). Se observa que para las líneas izquierda y derecha (Figuras 5.16a, c, d y f), las simulaciones captan la tendencia obtenida en los resultados experimentales, pero por lo general la magnitud de los valores han sido subestimados, especialmente en las zonas más cercanas al quemador.

Por otro lado, en el eje central (Figuras 5.16b y e) las predicciones hechas por las simulaciones son mucho más cercanas a los resultados experimentales, aunque para 100 % gas natural (línea azul continua) se ha obtenido un pico de temperatura, el cual no ha ocurrido experimentalmente. A pesar de esto, se puede decir que en general, el modelo usado, ha hecho una predicción de la temperatura bastante aceptable, especialmente si los resultados son usados con fines de diseño.

En la Figura 5.17 se presenta la comparación de los resultados experimentales y de simulación para la concentración de metano (en base seca) a lo largo de la cámara de combustión para las 3 líneas evaluadas. La forma en la que se presentan los resultados es igual a la explicada para el caso de la temperatura. Debe notarse que para las líneas laterales (Figuras 5.17a, c, d y f) las concentraciones máximas de CH_4 , obtenidas por medio de las simulaciones, tienden a estar más desplazadas hacia la zona de aproximadamente 750 mm, mientras que experimentalmente el máximo se encuentra en la zona entre 250 y 500 mm. Dado que se presume

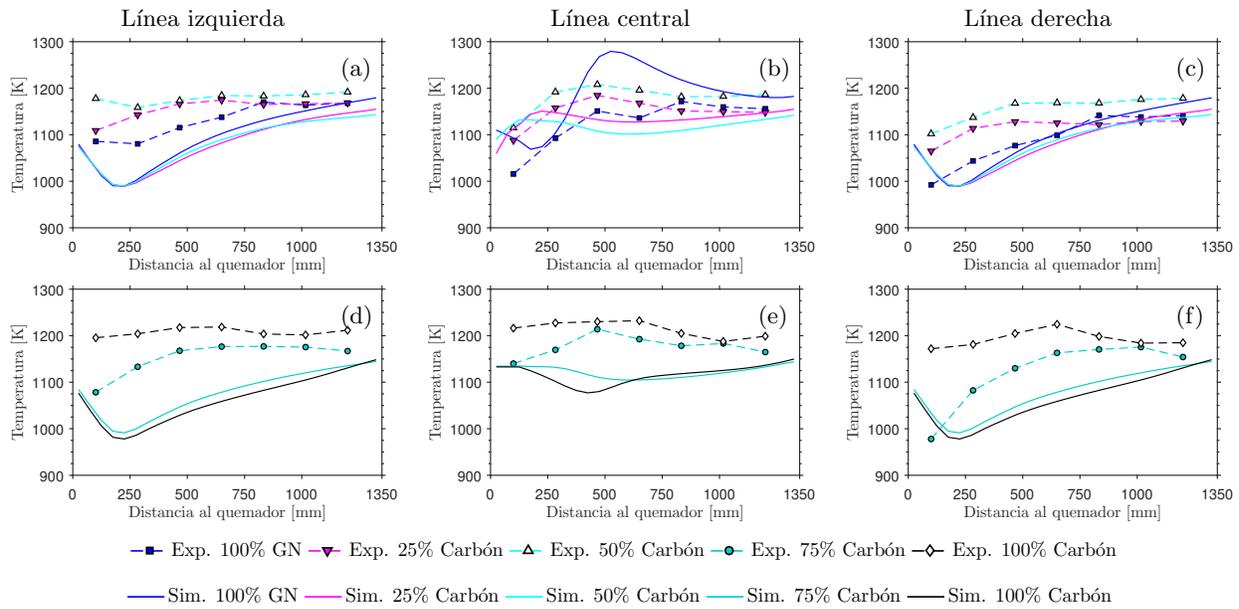


Figura 5.16. Comparación de los resultados experimentales y de simulación de la temperatura para los casos de combustión sin llama.

que el CH_4 que llega a las líneas laterales se debe principalmente a la expansión del *jet* de gas natural y también a la absorción causada por el impulso de los *jets* de aire, entonces se puede decir que la expansión del *jet* de gas natural es más rápida que lo predicho por el modelo usado. La tasa de expansión de los *jets* es determinada principalmente por el modelo de turbulencia empleado (en este caso el modelo $k-\epsilon$ estándar), por lo cual al parecer este modelo está subestimando la tasa a la cual el *jet* de gas natural se expande.

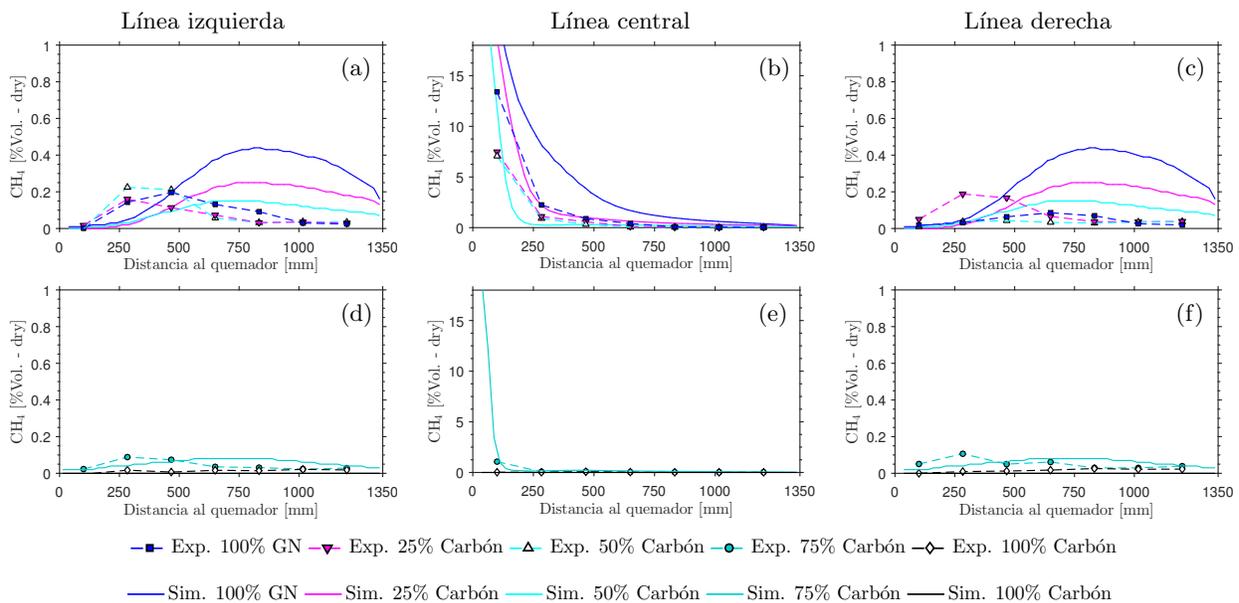


Figura 5.17. Comparación de los resultados experimentales y de simulación de la concentración de CH_4 para los casos de combustión sin llama.

Adicionalmente, en el eje central (Figuras 5.17b y e) el modelo predice bastante bien la tendencia de la concentración de CH_4 obtenida experimentalmente, pero para 100 % gas natural (línea azul continua) y 25 % carbón (línea magenta continua) el modelo tiende a sobreestimar la concentración de CH_4 en la zona cercana al quemador, mientras que para los casos con menos gas natural (50 % carbón y 75 % carbón) la

predicción hecha por el modelo se ajusta bastante bien a los datos experimentales. Este resultado puede ser visto como el efecto combinado de que el modelo de turbulencia está subestimando la tasa de expansión del gas natural para las mayores velocidades de descarga del gas natural (mayores porcentajes de gas natural en la mezcla), pero además podría estar ocurriendo que el modelo de interacción de turbulencia y combustión (modelo EDC) está subestimando la tasa a la cual se quema el gas natural, lo cual en este caso parece estar ocurriendo para los mayores niveles de turbulencia (o mayores velocidades de descarga del jet de gas natural).

En la Figura 5.18 se presentan los resultados de concentración de oxígeno (en base seca) a lo largo de la cámara de combustión para las condiciones de combustión sin llama. En general, se observa que la tendencia para todas las líneas medidas han sido predichas de un forma muy buena por medio del modelo empleado, incluso, se puede decir que la magnitud de la concentración de O_2 ha sido predicha correctamente ya que las curvas de las simulaciones se encuentran en general dentro de las zonas abarcadas por las barras de error de los datos experimentales (mostradas en la Figura 5.10). Adicionalmente, debe notarse que para las líneas laterales (Figuras 5.18a, c, d y f) las curvas de concentración de oxígeno de las simulaciones para la coordenada 0 deberían tener un valor igual 20.9%, lo cual no sucede, sino que en su lugar la concentración tiene una pequeña disminución, la cual es causada por el hecho de que se usó el método de promediar los resultados de simulación en esferas de 50 mm, las cuales cerca a la descarga de los *jets* de aire, tienen un tamaño mayor que el ancho del propio *jet*.

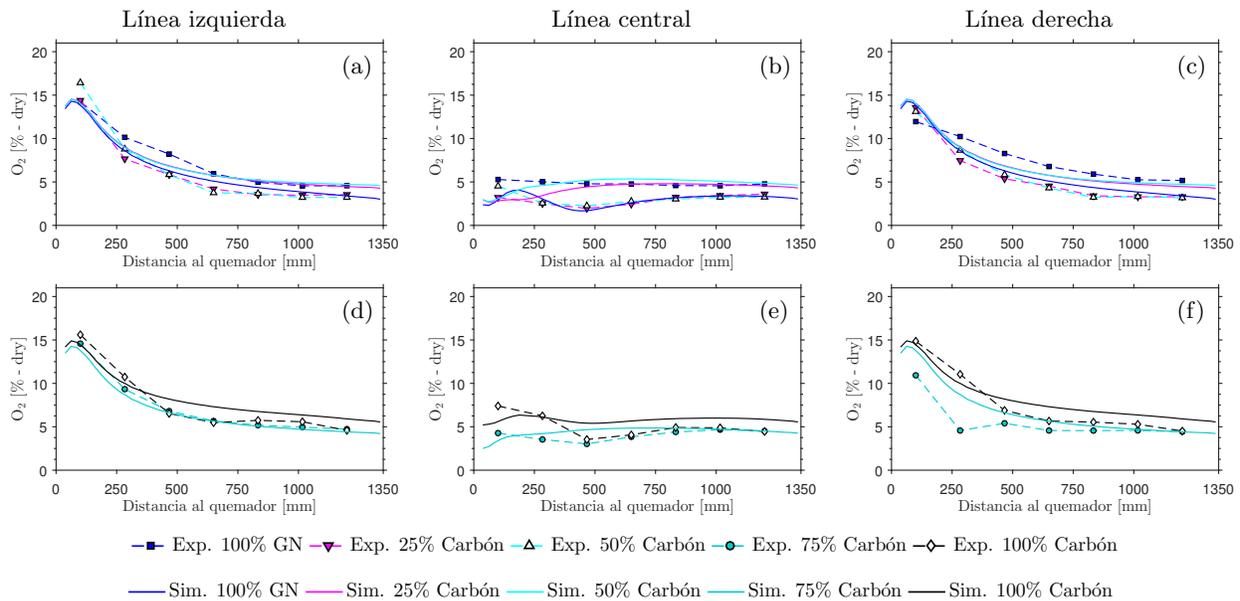


Figura 5.18. Comparación de los resultados experimentales y de simulación para la concentración de O_2 en las condiciones de combustión sin llama.

En la Figura 5.19 se muestran los resultados experimentales y de simulación de concentración de CO a lo largo de la cámara de combustión para las diferentes líneas medidas. Se observa que para las líneas laterales con un alto porcentaje de carbón (Figuras 5.19d y f) el comportamiento es algo similar al comportamiento obtenido para la concentración de CH_4 , donde las simulaciones muestran un máximo en la zona entre 1000 y 1350 mm, mientras que experimentalmente ese máximo ocurre mucho antes, en la zona entre 500 y 750 mm. Adicionalmente, para los casos con bajo contenido de carbón (Figuras 5.19a y c) la predicción que hace el modelo es bastante mejor, ya que los máximos experimentales se encuentran aproximadamente en la misma zona que en las simulaciones.

Por otro lado, para el eje central (Figuras 5.19b y e) en general la concentración de CO predicha por el modelo es bastante más alta que los valores medidos experimentalmente, en especial para el caso de 100% gas natural con el modelo se obtiene un valor máximo cercano a 8000 ppm, el cual ocurre en la zona cercana a 500 mm, pero este valor es mucho mayor que el máximo medido experimentalmente, el cual se aproxima a 1000 ppm. También, se observa para la línea central, según el modelo, que a medida que aumenta el porcentaje de carbón (casos de 25, 50 y 75% carbón), el pico de CO va disminuyendo y se va acercando a la zona del quemador. Ese pico de CO se debe a la combustión del gas natural y se va acercando a la zona del quemador por la disminución del impulso del *jet* del mismo gas. En este sentido, la sobreestimación de CO por parte

del modelo probablemente es causada por el uso de un mecanismo de reacción simplificado.

Adicionalmente, debe notarse que según el modelo, para todas las líneas evaluadas, la concentración de CO al final de la cámara de combustión no es igual a cero, lo cual es contrario a lo que se encontró experimentalmente, lo cual indica que el modelo subestima la tasa de reacción.

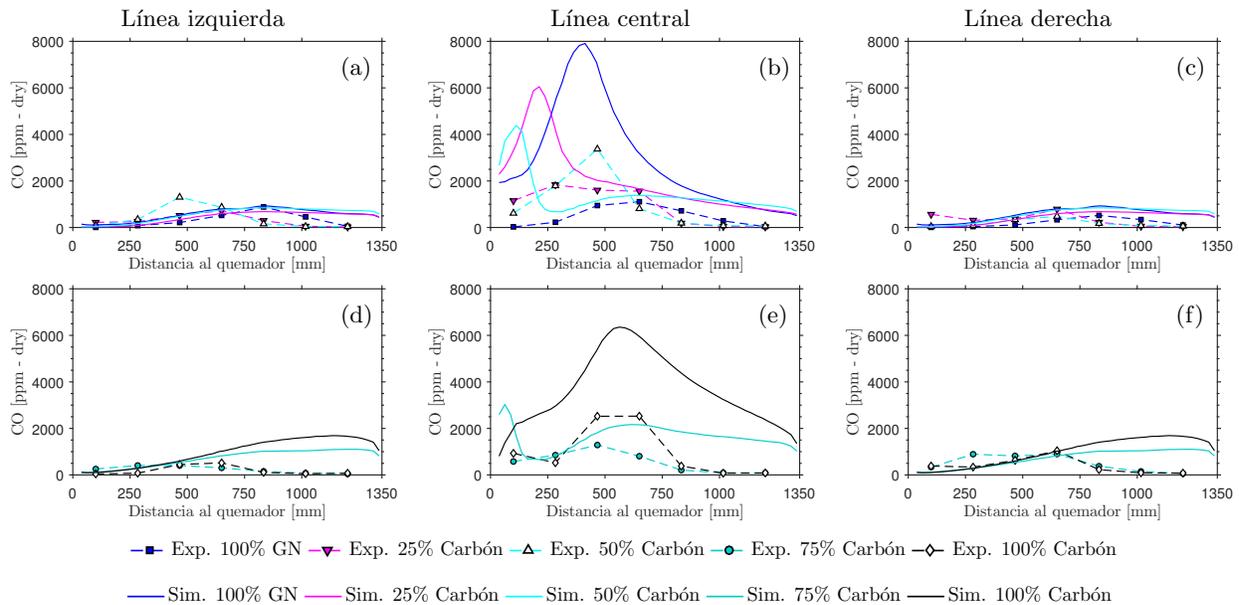


Figura 5.19. Comparación de los resultados experimentales y de simulación para la concentración de CO (en base seca) para las condiciones de combustión sin llama.

Con respecto a la concentración de CO_2 , en la Figura 5.20 se muestra la comparación de los resultados experimentales y de simulación a lo largo de la cámara de combustión en base seca. En general, se observa que la predicción hecha por el modelo es bastante buena y se ajustan tanto la tendencia como la magnitud de los valores obtenidos. Es importante resaltar que para las especies mayores (O_2 y CO_2) las predicciones hechas por el modelo se ajustan bastante bien a los datos experimentales, por otro lado, para las especies que se encuentran en menor concentración (CO y CH_4) la predicción no es tan exacta, lo cual probablemente se debe al uso de un mecanismo de reacción simplificado.

Adicionalmente, con el fin de tener una visión más global acerca de la predicción obtenida con el modelo con respecto a los datos experimentales, en la Figura 5.21 se presentan los resultados de temperatura, O_2 , CH_4 , CO_2 y CO , donde la comparación se realiza ubicando en el eje horizontal el resultado experimental y en el eje vertical el resultado obtenido por medio de la simulación para la misma posición de la medición experimental, donde si la predicción del modelo es perfecta entonces el punto debe estar ubicado en la línea de 45° , pero si el modelo sobrepredice la variable entonces dicho punto estará ubicado por encima de la línea y si por el contrario el punto se encuentra por debajo de la línea de 45° , entonces el modelo subestima la variable en cuestión. También debe notarse que los puntos mostrados en estas figuras corresponden al total de los casos de combustión sin llama, tanto con 100 % gas natural como con las mezclas de carbón pulverizado-gas natural y con 100 % carbón pulverizado, para las 3 líneas medidas.

En la Figura 5.21a se muestra la comparación de los resultados de temperatura para todos los casos de combustión sin llama, observándose que una gran cantidad de los puntos se encuentran distribuidos alrededor de la línea de 45° , y además se encuentran muy concentrados en una zona que está entre 1100 y 1200 K, por lo cual se podría decir que en general el modelo hace una muy buena predicción de la temperatura, aunque hay algunos puntos donde la temperatura predicha es bastante menor a la medida y estos puntos normalmente corresponden a las zonas cercanas a la descarga de los *jets* de aire y de combustible, donde la medición realizada tiene mayor incertidumbre debido a los altos gradientes que se presentan en dichas zonas. Por otro lado, el hecho de que gran parte de los puntos se encuentren concentrados en una región tan pequeña es una muy buena señal de que en todos los casos evaluados se ha obtenido el régimen de combustión sin llama debido a que refuerza el hecho de que hay una distribución uniforme de la temperatura a lo largo de la cámara de combustión.

En la Figura 5.21b es presentada la comparación de los resultados de O_2 , observándose que los puntos se

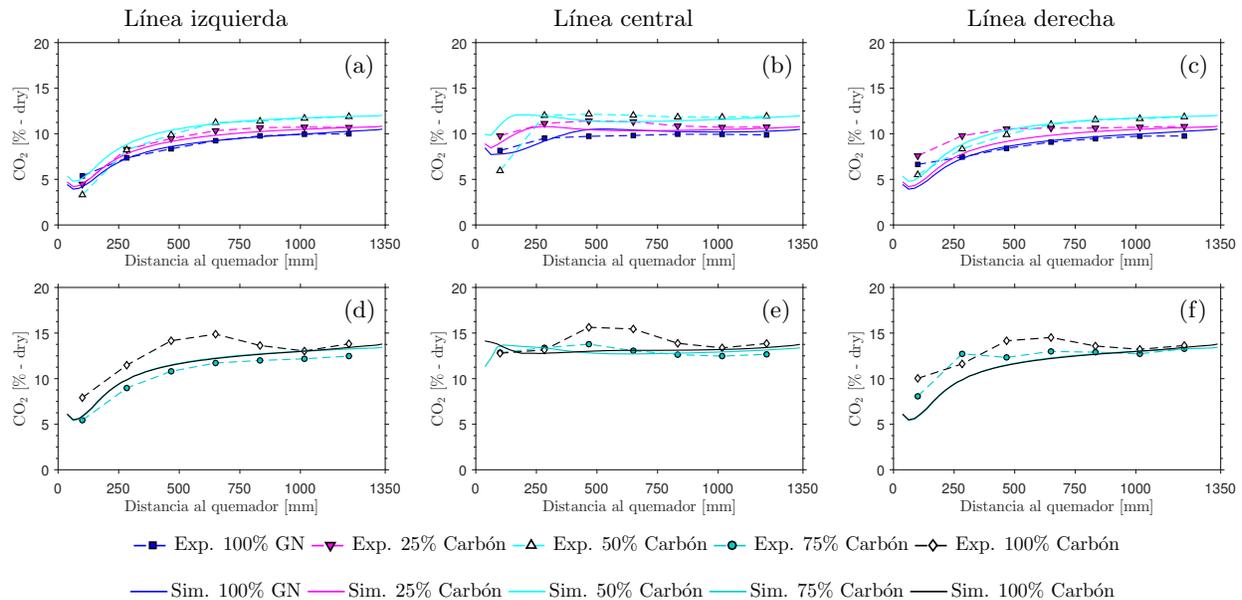


Figura 5.20. Comparación de los resultados experimentales y de simulación para la concentración de CO_2 en condiciones de combustión sin llama.

distribuyen bastante bien alrededor de la línea de 45° , por lo cual se puede decir que la predicción hecha por el modelo es bastante buena y confiable.

También, en la Figura 5.21c se muestra la comparación de los resultados de concentración de CH_4 , para lo cual debe primero decirse que unos cuantos puntos fueron excluidos de la figura debido a que sus concentraciones eran mucho mayores en comparación a la de la mayoría de los puntos y si estos eran incluidos entonces parecía como si la mayoría de puntos estuvieran ubicados en cero. Se observa que los puntos también están distribuidos alrededor de la línea de 45° , pero en este caso hay una tendencia del modelo a sobrepredecir la concentración de CH_4 .

De forma similar, en la Figura 5.21d se muestra la comparación de los resultados de CO_2 , donde se observa que estos están bastante bien distribuidos alrededor de la línea de 45° , de tal forma que la predicción del modelo con respecto a la concentración de CO_2 a lo largo de la cámara de combustión para las diferentes condiciones evaluadas es muy buena.

Finalmente, en la Figura 5.21e se presenta la comparación de los resultados de concentración de CO , donde se aprecia que gran parte de los puntos se encuentran por encima de la línea de 45° , por lo cual el modelo tiende a sobrepredecir la concentración de CO , pero a pesar de esto se puede considerar que con el modelo usado en este trabajo se obtienen predicciones bastante aceptables en la mayoría de variables evaluadas.

5.4.6. Quimioluminiscencia espontánea

En esta sección se presentan los resultados de quimioluminiscencia espontánea a lo largo de la cámara de combustión, cuyas imágenes fueron obtenidas empleando una cámara ICCD y anteponiendo en dicha cámara 2 filtro ópticos diferentes: un filtro de rango estrecho que tiene la transmisividad centrada en 430 nm, la cual coincide con la longitud de onda en la cual el CH^* genera su emisión; y otro filtro que tiene una transmisividad centrada en 308 nm, la cual coincide con la emisión del OH^* . Las curvas de transmisividad de ambos filtros fueron presentadas en la Figura 2.7 (Sección 2.2.4).

En la Figura 5.22 se presentan las imágenes de intensidad de quimioluminiscencia empleando el filtro que permite el paso de la emisión de CH^* , las cuales son tomadas en las 3 ventanas a lo largo de la cámara de combustión y representan la imagen promedio de 300 imágenes individuales. Las imágenes para una misma condición han sido combinadas y escaladas de tal forma que se aprecie de forma correcta la distancia entre las diferentes imágenes y el quemador. Para cada imagen combinada, en la parte izquierda se muestra una línea vertical que corresponde al plano de descarga del quemador y las líneas negras horizontales en cada imagen corresponden al eje de descarga del gas natural y del carbón pulverizado.

Debe notarse que las dos imágenes en la tercer ventana están 12 mm por encima de las imágenes de las

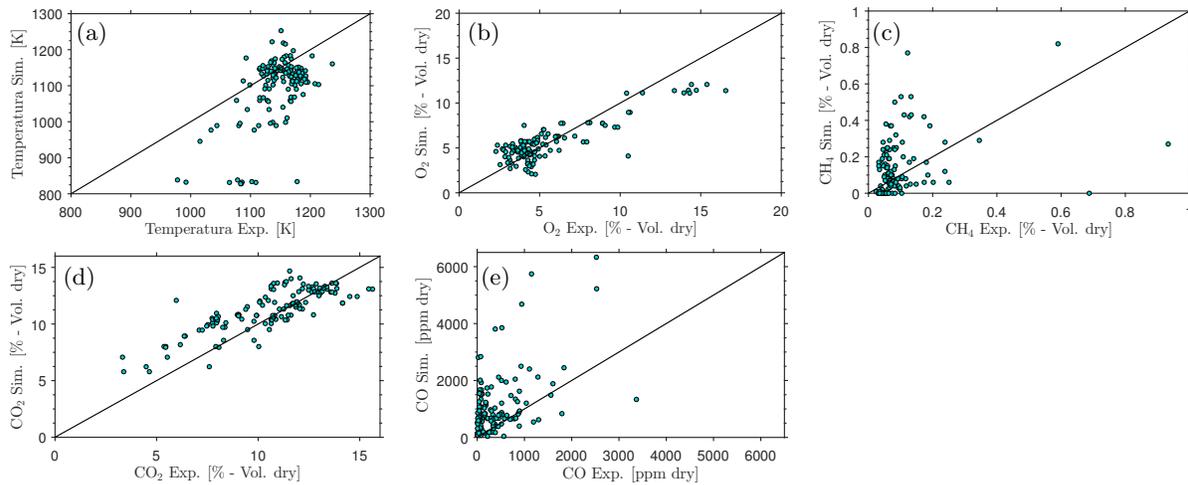


Figura 5.21. Comparación de datos experimentales y de simulación.

otras ventanas, lo cual se debe a que constructivamente dicha ventana se encontraba por encima de las otras 2 ventanas.

En cuanto a la barra de colores en las imágenes, debe tenerse en cuenta que las imágenes han sido normalizadas con respecto a la máxima intensidad medida globalmente, la cual corresponde en este caso a la condición de modo llama con 100 % gas natural (Figura 5.22f), pero a pesar de que las intensidades de las barras de color son relativas a dicha intensidad máxima, para cada condición individual los colores corresponden solamente al máximo y mínimo local de cada condición. Esto se ha hecho de esta forma con el fin de mejorar la visualización de las imágenes donde la intensidad es baja.

Se observa que en los casos de modo llama, las intensidades máximas son casi el doble a las intensidades obtenidas para los casos de combustión sin llama, lo cual se puede ver en el valor máximo de cada barra de color. Adicionalmente, se observa que la mayor intensidad de señal de CH^* se obtiene para el caso de modo llama con 100 % gas natural, la cual está incluso por encima de la intensidad obtenida en modo llama con 100 % carbón pulverizado. También, debe notarse que para los casos de modo llama se puede diferenciar claramente donde se encuentra la zona con mayor producción de radicales CH^* , de tal forma que en el caso de modo llama con 100 % gas natural, apenas se alcanza a apreciar una pequeña parte de la zona de reacción, esto debido a que la primera imagen se encuentra a una distancia de 195 mm del quemador, y en este caso la zona de reacción se encuentra anclada en la descarga del mismo. Por otro lado, para el caso de modo llama con 100 % carbón la mayor intensidad sucede en la segunda y tercera ventana, lo cual muestra claramente que la reacción en esta condición está completamente desprendida del quemador, además es interesante ver que incluso se alcanza a apreciar una zona de reacción bastante bien definida (Figura 5.22g).

Con respecto a los casos de combustión sin llama, se observa que en general para todos los casos evaluados la zona de producción de radicales CH^* no está tan bien definida en comparación a los resultados obtenidos para modo llama, a pesar de esto, por ejemplo, al ver el caso de 100 % gas natural en modo sin llama (Figura 5.22), se observa que la mayor intensidad de CH^* se obtiene en la parte final de la cámara de combustión pero dicha intensidad máxima es entre un 25 % y un 35 % menor que las intensidades máximas obtenidas con las mezclas de gas natural con carbón pulverizado.

En cuanto a los casos que incluyen carbón pulverizado en condiciones de combustión sin llama, se observa que se obtienen mayores intensidades de radicales CH^* en la primera y en la segunda ventana de la cámara de combustión, lo cual posiblemente se deba a la liberación y reacción de los volátiles. Es importante notar que para combustión sin llama con carbón pulverizado la zona de reacción se encuentra más cerca al quemador, y esto se debe principalmente al hecho de que las partículas de carbón pulverizado cuando entran al horno en combustión sin llama se encuentran rodeadas de gases calientes, mientras que en modo convencional se encuentran rodeadas por un co-flujo de aire relativamente frío, ocasionando que en modo llama se retrase el proceso de volatilización.

De forma similar, en la Figura 5.23 se presentan los resultados de intensidad de la señal de quimioluminiscencia, pero en este caso usando el filtro que permite el paso de la señal del radical OH^* . La forma en la que se presentan los resultados es igual a la que se usó para el CH^* , donde las barras de color han sido normalizadas con respecto a la mayor intensidad de OH^* , la cual nuevamente se obtuvo para el caso

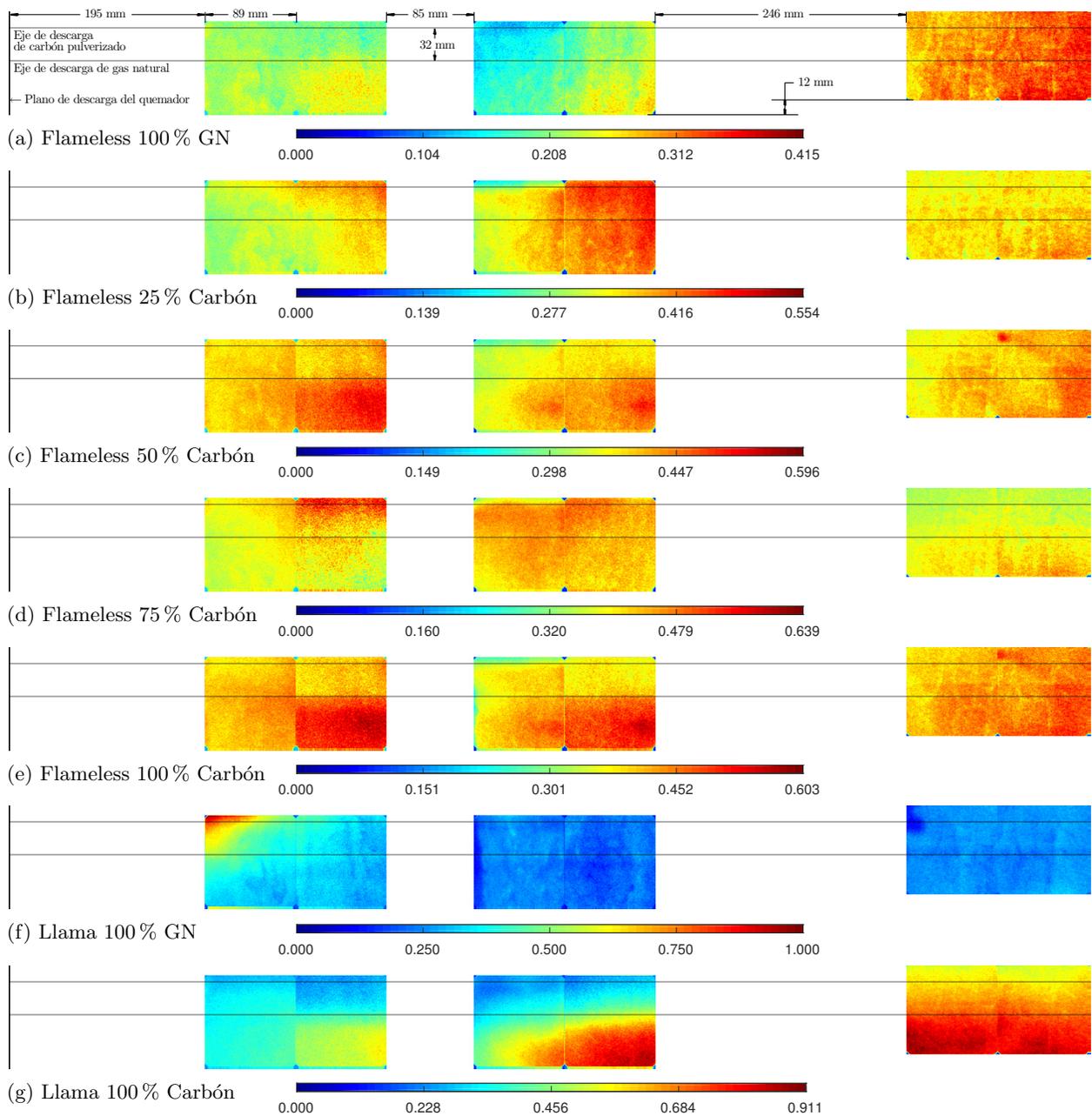


Figura 5.22. Resultados de mediciones de quimioluminiscencia de CH^* empleando un filtro óptico centrado en 430 nm.

de 100 % gas natural en modo llama (Figura 5.23f).

Debe recordarse que para el filtro de OH^* el tiempo de exposición en la cámara se aumentó a 80 ms, lo cual es cuatro veces más que el tiempo de exposición usado con el filtro de CH^* (20 ms), esto debido a que la transmisividad máxima de este filtro es aproximadamente 15 % (ver Figura 2.7).

Para los casos de modo llama, se observa que para 100 % gas natural (Figura 5.23f) la forma de la zona de alta intensidad de OH^* es bastante similar a la que se obtuvo para el filtro de CH^* , con la diferencia de que la zona de OH^* es más grande que la de CH^* . Por otro lado, para el caso de 100 % carbón en modo llama, se observa que el comportamiento del OH^* es bastante diferente al resultado obtenido para el CH^* , obteniéndose una mayor intensidad en la primera ventana y en este caso no se aprecia una zona tan demarcada como la que se obtuvo para el CH^* . Es importante mencionar que la intensidad medida con el filtro de OH^* es por lo general bastante menor que la obtenida con el filtro de CH^* y por este motivo en varias de las imágenes se alcanza a apreciar una señal de ruido, que se manifiesta con una banda diagonal.

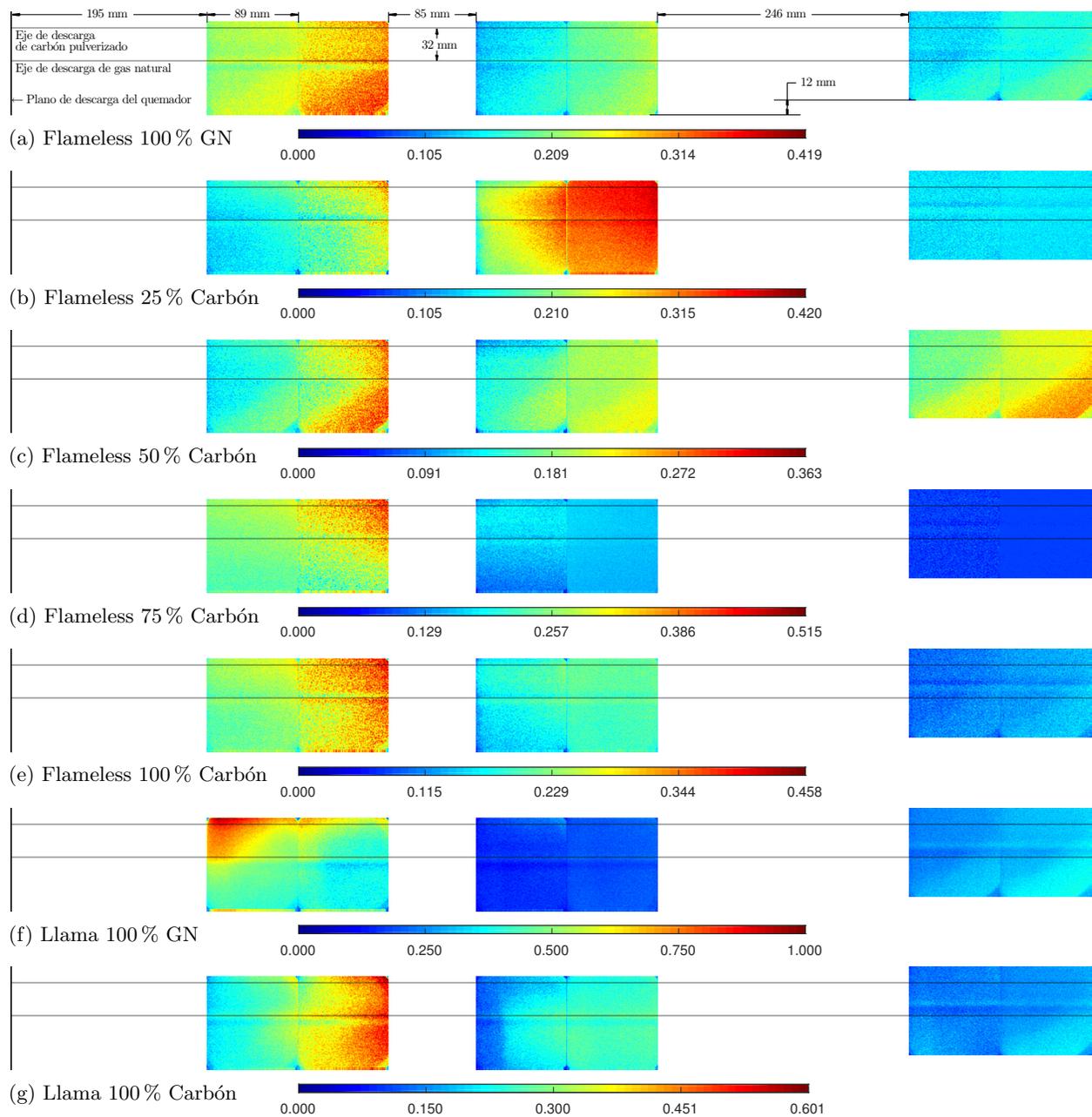


Figura 5.23. Resultados de mediciones de quimioluminiscencia de OH^* con un filtro centrado en 308 nm.

Con respecto a los casos de combustión sin llama, para 100% gas natural (Figura 5.23a) se observa que hay una mayor intensidad de OH^* en la primera y segunda ventanas, lo cual es algo diferente al resultado obtenido para el CH^* , donde la mayor intensidad se obtuvo en la última ventana. Por otro lado, para el caso con 25% carbón en combustión sin llama se observa que la zona OH^* se encuentra aproximadamente en la mitad de la cámara de combustión (segunda ventana) y en este caso si hay una buena correspondencia entre la zona de OH^* y la de CH^* . En los demás casos de combustión sin llama se obtiene un resultado bastante similar entre sí, donde la zona con mayor intensidad de OH^* se encuentra ubicada más cerca al quemador en la primera ventana.

5.4.7. Mie scattering

En la Sección 5.3.5 se explicó el método y el montaje usado para realizar las mediciones de *Mie scattering* al interior de la cámara de combustión donde dichas mediciones se realizaron para las condiciones de 50% y

100 % carbón en modo combustión sin llama y también para modo llama con 100 % carbón.

En la Figura 5.24 se presenta, a modo de ejemplo, una imagen del plano láser al interior de la cámara de combustión tomada con una cámara convencional. La imagen fue tomada algún tiempo después de que el horno fue apagado, razón por la cual, algunas de las partículas de carbón se queman al tocar las paredes como se puede apreciar por la partícula brillante (amarilla) en la zona inferior de la imagen. También, En la imagen se aprecian algunos puntos más brillantes, los cuales corresponden a la luz dispersada por las partículas de carbón más grandes. Adicionalmente, se observa una intensidad de color verde más bien continua principalmente en la zona superior de la imagen, que corresponden a la zona por donde atraviesa el *jet* de carbón. Esta zona de luz muy continua parece producirse por lo que sería una nube de partículas muy pequeñas de carbón pulverizado.

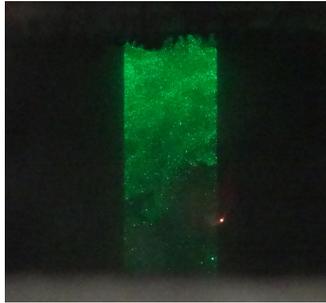


Figura 5.24. Imagen del plano láser al interior de la cámara de combustión tomada con una cámara convencional.

En la Figura 5.25 se presentan, a modo de ejemplo, imágenes individuales de Mie *scattering* obtenidas con la cámara ICCD para la primera ventana de la cámara de combustión. Se presentan imágenes para cada una de las condiciones en las que se empleó esta técnica, donde debe notarse que, en general, los casos de combustión sin llama tienden a presentar una distribución de partículas que abarca la totalidad de la imagen, mientras que para el caso de modo llama las partículas tienden a estar más concentradas en la parte superior de las imágenes (zona por la cual atraviesa el *jet* de carbón pulverizado). También, en algunas imágenes se ha resaltado en cuadros rojos algunas zonas donde se presentan mayores concentraciones de partículas, lo cual normalmente coincide con la zona donde se encuentra el *jet* de carbón pulverizado.

Por otro lado, en la Figura 5.26 se presentan los resultados obtenidos, donde las imágenes mostradas corresponden al promedio de 500 imágenes tomadas con la cámara ICCD para cada posición del plano láser, y dichas imágenes promedio son ubicadas una al lado de la otra tanto para la ventana 1 como para la ventana 2. Adicionalmente, la línea vertical al lado izquierdo corresponde a la ubicación de la descarga del quemador y las líneas horizontales corresponden al eje de descarga de la boquilla de gas natural en modo flameless (línea central) y al eje de descarga del carbón pulverizado (línea superior). También, el código de colores para cada condición es independiente de las otras condiciones, pero las barras de color están normalizadas y referidas a la condición con mayor intensidad, la cual en este caso es modo llama con 100 % carbón pulverizado.

En primer lugar, se aprecia que para el caso de modo llama con 100 % carbón (Figura 5.26c) se tiene una concentración del *jet* de partículas más alta hasta una distancia mayor, lo cual se denota por la zona roja que corresponde a la descarga del *jet* de carbón pulverizado. Por otro lado, para el caso de 100 % carbón pulverizado (Figura 5.26b) aun se aprecia parte de la estructura del *jet* de carbón pulverizado en la primera ventana, pero la concentración de las partículas es bastante menor en comparación al modo llama; e incluso al final de dicha ventana ya prácticamente no se aprecia dicho *jet*, esto puede deberse a un efecto combinado del consumo más temprano de dichas partículas (por las mayores temperaturas en esa zona debido a la recirculación de gases) y también a que la misma recirculación puede conducir a que el *jet* se disperse más rápidamente en la cámara de combustión.

También, para el caso de 50 % carbón pulverizado (Figura 5.26a), se observa que es bastante más difícil apreciar la estructura del *jet* de carbón pulverizado en la primera ventana, aunque se alcanza a apreciar una mayor intensidad en la zona que corresponde al *jet* de carbón pulverizado. Esto probablemente se debe a una dispersión temprana de dicho *jet* causada por el *jet* de gas natural, el cual se descarga a alta velocidad, 32 mm abajo del *jet* de carbón pulverizado.

Adicionalmente, para los tres casos se observa que en la segunda ventana la concentración de partículas es bastante más baja en comparación a la primera ventana, aunque esto no significa que no hay partículas en dicha zona, sino que la distribución de las mismas es bastante más uniforme en comparación con la primera

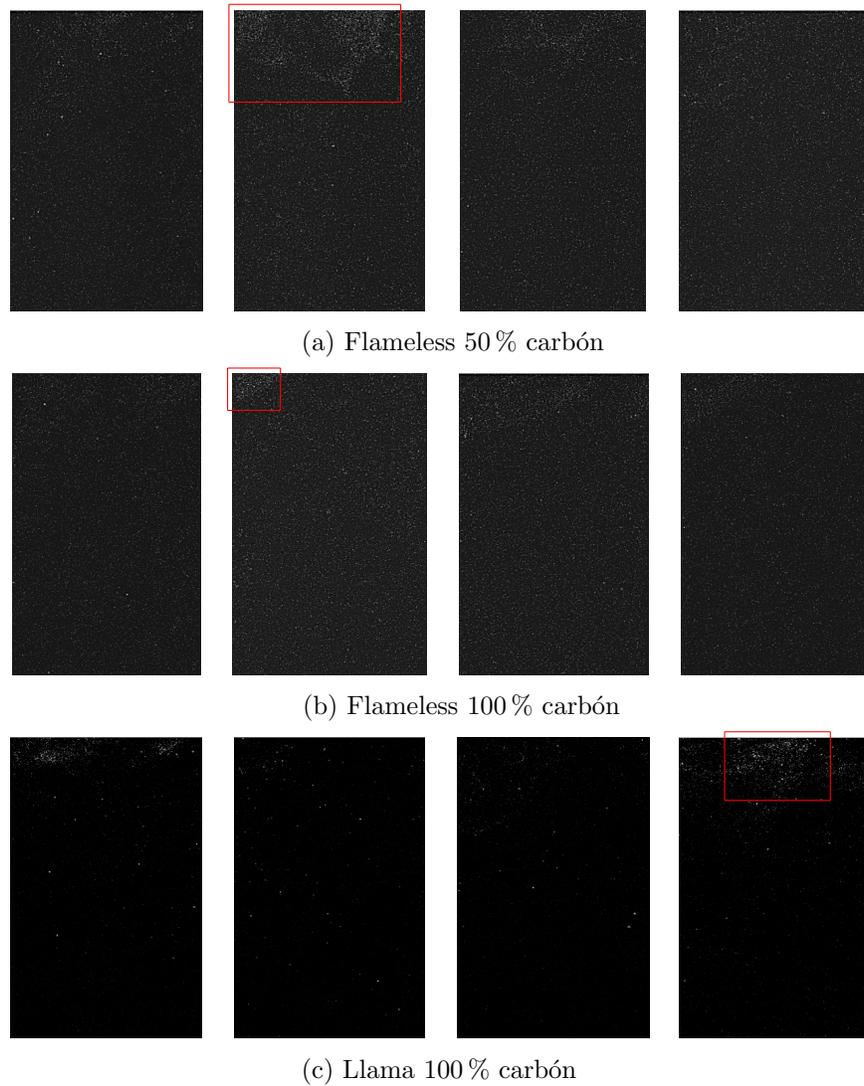


Figura 5.25. Algunas imágenes individuales de Mie *scattering* obtenidas con la cámara ICCD para las condiciones en las cuales se empleó esta técnica.

ventana. Además, según [79] la señal de Mie *scattering* tiene una dependencia a la cuarta potencia con el diámetro de las partículas, de tal forma que en la segunda ventana al haber una reducción del diámetro ocasionado por la combustión, entonces la señal medida decae mucho más que la propia reducción del diámetro.

5.5. Conclusiones de los resultados experimentales

En cuanto a los resultados experimentales se concluye que:

- Para las mediciones de temperatura al interior de la cámara de combustión se obtuvieron resultados bastante similares al comparar las diferentes condiciones evaluadas, donde para los casos de combustión sin llama, las temperaturas tienden a ser menores (del orden de 1000 K) en las cercanías del quemador y un poco mayores al final de la cámara de combustión (cercanas a 1200 K), lo cual se debe principalmente a que en este régimen de combustión la zona de reacción no se encuentra anclada al quemador. Por otro lado, se ha obtenido que para los casos de combustión en modo llama las temperaturas no son mucho mayores que las temperaturas en combustión sin llama, aunque para 100 % gas natural en modo llama la temperatura es mayor cerca al quemador y disminuye al aumentar la distancia al mismo, lo cual es esperado debido a que en este caso la llama está anclada a la boquilla del quemador y probablemente

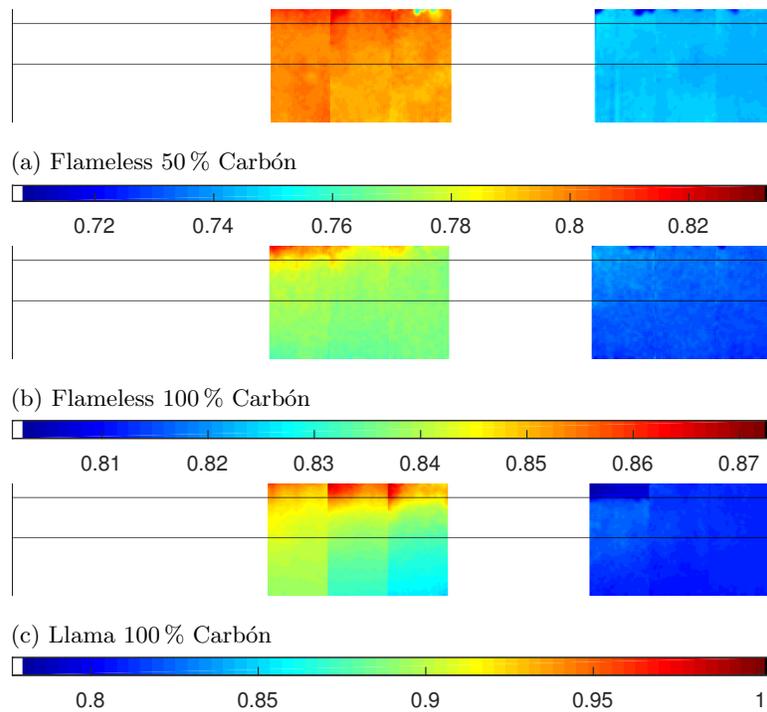


Figura 5.26. Resultados de Mediciones de Mie Scattering para los accesos ópticos con imágenes promedio en las 3 condiciones en las cuales se empleó esta técnica de medición.

en dicha zona (no medido) la temperatura es bastante más alta a las temperaturas de combustión sin llama.

- En cuanto a la concentración de oxígeno al interior de la cámara de combustión se observó que nuevamente las concentraciones oxígeno al interior del horno son bastante similares en los casos de combustión sin llama, aunque para 100 % carbón, la concentración ha sido algo mayor que en los demás casos de mezclas gas natural-carbón pulverizado en modo sin llama. También, se obtuvo que para 100 % carbón en modo llama la concentración de oxígeno ha sido en general mayor a los casos de combustión sin llama.
- Con respecto a la concentración de CO al interior de la cámara de combustión se observó que para todos los casos de combustión sin llama la concentración de CO al final de la cámara desciende a valores cercanos a 0 ppm, lo cual es importante porque es un indicio de que el carbón en todas estas condiciones se está quemando bastante bien. Por otro lado, para el caso de 100 % carbón en modo llama la concentración de CO en la zona final de la cámara de combustión permanece bastante alta (entre 1000 y 3000 ppm) lo cual significaría que en este caso se requiere una longitud mayor para quemar el carbón completamente.
- Adicionalmente, en cuanto a la concentración de NO al interior de la cámara de combustión se obtuvo una concentración de prácticamente 0 ppm de NO para el caso de 100 % gas natural en modo sin llama, mientras que para 100 % gas natural en modo llama la concentración estuvo cerca de 30 ppm a lo largo de casi toda la cámara de combustión. Por otro lado, para los casos de combustión sin llama que incluyen carbón pulverizado se han obtenido concentraciones de NO bastante similares entre los diferentes casos, con concentraciones de aproximadamente 50 ppm cerca al quemador, las cuales aumentan hasta aproximadamente 150 ppm al final de la cámara de combustión. También, para el caso de 100 % carbón en modo llama se han obtenido concentraciones de NO bastante más altas en comparación a los casos de combustión sin llama, con concentraciones del orden de 150 ppm cerca al quemador, que aumentan hasta 400 ppm al final del horno. Este es un resultado bastante importante porque muestra que efectivamente para carbón pulverizado y las mezclas de carbón pulverizado-gas natural las concentraciones de NO se reducen de forma significativamente en el régimen de combustión sin llama.
- También, se observó que con el modelo numérico de Fluent se obtuvieron predicciones bastante aceptables con respecto a los resultados experimentales, especialmente para la temperatura y las

concentraciones de O_2 y CO_2 , pero el modelo tiende a hacer una sobreestimación de la concentración de CO , lo cual se debe a que el modelo hace uso de un mecanismo de reacción global.

- Por otro lado, para todos los casos, tanto de combustión sin llama como en modo llama, se obtuvieron porcentajes de quemado del carbón (*burnout*) en la chimenea muy altos (mayores a 98%) y de hecho para 25% carbón se ha obtenido el mayor porcentaje de quemado del carbón, lo cual indica que para bajas concentraciones de carbón el gas natural si puede contribuir a que haya un mayor quemado del carbón.
- En cuanto a distribución de la zona de reacción se observó por medio de las mediciones de quimioluminiscencia espontanea haciendo uso del filtro para la señal de CH^* , que efectivamente para los casos de modo llama la zona de reacción es más intensa y está confinada en una zona más pequeña, mientras que para los casos de modo sin llama en general se obtuvieron zonas de reacción distribuidas a lo largo de la cámara de combustión.
- Finalmente, por medio de la técnica de Mie *scattering* se midió de forma cualitativa la concentración del jet de carbón pulverizado a lo largo de las 2 primeras ventanas en la cámara de combustión, obteniéndose que para el caso de modo llama con 100% carbón la estructura del jet de carbón se conserva en una mayor distancia en comparación al caso de 100% carbón pulverizado en modo sin llama, donde la estructura del jet en la primera ventana ya se ha dispersado casi en su totalidad. Adicionalmente, para el caso de 50% carbón en modo sin llama se ha obtenido que incluso en la primera ventana donde se hizo la medición, la estructura del jet de carbón es apenas reconocible, lo cual se debe a que probablemente la recirculación provocada por el jet de gas natural (el cual está bastante cerca y se descarga a alta velocidad) ha contribuido a dispersar el jet de carbón, razón por la cual se observa una concentración de las partículas de carbón mucho más uniforme para este caso.

Capítulo 6

Conclusiones

En este trabajo se desarrolló el estudio numérico y experimental de mezclas de carbón pulverizado (CP) con gas natural (GN) en condiciones de combustión sin llama manteniendo una potencia térmica constante de 28 kW y un factor de aireación de 1.2 para todas las condiciones evaluadas.

Las mezclas analizadas fueron 100 % GN - 0 % CP, 75 % GN - 25 % CP, 50 % GN - 50 % CP, 25 % GN - 75 % CP, y 0 % GN - 100 % CP, donde los porcentajes corresponden al porcentaje de energía aportada por cada combustible en base al poder calorífico inferior.

Adicionalmente, con el fin de realizar comparaciones se analizaron también 2 casos de combustión convencional, uno con 100 % gas natural y otro con 100 % carbón pulverizado, manteniendo las condiciones de potencia térmica y factor de aireación igual a los valores usados para combustión sin llama.

En este capítulo básicamente se han retomando las conclusiones que ya se habían consignado en los capítulos anteriores.

Numéricamente se realizaron simulaciones por medio del software Fluent donde se evaluó el efecto de la variación de la distancia de las boquillas de aire de combustión y la variación del diámetro de dichas boquillas, esto con el fin de encontrar cual es la configuración del quemador que conduce a propiedades características de la combustión sin llama, como son la uniformidad de la temperatura y un alto factor de recirculación, donde la mejor geometría hallada numéricamente fue analizada también experimentalmente.

De los resultados de las simulaciones fluido-dinámicas realizadas en el software Fluent se concluye que aunque en general con todas las configuraciones probadas se obtienen temperaturas uniformes y zonas de reacción muy distribuidas, la geometría que presenta mejores características es la geometría donde la distancia de las boquillas de aire es mayor (240 mm) y donde el diámetro de dichas boquillas es menor (10.9 mm) debido principalmente al hecho de que esto maximiza el factor de recirculación, lo cual experimentalmente debe conducir a obtener de forma estable el régimen de combustión sin llama para las diferentes mezclas de carbón pulverizado con gas natural, de tal forma que esta ha sido la geometría seleccionada para realizar las mediciones experimentales.

Por otro lado, con el fin de dar soporte a las simulaciones numéricas de Fluent, se realizaron una serie de simulaciones en un software llamado SKIPPY, el cual permite analizar con cierto grado de detalle el proceso de quemado del carbonizado en estado estable, empleando mecanismos detallados gaseosos para la capa límite y mecanismos de fase heterogénea para la partícula porosa. Para estas simulaciones las condiciones de frontera se basaron en los resultados de la atmósfera que rodea las partículas tomados de las simulaciones de Fluent.

De estas simulaciones se ha concluido que:

- Para las partículas pequeñas ($15.2 \mu\text{m}$) el quemado del carbonizado (*char burnout*) tiende a disminuir a medida que aumenta el porcentaje de carbón, lo cual indicaría un efecto positivo del metano para ayudar a quemar el carbón, pero para las partículas más grandes (95 y $243.2 \mu\text{m}$) este comportamiento se conserva solo hasta 75 % carbón, ya que para 100 % carbón el quemado del carbonizado es significativamente más rápido en comparación a los otros porcentajes de carbón y esto se debe a que en dicha condición el porcentaje de oxígeno medio a lo largo de las trayectorias de las partículas se mantiene en un valor algo mayor en comparación a los demás porcentajes de carbón.
- También es notable que en SKIPPY, para las partículas pequeñas, el tiempo que éstas tardan en consumirse es bastante mayor que el resultado obtenido en Fluent, aunque cuando se observa el

comportamiento con las partículas medianas el tiempo final obtenido no difiere mucho del de Fluent, pero en las primeras etapas del quemado del carbonizado el consumo de la partícula es más rápido para las simulaciones de SKIPPY.

- Finalmente, se observó que en base al modelo de SKIPPY, el aumento de la concentración de metano en la condición de frontera de la capa límite no tiene un efecto muy significativo ni sobre los perfiles de temperatura ni sobre la fracción másica de oxígeno, pero al aumentar la temperatura de la capa límite si se notó un efecto importante, lo cual cambió el régimen de quemado del carbonizado de un régimen 2 (mixto) a un régimen 3, el cual es controlado por la tasa de difusión del oxígeno en la capa límite.

Adicional al análisis numérico se realizó un trabajo experimental, donde se realizaron mediciones de temperatura y especies químicas al interior de la cámara de combustión así como en la chimenea. También, con el fin de caracterizar mejor las condiciones evaluadas se realizaron mediciones de quimioluminiscencia espontánea para captar la señal de radicales OH^* y CH^* , y se usó la técnica de Mie *scattering* para ver de forma cualitativa la estructura del jet de carbón pulverizado.

En cuanto a los resultados experimentales se concluye que:

- Se considera que se ha obtenido el régimen de combustión sin llama tanto para carbón pulverizado como para las mezclas de carbón pulverizado con gas natural, lo cual se considera así por varias razones, entre las que se cuentan que la señal de OH^* y CH^* se encuentra bastante distribuida a lo largo de la cámara de combustión, además, la temperatura también ha sido muy uniforme y que la concentración de NO ha sido reducida de forma considerable tanto al interior de la cámara de combustión como en la chimenea.
- Para las mediciones de temperatura al interior de la cámara de combustión se obtuvieron resultados bastante similares al comparar las diferentes condiciones evaluadas, donde para los casos de combustión sin llama, las temperaturas tienden a ser menores (del orden de 1000 K) en las cercanías del quemador y un poco mayores al final de la cámara de combustión (cercanas a 1200 K), lo cual se debe principalmente a que en este régimen de combustión la zona de reacción no se encuentra anclada al quemador. Por otro lado, se ha obtenido que para los casos de combustión en modo llama las temperaturas no son mucho mayores que las temperaturas en combustión sin llama, aunque para 100 % gas natural en modo llama la temperatura es mayor cerca al quemador y disminuye al aumentar la distancia al mismo, lo cual es esperado debido a que en este caso la llama está anclada a la boquilla del quemador y probablemente en dicha zona (no medido) la temperatura es bastante más alta a las temperaturas de combustión sin llama.
- En cuanto a la concentración de oxígeno al interior de la cámara de combustión se observó que nuevamente las concentraciones oxígeno al interior del horno son bastante similares en los casos de combustión sin llama, aunque para 100 % carbón, la concentración ha sido algo mayor que en los demás casos de mezclas gas natural-carbón pulverizado en modo sin llama. También, se obtuvo que para 100 % carbón en modo llama la concentración de oxígeno ha sido en general mayor a los casos de combustión sin llama.
- Con respecto a la concentración de CO al interior de la cámara de combustión se observó que para todos los casos de combustión sin llama la concentración de CO al final de la cámara desciende a valores cercanos a 0 ppm, lo cual es importante porque es un indicio de que el carbón en todas estas condiciones se está quemando bastante bien. Por otro lado, para el caso de 100 % carbón en modo llama la concentración de CO en la zona final de la cámara de combustión permanece bastante alta (entre 1000 y 3000 ppm) lo cual significaría que en este caso se requiere una longitud mayor para quemar el carbón completamente.
- Adicionalmente, en cuanto a la concentración de NO al interior de la cámara de combustión se obtuvo una concentración de prácticamente 0 ppm de NO para el caso de 100 % gas natural en modo sin llama, mientras que para 100 % gas natural en modo llama la concentración estuvo cerca de 30 ppm a lo largo de casi toda la cámara de combustión. Por otro lado, para los casos de combustión sin llama que incluyen carbón pulverizado se han obtenido concentraciones de NO bastante similares entre los diferentes casos, con concentraciones de aproximadamente 50 ppm cerca al quemador, las cuales aumentan hasta aproximadamente 150 ppm al final de la cámara de combustión. También, para el caso de 100 % carbón en modo llama se han obtenido concentraciones de NO bastante más altas en comparación a los casos de combustión sin llama, con concentraciones del orden de 150 ppm cerca al quemador, que aumentan hasta 400 ppm al final del horno. Este es un resultado bastante importante porque muestra que efectivamente para carbón pulverizado y las mezclas de carbón pulverizado-gas natural las concentraciones de NO se reducen de forma significativamente en el régimen de combustión sin llama.

-
- También, se observó que con el modelo numérico de Fluent se obtuvieron predicciones bastante aceptables con respecto a los resultados experimentales, especialmente para la temperatura y las concentraciones de O_2 y CO_2 , pero el modelo tiene a hacer una sobre-estimación de la concentración de CO , lo cual se debe a que el modelo hace uso de un mecanismo de reacción global.
 - Por otro lado, para todos los casos, tanto de combustión sin llama como en modo llama, se obtuvieron porcentajes de quemado del carbón (*burnout*) en la chimenea muy altos (mayores a 98%) y de hecho para 25% carbón se ha obtenido el mayor porcentaje de quemado del carbón, lo cual indica que para bajas concentraciones de carbón el gas natural si puede contribuir a que haya un mayor quemado del carbón.
 - En cuanto a distribución de la zona de reacción se observó por medio de las mediciones de quimioluminiscencia espontanea haciendo uso del filtro para la señal de CH^* , que efectivamente para los casos de modo llama la zona de reacción es más intensa y está confinada en una zona más pequeña, mientras que para los casos de modo sin llama en general se obtuvieron zonas de reacción distribuidas a lo largo de la cámara de combustión.
 - Finalmente, por medio de la técnica de Mie *scattering* se midió de forma cualitativa la concentración del jet de carbón pulverizado a lo largo de las 2 primeras ventanas en la cámara de combustión, obteniéndose que para el caso de modo llama con 100% carbón la estructura del jet de carbón se conserva en una mayor distancia en comparación al caso de 100% carbón pulverizado en modo sin llama, donde la estructura del jet en la primera ventana ya se ha dispersado casi en su totalidad. Adicionalmente, para el caso de 50% carbón en modo sin llama se ha obtenido que incluso en la primera ventana donde se hizo la medición, la estructura del jet de carbón es apenas reconocible, lo cual se debe a que probablemente la recirculación provocada por el jet de gas natural (el cual está bastante cerca y se descarga a alta velocidad) ha contribuido a dispersar el jet de carbón, razón por la cual se observa una concentración de las partículas de carbón mucho más uniforme para este caso.

Apéndice A

Detalle del modelo matemático implementado en Fluent

A continuación se presentan las ecuaciones que hacen parte del modelo de Fluent por medio del cual se simuló el proceso de combustión de las mezclas de gas natural y carbón pulverizado, el cual fue descrito en la Sección 3.2.

En primer lugar, se parte de las ecuaciones de conservación promediadas temporalmente y en estado estable, las cuales son:

Conservación de la masa

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial x_i} = \bar{S}_c \quad (\text{A.1})$$

Debe notarse que en este caso el término temporal es igual a 0, además, esta ecuación no es igual a 0, sino que tiene un término fuente (\bar{S}_c) el cual es la masa adicionada por las partículas debido a la volatilización y al quemado del carbonizado. También, debe notarse que se está haciendo uso de la notación de sumatorias.

En la ecuación anterior y en las ecuaciones subsiguientes la barra recta sobre la densidad ($\bar{\rho}$) corresponde al promedio temporal de dicha variable, mientras que la barra curva, en este caso sobre la velocidad (\tilde{u}), es la media de Favre, la cual viene dada por la ecuación A.2.

$$\tilde{u} = \frac{\bar{\rho} \tilde{u}}{\bar{\rho}} \quad (\text{A.2})$$

Conservación del *momentum*

En la Ecuación A.3 se presenta la expresión de conservación de la cantidad de movimiento promediada y en estado estable donde se observa que debido al proceso de promediación aparece un término, el cual está en función de las fluctuaciones de la velocidad ($\overline{\rho u_j'' u_i''}$), el cual da cuenta del efecto de la turbulencia sobre el flujo medio.

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{u}_i) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\mu} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \bar{\mu} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] - \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho u_j'' u_i''}) \quad (\text{A.3})$$

Para representar el tensor de esfuerzos turbulentos $-\overline{\rho u_j'' u_i''}$ se hace uso de la hipótesis de Bousinesq [137] (Ecuación A.4), de tal forma que dicho tensor se expresa en términos de las propiedades medias del flujo, de la energía cinética turbulenta (k) y de μ_t , la cual es un símil con la viscosidad del fluido, la cual se conoce como viscosidad turbulenta, y Con el fin de poder hallar estas últimas 2 variables, es necesario hacer uso de un modelo de turbulencia.

$$-\overline{\rho u_j'' u_i''} = \mu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \left(\bar{\rho} k + \mu_t \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \quad (\text{A.4})$$

Conservación de la energía

De forma similar que con la ecuación de conservación de la cantidad de movimiento (Ecuación A.3), al promediar la ecuación de la energía aparece un término el cual da cuenta del efecto de la turbulencia sobre la energía del flujo (Ecuación A.5) y de forma similar, dicho término es expresado en términos del gradiente de entalpía total (h_t) y de la viscosidad turbulenta (μ_t) (Ecuación A.7). Adicionalmente, aparece el número de Prandtl turbulento (Pr_t), para el cual se ha usado un valor de 0.85.

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{h}_t) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{k} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_j} + \bar{\rho} \sum_{m=1}^N \tilde{h}_m D_m \frac{\partial \tilde{Y}_m}{\partial x_j} \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\mu} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \bar{\mu} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] \tilde{u}_i - \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho u_j'' h_t''}) \quad (\text{A.5})$$

$$h_t = h_s + \sum_{m=1}^N \Delta h_{f,R}^{\circ} Y_k + \frac{1}{2} u_i u_i \quad (\text{A.6})$$

$$\overline{\rho u_j'' h_t''} = - \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial \tilde{h}_t}{\partial x_i} \quad (\text{A.7})$$

Conservación de las especies

En la Ecuación A.8 se presenta la ecuación de conservación de las especies químicas en estado estable y promediada temporalmente. En esta ecuación se ha usado un enfoque de difusividad promedio de la especie k en la mezcla (D_k) y el término que da cuenta del efecto de la turbulencia sobre el transporte de las especies ha sido expresado de una forma similar a la usada para la ecuación de la energía (Ecuación A.9). Adicionalmente, para el término R_k , el cual es la producción y destrucción de especies, debe usarse un modelo de combustión que de cuenta de la interacción entre la turbulencia y las reacciones químicas.

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_k}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} D_k \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i} \right) + R_k - \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho u_j'' Y_k''}) \quad (\text{A.8})$$

$$\overline{\rho u_j'' Y_k''} = - \frac{\mu_t}{Sc_t} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i} \quad (\text{A.9})$$

Modelo de turbulencia k- ε estándar

Como se expresó en el apartado de conservación de la cantidad de movimiento, debe usarse un modelo para poder calcular μ_t y k. En este caso, se ha usado el modelo k- ε estándar donde μ_t se calcula en términos de k y ε (tasa de disipación de la energía cinética turbulenta, Ecuación A.10).

Adicionalmente, las variables k y ε son calculadas por medio de las ecuaciones de transporte A.11 y A.12.

$$\mu_t = \bar{\rho} C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (\text{A.10})$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} k \tilde{u}_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\bar{\mu} + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + 2\mu_t S_{ij} S_{ij} - g_i \frac{\mu_t}{\bar{\rho} Pr_t} \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial x_i} - \bar{\rho} \varepsilon \quad (\text{A.11})$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \varepsilon \tilde{u}_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\bar{\mu} + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} \left(2\mu_t S_{ij} S_{ij} - C_{3\varepsilon} g_i \frac{\mu_t}{\bar{\rho} Pr_t} \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial x_i} \right) - C_{2\varepsilon} \bar{\rho} \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (\text{A.12})$$

Modelo de interacción turbulencia-combustión EDC

Por otro lado, para calcular el término R_k en la Ecuación A.8, se ha usado el modelo EDC (*Eddy Dissipation Concept*), el cual asume que las reacciones ocurren en las pequeñas escalas de turbulencia en un reactor a

presión constante, con condiciones iniciales tomadas como la concentración de especies y la temperatura en cada celda al inicio del cálculo.

El término R_k es calculado por medio de la expresión dada en la Ecuación A.13. Donde Y_k^* es la fracción másica de la especie k después de reaccionar un tiempo τ^* (Ecuación A.14), cuyas reacciones son gobernadas por tasas tipo Arrhenius (Ecuación A.16). La fracción de volumen de la escalas de turbulencia pequeñas es calculada como ξ^{*3} , donde ξ^* viene dado por la Ecuación A.15.

$$R_k = \frac{\bar{\rho}(\xi^*)^2}{\tau^* [1 - (\xi^*)^3]} (Y_k^* - Y_k) \quad (\text{A.13})$$

$$\tau^* = C_\tau \left(\frac{\nu}{\varepsilon} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{A.14})$$

$$\xi^* = C_\xi \left(\frac{\nu \varepsilon}{k^2} \right)^{\frac{1}{4}} \quad (\text{A.15})$$

$$\hat{R}_{k,r} = (\nu''_{k,r} - \nu'_{k,r}) \left(A_r T^{\beta_r} e^{-\frac{E_r}{RT}} \prod_{j=1}^N [C_{j,r}]^{\eta'_{j,r}} \right) \quad (\text{A.16})$$

Modelo de radiación de ordenadas discretas

Adicionalmente, se hace uso del modelo de radiación de ordenadas discretas, con el fin de describir la transferencia de calor al interior de la cámara de combustión de una forma más adecuada.

Este modelo hace una simplificación de la ecuación de transferencia radiativa al considerar dicha ecuación como una ecuación de campo en la dirección \vec{s} , de tal modo que la ecuación de transferencia radiativa se reduce a la Ecuación A.17, donde no se han considerado efectos de dispersión de la radiación (*scattering*) por las partículas y adicionalmente, la absorptividad se calcula como la suma de la absorptividad del gas (a) y la absorptividad de las partículas (a_p), donde esta última viene dada por la Ecuación A.19. Por otro lado, la emisión equivalente de las partículas (E_p) se calcula por medio de la Ecuación A.18.

$$\frac{\partial I s_i}{\partial x_i} + (a + a_p)I = a \frac{\sigma T^4}{4\pi} + E_p \quad (\text{A.17})$$

$$E_p = \lim_{V \rightarrow 0} \sum_{n=1}^N \left(\epsilon_{pn} A_{pn} \frac{\sigma T_{pn}^4}{\pi V} \right) \quad (\text{A.18})$$

$$a_p = \lim_{V \rightarrow 0} \sum_{n=1}^N \epsilon_{pn} \frac{A_{pn}}{V} \quad (\text{A.19})$$

Con el fin de calcular el coeficiente de absorción de los gases se hace uso del modelo de suma ponderada de gases grises, el cual se halla por medio de la Ecuación A.20, donde el término ϵ se calcula por medio de la Ecuación A.21, cuyos coeficientes de ponderación de la mezcla ($a_{\epsilon,i}$), son calculados por medio de polinomios (Ecuación A.22), donde los coeficientes de dichos polinomios ($b_{\epsilon,i,j}$) son obtenidos por ajuste con respecto a datos experimentales.

$$a = -\frac{\ln(1 - \epsilon)}{s} \quad (\text{A.20})$$

$$\epsilon = \sum_{i=0}^I a_{\epsilon,i} (1 - e^{-\kappa_i p s}) \quad (\text{A.21})$$

$$a_{\epsilon,i} = \sum_{j=1}^J b_{\epsilon,i,j} T^{j-1} \quad (\text{A.22})$$

Modelo de fase discreta

En las secciones anteriores se mostraron las ecuaciones que se usan para calcular las propiedades del flujo homogéneo el cual se rige principalmente por las ecuaciones de transporte. En las próximas secciones se muestran los modelos usados para hacer el cálculo de las trayectorias de las partículas de carbón pulverizado y los procesos que sufren dichas partículas al interior de la cámara de combustión.

El cálculo de las trayectorias de las partículas se hace por medio de la integración del balance de fuerzas sobre las partículas, donde dicho balance de fuerzas es igual a la inercia de la partículas. Esto viene dado por la Ecuación A.23, en la cual solo se están considerando la fuerza de arrastre y de gravedad sobre cada partícula.

$$\frac{du_p}{dt} = \frac{18\bar{\mu}}{\rho_p d_p^2} \frac{C_D Re_p}{24} (u - u_p) + \frac{g_y (\rho_p - \bar{\rho})}{\rho_p} \quad (\text{A.23})$$

$$Re_p = \frac{\bar{\rho} d_p |u_p - u|}{\bar{\mu}} \quad (\text{A.24})$$

$$C_D = \frac{24}{Re_p} (1 + b_1 Re_p^{b_2}) + \frac{b_3 Re_p}{b_4 + Re_p} \quad (\text{A.25})$$

$$b_1 = \exp(2.3288 - 6.4581\phi + 2.4486\phi^2) \quad (\text{A.26})$$

$$b_2 = 0.0964 + 0.5565\phi \quad (\text{A.27})$$

$$b_3 = \exp(4.905 - 13.8944\phi + 18.4222\phi^2 - 10.2599\phi^3) \quad (\text{A.28})$$

$$b_4 = \exp(1.4681 + 12.2584\phi - 20.7322\phi^2 + 15.8855\phi^3) \quad (\text{A.29})$$

Donde ϕ es el factor de forma de la partícula.

Dispersión turbulenta de las partículas

Para generar la dispersión de las partículas debida a la turbulencia se ha usado el modelo *random walk*, el cual incluye el efecto de las fluctuaciones instantáneas de la velocidad sobre las trayectorias de las partículas por medio del uso de métodos estadísticos.

En primer lugar, el modelo se basa en que la difusividad de las partículas está dada por $\overline{u_i'' u_j''} T_L$, donde T_L es el tiempo integral, el cual para el modelo k- ϵ estándar se puede calcular por medio de la Ecuación A.30.

$$T_L \approx 0.30 \frac{k}{\epsilon} \quad (\text{A.30})$$

En este modelo, se emula la interacción de una partícula con los *eddies* de la fase homogénea turbulenta, donde dichos *eddies* son caracterizados por una escala de tiempo (τ_e) y por una distribución Gausiana aleatoria de la fluctuación de la velocidad (u_x'' , u_y'' y u_z'').

donde los valores de u_i'' son recalculados cada τ_e y son dados por la Ecuación A.31

$$u_i'' = \zeta \sqrt{\frac{2k}{3}} \quad (\text{A.31})$$

donde ζ es un número aleatorio distribuido normalmente, y el tiempo característico τ_e se calcula como:

$$\tau_e = 2T_L \quad (\text{A.32})$$

De tal forma que cuando en la trayectoria de la partícula se alcanza el tiempo τ_e entonces se obtiene un nuevo valor de ζ para calcular un nuevo valor de velocidad instantánea ($\tilde{u}_i + u_i''$).

Acople entre fase discreta y fase continua

Debido a que las partículas liberan masa y son reactivas, entonces se considera que no solo el flujo afecta las partículas, sino que también las partículas afectan las características del flujo, y esto se conoce como acople de dos vías, significando que hay un intercambio de cantidad de movimiento, energía y masa entre las partículas y el fluido que las rodea.

Así, en la Ecuación de cantidad de movimiento (Ecuación A.3) se debe incluir un término fuente dado por la Ecuación A.33.

$$S_m = \sum \left[\frac{18\mu C_D Re}{24\rho_p d_p^2} (u_p - u) + \frac{g_y (\rho_p - \rho)}{\rho_p} \right] \dot{m}_p \Delta t \quad (\text{A.33})$$

En la ecuación de conservación de la energía (Ecuación A.5) se incluye como término fuente la Ecuación A.34.

$$S_q = (m_{p_{in}} - m_{p_{out}}) [-H_{lat_{ref}} + H_{vol}] - m_{p_{out}} \int_{T_{ref}}^{T_{p_{out}}} c_{p_p} dT + m_{p_{in}} \int_{T_{ref}}^{T_{p_{in}}} c_{p_p} dT \quad (\text{A.34})$$

Y el término fuente en la ecuación de conservación de la masa (Ecuación A.1) está dado por la Ecuación A.35.

$$S_c = \frac{\Delta m_p}{m_{p,0}} \dot{m}_{p,0} \quad (\text{A.35})$$

Procesos en las partículas y transferencia de calor en las mismas

Mientras la partícula no sufre ningún proceso al interior de la cámara de combustión, ésta solamente se calienta o se enfría de acuerdo a la Ecuación A.36.

$$m_p c_p \frac{dT_p}{dt} = h A_p (T_\infty - T_p) + \epsilon_p A_p \sigma (\theta_R^4 - T_p^4) \quad (\text{A.36})$$

Con $\theta_R = (G/4\sigma)^{1/4}$, donde G es la radiación incidente.

Adicionalmente, h es evaluado por medio de la correlación de Ranz y Marshall [82, 83] (Ecuación A.37).

$$Nu = \frac{h d_p}{k_\infty} = 2.0 + 0.6 Re_p^{1/2} Pr^{1/3} \quad (\text{A.37})$$

Secado

Cuando la temperatura de la partícula alcanza la temperatura de ebullición del agua y la partícula aún contiene agua, entonces se da el proceso de secado y el cual se lleva a cabo hasta el momento en que el agua se evapora completamente. En este caso el cambio de la masa de la partícula se obtiene por medio de la Ecuación A.38, y adicionalmente se considera que la partícula permanece a la temperatura de ebullición del agua.

$$-\frac{dm_p}{dt} h_{fg} = h A_p (T_\infty - T_p) + \epsilon_p A_p \sigma (\theta_R^4 - T_p^4) \quad (\text{A.38})$$

Volatilización

El proceso de volatilización para cada partícula inicia en el momento en que la temperatura de la misma es igual o mayor a la temperatura de volatilización y se lleva a cabo mientras la partícula aún tenga alguna cantidad de volátiles. Las Ecuaciones A.39, A.40 y A.41 corresponden al modelo de volatilización de dos tasas que compiten entre sí (*two competing rates*), el cual ha sido usado en este trabajo. Donde m_v es la masa instantánea de volátiles, $f_{w,0}$ es la fracción másica inicial de agua en las partículas, $m_{p,0}$ es la masa inicial de las partículas y m_a es la masa de ceniza en las partículas.

$$k_1 = A_1 e^{-E_1/RT_p} \quad (\text{A.39})$$

$$k_2 = A_2 e^{-E_2/RT_p} \quad (\text{A.40})$$

$$\frac{m_v(t)}{(1 - f_{w,0})m_{p,0} - m_a} = \int_0^t (\alpha_1 k_1 + \alpha_2 k_2) \exp\left(-\int_0^t (k_1 + k_2) dt\right) dt \quad (\text{A.41})$$

Cuando las partículas están sufriendo el proceso de volatilización, la temperatura de las mismas es calculada por medio de la Ecuación A.42 la cual similar a la Ecuación A.36 con la diferencia de que aparece un término el cual contiene el parámetro h_{vol} , el cual corresponde a la energía requerida para volatilizar las partículas.

$$m_p c_p \frac{dT_p}{dt} = h A_p (T_\infty - T_p) + \frac{dm_p}{dt} h_{vol} + \epsilon_p A_p \sigma (\theta_R^4 - T_p^4) \quad (\text{A.42})$$

Quemado del carbonizado

Para el quemado del carbonizado se ha usado el modelo de reacciones de superficie múltiples el cual para cada reacción heterogénea es expresado por medio de la Ecuación A.43, donde $R_{j,r}$ es la tasa de liberación en la superficie de la especie j (kg/s). η_r es el factor de efectividad de la reacción de superficie r , el cual en este caso se ha asumido igual a 1 para las 3 reacciones heterogéneas evaluadas en este trabajo.

Este modelo involucra tanto la difusividad de las especies gaseosas hacia la partícula (Ecuación A.44), así como la cinética intrínseca del carbonizado (Ecuación A.45).

$$R_{j,r} = A_p \eta_r Y_j \rho_n \frac{k_{kin,r} D_{0,r}}{D_{0,r} + k_{kin,r}} \quad (\text{A.43})$$

$$D_{0,r} = C_{1,r} \frac{[(T_p + T_\infty)/2]^{0.75}}{d_p} \quad (\text{A.44})$$

$$k_{kin,r} = A_r T^{\beta_r} e^{-(E_r/RT)} \quad (\text{A.45})$$

Para el cálculo de la temperatura de la partícula se hace uso de la Ecuación A.46, donde aparece un término que contiene el parámetro H_{reac} , el cual es el calor liberado por las reacciones de superficie el cual se ha asumido que en su totalidad permanece en la partícula.

$$m_p c_p \frac{dT_p}{dt} = h A_p (T_\infty - T_p) + \frac{dm_p}{dt} H_{reac} + \epsilon_p A_p \sigma (\theta_R^4 - T_p^4) \quad (\text{A.46})$$

Apéndice B

Código tratamiento de imágenes de quimioluminiscencia

Scrip principal

```
1 %%Este script es usado para obtener una imagen promedio filtrada. se
2 %recomienda usar primero el script comparacion_PSD, el cual permite
3 %comparar la densidad espectral de la imagen promedio y del background con
4 %el fin de seleccionar la frecuencia a partir de la cual se van a filtrar
5 % las imagenes.
6 %% -----
7 % Creado por Juan Camilo Lezcano
8 % Grupo GASURE
9 % Universidad de Antioquia
10 % 2016-10-04
11
12
13 %% -----
14 clear all
15
16 prompt = [ 'Antes de ejecutar este script, \n', ...
17           'se recomienda ejecutar el script comparacion_PSD, \n', ...
18           'el cual es util para seleccionar la frecuencia de filtrado.\n\n'];
19 fprintf(prompt)
20
21 [imagenes, ruta, nombre_archivo] = funcion_convert_spe_2_matlab();
22 [imagen_promedio] = funcion_matriz_imagen_promedio(imagenes);
23 [bkg, ~, ~] = funcion_convert_spe_2_matlab([], ruta);
24 [bkg_promedio] = funcion_matriz_imagen_promedio(bkg);
25 [promedio_restado] = funcion_imagen_promedio_sin_background(imagen_promedio, bkg_promedio);
26
27 prompt = 'Ingrese la frecuencia de corte (valor por defecto, 0.01): ';
28 cut_off = input(prompt);
29
30 [imagen_filtrada] = funcion_imagen_filtrada(promedio_restado, cut_off);
31
32 map = jet;
33 imagesc(imagen_filtrada)
34 colorbar
35 colormap(map)
36 axis off
37 filename=[nombre_archivo, '_average_filtrada'];
38 print(filename, '-dpng')
```

Funciones

```
1 function [frames_all, pathname, name] = funcion_convert_spe_2_matlab(texto, path)
2 %% Esta funcion es usada para seleccionar el archivo .SPE que se quiere
3 % importar a Matlab. Esta funcion requiere hacer uso del archivo SpeReader.
4
5 % input:
6 % texto: argumento opcional para informar al usuario que tipo de archivo
7 % debe seleccionar.
8 % path: argumento opcional que contiene la direccion a una carpeta
```

```

9 % especifica , sino se indica la direccion , se toma dicha variable
10 % como la carpeta actual de trabajo.
11 % output:
12 % frames_all: matriz de 4 dimensiones que contiene cada imagen tomada con
13 % la camara ICCD.
14 % pathname: direccion en la cual se encuentra el archivo .SPE seleccionado.
15 % name: nombre del archivo .SPE que fue seleccionado.
16 %% -----
17 % Creado por:
18 % Juan Camilo Lezcano
19 % Grupo GASURE
20 % Universidad de Antioquia
21 % 2016-09-28
22 %% -----
23 if nargin < 1
24     texto = 'Seleccione el archivo .SPE';
25 end
26 if nargin < 2
27     path = pwd;
28 end
29
30
31 [file_to_process ,pathname]=uigetfile('*.SPE',texto , path);
32 path_file = [pathname file_to_process];
33
34 if isequal(file_to_process ,0)
35     disp('El usuario selecciono Cancelar')
36     return
37 else
38     disp(['El usuario selecciono ', fullfile(pathname, file_to_process)])
39 end
40
41 %% -----
42 [~,name,~]=fileparts(path_file);
43 objvar=SpeReader(path_file);
44 frames_all=read(objvar); %creates a matrix 4-D containing the pictures
45
46 end

```

```

1 function [imagen_promedio] = funcion_matriz_imagen_promedio(framesAll)
2 %Crea una matriz con la informacion de la imagen promedio obtenida de
3 % las imagenes tomadas con la camara ICCD.
4
5 %input:
6 % framesAll: matriz 4D obtenida por medio de la funcion
7 % convert_spe_2_matlab.
8 %output:
9 % imagen_promedio: matriz con la informacion promedio de la variable
10 % framesAll
11 %% -----
12 % Creado por Juan Camilo Lezcano
13 % Grupo GASURE
14 % Universidad de Antioquia
15 % 2016-09-28
16
17 %% -----
18 imagen_promedio = mean(framesAll ,4);
19 end

```

```

1 function [imagen_restada] = funcion_imagen_promedio_sin_background(average_image ,
2     average_image_bkg)
3
4 %% -----
5 imagen_restada = average_image - average_image_bkg;
6
7
8 end

```

```

1 function [imagen_filtrada] = funcion_imagen_filtrada(AverageImage , cut_off)
2 %Esta funcion se usa para filtrar las imagenes con una frecuencia deseada
3

```

```

4 %input:
5 % AverageImage: matriz 2D que contiene la informacion de la imagen
6 % promedio.
7 % cut_off: valor de frecuencia a partir del cual se va a aplicar el filtro
8 % a la imagen.
9 %output:
10 % imagen_filtrada: matriz 2D filtrada en base a la frecuencia cut_off.
11 %
12
13 %% -----
14 %Creado por Juan Camilo Lezcano
15 %Grupo GASURE
16 %Universidad de Antioquia
17 %2016-09-28
18
19 %% -----
20 if isempty(cut_off)
21     cut_off = 0.01;
22 end
23
24
25 K0 = cut_off;
26
27 fourier_image = fft2(AverageImage);
28
29 method = 2;
30
31 [N,M] = size(AverageImage);
32
33 dx = 1;
34 dy = 1;
35 %Characteristic wavelengths
36 KX0 = (mod(1/2 + (0:(M-1))/M, 1) - 1/2);
37 KX1 = KX0 * (2*pi/dx);
38 KY0 = (mod(1/2 + (0:(N-1))/N, 1) - 1/2);
39 KY1 = KY0 * (2*pi/dy);
40 [KX,KY] = meshgrid(KX1,KY1);
41 %Filter formulation
42
43 switch method
44     case 1
45         %% Cut-off low pass filter
46         lpf = (KX.*KX + KY.*KY < K0^2);
47
48     case 2
49         %% Smoothed low pass filter
50         lpf = zeros(1024);
51         tolerance = 0.8*K0;
52
53         for i = 1 : N
54             for j = 1 : M
55                 frequency = KX(i,j)^2 + KY(i,j)^2;
56                 if (frequency < (cut_off - tolerance))
57                     lpf(i,j) = 1;
58                 elseif (frequency > (cut_off + tolerance))
59                     lpf(i,j) = 0;
60                 else
61                     lpf(i,j) = 0.5*(1-sin(pi*(frequency - cut_off)/(2*tolerance)));
62                 end
63             end
64         end
65
66     case 3
67         %% low pass filter with linear high frequency reconstruction
68         higher_frequency = max(max(KX.*KX + KY.*KY));
69         lpf = zeros(1024);
70         for i = 1 : N
71             for j = 1 : M
72                 frequency = KX(i,j)^2 + KY(i,j)^2;
73                 if (frequency < cut_off)
74                     lpf(i,j) = 1;
75                 else

```

```
76         lpf(i,j) = (higher_frecuency - frecuency)/(higher_frecuency - cut_off);
77     end
78 end
79 end
80
81 otherwise
82     disp('Valor invalido')
83     return
84 end
85
86
87
88 imagen_filtrada = ifft2(lpf.*fourier_image);
89
90
91 end
```

Apéndice C

Funciones Definidas por el Usuario (UDF's)

A continuación se presenta la UDF que fue implementada en Fluent para obtener los datos de temperatura y especies que rodean las partículas de carbonizado a lo largo de sus trayectorias para ser usados como condición de frontera en las simulaciones de SKIPPY. Los datos son tomados cada 100 ms iniciando justo cuando inicia el proceso de quemado del carbonizado.

```
1 #include "udf.h"
2 /*****
3 /* UDF para Almacenar en un archivo la temperatura y las especies de la
4 atmosfera que rodea la particula en un tiempo deseado despues de que inicial el char burnout.
5
6 Uso: Compilar la funcion , y ponerla en: Reports -> Sample -> User-Defined Functions .
7 Seleccionar en Boundaries y la inyeccion a muestrear
8 En la linea 87 modificar el numero 2.5 por el tiempo deseado en segundos
9 despues de que inicia el char burnout.
10
11 Camilo Lezcano
12 Universidad de Antioquia
13 Grupo GASURE
14 2017-01-31
15 Fluent v17.1 */
16 /*****
17 int var1;
18 real var2;
19
20 #define REMOVE_PARTICLES FALSE
21 DEFINE_DPM_OUTPUT(dpm_char_sample_plus, header, fp, p, t, plane)
22 {
23 #if RP_2D
24 real y;
25 if(header)
26 {
27 par_fprintf_head(fp, "#Time[s] R [m] X-velocity [m/s]");
28 par_fprintf_head(fp, " W-velocity [m/s] R-velocity [m/s] ");
29 par_fprintf_head(fp, "Drop Diameter[m] Number of Drops ");
30 par_fprintf_head(fp, "Temperature [K] Initial Diam [m] ");
31 par_fprintf_head(fp, "Injection Time [s] \n");
32 }
33 if(NULLP(p))
34 return;
35 if (rp_axi && (sg_swirl || rp_ke))
36 y = MAX(sqrt(SQR(P_POS(p)[1]) + SQR(P_POS(p)[2])), DPM_SMALL);
37 else
38 y = P_POS(p)[1];
39 par_fprintf(fp, "%d %d int64_fmt " %f %f %f %f %e %e %f %e %f \n",
40 P_INJ_ID(P_INJECTION(p)), p->part_id, P_TIME(p), y, P_VEL(p)[0],
41 P_VEL(p)[1], P_VEL(p)[2], P_DIAM(p), P_N(p),
42 P_T(p), P_INIT_DIAM(p), p->time_of_birth);
43 #else
```

```

44 real z, x, y;
45 cell_t c;
46 Thread *cthread;
47 if(header)
48 {
49 par_fprintf_head(fp,"time[s] x-position[m] y-position[m] ");
50 par_fprintf_head(fp,"z-position[m] diameter[m] particle_temperature[K] ");
51 par_fprintf_head(fp,"Y_water[-] Y_vol[-] Y_char[-] xp-velocity[m/s] ");
52 par_fprintf_head(fp,"yp-velocity[m/s] zp-velocity[m/s] ");
53 par_fprintf_head(fp,"xg-velocity[m/s] yg-velocity[m/s] ");
54 par_fprintf_head(fp,"zg-velocity[m/s] gas_temperature[K] ");
55 par_fprintf_head(fp,"Y_VOL[-] Y_O2[-] Y_CO2[-] Y_H2O[-] Y_SO2[-] Y_CO[-] ");
56 par_fprintf_head(fp,"Y_H2[-] Y_CH4[-] Y_N2[-] Y_C3H8[-] Y_C2H6[-]\n");
57 }
58 if(NULLP(p))
59 return;
60 x = P_POS(p)[0];
61 y = P_POS(p)[1];
62 z = P_POS(p)[2];
63 c = P_CELL(p);
64 cthread = P_CELL_THREAD(p);
65 // par_fprintf(fp,"%d % int64_fmt " % % % % % % % % % % \n",
66 // P_INJ_ID(P_INJECTION(p)), p->part_id, P_TIME(p), r,P_VEL(p)[0],
67 // P_VEL(p)[1],P_VEL(p)[2],P_DIAM(p),P_N(p),
68 // P_T(p), P_INIT_DIAM(p), p->time_of_birth);
69
70 //if (PLMF(p) == 0. && P_VF(p) == 0. && P_CF(p) > 0.)
71
72 if (P_TIME(p) < 1e-3)
73 {
74 var1 = 0;
75 var2 = 0.;
76 // par_fprintf(fp,"%d % int64_fmt " %d % \n",
77 // P_INJ_ID(P_INJECTION(p)), p->part_id, var1,var2);
78 // MARK_PARTICLE(p, P_FL_REMOVED);
79 }
80
81 if (P_CURRENTLAW(p) == 5 && var1 == 0)
82 {
83 var2 = P_TIME(p);
84 var1 = 1;
85 }
86
87 if (P_CURRENTLAW(p) == 5 && P_TIME(p) > (var2 + 2.5))
88 {
89 //par_fprintf(fp,"%d % % % % % % % \n",
90 //P_INJ_ID(P_INJECTION(p)), p->part_id, P_TIME(p),P_POS(p)[0],P_POS(p)[1],P_POS(p)[2],P_CF(p));
91 par_fprintf(fp,"%d % int64_fmt " % % % % % .8f % .1f % % % % % % % % % % % % % % % .1f % % % %
92 % % % % % % % % \n",
93 P_INJ_ID(P_INJECTION(p)), p->part_id, P_TIME(p),P_POS(p)[0],P_POS(p)[1],P_POS(p)[2],P_DIAM(p),P_T(p),
94 P_LMF(p),P_VF(p),P_CF(p),P_VEL(p)[0],P_VEL(p)[1],P_VEL(p)[2],
95 C_U(c,cthread),C_V(c,cthread),C_W(c,cthread),C_T(c,cthread),C_YI(c,cthread,0),C_YI(c,cthread,1),
96 C_YI(c,cthread,2),C_YI(c,cthread,3),C_YI(c,cthread,4),C_YI(c,cthread,5),C_YI(c,cthread,6),
97 C_YI(c,cthread,10),C_YI(c,cthread,11),C_YI(c,cthread,12),C_YI(c,cthread,13));
98 MARK_PARTICLE(p, P_FL_REMOVED);
99 }
100
101 #endif
102 #if REMOVE_PARTICLES
103 MARK_PARTICLE(p, P_FL_REMOVED);
104 #endif
105 }

```

El siguiente código fue usado para obtener los resultados de simulación promediados sobre esferas de 50 mm a lo largo del eje axial central y con pequeñas modificaciones en el código se puede usar para el eje de las boquillas de aire.

```

1 /*****
2 Esta funcion es usada para obtener los datos promediados de temperatura, CO2,
3 O2, CH4 y CO sobre esferas de 50mm en el eje central de la camara de combustion.
4 Esto se hace de esta forma debido a la naturaleza de las sondas usadas para
5 realizar las mediciones experimentales.

```

```

6 *****/
7
8 #include <udf.h>
9 #include <stdio.h>
10
11 DEFINE_ON_DEMAND(get_average_data_centro_specific)
12 {
13     Domain *d;
14     Thread *t;
15     cell_t c;
16     double PCELL = 1.013e05; /* pressure 1 atm, in Pa */
17     FILE *fp;
18     int o2_index = 1;
19     int co2_index = 2;
20     int h2o_index = 3;
21     int co_index = 5;
22     int ch4_index = 10;
23     int i;
24     double M_CO = 28.01;
25     double M_CO2 = 44.01;
26     double M_CH4 = 16.04;
27     double M_O2 = 31.9988;
28     double M_H2O = 18.01528;
29     double xc[ND_ND];
30     double vol_tot;
31     double xmin = -0.675;
32     double xmax = 0.675;
33     double r = 0.025; /* Size of the sphere where the values are going to be averaged */
34     double sph_p[3]; /* Coordinates of the center of the sphere */
35     double distance;
36     double pressure;
37     double tavg, CO2avg, COavg, CH4avg, O2avg;
38     double y_CO, y_CO2, y_O2, y_CH4, y_H2O;
39     double x_CO, x_CO2, x_O2, x_CH4, x_H2O;
40     double p_CO, p_CO2, p_O2, p_CH4, p_H2O;
41     double R = UNIVERSAL_GAS_CONSTANT;
42     double volume, T, rho;
43     d = Get_Domain(1);
44     sph_p[0] = xmin + 0.1833;
45     sph_p[1] = 0.;
46     sph_p[2] = 0.;
47     fp = fopen("Averaged_data_axis_centro_specific.txt", "w");
48     fprintf(fp, "x y z T CO2.dry CO-ppm.dry O2.dry CH4.dry\n");
49
50     for (i = 0; i < 7; i += 1)
51     /* while (sph_p[0] < xmax) */
52     {
53     /* Loop over all cell threads in the domain */
54     thread_loop_c(t, d)
55     {
56     /* Loop over all cells */
57     begin_c_loop(c, t)
58     {
59     C_CENTROID(xc, c, t);
60     distance = sqrt(pow(xc[0] - sph_p[0], 2) + pow(xc[1] - sph_p[1], 2) + pow(xc[2] - sph_p[2], 2));
61     if (distance < r)
62     {
63     T = C_T(c, t);
64     volume = C_VOLUME(c, t);
65     rho = C_R(c, t);
66     tavg += T * volume;
67     pressure = C_P(c, t) + PCELL;
68     y_H2O = C_YI(c, t, h2o_index);
69     p_H2O = R * T * rho * y_H2O / M_H2O;
70     x_H2O = p_H2O / pressure;
71
72     y_CO2 = C_YI(c, t, co2_index);
73     p_CO2 = R * T * rho * y_CO2 / M_CO2;
74     x_CO2 = p_CO2 / pressure;
75     x_CO2 = x_CO2 / (1 - x_H2O) * 100; /* CO2 vol percent dry */
76     CO2avg += x_CO2 * volume;
77

```

```

78     y_CO = C_YI(c,t,co_index);
79     p_CO = R * T * rho * y_CO / M_CO;
80     x_CO = p_CO / pressure;
81     x_CO = x_CO / (1 - x_H2O) * 1000000; /* CO ppm dry */
82     COavg += x_CO * volume;
83
84     y_O2 = C_YI(c,t,o2_index);
85     p_O2 = R * T * rho * y_O2 / M_O2;
86     x_O2 = p_O2 / pressure;
87     x_O2 = x_O2 / (1 - x_H2O) * 100; /* O2 vol percent dry */
88     O2avg += x_O2 * volume;
89
90     y_CH4 = C_YI(c,t,ch4_index);
91     p_CH4 = R * T * rho * y_CH4 / M_CH4;
92     x_CH4 = p_CH4 / pressure;
93     x_CH4 = x_CH4 / (1 - x_H2O) * 100; /* O2 vol percent dry */
94     CH4avg += x_CH4 * volume;
95
96     vol_tot += C_VOLUME(c,t);
97
98     } /* end if */
99 } /* end c.loop */
100 end_c_loop(c,t)
101 } /* end thread loop */
102
103 if (vol_tot > 0.)
104 {
105     tavg /= vol_tot;
106     CO2avg /= vol_tot;
107     COavg /= vol_tot;
108     O2avg /= vol_tot;
109     CH4avg /= vol_tot;
110
111     fprintf(fp, "%6f %6f %6f %4.2f %3.2f %3.2f %3.2f %5.2f\n", sph_p[0], sph_p[1], sph_p[2],
112     tavg, CO2avg, COavg, O2avg, CH4avg);
113     } /* end if */
114
115     tavg = 0.;
116     CO2avg = 0.;
117     COavg = 0.;
118     O2avg = 0.;
119     CH4avg = 0.;
120     vol_tot = 0.;
121
122     sph_p[0] += 0.1833;
123 } /* end for */
124 fclose(fp);
125 Message("\nWork completed\n");
126 }

```

Bibliografía

- [1] J. Wüning and J. Wüning, “Flameless oxidation to reduce thermal NO_x-formation,” *Progress in energy and combustion science*, vol. 23, no. 1, pp. 81–94, 1997.
- [2] M. Katsuki and T. Hasegawa, “The science and technology of combustion in highly preheated air,” in *Symposium (International) on combustion, 2008*, vol. 27, pp. 3135–3146, Elsevier, 1998.
- [3] S.-R. Wu, W.-C. Chang, and J. Chiao, “Low NO_x heavy fuel oil combustion with high temperature air,” *Fuel*, vol. 86, no. 5, pp. 820–828, 2007.
- [4] D. Ristic, M. Schneider, A. Schuster, G. Scheffknecht, and J. Wüning, “Investigation of NO_x formation for flameless coal combustion,” in *7th High Temperature Air Combustion and Gasification International Symposium, Phuket, Thailand, 2008*, January 2008.
- [5] M. L. F. Winter and A. K. Agarwal, *Handbook of combustion*. Wiley-VCH, Weinheim, 2010.
- [6] M. Z. Jacobson and M. A. Delucchi, “Providing all global energy with wind, water, and solar power, part I: Technologies, energy resources, quantities and areas of infrastructure, and materials,” *Energy Policy*, vol. 39, no. 3, pp. 1154–1169, 2011.
- [7] M. A. Delucchi and M. Z. Jacobson, “Providing all global energy with wind, water, and solar power, part II: Reliability, system and transmission costs, and policies,” *Energy policy*, vol. 39, no. 3, pp. 1170–1190, 2011.
- [8] A. Amell, F. Cadavid, M. Sánchez, H. Burbano, J. Pareja, H. Copete, and B. Herrera, “Desarrollo y evaluación de un horno de combustión sin llama y de alta eficiencia térmica,” Tech. Rep. N° 111533218837, Universidad de Antioquia, 2009.
- [9] A. Amell, F. Cadavid, M. Sánchez, and C. Lezcano, “Desarrollo y evaluación de un quemador de combustión sin llama a gas natural usando aire enriquecido con oxígeno,” Tech. Rep. N° 3552008, Universidad de Antioquia, 2011.
- [10] P. N. Alvarado, *Combustión de material carbonoso en condiciones de alta temperatura y baja concentración de oxígeno*. PhD thesis, Universidad de Antioquia, 2014.
- [11] A. Cavaliere and M. de Joannon, “Mild combustion,” *Progress in Energy and Combustion science*, vol. 30, no. 4, pp. 329–366, 2004.
- [12] B. B. Dally, E. Riesmeier, and N. Peters, “Effect of fuel mixture on moderate and intense low oxygen dilution combustion,” *Combustion and flame*, vol. 137, no. 4, pp. 418–431, 2004.
- [13] H. Spliethoff, *Power generation from solid fuels*. Springer Science & Business Media, 2010.
- [14] A. E. Green and K. M. Pamidimukkala, “Synergistic combustion of coal with natural gas,” *Energy*, vol. 9, no. 6, pp. 477–484, 1984.
- [15] Y. Liu, J. Sun, and D. Chen, “Flame propagation in hybrid mixture of coal dust and methane,” *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, vol. 20, no. 4, pp. 691–697, 2007.
- [16] D. Bayless, A. Schroeder, D. Johnson, J. Peters, H. Krier, and R. Buckius, “The effects of natural gas cofiring on the ignition delay of pulverized coal and coke particles,” *Combustion science and technology*, vol. 98, no. 1-3, pp. 185–198, 1994.
- [17] N. Rubtsov, B. Seplyarskii, G. Tsvetkov, and V. Chernysh, “Ignition of coal powders in the presence of natural gas, oxygen, and reactive admixtures,” *Kinetics and Catalysis*, vol. 52, no. 3, pp. 348–352, 2011.
- [18] B. A. Fleck, A. Sobiesiak, and H. Becker, “Experimental and numerical investigation of the novel low NO_x CGRI burner,” *Combustion science and technology*, vol. 161, no. 1, pp. 89–112, 2000.
- [19] A. Cavigiolo, M. A. Galbiati, A. Effuggi, D. Gelosa, and R. Rota, “Mild combustion in a laboratory-scale apparatus,” *Combustion Science and Technology*, vol. 175, no. 8, pp. 1347–1367, 2003.
- [20] W. Blasiak, W. Yang, and N. Rafidi, “Physical properties of a lpg flame with high-temperature air on a regenerative burner,” *Combustion and flame*, vol. 136, no. 4, pp. 567–569, 2004.
- [21] J. Wüning, “Flameless oxidation,” in *6th HiTACG Symposium, Essen, Germany*, 2005.

- [22] E. Masson *et al.*, “An experimental facility at laboratory scale to assess the effect of confinement on flameless combustion regime,” in *Proceedings of the European Combustion Meeting*, 2005.
- [23] A. Effuggi, D. Gelosa, M. Derudi, and R. Rota, “Mild combustion of methane-derived fuel mixtures: natural gas and biogas,” *Combustion Science and Technology*, vol. 180, no. 3, pp. 481–493, 2008.
- [24] H. Schütz, R. Lücknerath, T. Kretschmer, B. Noll, and M. Aigner, “Analysis of the pollutant formation in the flox® combustion,” *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, vol. 130, no. 1, p. 011503, 2008.
- [25] A. Colorado, B. Herrera, and A. Amell, “Performance of a flameless combustion furnace using biogas and natural gas,” *Bioresource Technology*, vol. 101, no. 7, pp. 2443–2449, 2010.
- [26] A. Rebola, M. Costa, and P. J. Coelho, “Experimental evaluation of the performance of a flameless combustor,” *Applied Thermal Engineering*, vol. 50, no. 1, pp. 805–815, 2013.
- [27] M. Sánchez, F. Cadavid, and A. Amell, “Experimental evaluation of a 20kw oxygen enhanced self-regenerative burner operated in flameless combustion mode,” *Applied energy*, vol. 111, pp. 240–246, 2013.
- [28] H. Tsuji, A. K. Gupta, T. Hasegawa, M. Katsuki, K. Kishimoto, and M. Morita, *High temperature air combustion: from energy conservation to pollution reduction*. CRC press, 2002.
- [29] H. Stadler, *Experimental and numerical investigation of flameless pulverised coal combustion*. PhD thesis, RWTH Aachen, 2010.
- [30] R. Weber, J. P. Smart, and W. vd Kamp, “On the (mild) combustion of gaseous, liquid, and solid fuels in high temperature preheated air,” *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 30, no. 2, pp. 2623–2629, 2005.
- [31] S. Orsino, M. Tamura, P. Stabat, S. Constantini, O. Prado, and R. Weber, “Excess enthalpy combustion of coal,” *IFRF Doc*, 2000.
- [32] T. Suda, M. Takafuji, T. Hirata, M. Yoshino, and J. Sato, “A study of combustion behavior of pulverized coal in high-temperature air,” *Proceedings of the combustion Institute*, vol. 29, no. 1, pp. 503–509, 2002.
- [33] H. Zhang, G. Yue, J. Lu, Z. Jia, J. Mao, T. Fujimori, T. Suko, and T. Kiga, “Development of high temperature air combustion technology in pulverized fossil fuel fired boilers,” *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 31, no. 2, pp. 2779–2785, 2007.
- [34] A. Schuster, D. Ristic, J. Santamaria, P. Plion, G. Hesselmann, J. Wüning, D. Honoré, D. Giannakopoulos, H. Stadler, M. Förster, *et al.*, “Development of a pilot-scale flameless oxidation burner for ultra low NO_x combustion of pulverised coal/research fund for coal and steel,” tech. rep., 2009.
- [35] D. Ristic, A. Schuster, G. Scheffknecht, H. Stadler, M. Foerster, R. Kneer, and J. Wunning, “Experimental study on flameless oxidation of pulverised coal in bench and pilot scale,” *VDI BERICHTE*, vol. 1988, p. 45, 2007.
- [36] D. Ristic, A. Schuster, and G. Scheffknecht, “On the potential of flameless oxidation to reduce NO_x emissions from pulverized coal combustion,” *IFRF Combust J*, pp. 1–16, 2010.
- [37] M. Saffari Pour and Y. Weihong, “Performance of pulverized coal combustion under high temperature air diluted by steam,” *ISRN Mechanical Engineering*, vol. 2014, 2014.
- [38] M. Saha, B. B. Dally, P. R. Medwell, and E. M. Cleary, “Moderate or intense low oxygen dilution (MILD) combustion characteristics of pulverized coal in a self-recuperative furnace,” *Energy & Fuels*, vol. 28, no. 9, pp. 6046–6057, 2014.
- [39] M. Tamura, S. Watanabe, K. Komaba, and K. Okazaki, “Combustion behaviour of pulverised coal in high temperature air condition for utility boilers,” *Applied Thermal Engineering*, vol. 75, pp. 445–450, 2015.
- [40] M. Weidmann, D. Honoré, V. Verbaere, G. Boutin, S. Grathwohl, G. Godard, C. Gobin, R. Kneer, and G. Scheffknecht, “Experimental characterization of pulverized coal MILD flameless combustion from detailed measurements in a pilot-scale facility,” *Combustion and Flame*, 2016.
- [41] M. Weidmann, S. Grathwohl, H. Dieter, G. Boutin, D. Honoré, and G. Scheffknecht, “Progress in flameless pulverized coal burner design (300 kW_{th}) based on CFD simulations and experimental investigations,” 2014.
- [42] M. Saha, B. B. Dally, P. R. Medwell, and A. Chinnici, “Effect of particle size on the MILD combustion characteristics of pulverised brown coal,” *Fuel Processing Technology*, 2016.
- [43] M. Saha, B. B. Dally, P. R. Medwell, and A. Chinnici, “Burning characteristics of victorian brown coal under MILD combustion conditions,” *Combustion and Flame*, vol. 172, pp. 252–270, 2016.
- [44] P. Li, F. Wang, Y. Tu, Z. Mei, J. Zhang, Y. Zheng, H. Liu, Z. Liu, J. Mi, and C. Zheng, “Moderate or intense low-oxygen dilution oxy-combustion characteristics of light oil and pulverized coal in a pilot-scale

- furnace,” *Energy & Fuels*, vol. 28, no. 2, pp. 1524–1535, 2014.
- [45] Z. Mao, L. Zhang, X. Zhu, D. Zhou, W. Liu, and C. Zheng, “Investigation on coal moderate or intense low-oxygen dilution combustion with high-velocity jet at pilot-scale furnace,” *Applied Thermal Engineering*, vol. 111, pp. 387–396, 2017.
- [46] D. Van Krevelen, “Graphical-statistical method for the study of structure and reaction processes of coal,” *Fuel*, vol. 29, no. 12, pp. 269–284, 1950.
- [47] A. d. S. Blandón Montes, *Contribución de la materia orgánica sedimentaria a la determinación del paleoambiente y del potencial de generación de hidrocarburos en los carbones de la Formación Amagá (Colombia)*. PhD thesis, University of Geneva, 2006.
- [48] H. Stadler, D. Ristic, M. Förster, A. Schuster, R. Kneer, and G. Scheffknecht, “NO_x-emissions from flameless coal combustion in air, Ar/O₂ and CO₂/O₂,” *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 32, no. 2, pp. 3131–3138, 2009.
- [49] M. Weidmann, V. Verbaere, G. Boutin, D. Honoré, S. Grathwohl, G. Goddard, C. Gobin, H. Dieter, R. Kneer, and G. Scheffknecht, “Detailed investigation of flameless oxidation of pulverized coal at pilot scale (230 kW),” *Applied Thermal Engineering*, vol. 74, pp. 96–101, 2015.
- [50] Y. Tu, H. Liu, P. Li, F. Wang, T. Zhang, C. Bai, Y. Zheng, Z. Liu, J. Mi, and C. Zheng, “Experimental study of MILD combustion for pulverized coal in 0.3 MW vertical furnace,” in *9th Asia-Pacific Conference on Combustion, Gyeongju, Korea*, 2013.
- [51] J. Smart and G. Riley, “Combustion of coal in a flameless oxidation environment under oxyfuel firing conditions: the reality,” *Journal of the Energy Institute*, vol. 85, no. 3, pp. 131–134, 2012.
- [52] Z. Qinglin, S. Artur, Y. Weihong, and W. Blasiak, “Properties of pulverized coal combustion in high temperature air/steam mixture,” *Royal institute of technology (KTH)*, 2010.
- [53] J. P. Kim, U. Schnell, G. Scheffknecht, and A. Benim, “Numerical modelling of MILD combustion for coal,” *Progress in Computational Fluid Dynamics, an International Journal*, vol. 7, no. 6, pp. 337–346, 2007.
- [54] N. Schaffel-Mancini, *Ecological evaluation of the pulverized coal combustion in HTAC technology*. PhD thesis, Zugl.: Clausthal, Techn. Univ. und Gliwice, Politechn. Ślaska, Diss., 2009.
- [55] M. Vascellari and G. Cau, “Influence of turbulence–chemical interaction on CFD pulverized coal MILD combustion modeling,” *Fuel*, vol. 101, pp. 90–101, 2012.
- [56] M. Vascellari, S. Schulze, P. Nikrityuk, D. Safronov, and C. Hasse, “Numerical simulation of pulverized coal MILD combustion using a new heterogeneous combustion submodel,” *Flow, Turbulence and Combustion*, vol. 92, no. 1-2, pp. 319–345, 2014.
- [57] Y. Tu, H. Liu, S. Chen, Z. Liu, H. Zhao, and C. Zheng, “Numerical study of combustion characteristics for pulverized coal under oxy-mild operation,” *Fuel Processing Technology*, vol. 135, pp. 80–90, 2015.
- [58] Y. Tu, H. Liu, K. Su, S. Chen, Z. Liu, C. Zheng, and W. Li, “Numerical study of H₂O addition effects on pulverized coal oxy-MILD combustion,” *Fuel Processing Technology*, vol. 138, pp. 252–262, 2015.
- [59] C. R. Choi and C. N. Kim, “Numerical investigation on the flow, combustion and NO_x emission characteristics in a 500 MW tangentially fired pulverized-coal boiler,” *Fuel*, vol. 88, no. 9, pp. 1720–1731, 2009.
- [60] G. Coraggio and M. Laiola, “Combustion of NG and pulverized coal in a mixture of oxygen and RFG (IFRF. doc. no f110/y/01),” *Pisa, Italy: International Flame Research Foundation*, 2009.
- [61] Y. Sung and G. Choi, “Non-intrusive optical diagnostics of co-and counter-swirling flames in a dual swirl pulverized coal combustion burner,” *Fuel*, vol. 174, pp. 76–88, 2016.
- [62] C. Yin, “Effects of moisture release and radiation properties in pulverized fuel combustion: A CFD modelling study,” *Fuel*, vol. 165, pp. 252–259, 2016.
- [63] P. Heil, D. Toporov, H. Stadler, S. Tschunko, M. Förster, and R. Kneer, “Development of an oxycoal swirl burner operating at low O₂ concentrations,” *Fuel*, vol. 88, no. 7, pp. 1269–1274, 2009.
- [64] C. Galletti, A. Parente, M. Derudi, R. Rota, and L. Tognotti, “Numerical and experimental analysis of NO emissions from a lab-scale burner fed with hydrogen-enriched fuels and operating in MILD combustion,” *International journal of hydrogen energy*, vol. 34, no. 19, pp. 8339–8351, 2009.
- [65] M. Drake, S. Correa, R. Pitz, W. Shyy, and C. Fenimore, “Superequilibrium and thermal nitric oxide formation in turbulent diffusion flames,” *Combustion and Flame*, vol. 69, no. 3, pp. 347–365, 1987.
- [66] M. Heitor and A. Moreira, “Thermocouples and sample probes for combustion studies,” *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 19, no. 3, pp. 259–278, 1993.
- [67] D. Toporov, P. Bocian, P. Heil, A. Kellermann, H. Stadler, S. Tschunko, M. Förster, and R. Kneer, “Detailed investigation of a pulverized fuel swirl flame in CO₂/O₂ atmosphere,” *Combustion and Flame*, vol. 155, no. 4, pp. 605–618, 2008.

- [68] H. Liu, R. Zailani, and B. M. Gibbs, "Comparisons of pulverized coal combustion in air and in mixtures of O_2/CO_2 ," *Fuel*, vol. 84, no. 7, pp. 833–840, 2005.
- [69] A. White and L. M. Beddows, "The choice of sampling tube material in the determination of nitrogen oxide concentrations in products of combustion," *Journal of Applied Chemistry and Biotechnology*, vol. 23, no. 10, pp. 759–767, 1973.
- [70] B. Danon, A. Swiderski, W. De Jong, W. Yang, and D. Roekaerts, "Emission and efficiency comparison of different firing modes in a furnace with four hitac burners," *Combustion Science and Technology*, vol. 183, no. 7, pp. 686–703, 2011.
- [71] L. Zhang, W. Nehme, A. K. Biswas, W. Yang, W. Blasiak, and D. Bertin, "Characterisation of heat transfer and flame length in a semi-scale industrial furnace equipped with hitac burner," *Journal of the Energy Institute*, vol. 83, no. 3, pp. 133–143, 2010.
- [72] P. J. Geddis, *Evaluation of chemiluminescence as a measurement option for industrial flame monitoring and process control*. PhD thesis, University of Toronto, 2009.
- [73] J. R. Howell, M. P. Menguc, and R. Siegel, *Thermal radiation heat transfer*. CRC press, 2010.
- [74] N. Docquier, F. Lacas, and S. Candel, "Closed-loop equivalence ratio control of premixed combustors using spectrally resolved chemiluminescence measurements," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 29, no. 1, pp. 139–145, 2002.
- [75] J. Luque and D. R. Crosley, "LIFBASE (version 1.5)," *SRI International Report MP*, pp. 99–009, 1999.
- [76] H. Stadler, M. Förster, and R. Kneer, "Experimental investigation of CH-chemiluminescence in an oxyfuel flame," in *Proceedings of the Third European Combustion Meeting*, pp. 11–13, 2007.
- [77] M. R. W. Lauer *et al.*, *Determination of the heat release distribution in turbulent flames by chemiluminescence imaging*. PhD thesis, Technische Universität München, 2011.
- [78] M. Weidmann, B. Gövert, M. Habermehl, O. Hatzfeld, P. Plaza, P. Bocian, E. Cresci, J. G. Wüning, A. Duncan, H. Grüner, D. Honoré, J. Sawicki, and T. Leszek, "Development of scale-up method and simulation tools for the demonstration of PC-FLOX burner technology in full-scale utility boilers (Flox-Coal-II)," tech. rep., Research fund for coal and steel, 2014.
- [79] S. Balusamy, M. M. Kamal, S. M. Lowe, B. Tian, Y. Gao, and S. Hochgreb, "Laser diagnostics of pulverized coal combustion in o_2/n_2 and o_2/co_2 conditions: velocity and scalar field measurements," *Experiments in Fluids*, vol. 56, no. 5, pp. 1–16, 2015.
- [80] J. Hayashi, N. Hashimoto, N. Nakatsuka, H. Tsuji, H. Watanabe, H. Makino, and F. Akamatsu, "Soot formation characteristics in a lab-scale turbulent pulverized coal flame with simultaneous planar measurements of laser induced incandescence of soot and mie scattering of pulverized coal," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 34, no. 2, pp. 2435–2443, 2013.
- [81] A. Gosman and E. Loannides, "Aspects of computer simulation of liquid-fueled combustors," *Journal of Energy*, vol. 7, no. 6, pp. 482–490, 1983.
- [82] W. Ranz and W. Marshall, "Evaporation from drops, part I," *Chemical Engineering Progress*, vol. 48, no. 3, pp. 141–146, 1952.
- [83] W. Ranz and W. Marshall, "Evaporation from drops: Part II," *Chem. Engng. Prog.*, vol. 48, no. 4, pp. 173–180, 1952.
- [84] M. Baum and P. Street, "Predicting the combustion behaviour of coal particles," *Combustion science and technology*, vol. 3, no. 5, pp. 231–243, 1971.
- [85] F. Manual, "Manual and user guide of Fluent software," *Fluent Inc*, 2005.
- [86] F. Cadavid, *Simulation numérique de la réduction des émissions de NO_x dans un four pilote de 4 MW et une chaudière tangentielle de 609 MW à charbon pulvérisé*. PhD thesis, Valenciennes, 2004.
- [87] M. Saha, A. Chinnici, B. B. Dally, and P. R. Medwell, "Numerical study of pulverized coal MILD combustion in a self-recuperative furnace," *Energy & Fuels*, vol. 29, no. 11, pp. 7650–7669, 2015.
- [88] P. Warzecha and A. Boguslawski, "LES and RANS modeling of pulverized coal combustion in swirl burner for air and oxy-combustion technologies," *Energy*, vol. 66, pp. 732–743, 2014.
- [89] D. Christ and R. Kneer, *The effect of char kinetics on the combustion of pulverized coal under oxyfuel conditions*. PhD thesis, 2013.
- [90] S. Badzioch and P. G. Hawksley, "Kinetics of thermal decomposition of pulverized coal particles," *Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development*, vol. 9, no. 4, pp. 521–530, 1970.
- [91] R. V. Filkoski, I. J. Petrovski, and P. Karas, "Optimization of pulverised coal combustion by means of CFD/CTA modeling," *Thermal science*, vol. 10, no. 3, pp. 161–179, 2006.
- [92] S. Halama and H. Spliethoff, "Numerical simulation of entrained flow gasification: Reaction kinetics and char structure evolution," *Fuel Processing Technology*, vol. 138, pp. 314–324, 2015.
- [93] H. Kobayashi, J. Howard, and A. F. Sarofim, "Coal devolatilization at high temperatures," in

- Symposium (international) on combustion*, vol. 16, pp. 411–425, Elsevier, 1977.
- [94] S. K. Ubhayakar, D. B. Stickler, C. W. Von Rosenberg, and R. E. Gannon, “Rapid devolatilization of pulverized coal in hot combustion gases,” in *Symposium (International) on Combustion*, vol. 16, pp. 427–436, Elsevier, 1977.
- [95] T. H. Fletcher, A. R. Kerstein, R. J. Pugmire, M. Solum, and D. M. Grant, “A chemical percolation model for devolatilization: summary,” *Brigham Young University*, 1992.
- [96] D. Genetti, T. H. Fletcher, and R. J. Pugmire, “Development and application of a correlation of ^{13}C NMR chemical structural analyses of coal based on elemental composition and volatile matter content,” *Energy & Fuels*, vol. 13, no. 1, pp. 60–68, 1999.
- [97] T. Fletcher and R. J. Pugmire, “Chemical percolation model for coal devolatilization.” <http://www.et.byu.edu/~tom/cpd/cpdcodes.html>.
- [98] D. B. Genetti, *An advanced model of coal devolatilization based on chemical structure*. PhD thesis, Brigham Young University, 1999.
- [99] M. A. Field, “Rate of combustion of size-graded fractions of char from a low-rank coal between 1200 K and 2000 K,” *Combustion and Flame*, vol. 13, no. 3, pp. 237–252, 1969.
- [100] N. Schaffel, M. Mancini, A. Szle, R. Weber, *et al.*, “Mathematical modeling of MILD combustion of pulverized coal,” *Combustion and Flame*, vol. 156, no. 9, pp. 1771–1784, 2009.
- [101] R. Kurose, H. Makino, and A. Suzuki, “Numerical analysis of pulverized coal combustion characteristics using advanced low- NO_x burner,” *Fuel*, vol. 83, no. 6, pp. 693–703, 2004.
- [102] H. Stadler, D. Toporov, M. Förster, and R. Kneer, “On the influence of the char gasification reactions on NO formation in flameless coal combustion,” *Combustion and Flame*, vol. 156, no. 9, pp. 1755–1763, 2009.
- [103] M. Vascellari and G. Cau, “Numerical simulation of pulverized coal oxy-combustion with exhaust gas recirculation,” in *Proceeding of CCT2009 Fourth International Conference on Clean Coal Technologies. Dresden, Germany*, 2009.
- [104] B. F. Magnussen and B. Hjertager, “On the structure of turbulence and a generalized eddy dissipation concept for chemical reaction in turbulent flow,” in *19th AIAA Aerospace Meeting, St. Louis, USA*, vol. 198, 1981.
- [105] A. Kazakov and M. Frenklach, “DRM22.” <http://www.me.berkeley.edu/drm/>.
- [106] W. Jones and R. Lindstedt, “Global reaction schemes for hydrocarbon combustion,” *Combustion and flame*, vol. 73, no. 3, pp. 233–249, 1988.
- [107] Transportadora de Gas Internacional - TGI, “Cromatografías específicas.” <http://cen.tgi.com.co/PLTGWeb/Public/Reports/PreDefReports.aspx?ReportName=Report22.xml>.
- [108] J. P. Kim, U. Schnell, and G. Scheffknecht, “Comparison of different global reaction mechanisms for MILD combustion of natural gas,” *Combustion Science and Technology*, vol. 180, no. 4, pp. 565–592, 2008.
- [109] L. Wang, Z. Liu, S. Chen, and C. Zheng, “Comparison of different global combustion mechanisms under hot and diluted oxidation conditions,” *Combustion Science and Technology*, vol. 184, no. 2, pp. 259–276, 2012.
- [110] C. K. Westbrook and F. L. Dryer, “Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames,” *Combustion science and technology*, vol. 27, no. 1-2, pp. 31–43, 1981.
- [111] D. W. Shaw, X. Zhu, M. K. Misra, and R. H. Essenhigh, “Determination of global kinetics of coal volatiles combustion,” in *Symposium (International) on Combustion*, vol. 23, pp. 1155–1162, Elsevier, 1991.
- [112] G. P. Smith, D. M. Golden, M. Frenklach, N. W. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldenberg, C. T. Bowman, R. K. Hanson, S. Song, W. J. Gardiner, *et al.*, “GRI 3.0.” http://www.me.berkeley.edu/gri_mech, 2000.
- [113] E. S. Hecht, C. R. Shaddix, and J. S. Lighty, “Analysis of the errors associated with typical pulverized coal char combustion modeling assumptions for oxy-fuel combustion,” *Combustion and Flame*, vol. 160, no. 8, pp. 1499–1509, 2013.
- [114] C. R. Shaddix, F. Holzleithner, M. Geier, and B. S. Haynes, “Numerical assessment of tognotti determination of CO_2/CO production ratio during char oxidation,” *Combustion and Flame*, vol. 160, no. 9, pp. 1827–1834, 2013.
- [115] E. S. Hecht, C. R. Shaddix, M. Geier, A. Molina, and B. S. Haynes, “Effect of CO_2 and steam gasification reactions on the oxy-combustion of pulverized coal char,” *Combustion and Flame*, vol. 159, no. 11, pp. 3437–3447, 2012.
- [116] E. S. Hecht, C. R. Shaddix, A. Molina, and B. S. Haynes, “Effect of CO_2 gasification reaction

- on oxy-combustion of pulverized coal char,” *Proceedings of the combustion institute*, vol. 33, no. 2, pp. 1699–1706, 2011.
- [117] A. Molina, B. Haynes, and C. Shaddix, “Effect of reactant penetration on inhibition of coal char gasification,” *Energética*, no. 36, pp. 19–24, 2006.
- [118] A. Molina, A. F. Sarofim, W. Ren, J. Lu, G. Yue, J. M. Beér, and B. S. Haynes, “Effect of boundary layer reactions on the conversion of char-n to no, n₂o, and hcn at fluidized-bed combustion conditions,” *Combustion science and technology*, vol. 174, no. 11–12, pp. 43–71, 2002.
- [119] B. E. Launder and D. B. Spalding, *Lectures in mathematical models of turbulence*. Academic press, 1972.
- [120] S. T. Thynell, “Discrete-ordinates method in radiative heat transfer,” *International journal of engineering science*, vol. 36, no. 12, pp. 1651–1675, 1998.
- [121] T. Smith, Z. Shen, and J. Friedman, “Evaluation of coefficients for the weighted sum of gray gases model,” *Journal of Heat Transfer*, vol. 104, no. 4, pp. 602–608, 1982.
- [122] A. Haider and O. Levenspiel, “Drag coefficient and terminal velocity of spherical and nonspherical particles,” *Powder technology*, vol. 58, no. 1, pp. 63–70, 1989.
- [123] M. L. de Souza-Santos, *Solid Fuels Combustion and Gasification: Modeling, Simulation*. CRC Press, 2010.
- [124] J. P. Mathews, S. Eser, P. G. Hatcher, and A. W. Scaroni, “The shape of pulverized bituminous vitrinite coal particles,” *KONA Powder and Particle Journal*, vol. 25, no. 0, pp. 145–152, 2007.
- [125] S. Morsi and A. Alexander, “An investigation of particle trajectories in two-phase flow systems,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 55, no. 02, pp. 193–208, 1972.
- [126] G. B. Wallis, *One-dimensional two-phase flow*. McGraw-Hill, 1969.
- [127] D. J. Maloney, R. Sampath, and J. W. Zondlo, “Heat capacity and thermal conductivity considerations for coal particles during the early stages of rapid heating,” *Combustion and Flame*, vol. 116, no. 1, pp. 94–104, 1999.
- [128] I. B. Celik, U. Ghia, P. J. Roache, *et al.*, “Procedure for estimation and reporting of uncertainty due to discretization in CFD applications,” *Journal of fluids Engineering-Transactions of the ASME*, vol. 130, no. 7, 2008.
- [129] C. Lezcano, A. Amell, and F. Cadavid, “Numerical calculation of the recirculation factor in flameless furnaces,” *Dyna*, vol. 80, no. 180, pp. 144–151, 2013.
- [130] P. Ashman, B. Haynes, P. Nelson, P. Nancarrow, J. Bus, P. Nicholls, T. Prokopiuk, A. Buckey, and C. Li, “Improved techniques for the prediction of nox formation from char nitrogen,” 1999.
- [131] R. J. Kee, F. M. Rupley, and J. A. Miller, “Chemkin-ii: A fortran chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical kinetics,” tech. rep., Sandia National Labs., Livermore, CA (USA), 1989.
- [132] R. Kee, F. Rupley, J. Miller, M. Coltrin, J. Grcar, E. Meeks, H. Moffat, A. Lutz, G. Dixon-Lewis, M. Smooke, J. Warnatz, G. Evans, R. Larson, R. Mitchell, L. Petzold, W. Reynolds, M. Caracotsios, W. Stewart, P. Glarborg, C. Wang, and O. Adigun, “Surface chemkin: A software package for the analysis of heterogeneous chemical kinetics at a solid-surface–gas-phase interface,” *CHEMKIN Collection Release*, vol. 3.
- [133] N. Laine, F. Vastola, and P. Walker Jr, “The importance of active surface area in the carbon-oxygen reaction,” *J Phys Chem*, vol. 67, no. 10, pp. 2030–2034, 1963.
- [134] P. Causton and B. Mценaney, “Determination of active surface areas of coal chars using a temperature-programmed desorption technique,” *Fuel*, vol. 64, no. 10, pp. 1447–1452, 1985.
- [135] M. R. Khan, “Significance of char active surface area for appraising the reactivity of low-and high-temperature chars,” *Fuel*, vol. 66, no. 12, pp. 1626–1634, 1987.
- [136] S. Visona and B. Stanmore, “Modeling no x release from a single coal particle ii. formation of no from char-nitrogen,” *Combustion and Flame*, vol. 106, no. 3, pp. 207–218, 1996.
- [137] J. Hinze, “Turbulence, mcgraw-hill publishing co.,” *New York, NY*, 1975.