

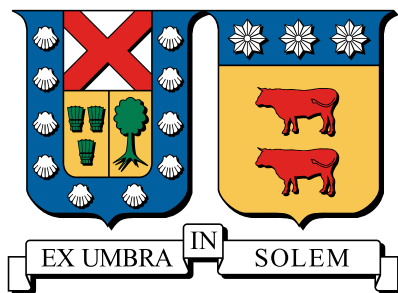
2022

Experimentación y modelación bidimensional del "fire rate" en un reactor de medio poroso inerte compuesto por esferas huecas

Carmona Malatesta, Nicolás Ignacio

<https://hdl.handle.net/11673/55106>

Repositorio Digital USM, UNIVERSIDAD TECNICA FEDERICO SANTA MARIA



UNIVERSIDAD TÉCNICA FEDERICO SANTA MARÍA

DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MECÁNICA

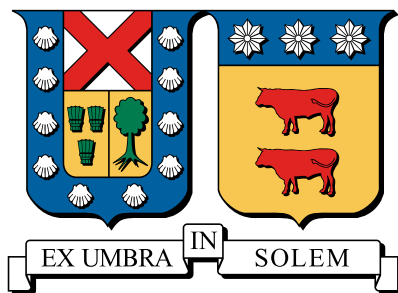
VALPARAÍSO- CHILE

**EXPERIMENTACIÓN Y MODELACIÓN
BIDIMENSIONAL DEL "FIRE RATE" EN UN
REACTOR DE MEDIO POROSO INERTE
COMPUESTO POR ESFERAS HUECAS**

Nicolás Ignacio Carmona Malatesta

Magíster en Ciencias de la Ingeniería Mecánica

2022



UNIVERSIDAD TÉCNICA FEDERICO SANTA MARÍA
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MECÁNICA
VALPARAÍSO- CHILE

EXPERIMENTACIÓN Y MODELACIÓN BIDIMENSIONAL DEL "FIRE RATE"
EN UN REACTOR DE MEDIO POROSO INERTE COMPUESTO POR ESFERAS
HUECAS

NICOLÁS IGNACIO CARMONA MALATESTA

Tesis de grado para optar al grado de:
Magíster en Ciencias de la Ingeniería Mecánica
y al título de:
Ingeniero Civil Mecánico

Profesor Guía: Dr. Ing. Mario Toledo Torres

Profesor Correferente: Dr. Olivier Skurtys

Profesor Correferente externo: Dr. Valeri Bubnovich

TITULO DE LA TESIS:

**EXPERIMENTACIÓN Y MODELACIÓN BIDIMENSIONAL DEL "FIRE RATE" EN
UN REACTOR DE MEDIO POROSO INERTE COMPUESTO POR ESFERAS HUECAS**

AUTOR:

Nicolás Ignacio Carmona Malatesta

TRABAJO DE TESIS, presentado en cumplimiento parcial de los requisitos para el Grado de
Magíster en Ciencias de la Ingeniería Mecánica de la Universidad Técnica Federico Santa María.

Dr. Ing. Mario Toledo Torres

Dr. Olivier Skurtys

Dr. Valeri Bubnovich

VALPARAÍSO CHILE- 2022

En memoria a mi querido tata Sergio Alejandro Carmona Véliz, por siempre y para siempre mi querido papito.

Life is like riding a bicycle. To keep balance you must keep moving.

- Albert Einstein

Agradecimientos

Imposible partir sin agradecer a mi querida madre Paulina, quién hizo todo lo humanamente posible para poder permitirme estar en estas instancias, ser un apoyo incondicional, catetearme para siempre mejorar y los regaloneos merecidos y no tan merecidos que siempre me has dado.

A mis abuelos, Sergio y Lina, quienes siempre han sido como mis segundos padres desde que tengo razón de ser, siempre disponibles para apoyar sin importar la razón.

A mi tía Marcela por todas las veces que me ha apoyado, regaloneado y brindado una mano cuando lo requiero.

A mi tío Rodrigo por toda la motivación y apoyo que me daba cuando era chico e incluso hoy con respecto a las bicicletas y temas de vida. El maestro de las cletas.

A mi tío Sergio por su sabiduría, consejos y apañe en esos momentos flojos y aburridos durante los primeros años de universidad (cuando había tiempo para leasar jaja).

A mi polola Claudia, por todo lo que me ha entregado, apoyado, alegrado, regaloneado y enseñado durante estos años que llevamos juntos, gracias por siempre estar ahí y ponerme los pies en la tierra de vez en cuando.

A los Ernestos, pilar y fuente de apoyo durante todos estos largos años que hemos estado en la universidad, siempre presentes dentro y fuera de la U, grande los cabros!

A la generación JIM 2015, la mejor que ha existido, y el mejor team de coordinadores durante el 2018 llevando a cabo una de las jornadas más estresantes de la vida jajajaja.

A los TataRiders, cabros motivados buenos para endurear y también tomar, como tiene que ser! Una infaltable fuente de apoyo, alegría y buena onda, grande mis cabrengues!

A los cabros del Runescape, quienes apañaban en todas durante la cuarentena!

A mi profesor guía por siempre estar presente y ser inspiración para potenciar mis locuras ingenieriles que terminaron en mi tema de investigación.

A Jose Duque y a todo el equipo de termo fluidos por todas las risas y buenos momentos.

Por último y no menos importante, a mi benefactora Maria Julia Solari Casaretto.

Resumen

La combustión en medios porosos inertes se caracteriza por intensificar los mecanismos de transferencia de calor. Una de las configuraciones más investigadas consiste en reactores que utilizan esferas de alúmina sólidas como medio poroso. El objetivo principal de esta tesis es investigar numérica y empíricamente la tasa de quemado ("Fire Rate", FR) en un reactor poroso compuesto por esferas de alúmina hueca, de manera de analizar las temperaturas y velocidades de desplazamiento del frente de llama. Se propone un modelo bidimensional de combustión en medios porosos inertes que considera las ecuaciones de conservación de masa, energía del sólido, gas y especie química, reconociendo los efectos radiativos internos a las esferas huecas. El modelo se discretiza utilizando el método ADI y se resuelve mediante un algoritmo TDMA. Por su parte, se diseña e implementa un reactor cilíndrico compuesto por esferas huecas de alúmina de 3-4 mm con sus sistemas de medición y control de flujos y temperaturas. Para una relación de equivalencia entre $0.4 \leq \phi \leq 1$, y un Fire Rate entre $755 \text{ kW/m}^2 \leq \text{FR} \leq 3775 \text{ kW/m}^2$, se presentan temperaturas en un rango de 1049 K y 1501 K, y velocidades de desplazamiento entre -1.02 cm/s y -0.005 cm/s. Un incremento del FR genera una temperatura de combustión más elevada debido principalmente al mayor consumo de combustible. Las mezclas de gases como aire, vapor de agua y dióxido de carbono en el interior de las esferas huecas, no presentan cambios significativos en las temperaturas y velocidades de desplazamiento en el interior del reactor. En conclusión el uso de esferas huecas de alúmina como medios poroso inerte, permiten sostener los perfiles térmicos característicos de este tipo de tecnología, pero con temperaturas de combustión más elevadas que los reactores que utilizan esferas sólidas de alúmina.

Palabras Clave *Combustión filtrada, medio poroso inerte, esferas huecas, estabilización de llama, esferas de alúmina*

Abstract

The combustion in inert porous media intensifies heat transfer mechanisms. One of the most investigated configurations with this type of reactor consists of using solid alumina spheres as a porous medium. The main objective of this thesis is the numerical and empirical research of the effects on the temperature and combustion wave velocity by the Fire Rate inside a porous media burner filled with hollow alumina spheres. A proposed two-dimensional model for combustion in inert porous media considers the equations of mass conservation, solid, gas, and chemical species energy conservation, recognizing the radiative effects of the hollow sphere's core. The model discretizes by the ADI method and resolves using the TDMA algorithm. Besides, a cylindrical reactor of inert porous media composed of 3-4 mm hollow spheres is designed and implemented with its flow and temperature control systems. For an equivalence ratio between $0.4 \leq \phi \leq 1$, and a Fire Rate between $755 \text{ kW/m}^2 \leq \text{FR} \leq 3775 \text{ kW/m}^2$, temperatures are presented in a range of 1049 K and 1501 K, and wave speeds between -1.02 cm/s and -0.005 cm/s. An increase in FR generates a higher combustion temperature mainly due to higher fuel consumption. Gas mixtures such as air, water vapor, and carbon dioxide inside the hollow spheres do not show significant changes in temperatures and wave speeds inside the reactor. In conclusion, the use of hollow alumina spheres as inert porous media allows the characteristic thermal profiles of this type of technology to be maintained, but with higher combustion temperatures than reactors that use solid alumina spheres.

Keywords *Filtration combustion, Inert porous media, Hollow spheres, Flame stabilization, Alumina spheres*

Índice general

Agradecimientos	7
Resumen	9
Abstract	11
Nomenclatura	20
1. Introducción	22
1.1. Combustión en medios porosos inertes	23
1.1.1. Esferas huecas como medio poroso inerte	24
1.1.2. Velocidad de frente de llama	25
1.1.3. Tasa de quemado	25
1.2. Objetivos de investigación	26
1.2.1. Objetivo general	26
1.2.2. Objetivos específicos	27
2. Transferencia de calor en esferas huecas con interior participativo	28
2.1. Conducción	29
2.2. Convección natural	30
2.3. Radiación	31
2.4. Conductividades efectivas	31
2.4.1. Ecuaciones de Leckner	31
3. Modelo matemático de combustión MPI 2D	33
3.1. Consideraciones	33
3.2. Condiciones iniciales y de borde	34
3.2.1. Condiciones iniciales	35
3.2.2. Condiciones de borde radiales	35

3.2.3.	Condiciones de borde axiales	35
3.3.	Ecuaciones gobernantes	36
3.3.1.	Ecuación de estado	36
3.3.2.	Ecuación de Ergun	36
3.3.3.	Ecuación de continuidad	37
3.3.4.	Ecuación de conservación de energía para el medio sólido	37
3.3.5.	Ecuación de conservación de energía para la mezcla de gases . . .	40
3.3.6.	Ecuación de conservación de masa especie química	41
4.	Método de solución numérica del modelo matemático bidimensional	42
4.1.	Discretización de la ecuación de continuidad y Ergun	43
4.1.1.	Condiciones de borde axiales	45
4.1.2.	Condiciones de borde radiales	45
4.1.3.	Velocidad	46
4.2.	Discretización de la ecuación de conservación de masa de metano	46
4.2.1.	Ecuación algoritmo TDMA	47
4.2.2.	Condiciones de borde axiales	48
4.2.3.	Condiciones de borde radiales	48
4.3.	Discretización de la ecuación de energía para la fase gaseosa	49
4.3.1.	Ecuación algoritmo TDMA	49
4.3.2.	Condiciones de borde axiales	50
4.3.3.	Condiciones de borde radiales	50
4.4.	Discretización de la ecuación de energía para la fase sólida	51
4.4.1.	Ecuación algoritmo TDMA	52
4.4.2.	Condiciones de borde axiales	52
4.4.3.	Condiciones de borde radiales	53
4.4.4.	Conductividad efectiva en medios porosos inertes compuestos por esferas huecas	54
4.4.5.	Conductividad efectiva en medios porosos inertes compuestos por esferas huecas con interior participativo en la transferencia de calor radiante	54
4.5.	Diagrama flujo código	54
5.	Diseño y procedimiento experimental	57
5.1.	Banco de prueba	57
5.2.	Registro de temperaturas	57

5.3. Puesta en marcha	58
5.4. Ensayos	59
5.5. Variación de caudal	59
6. Presentación y análisis de resultados	60
6.1. Dependencia de malla y contraste numérico	60
6.2. Resultados preliminares	62
6.2.1. Temperaturas de simulación computacional	62
6.2.2. Temperaturas experimentales	64
6.3. Velocidad de propagación experimental	65
6.4. Temperaturas experimentales y de simulación computacional	69
6.5. Efecto radiativo interno y espesor de esfera	73
6.6. Mezcla interna	77
6.7. Gases producto	78
7. Conclusiones	80
A. Variables ecuaciones de Leckner	82
B. Ingeniería armado reactor	84
B.1. Lugar de trabajo y propiedades	84
B.2. Estructura	85
B.3. Ensamblado termocuplas	86
B.4. Equipos controladores	86
B.5. Difusor de calor	87
C. Error de lectura termocuplas	88
D. Reactor medio poroso interte	89
E. Protocolo reactor medio poroso inerte	91
F. Aparato generador de esferas huecas	93
G. Código madre combustión en medio poroso inerte hueco 2D	95
Bibliografía	96

Índice de figuras

1.1. Esquema efecto de recirculación de calor al interior de un reactor de medios porosos [5]	23
2.1. Esquema representativo de esfera hueca, con detalle de los métodos de transferencia de calor agregados para una nueva configuración y parámetros dimensionales.	28
2.2. Esquema de transformación de partícula hueca a partícula equivalente. a) Esfera hueca compuesta por 3 fases, matriz, casquete y centro. b) Partícula sólida con distribución equivalente de a. c) Conjunto de esferas huecas con matriz y centro del mismo elemento. d) Equivalencia de la esfera hueca como una sólida. El radio exterior de la esfera es r ; el espesor del casquete es t . K_m (λ_m), K_c (λ_c), y K_s (λ_s) son la conductividad de la matriz, centro y casquete respectivamente, K_p (λ_p) es la conductividad de la partícula equivalente. e) Representación de dos casquetes especiales que pueden tratarse como esferas huecas, una con casquete poroso y otra con varios materiales. [24].	30
3.1. Esquema representativo de situación física a simular.	34
4.1. Diagrama de flujo para código computacional 2D	56
5.1. Esquema experimental utilizado para realizar los ensayos en laboratorio. .	58
5.2. Reactor armado en su totalidad, varilla de termocuplas sin conexión a lector DAQ.	58
6.1. Campo de temperaturas del sólido al interior del reactor MPI, izquierda perfil para esferas de 10 mm, derecha perfil para esferas de 4 mm, con $\phi = 0.8$ y $v_f = 0.4$ m/s.	63

6.2. Campo de temperaturas del gas al interior del reactor MPI, izquierda perfil para esferas de 10 mm, derecha perfil para esferas de 4 mm, con $\phi = 0.8$ y $v_f = 0.4$ m/s.	63
6.3. Perfiles de temperaturas al interior del reactor MPI para un lecho de esferas con diámetro 10 mm, con $\phi = 0.8$, $v_f = 0.4$ m/s y 10 segundos de diferencia.	64
6.4. Perfiles de temperaturas al interior del reactor MPI para un lecho de esferas con diámetro 4 mm, con $\phi = 0.8$, $v_f = 0.4$ m/s y 10 segundos de diferencia.	64
6.5. Temperaturas registradas al interior del reactor. Resultados para una relación de equivalencia $\phi = 0.7$ y una velocidad de filtración $v_f = 0.51$ m/s.	65
6.6. Velocidades experimentales desplazamiento frente de llama para variados Fire Rate.	66
6.7. Temperaturas registradas al interior del reactor para un frente de llama estabilizado en T1. Resultados para una relación de equivalencia $\phi = 0.55$ y una velocidad de filtración $v_f = 1.04$ m/s.	67
6.8. Velocidades experimentales desplazamiento frente de llama para variados Fire Rate.	68
6.9. Temperaturas numéricas y experimentales registradas al interior del reactor para variados Fire Rate y una relación de equivalencia $\phi = 0.7$	69
6.10. Temperaturas numéricas y experimentales registradas al interior del reactor para variados Fire Rate y una relación de equivalencia $\phi = 0.55$	70
6.11. Temperaturas experimentales registradas al interior del reactor para variados Fire Rate y relaciones de equivalencia.	71
6.12. Campo de temperaturas del gas al interior del reactor MPI utilizando una malla de 1001×11 . Para $\phi = 0.7$ y $v_f = 0.51$ m/s.	71
6.13. Temperatura en el centro y borde del reactor para el sólido, utilizando una malla de 1001×11 elementos. Resultados para una relación de equivalencia $\phi = 0.7$ y una velocidad de filtración $v_f = 0.51$ m/s.	72
6.14. Temperatura en el centro y capa de aislante externa del reactor captado por las termocuplas tipo S y K respectivamente. Resultados para una relación de equivalencia $\phi = 0.7$ y una velocidad de filtración $v_f = 0.51$ m/s.	73

6.15. Resultados numéricos del comportamiento de la conductividad total y efectiva tras someterse a cambios de temperatura por el frente de llama. Resultados para una relación de equivalencia $\phi = 0.7$ y una velocidad de filtración $v_f = 0.51$ m/s.	74
6.16. Resultados numéricos en detalle del comportamiento de la conductividad tras someterse a cambios de temperatura por el frente de llama. Resultados para una relación de equivalencia $\phi = 0.7$ y una velocidad de filtración $v_f = 0.51$ m/s.	74
6.17. Perfil de temperaturas al centro del reactor, para variados porcentajes de espesor en una HS de 6.5 mm de diámetro tras 15 minutos del encendido.	75
6.18. Detalle de perfiles de temperatura al centro del reactor, para variados porcentajes de espesor en una HS de 6.5 mm de diámetro tras 15 minutos del encendido.	75
6.19. Conductividad de la HS con respecto a la temperatura, para variados porcentajes de espesor en una HS de 6.5 mm de diámetro tras 15 minutos del encendido.	76
6.20. Conductividad radiante al interior de la HS, para variados porcentajes de espesor en una HS de 6.5 mm de diámetro tras 15 minutos del encendido.	76
6.21. Emisividades de H_2O en estado vapor (izquierda) y CO_2 en estado gaseoso (derecha) con respecto a la temperatura y la cantidad volumétrica en la mezcla.	77
6.22. Curvas de emisividad mezcla CO_2 - H_2O para variadas configuraciones	78
A.1. Variables para ecuaciones de Leckner [29]	83
B.1. Estado mesa construida previo a la instalación de respaldo, armado reactor y línea de gas.	84
B.2. Diámetros	85
B.3. Punto soldadura entre cable compensado y filamento correspondiente.	86
B.4. Difusor de temperatura instalado sobre reactor de medio poroso.	87
C.1. Dispersión de temperaturas en detalle tras ignición de reactor, para $\phi = 0.7$ y $v_f = 0.51$ m/s.	88
D.1. Reactor de medio poroso inerte utilizado para experimentación, en detalle las dimensiones de puntos de soldadura y distribución de termocuplas.	90
F.1. Aparato generador de esferas huecas con gas en su interior.	94

Índice de cuadros

6.1. Resultados para un paso de tiempo $dt = 0.1$ segundos.	61
6.2. Resultados para un paso de tiempo $dt = 0.05$ segundos.	61
6.3. Resultados para un paso de tiempo $dt = 0.01$ segundos.	61
6.4. Resultados para una malla de 1001×11 elementos.	61
6.5. Velocidades experimentales adicionales	67
6.6. Temperaturas experimentales adicionales	70
6.7. Comparación gases producto entre modelos	79

Nomenclatura

Sub-índices

0	Inicial
amb	Ambiente
bed	Lecho poroso
c	Centro
CH ₄	Metano
CO ₂	Dióxido de carbono
eff	Efectiva
ext	Externo
f	Fría
g	Gas
h	Caliente
H ₂ O	Vapor de agua
int	Interno
O ₂	Oxígeno
p	Partícula
R	Radiante
r	Radial

res Resultante

s Sólido

z Axial

Super-índices

' Actualizado

* Corregido

n Punto temporal arbitrario

Símbolos

α Difusividad térmica (m²/s)

δ Porosidad (-)

\dot{r} Velocidad de reacción metano (kg/m³s)

η Variable auxiliar

λ Conductividad (W/m K)

μ Viscosidad dinámica (Pa·s)

Ω Parámetro de relajación Jacobi

ϕ Relación de equivalencia (-)

ψ Variable auxiliar

ρ Densidad (kg/m³)

σ	Constante Stefan-Boltzmann ($\text{W/m}^2 \text{ K}^4$)	min	minutos
		n	Número de moles (mol)
τ	Transmisividad (-)	Nu	Número de Nusselt (-)
ε	Emisividad alúmina (-)	P	Presión (Pa)
ε_g	Emisividad gas (-)	Pr	Número de Prandtl (-)
φ	Función corriente	R	Constante universal de gases (J/kg K)
α	Coefficiente intercambio de calor ($\text{W/m}^2 \text{ K}$)	r	Componente radial (m)
A_r	Sección transversal del reactor (m^2)	Ra	Número de Rayleigh
C_p	Calor específico (J/kg K)	Re	Número de Reynolds (-)
d	Diámetro (m)	SS	Esfera sólida
E_R	Coefficiente de Rosseland (m^{-1})	T	Temperatura (K)
E_a	Energía de activación (J/kg)	V	Volumen (m^3)
F	Factor de forma (-)	v	Velocidad (m/s)
FR	Fire rate (kW/m^2)	v_f	Velocidad de filtración (m/s)
HS	Esfera hueca	w	Fracción másica adimensional (-)
k	Constante velocidad Arrhenius (-)	z	Componente axial (m)
k_0	Constante frecuencia (s^{-1})	.	Separador decimal
L	Litros	GN	Gas Natural
Le	Número de Lewis (-)	ufc	Velocidad frente de combustión (cm/s)
Lm	Longitud media haz (m)		

Capítulo 1

Introducción

El aumento de la población en el mundo ha crecido en conjunto a la demanda energética [1], implicando una gran dependencia a combustibles fósiles para sustentar lo solicitado diariamente. Éstos se han utilizado durante varias décadas como el principal elemento generador de energía, generando de tal modo variados problemas medioambientales a causa de los gases provenientes de la combustión. Estos gases, han producido el conocido efecto invernadero, principal partícipe del calentamiento global. Lo cual ha llevado a la comunidad científica a investigar y aplicar métodos alternativos para suplir el consumo energético e intentar descarbonizar los procesos ya existentes, dando como resultado las energías renovables no convencionales y los combustibles alternativos, como lo son por ejemplo: el biogás, biodiésel e hidrógeno (H_2). Este último ha estado en la mira como un candidato a reemplazar la combustión de hidrocarburos, debido a su nula emisión de carbono [2].

Una de las formas de producir H_2 es a través la separación molecular de agua (H_2O) mediante la generación de vapor - metano [3] a muy altas temperaturas que bordean y/o superan los 1200 K. Durante este proceso, el metano reacciona con el vapor de agua, dando como productos H_2 , CO, CO_2 , donde finalmente los gases almacenados se someten a un proceso de adsorción para eliminar las impurezas y dejar únicamente hidrógeno.

Estas temperaturas son fácilmente alcanzadas dentro de un reactor de medios porosos [4], el cual cuenta con un proceso de combustión que está caracterizado por utilizar los tres métodos de transferencia de calor (Figura 1.1) y contar con emisiones muy bajas [2] gracias a la facilidad de control de temperatura en el frente de combustión, ya que tiene la capacidad de lograr filtrar un fluido entre los poros, de modo que el reactor tiene la facilidad de combustionar dentro de los poros variadas mezclas de combustible generando así un frente de combustión formado por microllamas estables [5]. En comparación a

otros métodos clásicos como lo es un quemador de alta potencia, éstos cuentan con un tamaño aproximadamente 10 veces menor (revisar plano en Anexo D.1). Actualmente se ha realizado experimentación con este tipo de tecnología [6] e investigación sobre modelos aplicables a reactores que utilicen este medio [7].

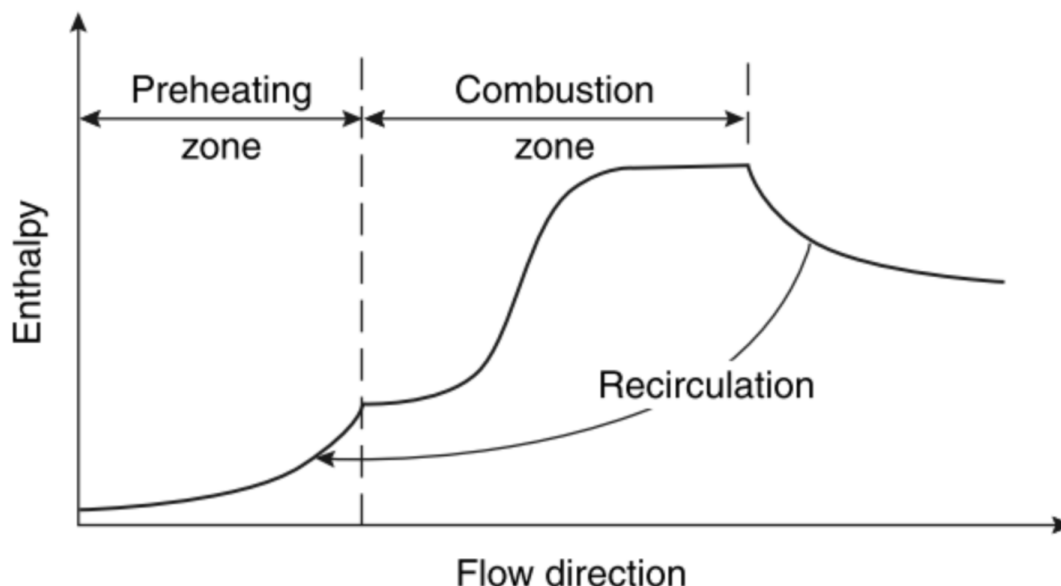


Figura 1.1: Esquema efecto de recirculación de calor al interior de un reactor de medios porosos [5]

1.1. Combustión en medios porosos inertes

Un reactor de medios porosos es, en palabras simples, un recipiente que contiene un lecho con pequeñas perforaciones o espacios para que la mezcla de combustible logre fluir. Estos espacios se conocen como los poros y pueden ser formados mediante esponjas cerámicas [8], esferas sólidas [9, 10] (SS), esferas huecas [6] (HS), esferas metálicas [11], entre otros materiales, es más, se cuenta con registros de fabricación de esferas metálicas rellenas de gases a altas presiones realizada en laboratorios de la NASA [12], las cuales son fabricadas mediante un aparato generador de esferas rellenas de gas [13]. Esta porosidad, representa a un porcentaje en volumen del medio utilizado, la cual contiene un rango desde 0.02 hasta 0.98 [4]. Para el caso de esferas ordenadas aleatoriamente, se espera que su porosidad sea de un 40 % [4]. El fin de esta combustión es aprovechar al máximo la recirculación de calor por conducción, convección y radiación (Figura 1.1). Por parte del lecho poroso, el cual en este caso estudiado son las esferas, se tiene aporte

mediante conducción y radiación, mientras que la mezcla gaseosa lo hace con convección. El lecho poroso, permite suministrar calor a la premezcla que está pronta a combustionar, ayudando de tal manera a ciertas combinaciones de mezclas de combustible alcanzar valores súper-adiabáticos [14].

Dentro de estos reactores, se genera un frente de combustión que es posible considerar como una llama plana, puesto a que corresponde a una serie de micro-llamas formada al interior de cada poro, generando un disco de llama de aproximadamente 1 cm de espesor. Este frente viaja aguas arriba (dirección contra flujo mezcla) o aguas abajo según la relación de mezcla que se introduzca al reactor, entre otros factores. Este movimiento se genera por el gradiente de temperatura (ΔT) generado entre el sólido y el gas, el cual está directamente vinculado a la relación de combustible - aire (ϕ), denominada como relación de equivalencia o ratio, que expresa una relación volumétrica entre el combustible de la mezcla y el aire suministrado:

$$\phi = \frac{\left(\frac{x_{fuel}}{x_{air}}\right)_{actual}}{\left(\frac{x_{fuel}}{x_{air}}\right)_{stoich}} \quad (1.1.1)$$

Donde x_{fuel} , x_{air} representa la fracción molar del combustible y aire utilizado respectivamente. Las mezclas que tengan una relación de equivalencia mayor a 1 (más combustible que aire) son llamadas mezclas ricas, mientras que para el caso menor a 1, como lo es el presente estudio, se les conoce como mezclas pobres.

El uso de HS en reactores de medios porosos es un método relativamente nuevo y cuenta con pocos estudios. Actualmente la publicación realizada por Fierro et al. [15] es el único ejemplar oficial que cuenta con información, estudios y simulaciones con respecto al uso de HS en los reactores de medios porosos inertes. Gutiérrez [6] realizó su memoria de titulación en la UTFSM investigando experimentalmente el comportamiento de las temperaturas, velocidades de propagación y gases producto en reactores de medios porosos inertes compuestos por HS. Sin embargo, ninguna de las dos investigaciones se focaliza en el comportamiento de las propiedades del frente de llama (temperatura y velocidad de desplazamiento) en función de la energía disponible que ingresa al reactor (Fire Rate). El presente estudio contempla investigación tanto numérica como experimental de los efectos producidos al interior del reactor tras modificar el Fire Rate, sumado a un estudio numérico de cómo afecta la radiación al interior de la esfera.

1.1.1. Esferas huecas como medio poroso inerte

El uso de HS, al igual que las SS, tienen por objetivo favorecer el precalentamiento del gas próximo a combustionar mediante la conducción de calor generada entre ellas,

elevando la entalpía de la premezcla aire-combustible antes de la reacción de oxidación. La diferencia entre HS y SS se encuentra en la cantidad de material sólido por la que está compuesta cada una, ya que al ser esferas huecas no requieren de grandes cantidades de calor para alcanzar altas temperaturas, facilitando así el desplazamiento del frente de llama al interior del reactor. La diferencia es observable tanto en simulaciones como en laboratorio, Gutiérrez [6] por ejemplo, cuenta con registros experimentales utilizando un reactor de medios porosos inertes relleno con SS y HS por separado, donde se aprecia un cambio en las velocidades con las que se desplaza el frente de llama, obteniendo valores promedio de -0.006 cm/s para el caso de SS y -0.010 cm/s para HS, ambos resultados para un mismo caudal y relación de equivalencia.

1.1.2. Velocidad de frente de llama

La velocidad del frente de llama, o velocidad de propagación, se le nombra al fenómeno de desplazamiento del frente de llama (o frente de combustión) producido al interior del reactor de medios porosos. Este frente de llama se produce por la combustión realizada en los poros del reactor, generando una serie de microllamas que en conjunto forman un disco conocido como llama plana [4]. Este frente de llama puede tener tres comportamientos, uno desplazándose aguas arriba (en dirección contra el flujo de combustible), aguas abajo (en dirección a favor del flujo de combustible) y estabilizado (velocidad igual a 0). El comportamiento aguas arriba se da cuando la energía entregada por la parte química predomina por sobre la energía que recircula al interior del reactor, causando que el frente de llama se desplace en sentido contrario al flujo. El fenómeno de aguas abajo se da cuando la recirculación de energía predomina por sobre la energía química, generando un desplazamiento a favor del flujo y momento en el que la temperatura del frente logra valores súper-adiabáticos. Por último, el fenómeno de estabilización se produce cuando la recirculación de calor logra un equilibrio con la fase química, provocando que el frente de llama no se desplace y se mantenga sin movimiento indefinidamente hasta que se perturbe el equilibrio por algún factor del mismo reactor o de las condiciones experimentales [7, 15–17].

1.1.3. Tasa de quemado

La tasa de quemado (Fire Rate) es una relación entre la cantidad de energía que se dispone por unidad de área (kW/m^2), relación que es comúnmente aplicada en análisis de quemadores industriales. Sin embargo, Hashemi et al. [18] la utiliza en estudio experimental de medios porosos inertes, en específico el uso de esponjas cerámicas. El

objetivo de Hashemi era encontrar puntos críticos en los que un quemador de medios porosos inertes cerámicos dejara de funcionar a causa del número de Peclet con el que se operaría en la experimentación, o bien, encontrar puntos en donde el frente de llama se encontrara en un estado de equilibrio (punto de estabilización). Sus resultados apuntan a que, para valores superiores a 3500 kW/m² se daba un punto de extinción de llama, a causa de la gran cantidad volumétrica de flujo. Para el presente estudio fue posible realizar experimentación con valores superiores a este.

La ecuación que describe el comportamiento del Fire Rate (FR) en medios porosos presentada por Hashemi es de la forma:

$$FR = \frac{LHV \cdot \dot{m}_{fuel}}{A} \quad (1.1.2)$$

Donde LHV presenta el poder calorífico inferior del combustible utilizado, \dot{m}_{fuel} el flujo másico del combustible, y A el área transversal del reactor. En donde la modificación del flujo másico del combustible cambia el valor de la relación de equivalencia (en el caso de mantener constante el flujo de aire) o bien, alterar la velocidad de filtración manteniendo una relación de equivalencia fija (en el caso de modificar proporcionalmente el flujo de aire).

1.2. Objetivos de investigación

Como se mencionó anteriormente, el estudio de esferas huecas (HS) en reactores de medios porosos inertes se considera una técnica nueva y con estudios e información limitada, a diferencia de las esferas sólidas (SS) y las esponjas cerámicas. Estas últimas cuentan con una gran cantidad de trabajos de investigación, utilizando principalmente modelos unidimensionales, para reconocer las temperaturas, velocidades de frentes de combustión y gases generados, mediante la modificación de los parámetros operacionales como la relación de equivalencia, las velocidades de filtración entre otros.

1.2.1. Objetivo general

El objetivo general de la tesis consiste en investigar numérica y experimentalmente el “Fire Rate” en un reactor de medio poroso inerte compuesto por esferas huecas, considerando diferentes mezclas de gases al interior de dichas esferas, con tal de analizar la temperatura y velocidad de desplazamiento del frente de llama.

1.2.2. Objetivos específicos

- I. Seleccionar un modelo bidimensional para investigar un proceso de combustión en un reactor de medios porosos inertes compuesto por HS.
- II. Incorporar la radiación interna de la HS al modelo bidimensional mediante una conductividad radiativa equivalente, considerando una mezcla gaseosa de $\text{CO}_2\text{-H}_2\text{O}$ en su interior.
- III. Diseñar, construir e implementar un reactor de medios porosos inertes compuesto por HS con aire en su interior.
- IV. Desarrollar experimentos variando parámetros operacionales.
- V. Analizar, interpretar y concluir en base a los resultados numéricos y experimentales.

Capítulo 2

Transferencia de calor en esferas huecas con interior participativo

Tradicionalmente, los estudios tanto experimentales como numéricos en reactores se han basado en usos de esferas sólidas como medio inerte [19, 40] o bien, esponjas cerámicas [18]. Sin embargo, en base a esferas huecas sólo se tiene registro de los estudios realizados por Cristóbal Gutierrez [6] y Matías Fierro [15]. El uso de esferas huecas se asemeja mucho a las sólidas, con cambios en las propiedades termo-físicas del material (densidad y conductividad) y la adición de métodos de transferencia de calor al interior del casquete esférico, puesto que el gas encerrado al interior puede participar en la conductividad efectiva que presente la esfera (Figura 2.1).

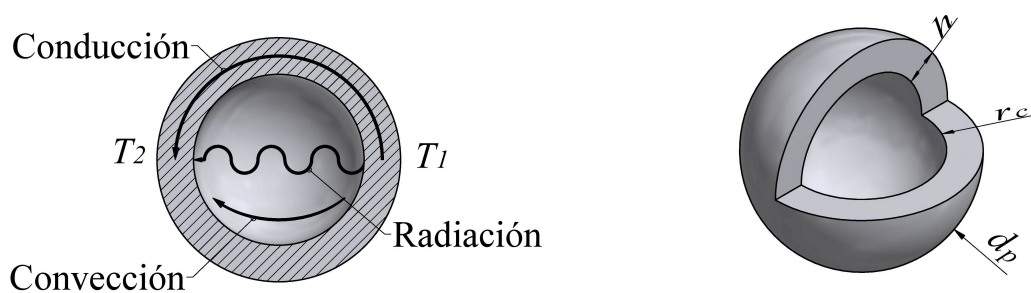


Figura 2.1: Esquema representativo de esfera hueca, con detalle de los métodos de transferencia de calor agregados para una nueva configuración y parámetros dimensionales.

Las propiedades termo-físicas como la densidad (ρ) y calor específico (C_p), según lo presentado por Fierro [15], se calculan conociendo su diámetro, espesor, y densidad del

material y gas contenido en el centro de la misma, según la relación:

$$\rho_{HS} = \frac{\rho_s \cdot (r_p^3 - (r_p - h)^3) + \rho_c \cdot (r_p - h)^3}{r_p^3} \quad (2.0.1)$$

Para la presente investigación, el valor de la densidad de las esferas fue determinado empíricamente, arrojando valores entre 1250 kg/m³ y 1380 kg/m³ para una relación de espesor equivalente al 10 %, entregando un error medio del 12 %. Por su parte, el calor específico se modelará mediante el polinomio presentado por Toledo [7], debido a que Fierro [15] muestra una diferencia despreciable entre el calor específico de HS y SS.

2.1. Conducción

En las esferas sólidas, donde la conducción se considera únicamente entre los puntos en que la esfera se encuentra en contacto con otras, el cálculo es simple y cuenta con variados experimentos y modelos matemáticos [4] que presentan una conductividad para el análisis de combustión en medios porosos. Sin embargo, para el caso de las esferas huecas, el cálculo y análisis no es tan sencillo debido al gas o mezcla de gases encerrado en el interior de la esfera.

Zian Jia *et al* [24] presenta un estudio en donde deduce matemáticamente una conductividad efectiva para el casquete esférico, utilizando las propiedades termo-físicas del centro y el espacio que rodea el cuerpo, haciendo una especie de partícula efectiva.

La conductividad de la partícula sólida equivalente presentada por Zian (Figura 2.2), se expresa mediante la relación (2.1.1). Cabe mencionar que los efectos de convección y radiación al interior de la esfera no son considerados puesto que el tamaño de la esfera no es lo suficientemente grande.

$$\lambda_p = \frac{3 + (\lambda_c/\lambda_s - 1)(1 + 2\nu)}{3 + (\lambda_c/\lambda_s - 1)(1 - \nu)} \lambda_s, \text{ con } \nu = \left(1 + \frac{h}{r_p}\right)^{-3} \quad (2.1.1)$$

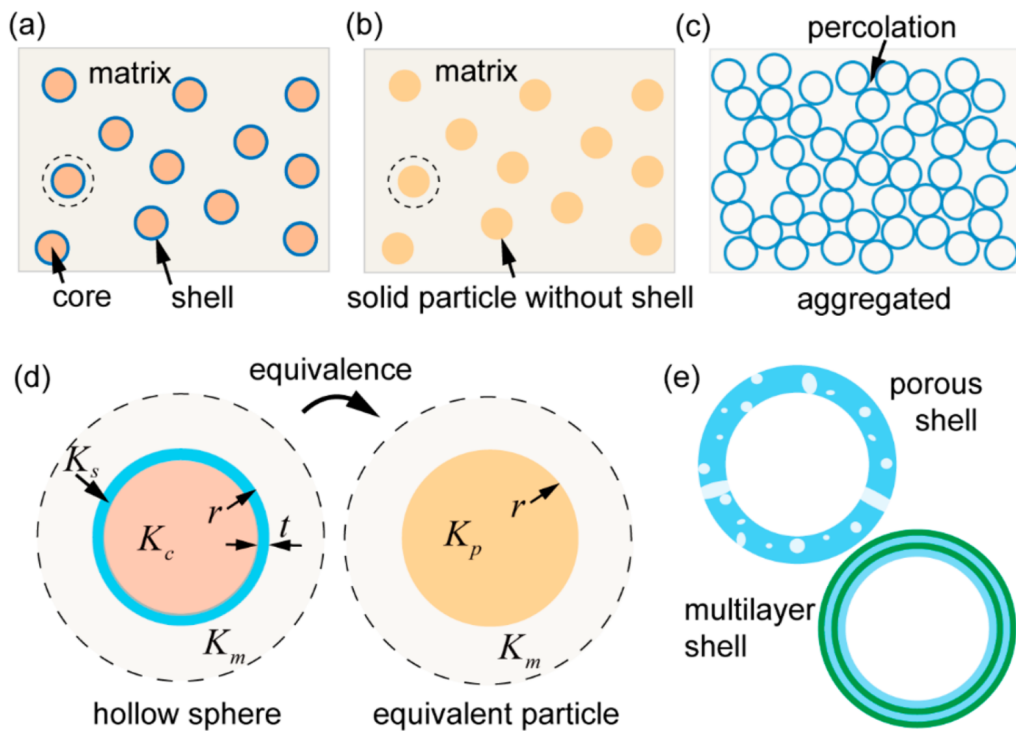


Figura 2.2: Esquema de transformación de partícula hueca a partícula equivalente. a) Esfera hueca compuesta por 3 fases, matriz, casquete y centro. b) Partícula sólida con distribución equivalente de a. c) Conjunto de esferas huecas con matriz y centro del mismo elemento. d) Equivalencia de la esfera hueca como una sólida. El radio exterior de la esfera es r ; el espesor del casquete es t . K_m (λ_m), K_c (λ_c), y K_s (λ_s) son la conductividad de la matriz, centro y casquete respectivamente, K_p (λ_p) es la conductividad de la partícula equivalente. e) Representación de dos casquetes especiales que pueden tratarse como esferas huecas, una con casquete poroso y otra con varios materiales. [24].

2.2. Convección natural

La convección natural a causa de los gradientes de temperatura, puede presentarse al interior de la esfera, siendo un aporte al fenómeno de transferencia de calor total que contaría el sistema. Considerar este efecto modificaría los valores de temperatura y flujo de calor del sistema. Sin embargo, [15] presenta un estudio basado en el número de Rayleigh (Ra) correspondiente al fluido encapsulado en la esfera, donde se concluye que los efectos convectivos por el gradiente de temperatura son considerables pero para esferas de diámetro menor a 45.5 mm, este efecto es prácticamente imperceptible. Para el presente estudio, las esferas más grandes no presentan un diámetro mayor a 5 mm.

2.3. Radiación

La radiación se presenta por el interfaz que se genera entre las esferas de alúmina al interior del reactor tras estar sometidas a altas temperaturas [23]. Para el caso de los medios porosos, se genera un factor de forma dependiente tanto del diámetro de la partícula como de la porosidad con la que se esté trabajando. Bubnovich y Toledo [7] proponen un modelo de distribución de radiación entre esferas derivado de lo propuesto por Kaviany [4].

Otro fenómeno de radiación se presenta al interior de la HS, donde las caras internas de la esfera se transmiten calor. Además, esta transferencia de calor puede considerarse un gas no transparente en el interior de las esferas [38, 39].

2.4. Conductividades efectivas

A continuación se presentan dos tipos de conductividades efectivas, una donde el interior de la HS no se considera como agente participativo en la transferencia de calor y otra en donde sí lo es. El planteamiento es similar ya que sólo se adiciona un término a la ecuación de conductividad efectiva.

La conductividad efectiva se entiende como una idealización de todo un conjunto como un único elemento, tal como el mostrado en la Figura 2.2, acoplando los tres mecanismos de transferencia de calor como una única conducción (con las equivalencias correspondientes). En particular, se considera conducción del material sólido, conducción por radiación entre esferas y una conductividad radiante generada por las caras internas de la esfera. En el caso de la convección al interior de la HS, se desprecia debido a su tamaño.

2.4.1. Ecuaciones de Leckner

Para considerar la radiación interna de una esfera hueca con gases en su interior, como el CO_2 y H_2O , se debe conocer la emisividad, transmisividad y absorptividad. Los estudios mostrados por Hottel [36], muestran que la emisividad varía en función de la temperatura, presión parcial y la longitud total en la que esté sometido un sistema. Hottel fue uno de los pioneros en lo que respecta a la investigación de estos fenómenos y realizó unas curvas en base a datos empíricos para variadas temperaturas y presiones parciales, éstas son conocidas como las Curvas de Hottel. Basándose en los estudios que realizó Hottel, el ingeniero Bo Leckner propuso un modelo de funciones basándose en los estudios

realizados por Hottel [42], en donde se adaptan las curvas para cualquier presión parcial y temperatura que se encuentre el gas sin tener mayores errores, facilitando el estudio para situaciones iterativas o de mucho cálculo repetitivo. Estas funciones determinan el valor de la emisividad de cada gas por separado [29], y se escriben de la forma:

$$\epsilon(p_a L, p, T_g)_{gas} = \epsilon_0(p_a L, T_g) \cdot \frac{\epsilon}{\epsilon_0}(p_a L, p, T_g) \quad (2.4.1)$$

$$\frac{\epsilon}{\epsilon_0}(p_a L, p, T_g) = \left[1 - \frac{(a-1)(1-P_E)}{a+b-1+P_E} \cdot \exp(\gamma) \right] \quad (2.4.2)$$

$$\gamma = \left\{ -c \left[\log_{10} \frac{(p_a L)_m}{p_a L} \right]^2 \right\} \quad (2.4.3)$$

$$\epsilon_0(p_a L, T_g) = \exp \left[\sum_{i=0}^M \sum_{j=0}^N C_{ji} \left(\frac{T_g}{T_0} \right)^j \left(\log_{10} \frac{p_a L}{(p_a L)_0} \right)^i \right] \quad (2.4.4)$$

Para lograr determinar el valor final de la mezcla gaseosa, se suman ambos valores junto a un factor de corrección en donde se hace presente la presión parcial a la que se encuentran los gases.

$$\Delta\epsilon = \left(\frac{\psi}{10.7 + 101\psi} - 0.0089\psi^{10.4} \right) \cdot \left[\log_{10} \frac{(p_{H_2O} + p_{CO_2})L}{(p_a L)_o} \right]^{2.76} \quad (2.4.5)$$

$$\psi = \frac{p_{H_2O}}{p_{H_2O} + p_{CO_2}} \quad (2.4.6)$$

Las variables presentes en las ecuaciones mostradas y la matriz C_{ji} , se pueden encontrar en el Anexo A. El valor de la longitud media del haz L se puede aproximar mediante la expresión (2.4.7), sin embargo, para el caso de esferas su valor se encuentra tabulado [41] tras ser una figura conocida, su expresión es equivalente a lo presentado en (2.4.8)

$$L_m = 3.6 \frac{V_{gas}}{A} \quad (2.4.7)$$

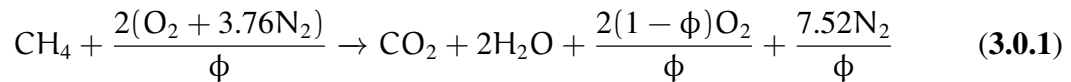
$$L_m = \frac{2}{3} d_{esfera} \quad (2.4.8)$$

Para la presente investigación estas expresiones de transferencia de calor son consideradas en el modelo bidimensional que se presenta a continuación.

Capítulo 3

Modelo matemático de combustión MPI 2D

El modelo matemático bidimensional para HS planteado, es una modificación del modelo unidimensional que analiza SS establecido por Bubnovich y Toledo [19], y del modelo bidimensional propuesto por Diaz [20]. Ambos modelos presentan un método de resolución de combustión completa en base a una reacción química de un solo paso, de la forma:



Donde las ecuaciones gobernantes consideran la ecuación de estado, continuidad mediante uso de ecuación de Ergun, y conservación de energía por parte del sólido, gas y especie química.

3.1. Consideraciones

Debido a la gran cantidad de ecuaciones involucradas dentro del fenómeno estudiado que no cuentan con solución trivial, es necesario plantear una serie de consideraciones y supuestos, como son:

- I. La mezcla aire-combustible actúa como un gas ideal, laminar, incompresible, exento de efectos gravitatorios, presión constante y con una reacción química de un solo paso e irreversible.
- II. La temperatura inicial del reactor y la de entrada del combustible serán equivalentes a 300 K.

- III. El medio poroso utilizado (HS) es compuesto de alúmina y sólo modifica sus propiedades termo-físicas con respecto a la temperatura, es totalmente inerte y no cambia de forma.
- IV. La ecuación de continuidad se trabaja en estado estacionario.
- V. No existe equilibrio térmico entre el medio sólido y la fase gaseosa ($T_s \neq T_g$).
- VI. La mezcla gaseosa interna de la HS, puede contener CO_2 y H_2O en fase gaseosa.
- VII. La situación física a modelar se presenta en la Figura 3.1.

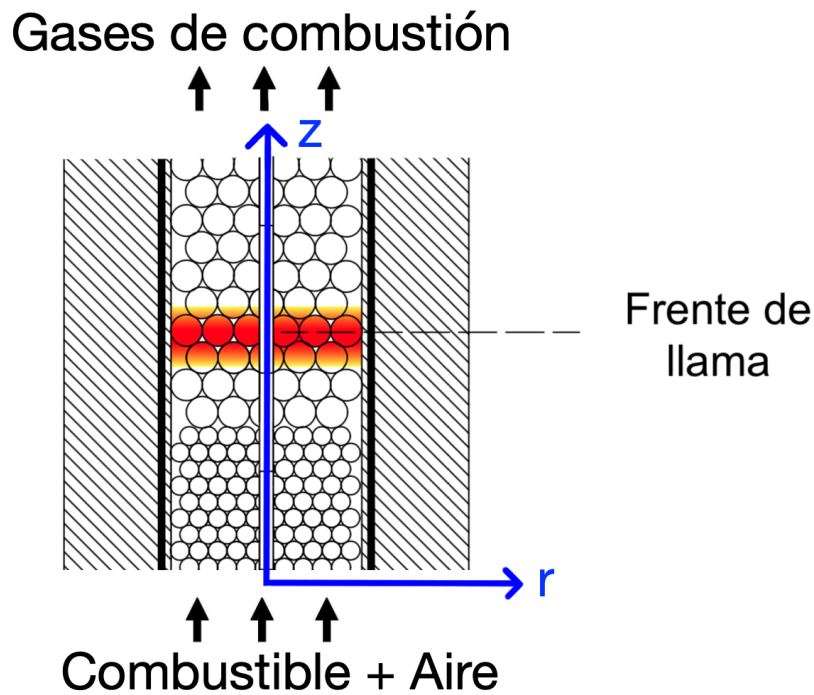


Figura 3.1: Esquema representativo de situación física a simular.

3.2. Condiciones iniciales y de borde

Las condiciones con las que opera el modelo matemático son las siguientes:

3.2.1. Condiciones iniciales

$$T_s = T_g = T_0 \quad (3.2.1)$$

$$w = w_0 = \frac{1}{1 + 17.16(1 + \phi)} \quad (3.2.2)$$

$$v_z = v_r = 0 \quad (3.2.3)$$

$$P = P_0 \quad (3.2.4)$$

3.2.2. Condiciones de borde radiales

$$r = 0$$

$$\frac{\partial T_s}{\partial r} = 0 \quad (3.2.5)$$

$$\frac{\partial w}{\partial r} = \frac{\partial v_z}{\partial r} = \frac{\partial T_g}{\partial r} = \frac{\partial P}{\partial r} = 0 \quad (3.2.6)$$

$$v_r = 0 \quad (3.2.7)$$

$$r = R$$

$$-\lambda_{eff} \frac{\partial T_s}{\partial r} = h \cdot (T_s - T_{ext}) + \epsilon \cdot \tau \cdot \sigma \cdot (T_s^4 - T_{ext}^4) \quad (3.2.8)$$

$$\frac{\partial w}{\partial r} = \frac{\partial T_g}{\partial r} = \frac{\partial P}{\partial r} = 0 \quad (3.2.9)$$

$$v_z = v_r = 0 \quad (3.2.10)$$

3.2.3. Condiciones de borde axiales

$$z = 0$$

$$\frac{\partial P}{\partial z} = \left(\frac{\mu_g}{K_1} + \frac{\rho_g \cdot |v_0|}{K_2} \right) \cdot v_0 \quad (3.2.11)$$

$$T_g = T_0 \quad (3.2.12)$$

$$w = w_0 \quad (3.2.13)$$

$$v_z = v_0 ; v_r = 0 \quad (3.2.14)$$

$$z = L$$

$$-\lambda_{\text{eff}} \frac{\partial T_s}{\partial z} = \epsilon \cdot \tau \cdot \sigma \cdot (T_s^4 - T_{\text{ext}}^4) \quad (3.2.15)$$

$$\frac{\partial w}{\partial z} = \frac{\partial v_z}{\partial z} = \frac{\partial T_g}{\partial z} = 0 \quad (3.2.16)$$

$$v_r = 0, P = P_0 \quad (3.2.17)$$

3.3. Ecuaciones gobernantes

3.3.1. Ecuación de estado

La ecuación de estado, principalmente denominada como ecuación de gas ideal, describe propiedades del gas en base al volumen, presión y temperatura. Ésta se plantea de la siguiente forma:

$$PV = nRT_g \quad (3.3.1)$$

En donde P es la presión de la mezcla gaseosa medida en Pa, V el volumen de la mezcla gaseosa medido en m^3 , n el número de moles de la mezcla medida en mol, R la constante universal de gases medida en kJ/mol K y T_g la temperatura del gas medida en K.

Mediante esta ecuación, se calcula la densidad que tendrá el gas al interior del reactor, en base a la variación de temperatura.

3.3.2. Ecuación de Ergun

La ecuación de Ergun sirve para describir la pérdida de carga al interior de un medio poroso, en específico el factor de fricción, mediante una modificación en el número de Reynolds para sistemas porosos [21]. Este factor de fricción puede utilizarse para extender la ecuación de Kozeny-Carman, con el fin de obtener una descripción detallada de la caída de presión de un flujo que transite al interior de un medio poroso. Dicha ecuación se formula de la forma:

$$-\nabla P = \frac{\mu_g}{K_1} v_i + \frac{\rho_g |v_i| v_i}{K_2} \quad (3.3.2)$$

donde v_i representa la velocidad del fluido en su componente radial o axial, K_1 es la permeabilidad del medio poroso y K_2 es el coeficiente inercial del medio poroso [22]. Ambos coeficientes se formulan de la forma:

$$K_1 = \frac{d_p^2 \cdot \delta^3}{150 \cdot (1 - \delta)^2} \quad (3.3.3)$$

$$K_2 = \frac{d_p \cdot \delta^3}{1.75 \cdot (1 - \delta)} \quad (3.3.4)$$

3.3.3. Ecuación de continuidad

La ecuación de continuidad se analiza de manera estacionaria. Su formulación es la siguiente:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\rho_g \cdot r \cdot v_r) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho_g \cdot v_z) = 0 \quad (3.3.5)$$

3.3.4. Ecuación de conservación de energía para el medio sólido

La ecuación que describe la conservación de energía en el sólido es presentada por Modest [23], en donde su adaptación a medios porosos viene descrita por Gonzalez [19]. Cabe destacar, que según lo planteado por Fierro [15], la convección del gas encerrado al interior de la esfera puede ser despreciada, por lo que se considera únicamente una conductividad efectiva donde está presente la radiación y conducción.

La forma de expresar la conservación de energía en coordenadas cilíndricas es:

$$(1 - \delta)(\rho_s \cdot C_{p,s}) \frac{\partial T_s}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \cdot \lambda_{eff} \frac{\partial T_s}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_{eff} \frac{\partial T_s}{\partial z} \right) + \alpha(T_g - T_s) \quad (3.3.6)$$

El polinomio que describe el valor del calor específico en base a la temperatura, viene descrito por [19]:

$$C_{p,s} = 29.567 + 2.61177 \cdot T_s - 0.00171 \cdot T_s^2 + 3.382 \times 10^{-7} \cdot T_s^3 \quad (3.3.7)$$

El coeficiente de intersticial de intercambio de calor, α , viene descrito igualmente por [19]:

$$\alpha = \frac{6 \cdot (1 - \delta) \cdot \lambda_g \cdot (2.0 + 1.1 \cdot Pr^{1/3} \cdot Re^{0.6})}{d_p^2} \quad (3.3.8)$$

$$\lambda_{eff} = \lambda_s + \lambda_r \quad (3.3.9)$$

Donde λ_{eff} representa la conductividad efectiva de la HS. El parámetro de conductividad por radiación (λ_r) es dado por el interfaz entre esferas, se plantea al igual que Toledo [7], λ_s presenta la conductividad de la esfera, con el planteamiento entregado

por Jia [24].

$$\lambda_{eff} = (1 - \delta) \cdot \lambda_p + \frac{32 \cdot \epsilon \cdot dp \cdot T_s^3}{9 \cdot (1 - \delta)} \quad (3.3.10)$$

$$\lambda_p = \frac{3 + (\lambda_c/\lambda_s - 1)(1 + 2\nu)}{3 + (\lambda_c/\lambda_s - 1)(1 - \nu)} \lambda_s \quad (3.3.11)$$

$$\nu = \left(1 + \frac{h}{r_p}\right)^{-3} \quad (3.3.12)$$

$$\lambda_s = -0.21844539 + 0.0017653 \cdot T_s + 8.2266 \times 10^{-8} \cdot T_s^2 \quad (3.3.13)$$

λ_p es la conductividad de la HS presentada por [24] con λ_c como la conductividad del gas encerrado en el centro de la esfera.

Además, es posible considerar los efectos radiativos al interior de la esfera, como un flujo de calor radiante, el cual es posible acoplarlo al calor existente en la conducción de la esfera, según lo señalado por Surjikov [25] y Modest [23]. Mediante un coeficiente de conducción radiante es posible replantear el flujo de calor radiante como una descripción de la ley de Fourier, conocida como aproximación de Rosseland [26–28], descrita de la forma:

$$\nabla \cdot q_{R,i} = -\lambda_R \frac{\partial T}{\partial x_i} = -\lambda_R \frac{\partial T}{\partial z} \quad (3.3.14)$$

Obteniéndose un nuevo valor de conductividad efectiva, el cual puede ser considerado como una conductividad total efectiva λ_T .

$$\lambda_T = \lambda_{eff} + \lambda_R \quad (3.3.15)$$

La aproximación de Rosseland se expresa mediante la siguiente relación

$$\lambda_R = \frac{16\sigma T_R^3}{3E_R} \quad (3.3.16)$$

Donde T_R representa una temperatura radiante compuesta entre la placa caliente y fría del medio, y el término E_R representa el coeficiente de Rosseland.

$$T_R^3 = \frac{T_h^3 + T_f^3}{4} \quad (3.3.17)$$

Sin embargo, una forma de replantear el flujo de calor radiante en donde sean partícipes las emisividades tanto del material refractario y el medio participativo que esté

expuesto el material, se puede expresar de la siguiente forma [23]:

$$C = \frac{1 - (1 - \varepsilon)F_{i,j}\tau_g}{\varepsilon}, \quad b = F_{i,j}(1 - \varepsilon_g)\sigma T_w^4 - F_{i,j}\varepsilon_g\sigma T_g^4 \quad (3.3.18)$$

$$q_R = \frac{b}{C} \quad (3.3.19)$$

$$\nabla \cdot q_R = -\frac{4\sigma\varepsilon [(1 - \varepsilon_g)T_R^3 - \varepsilon_g T_g^3]}{1 - (1 - \varepsilon)\tau_g} \frac{\partial T}{\partial z} = -\lambda'_R \frac{\partial T}{\partial z} \quad (3.3.20)$$

Considerando el supuesto de que la temperatura de la superficie radiante es muy similar a la del gas encerrado en el interior, por lo que $\frac{\partial T_w}{\partial z} = \frac{\partial T_g}{\partial z} = \frac{\partial T}{\partial z}$. Para mantener el esquema planteado por Rosseland, es necesario considerar el coeficiente de Rosseland E_R , también conocido como coeficiente de absorción, el cual tiene como unidad m^{-1} .

$$\lambda_R = \frac{16 \cdot \sigma \cdot \varepsilon [(1 - \varepsilon_g)T_R^3 - \varepsilon_g T_g^3]}{[1 - (1 - \varepsilon)\tau_g] E_R} \quad (3.3.21)$$

La simbología de los elementos que componen la conductividad radiante son: la constante de Stefan Boltzmann (σ), emisividad alúmina (ε), transmisividad mezcla gaseosa interna esfera (τ_g), emisividad mezcla gaseosa interna esfera (ε_g), temperatura radiante (T_R), temperatura mezcla gaseosa interna esfera (T_g) y coeficiente de Rosseland (E_R). Para obtener la emisividad y transmisividad de la mezcla gaseosa encerrada al interior de la esfera, se utilizan las ecuaciones de Leckner [29].

Hsu [30] establece que el coeficiente de Rosseland en medios porosos puede darse realizando una relación entre la separación de las caras radiantes y la porosidad del medio. Para este caso, como es aplicado a un solo poro que es completamente cerrado, la porosidad es considerada como 0 y la distancia entre caras radiantes como el diámetro interno de la HS, resultando:

$$E_R = \frac{3}{d_{int}} \quad (3.3.22)$$

Finalmente, considerando la conducción y radiación total de la esfera, la conductividad efectiva total que pertenece a la HS es:

$$\lambda_{eff} = (1 - \delta) \cdot \lambda_p + \frac{32 \cdot \varepsilon \cdot d_p \cdot T_s^3}{9 \cdot (1 - \delta)} + \frac{16 \cdot d_i \cdot \sigma \cdot \varepsilon [(1 - \varepsilon_g)T_R^3 - \varepsilon_g T_g^3]}{3 [1 - (1 - \varepsilon)\tau_g] E_R} \quad (3.3.23)$$

En donde la conductividad del centro (λ_c) presentada en la ecuación (3.3.11), estaría siendo una distribución entre el porcentaje de CO_2 y H_2O que contenga el centro de la

HS, en donde sus conductividades respectivamente son [31]:

$$\begin{aligned}\lambda_{\text{CO}_2} = & 6.085375 \times 10^{-2} - 3.63680275 \times 10^{-4} \cdot T_s + \\ & 1.0134366 \times 10^{-6} \cdot T_s^2 - 9.7042356 \times 10^{-10} \cdot T_s^3 + \\ & 3.27864115 \times 10^{-13} \cdot T_s^4\end{aligned}\quad (3.3.24)$$

$$\begin{aligned}\lambda_{\text{H}_2\text{O}} = & 1 \times 10^{-3} \cdot (17.542 + 0.059339 \cdot T_s + 1.019 \times 10^{-4} \cdot T_s^2 \\ & - 4.2509 \times 10^{-8} \cdot T_s^3 - 1.0624 \times 10^{-12} \cdot T_s^4)\end{aligned}\quad (3.3.25)$$

3.3.5. Ecuación de conservación de energía para la mezcla de gases

La ecuación de conservación de energía para la fase gaseosa [4] se presenta a continuación:

$$\begin{aligned}\rho_g \cdot C_{p,g} \left(\frac{\partial T_g}{\partial t} + v_r \frac{\partial T_g}{\partial r} + v_z \frac{\partial T_g}{\partial z} \right) = & \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_g \frac{\partial T_g}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \cdot \lambda_g \frac{\partial T_g}{\partial r} \right) \\ & - \frac{\alpha \cdot (T_g - T_s)}{\delta} + \Delta h_c \cdot \dot{r}\end{aligned}\quad (3.3.26)$$

En donde se puede apreciar un cambio con respecto a lo presentado por [19] que considera un factor de pérdida fijo. Para este caso, la pérdida de calor se realiza mediante iteraciones internas consideradas en las condiciones de borde, donde se considera la transmisividad del tubo de cuarzo. Las propiedades termofísicas presentadas se describen al igual que [19], de la forma:

$$C_{p,g} = 947.0 \cdot e^{-1.83 \times 10^{-4} \cdot T_g} \quad (3.3.27)$$

$$\lambda_g = 4.82 \times 10^{-7} \cdot C_{p,g} \cdot T_g^{0.7} \quad (3.3.28)$$

La entalpía de combustión de la mezcla (Δh_c) tiene un valor de 50.15 (MJ/m³) y la expresión de la velocidad de reacción del metano (\dot{r}) es:

$$\dot{r} = k \cdot \rho_g \cdot w_{\text{CH}_4} \quad (3.3.29)$$

$$k = k_0 \cdot e^{-E_a/R \cdot T_g} \quad (3.3.30)$$

Donde w_{CH_4} es la fracción másica adimensional del metano, E_a la energía de activación de Arrhenius ($E_a/R=15643.8$ K [19]) y k_0 el factor de frecuencia de colisiones con valor $2.6 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$.

3.3.6. Ecuación de conservación de masa especie química

Al igual que la conservación de energía del gas, la de especie química, en este caso la fracción másica adimensional del metano (anotada como w_i por comodidad visual), es presentada por [4] de la forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho_g \cdot w_i)}{\partial t} + v_r \frac{\partial(\rho_g \cdot w_i)}{\partial r} + v_z \frac{\partial(\rho_g \cdot w_i)}{\partial z} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \cdot D_g \cdot \rho_g \cdot \frac{\partial w_i}{\partial r} \right) \\ + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_g \cdot \rho_g \cdot \frac{\partial w_i}{\partial z} \right) - \dot{r} \end{aligned} \quad (3.3.31)$$

Donde D_g es la difusividad de especies, obtenida a partir del número de Lewis que se considera con valor 1 [7].

$$Le = \frac{\alpha}{D_g} \quad (3.3.32)$$

Con α representando la difusividad térmica, expresada de la forma:

$$\alpha = \frac{\lambda_g}{\rho_g \cdot C p_g} \quad (3.3.33)$$

Por último, las fracciones másicas de los gases resultantes de la combustión [19], se obtienen de la forma:

$$w_{CO_2} = 2.75 \cdot (w_{CH_4 0} - w_{CH_4 res}) \quad (3.3.34)$$

$$w_{H_2O} = 2.25 \cdot (w_{CH_4 0} - w_{CH_4 res}) \quad (3.3.35)$$

$$w_{O_2} = w_{O_2 0} - 4 \cdot \left(\frac{2\phi - 1}{\phi} \right) \cdot (w_{CH_4 0} - w_{CH_4 res}) \quad (3.3.36)$$

Capítulo 4

Método de solución numérica del modelo matemático bidimensional

El modelo matemático se plantea realizando un esquema *upwind* en los términos convectivos mediante un método de resolución ADI (alternating-direction implicit method). El método ADI, con su significado en español, método de direcciones implícitas alternas, es un método desarrollado para describir ecuaciones parabólicas en 2 y 3 dimensiones [32].

Su esquema consiste en dividir el paso de n a $n + 1$ según cuantas dimensiones cuente la ecuación, como en este caso se trata de 2 dimensiones, se realizan 2 divisiones para el análisis temporal. Primero se resuelve la ecuación utilizando la mitad del paso temporal ($n \rightarrow n + 1/2$) mediante un esquema mixto que consiste en utilizar un esquema Euler explícito para el término $\frac{\partial^2 \zeta}{\partial z^2}$ y Euler implícito para $\frac{\partial^2 \zeta}{\partial r^2}$. Resuelta esta ecuación, se invierten los roles para continuar con la otra mitad del paso temporal ($n + 1/2 \rightarrow n + 1$) utilizando Euler implícito en z y Euler explícito en r . Su estructura es de la forma:

$$\zeta^{n+1/2} - \zeta^n = \frac{\alpha \Delta t}{2} \left(\frac{\partial^2 \zeta^n}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 \zeta^{n+1/2}}{\partial r^2} \right) \quad (4.0.1)$$

$$\zeta^{n+1} - \zeta^{n+1/2} = \frac{\alpha \Delta t}{2} \left(\frac{\partial^2 \zeta^{n+1}}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 \zeta^{n+1/2}}{\partial r^2} \right) \quad (4.0.2)$$

Las ecuaciones planteadas son resueltas mediante el algoritmo presentado por [7], correspondiente al TDMA o algoritmo de Thomas. Este algoritmo corresponde a una simplificación de la eliminación de Gauss, utilizada para resolver sistemas tridiagonales

en donde el planteamiento sigue una descripción de la forma:

$$A_{i,j} \cdot \zeta_{i-1,j}^{n+1} - C_{i,j} \cdot \zeta_{i,j}^{n+1} + B_{i,j} \cdot \zeta_{i+1,j}^{n+1} = -F_{i,j} \quad (4.0.3)$$

A diferencia del resto de las ecuaciones, el valor numérico de la velocidad es resuelto mediante un campo de velocidades acoplado a la caída de presión al interior del reactor mediante un método iterativo utilizando un parámetro de relajación de Jacobi.

Todas las discretizaciones son escritas en lenguaje computacional FORTRAN 95 utilizando el software Sublime-Text para facilitar la ayuda visual en el proceso de programación.

4.1. Discretización de la ecuación de continuidad y Ergun

La ecuación de continuidad se plantea mediante lo presentado en la ecuación (3.3.5). En donde las velocidades pueden ser descritas como una derivación de una función corriente " φ ", expresándose de la forma:

$$v_z = \frac{1}{\rho_g \cdot r} \frac{\partial \varphi}{\partial r} \quad (4.1.1)$$

$$v_r = -\frac{1}{\rho_g \cdot r} \frac{\partial \varphi}{\partial z} \quad (4.1.2)$$

Se puede corroborar el cumplimiento de la ecuación de continuidad, reemplazando en (3.3.5), la expresión de las componentes de velocidad como se detalla a continuación:

$$-\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\rho_g \cdot \frac{1}{r} \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\rho_g \cdot \frac{1}{r} \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right) = 0 \quad (4.1.3)$$

$$-\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial r} \right) = 0 \quad (4.1.4)$$

Además, se acopla la ecuación de Ergun como caída de presión al interior del reactor con el fin de poder determinar la velocidad del sistema, resultando en dos ecuaciones. La caída de presión axial y la caída de presión radial es:

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(-\frac{\partial P}{\partial z} \right) = \frac{\partial}{\partial r} \left[\left(\frac{\mu_g}{K_1} + \frac{\rho_g |v_z|}{K_2} \right) \cdot v_z \right] \quad (4.1.5)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(-\frac{\partial P}{\partial r} \right) = \frac{\partial}{\partial z} \left[\left(\frac{\mu_g}{K_1} + \frac{\rho_g |v_r|}{K_2} \right) \cdot v_r \right] \quad (4.1.6)$$

Para simplificar cálculos, se introduce una variable auxiliar η .

$$\eta_z = \frac{\mu_g}{K_1} + \frac{\rho_g |v_z|}{K_2} \quad (4.1.7)$$

$$\eta_r = \frac{\mu_g}{K_1} + \frac{\rho_g |v_r|}{K_2} \quad (4.1.8)$$

Reemplazando en las ecuaciones de caída de presión resulta:

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(-\frac{\partial P}{\partial z} \right) = \frac{\partial}{\partial r} (\eta_z \cdot v_z) \quad (4.1.9)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(-\frac{\partial P}{\partial r} \right) = \frac{\partial}{\partial z} (\eta_r \cdot v_r) \quad (4.1.10)$$

Si se restan las ecuaciones (4.1.9) y (4.1.10) se obtiene una expresión similar con la ecuación de continuidad, la cual se presenta a continuación:

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(-\frac{\partial P}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial P}{\partial r} \right) = -\frac{\partial}{\partial r} (\eta_z \cdot v_z) - \frac{\partial}{\partial z} (\eta_r \cdot v_r) \quad (4.1.11)$$

Reemplazando la velocidad por la función corriente y modificando η , dividiéndola por la densidad del gas se expresa:

$$\frac{\partial}{\partial z} \left[\eta'_r \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right] + \frac{\partial}{\partial r} \left[\eta'_z \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right] = 0 \quad (4.1.12)$$

Resultando en un tipo de ecuación de Laplace, en donde se aplican diferencias finitas y un método de iteración simple para su análisis.

$$\begin{aligned} & \frac{\eta_{i+1,j} + \eta_{i,j}}{2} \cdot \frac{\varphi_{i+1,j} - \varphi_{i,j}}{\Delta z^2} + \frac{\eta_{i-1,j} + \eta_{i,j}}{2} \cdot \frac{\varphi_{i,j} - \varphi_{i-1,j}}{\Delta z^2} \\ & + \frac{\eta_{i,j+1} + \eta_{i,j}}{2} \cdot \frac{\varphi_{i,j+1} - \varphi_{i,j}}{\Delta r^2} + \frac{\eta_{i,j-1} + \eta_{i,j}}{2} \cdot \frac{\varphi_{i,j} - \varphi_{i,j-1}}{\Delta r^2} = 0 \end{aligned} \quad (4.1.13)$$

Desepejando la variable $\varphi_{i,j}$ y utilizando variables auxiliares a , b , c , d , se plantea el método en cómo se iterará la función corriente.

$$\varphi_{i,j}^* = \Omega \cdot \frac{a \cdot \varphi_{i,j+1} + b \cdot \varphi_{i,j-1} + c \cdot \varphi_{i+1,j} + d \cdot \varphi_{i-1,j}}{a + b + c + d} + (1 - \Omega) \cdot \varphi_{i,j}^* \quad (4.1.14)$$

$$a = \left(\frac{\eta_{i,j+1}}{r_{j+1}} + \frac{\eta_{i,j}}{r_j} \right) \cdot r_j \cdot \left(\frac{\Delta z}{\Delta r} \right)^2 \quad (4.1.15)$$

$$b = \left(\frac{\eta_{i,j-1}}{r_{j-1}} + \frac{\eta_{i,j}}{r_j} \right) \cdot r_j \cdot \left(\frac{\Delta z}{\Delta r} \right)^2 \quad (4.1.16)$$

$$c = \eta_{i+1,j} + \eta_{i,j} \quad (4.1.17)$$

$$d = \eta_{i-1,j} + \eta_{i,j} \quad (4.1.18)$$

$$\Omega_{\text{optimo}} = \frac{2 - \sqrt{1 - e}}{e} \quad (4.1.19)$$

$$e = \frac{1}{4} \left[\cos \left(\frac{\pi}{n_z - 1} \right) + \cos \left(\frac{\pi}{n_r - 1} \right) \right] \quad (4.1.20)$$

4.1.1. Condiciones de borde axiales

Las condiciones de borde axiales para resolver la ecuación (4.1.14) se describen de la forma:

$$z = 0$$

$$v_z = u_0 \rightarrow \varphi = \frac{u_0 \cdot \rho_g \cdot r^2}{2} \quad (4.1.21)$$

$$v_r = 0 \rightarrow \frac{\partial \varphi}{\partial z} = 0 \quad (4.1.22)$$

$$z = L$$

$$\frac{\partial v_z}{\partial z} = 0 \rightarrow \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{\rho_g \cdot r} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right) = 0 \quad (4.1.23)$$

$$v_r = 0 \rightarrow \frac{\partial \varphi}{\partial z} = 0 \quad (4.1.24)$$

4.1.2. Condiciones de borde radiales

Las condiciones de borde radiales para resolver la ecuación (4.1.14) se describen de la forma:

$$r = 0$$

$$\frac{\partial v_z}{\partial r} = 0 \rightarrow \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{\rho_g \cdot r} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right) = 0 \quad (4.1.25)$$

$$v_r = 0 \rightarrow \frac{\partial \varphi}{\partial z} = 0; \varphi_0 = u_0 \cdot \rho_g \cdot R_0^2 \quad (4.1.26)$$

$r = R$

$$v_z = 0 \rightarrow \frac{\partial \varphi}{\partial r} = 0 \quad (4.1.27)$$

$$v_r = 0 \rightarrow \frac{\partial \varphi}{\partial z} = 0; \varphi_0 = u_0 \cdot \rho_g \cdot R^2 \quad (4.1.28)$$

4.1.3. Velocidad

Como se indica en las ecuaciones (4.1.1) y (4.1.2), la velocidad se obtiene mediante la función corriente φ , una vez ésta tenga su valor actualizado y con el margen de error deseado. Se determina de la forma::

$$\frac{\varphi_{i,j}^* - \varphi_{i,j}}{\varphi_{i,j}} \leq 1 \times 10^{-4} \quad (4.1.29)$$

4.2. Discretización de la ecuación de conservación de masa de metano

La formulación de la conservación de especie es idéntica a la planteada y discretizada por [19] con la diferencia de que el método implícito utilizado corresponde al ADI. Esto se traduce en dejar fija una componente y variar otra, para a la siguiente iteración invertir los roles.

Para iniciar, se deja fija la componente axial y se varía la radial para el salto de tiempo $n \rightarrow n + 1/2$. La ecuación planteada por [7] y [19] con variación en componente radial se presenta a continuación (por comodidad visual, se utiliza $v_z = u$, $v_r = v$):

$$A_{i,j} \cdot w_{i,j-1}^{n+1/2} - C_{i,j} \cdot w_{i,j}^{n+1/2} + B_{i,j} \cdot w_{i,j+1}^{n+1/2} = -F_{i,j} \quad (4.2.1)$$

$$A_{i,j} = \frac{(v_{i,j} + |v_{i,j}|)^n}{2\Delta r} + \frac{r_j \left(\frac{\lambda_g}{C_{p,g}}\right)_{i,j}^n + r_{j-1} \left(\frac{\lambda_g}{C_{p,g}}\right)_{i,j-1}^n}{2r_j \cdot \Delta r^2 \cdot \rho_{g,i,j}^n} \quad (4.2.2)$$

$$B_{i,j} = -\frac{(v_{i,j} - |v_{i,j}|)^n}{2\Delta r} + \frac{r_{j+1} \left(\frac{\lambda_g}{C_{p,g}}\right)_{i,j+1}^n + r_j \left(\frac{\lambda_g}{C_{p,g}}\right)_{i,j}^n}{2r_j \cdot \Delta r^2 \cdot \rho_{g,i,j}^n} \quad (4.2.3)$$

$$C_{i,j} = A_{i,j} + B_{i,j} + \frac{2}{\Delta t} + k_0 \cdot e^{-E_a/R \cdot T_{g,i,j}^{n+1}} \quad (4.2.4)$$

$$F_{i,j} = \frac{2 \cdot w_{i,j}^n}{\Delta t} - u_{i,j}^n \cdot \frac{w_{i+1,j} - w_{i-1,j}}{2\Delta z} + \frac{\left(\frac{\lambda_g}{C_{p,g}}\right)_{i+1,j}^n + \left(\frac{\lambda_g}{C_{p,g}}\right)_{i,j}^n}{2 \cdot \rho_{g,i,j}^n} \cdot \frac{w_{i+1,j} - w_{i,j}}{\Delta z^2} - \frac{\left(\frac{\lambda_g}{C_{p,g}}\right)_{i,j}^n + \left(\frac{\lambda_g}{C_{p,g}}\right)_{i-1,j}^n}{2 \cdot \rho_{g,i,j}^n} \cdot \frac{w_{i,j} - w_{i-1,j}}{\Delta z^2} \quad (4.2.5)$$

Luego para hacer el salto de tiempo final $n + 1/2 \rightarrow n + 1$, se invierten los roles, dejando fija la componente radial y variable la axial. La ecuación predominante es idéntica a la ecuación (4.2.1), con la diferencia de que ahora la componente alternante es i y el punto de tiempo es $n + 1$. Las variables auxiliares A , B , C , F , mantienen su esquema, con el correspondiente cambio en las velocidades y los sub-índices que recorren en las componentes contrarias a las descritas ($i, j + 1 \rightarrow i + 1, j$, y así sucesivamente).

4.2.1. Ecuación algoritmo TDMA

Por último, se desprende una ecuación lineal que permite determinar la fracción másica del metano según el método TDMA, manteniendo la hipótesis mencionada por [19], se escribe para los elementos de la malla de dimensiones K, M :

Axial:

$$w_{i,j}^{n+1} = a_{i+1,j} \cdot w_{i+1,j}^{n+1} + b_{i+1,j} \quad (4.2.6)$$

$$a_{i+1,j} = \frac{B_{i,j}}{C_{i,j} - A_{i,j} \cdot a_{i,j}} \quad (4.2.7)$$

$$b_{i+1,j} = \frac{F_{i,j} + A_{i,j} \cdot b_{i,j}}{C_{i,j} - A_{i,j} \cdot a_{i,j}} \quad (4.2.8)$$

Radial:

$$w_{i,j}^{n+1/2} = a_{i,j+1} \cdot w_{i,j+1}^{n+1/2} + b_{i,j+1} \quad (4.2.9)$$

$$a_{i,j+1} = \frac{B_{i,j}}{C_{i,j} - A_{i,j} \cdot a_{i,j}} \quad (4.2.10)$$

$$b_{i,j+1} = \frac{F_{i,j} + A_{i,j} \cdot b_{i,j}}{C_{i,j} - A_{i,j} \cdot a_{i,j}} \quad (4.2.11)$$

4.2.2. Condiciones de borde axiales

Las condiciones de borde axiales para resolver la ecuación (4.2.6) se describen de la forma:

$$z = 0$$

$$w_{1,j}^{n+1} = w_0 \quad (4.2.12)$$

$$a_{2,j} = 0, \quad b_{2,j} = w_0 \quad (4.2.13)$$

$$z = L$$

$$\frac{\partial w_{k,j}}{\partial z} = 0 \rightarrow w_{k,j}^{n+1} = w_{k-1,j}^{n+1} \quad (4.2.14)$$

$$w_{k,j}^{n+1} = \frac{b_{k,j}}{1 - a_{k,j}} \quad (4.2.15)$$

4.2.3. Condiciones de borde radiales

Las condiciones de borde radiales para resolver la ecuación (4.2.9) se describen de la forma:

$$r = 0$$

$$\frac{\partial w_{i,1}}{\partial r} = 0 \rightarrow w_{i,1}^{n+1/2} = w_{i,2}^{n+1/2} \quad (4.2.16)$$

$$a_{i,2} = 1, \quad b_{i,2} = 0 \quad (4.2.17)$$

$$r = R$$

$$\frac{\partial w_{i,m}}{\partial r} = 0 \rightarrow w_{i,m}^{n+1/2} = w_{i,m-1}^{n+1/2} \quad (4.2.18)$$

$$w_{i,m}^{n+1/2} = \frac{b_{i,m}}{1 - a_{i,m}} \quad (4.2.19)$$

4.3. Discretización de la ecuación de energía para la fase gaseosa

Al igual que la conservación de masa de metano, el planteamiento y discretización de la ecuación de energía del gas viene descrito por [19], con la diferencia del método ADI. Guiándose por la discretización planteada en [7] y [19], variando su componente radial se expresa de la forma:

$$A_{i,j} \cdot T_{g,i,j-1}^{n+1/2} - C_{i,j} \cdot T_{g,i,j}^{n+1/2} + B_{i,j} \cdot T_{g,i,j+1}^{n+1/2} = -F_{i,j} \quad (4.3.1)$$

$$A_{i,j} = \frac{(v_{i,j} + |v_{i,j}|)^n \cdot C_{p,i,j}^n \cdot \rho_{g,i,j}^n}{2\Delta r} + \frac{r_{j-1}(\lambda_g)_{i,j-1}^n + r_j(\lambda_g)_{i,j}^n}{2r_j \cdot \Delta r^2} \quad (4.3.2)$$

$$B_{i,j} = -\frac{(v_{i,j} - |v_{i,j}|)^n \cdot C_{p,i,j}^n \cdot \rho_{g,i,j}^n}{2\Delta r} + \frac{r_{j+1}(\lambda_g)_{i,j+1}^n + r_j(\lambda_g)_{i,j}^n}{2r_j \cdot \Delta r^2} \quad (4.3.3)$$

$$C_{i,j} = A_{i,j} + B_{i,j} + \frac{2 \cdot C_{p,i,j}^n \cdot \rho_{g,i,j}^n}{\Delta t} + \frac{a_{i,j}^n}{\delta} \quad (4.3.4)$$

$$F_{i,j} = \frac{2 \cdot T_{g,i,j}^n \cdot \rho_{g,i,j}^n \cdot C_{p,i,j}^n}{\Delta t} + \frac{T_{s,i,j}^n \cdot a_{i,j}^n}{\delta} + \Delta h_c \cdot \dot{r}_{i,j}^n - \frac{u_{i,j}^n \cdot C_{p,i,j}^n \cdot \rho_{g,i,j}^n}{2} \cdot \frac{T_{g,i+1,j}^n - T_{g,i-1,j}^n}{\Delta z} + \frac{(\lambda_g)_{i+1,j}^n + (\lambda_g)_{i,j}^n}{2} \cdot \frac{T_{g,i+1,j}^n - T_{g,i,j}^n}{\Delta z^2} - \frac{(\lambda_g)_{i,j}^n + (\lambda_g)_{i-1,j}^n}{2} \cdot \frac{T_{g,i,j}^n - T_{g,i-1,j}^n}{\Delta z^2} \quad (4.3.5)$$

Donde α representa al coeficiente de transferencia de calor volumétrico entre sólido y gas. Luego, al igual que la conservación de masa en el salto de tiempo final $n + 1/2 \rightarrow n + 1$, se invierten los roles, dejando fija la componente radial y variable la axial, junto a todos los cambios correspondientes en los sub-índices ya mencionados.

4.3.1. Ecuación algoritmo TDMA

Utilizando la hipótesis planteada por [19], se escribe para los elementos de la malla de dimensiones K, M :

Axial:

$$T_{g,i,j}^{n+1} = a_{i+1,j} \cdot T_{g,i+1,j}^{n+1} + b_{i+1,j} \quad (4.3.6)$$

$$a_{i+1,j} = \frac{B_{i,j}}{C_{i,j} - A_{i,j} \cdot a_{i,j}} \quad (4.3.7)$$

$$b_{i+1,j} = \frac{F_{i,j} + A_{i,j} \cdot b_{i,j}}{C_{i,j} - A_{i,j} \cdot a_{i,j}} \quad (4.3.8)$$

Radial:

$$T_{g,i,j}^{n+1/2} = a_{i,j+1} \cdot T_{g,i,j+1}^{n+1/2} + b_{i,j+1} \quad (4.3.9)$$

$$a_{i,j+1} = \frac{B_{i,j}}{C_{i,j} - A_{i,j} \cdot a_{i,j}} \quad (4.3.10)$$

$$b_{i,j+1} = \frac{F_{i,j} + A_{i,j} \cdot b_{i,j}}{C_{i,j} - A_{i,j} \cdot a_{i,j}} \quad (4.3.11)$$

4.3.2. Condiciones de borde axiales

Las condiciones de borde axiales para resolver la ecuación (4.3.6) se describen de la forma:

$$z = 0$$

$$T_{g,1,j}^{n+1} = T_0 \quad (4.3.12)$$

$$a_{2,j} = 0, \quad b_{2,j} = T_0 \quad (4.3.13)$$

$$z = L$$

$$\frac{\partial T_g}{\partial z} = 0 \rightarrow T_{g,k,j}^{n+1} = T_{g,k-1,j}^{n+1} \quad (4.3.14)$$

$$T_{g,k,j}^{n+1} = \frac{b_{k,j}}{1 - a_{k,j}} \quad (4.3.15)$$

4.3.3. Condiciones de borde radiales

Las condiciones de borde radiales para resolver la ecuación (4.3.9) se describen de la forma:

$$r = 0$$

$$\frac{\partial T_{g,i,1}}{\partial r} = 0 \rightarrow T_{g,i,1}^{n+1/2} = T_{g,i,2}^{n+1/2} \quad (4.3.16)$$

$$a_{i,2} = 1, \quad b_{i,2} = 0 \quad (4.3.17)$$

$$r = R$$

$$\frac{\partial T_{g,i,m}}{\partial r} = 0 \rightarrow T_{g,i,m}^{n+1/2} = T_{g,i,m-1}^{n+1/2} \quad (4.3.18)$$

$$T_{g,i,m}^{n+1/2} = \frac{b_{i,m}}{1 - a_{i,m}} \quad (4.3.19)$$

4.4. Discretización de la ecuación de energía para la fase sólida

Al igual que la conservación de masa de metano, el planteamiento y discretización de la ecuación de energía del sólido viene descrito por [19], con la diferencia del método ADI. Guiándose por la discretización planteada en [7] y [19], variando su componente radial se expresa de la forma:

$$A_{i,j} \cdot T_{s,i,j-1}^{n+1/2} - C_{i,j} \cdot T_{s,i,j}^{n+1/2} + B_{i,j} \cdot T_{s,i,j+1}^{n+1/2} = -F_{i,j} \quad (4.4.1)$$

$$A_{i,j} = \frac{r_j (\lambda_{eff})_{i,j}^n + r_{j-1} (\lambda_{eff})_{i,j-1}^n}{r_j \cdot 2\Delta r^2} \quad (4.4.2)$$

$$B_{i,j} = \frac{r_{j+1} (\lambda_{eff})_{i,j+1}^n + r_j (\lambda_{eff})_{i,j}^n}{r_j \cdot 2\Delta r^2} \quad (4.4.3)$$

$$C_{i,j} = A_{i,j} + B_{i,j} + \frac{2 \cdot \rho_{eff,i,j}^n \cdot C_{ps,i,j}^n}{\Delta t} + a_{i,j}^n \quad (4.4.4)$$

$$F_{i,j} = \frac{2 \cdot \rho_{eff,i,j}^n \cdot T_{s,i,j}^n \cdot C_{ps,i,j}^n}{\Delta t} + \frac{(\lambda_{eff})_{i+1,j}^n + (\lambda_{eff})_{i,j}^n}{2} \cdot \frac{T_{s,i+1,j}^n - T_{s,i,j}^n}{\Delta z^2} - \frac{(\lambda_{eff})_{i,j}^n + (\lambda_{eff})_{i-1,j}^n}{2} \cdot \frac{T_{s,i,j}^n - T_{s,i-1,j}^n}{\Delta z^2} + a_{i,j} \cdot T_{g,i,j}^{n+1} \quad (4.4.5)$$

Donde a representa al coeficiente de transferencia de calor volumétrico entre sólido y gas. Luego, tras finalizar las iteraciones en todo el dominio, al igual que la conservación de masa, en el salto de tiempo final $n + 1/2 \rightarrow n + 1$, se invierten los roles, dejando fija la componente radial y variable la axial, junto a todos los cambios correspondientes en los sub-índices ya mencionados. A diferencia de las otras ecuaciones discretizadas, para el caso del sólido, se considera pérdida de calor con el ambiente, lo cual se presenta en las condiciones de borde.

4.4.1. Ecuación algoritmo TDMA

Utilizando la hipótesis planteada por [19], se escribe para los elementos de la malla de dimensiones K, M:

Axial:

$$T_{s,i,j}^{n+1} = a_{i+1,j} \cdot T_{s,i+1,j}^{n+1} + b_{i+1,j} \quad (4.4.6)$$

$$a_{i,j+1} = \frac{B_{i,j}}{C_{i,j} - A_{i,j} \cdot a_{i,j}} \quad (4.4.7)$$

$$b_{i,j+1} = \frac{F_{i,j} + A_{i,j} \cdot b_{i,j}}{C_{i,j} - A_{i,j} \cdot a_{i,j}} \quad (4.4.8)$$

Radial:

$$T_{s,i,j}^{n+1/2} = a_{i,j+1} \cdot T_{s,i,j+1}^{n+1/2} + b_{i,j+1} \quad (4.4.9)$$

$$a_{i,j+1} = \frac{B_{i,j}}{C_{i,j} - A_{i,j} \cdot a_{i,j}} \quad (4.4.10)$$

$$b_{i,j+1} = \frac{F_{i,j} + A_{i,j} \cdot b_{i,j}}{C_{i,j} - A_{i,j} \cdot a_{i,j}} \quad (4.4.11)$$

4.4.2. Condiciones de borde axiales

Las condiciones de borde axiales para resolver la ecuación (4.4.6) se describen de la forma:

$$z = 0$$

$$T_{s,1,j}^{n+1} = T_0 \quad (4.4.12)$$

$$a_{2,j} = 0, \quad b_{2,j} = T_0 \quad (4.4.13)$$

$$z = L$$

Para el caso superior axial, se considera una pérdida por la diferencia de temperatura y la radiación que emiten las esferas (ecuación (3.2.15)).

$$T_{s,k,j}^{n+1} = \frac{T_{s,k-1,j}^n + \frac{\epsilon\tau\sigma\Delta z}{\lambda_{eff}} \cdot T_{amb}^{4,n}}{1 + \frac{\epsilon\tau\sigma\Delta z}{\lambda_{eff}} \cdot T_{s,k,j}^{3,n}} \quad (4.4.14)$$

Donde τ representa la transmisividad del tubo de cuarzo.

4.4.3. Condiciones de borde radiales

Las condiciones de borde radiales para resolver la ecuación (4.4.9) se describen de la forma:

$$r = 0$$

$$\frac{\partial T_{s,i,1}}{\partial r} = 0 \rightarrow T_{s,i,1}^{n+1/2} = T_{s,i,2}^{n+1/2} \quad (4.4.15)$$

$$a_{i,2} = 1, \quad b_{i,2} = 0 \quad (4.4.16)$$

$$r = R$$

Para el caso de la frontera radial, se tienen pérdidas de calor producto de la radiación y convección hacia el ambiente. La ecuación (3.2.8) presenta este balance energético, su discretización se presenta como:

$$-\lambda_{eff} \cdot \frac{3 \cdot T_{s,i,m} - 4 \cdot T_{s,i,m-1} + T_{s,i,m-2}}{2\Delta r} = [h \cdot (T_{s,i,m} - T_{amb}) + \epsilon\tau\sigma \cdot (T_{s,i,m}^4 - T_{amb}^4)] \quad (4.4.17)$$

$$T_{s,i,m-2} = a_{i,m-1} \cdot T_{s,i,m-1} + b_{i,m-1} \quad (4.4.18)$$

$$T_{s,i,m-1} = a_{i,m} \cdot T_{s,i,m} + b_{i,m} \quad (4.4.19)$$

Reemplazando las temperaturas en las posiciones $m - 1$ y $m - 2$ por sus equivalentes al interior de la malla, la ecuación (4.4.17) queda descrita como:

$$-\lambda_{eff} \cdot \frac{3 \cdot T_{s,i,m} - 4 \cdot (a_{i,m} \cdot T_{s,i,m} + b_{i,m}) + a_{i,m-1} \cdot T_{s,i,m-1} + b_{i,m-1}}{2\Delta r} = [h \cdot (T_{s,i,m} - T_{amb}) + \epsilon\tau\sigma \cdot (T_{s,i,m}^4 - T_{amb}^4)] \quad (4.4.20)$$

Despejando la componente $T_{s,i,m}$, se plantea una ecuación implícita donde se tenga una estructura del tipo $T_s = f(T_s)$.

$$T_{s,i,m}^* = \frac{((4 - \alpha_{i,m}) \cdot b_{i,m} - b_{i,m-1}) \cdot \lambda_{eff} + 2\Delta r \cdot [T_{amb} \cdot h + \epsilon \tau \sigma \cdot (T_{amb}^4 - T_{s,i,m}^4)]}{(3 - \alpha_{i,m} \cdot (4 - \alpha_{i,m-1})) \cdot \lambda_{eff} + 2\Delta r \cdot h} \quad (4.4.21)$$

Al igual que la función corriente, se realizan iteraciones hasta que el error alcance el valor deseado. Se determina de la forma:

$$\frac{T_{s,i,m}^* - T_{s,i,m}}{T_{s,i,m}} \leq 1 \times 10^{-4} \quad (4.4.22)$$

4.4.4. Conductividad efectiva en medios porosos inertes compuestos por esferas huecas

La forma de obtener la conductividad efectiva al utilizar un lecho poroso conformado por esferas huecas es mediante la ecuación (3.3.10) para la posición i, j , expresado de la forma:

$$\lambda_{eff,i,j} = (1 - \delta) \cdot \lambda_{p,i,j}^{n+1} + \frac{32 \cdot \epsilon \cdot dp_{i,j} \cdot T_{s,i,j}^{3,n+1}}{9 \cdot (1 - \delta)} \quad (4.4.23)$$

4.4.5. Conductividad efectiva en medios porosos inertes compuestos por esferas huecas con interior participativo en la transferencia de calor radiante

Para obtener la conductividad efectiva al utilizar un lecho poroso conformado por esferas huecas que cuenten con un interior que sea participativo en la transferencia de calor radiante, es agregando la ecuación (3.3.21) a la (3.3.10). En donde λ_R se expresa de la forma:

$$\lambda_{R,i,j} = \frac{16 \cdot \sigma \cdot \epsilon \cdot [(1 - \epsilon_{g,i,j}) T_{R,i,j}^{3,n+1} - \epsilon_{g,i,j} T_{g,i,j}^{3,n+1}]}{[1 - (1 - \epsilon) \tau_{g,i,j}] E_R} \quad (4.4.24)$$

4.5. Diagrama flujo código

El algoritmo con el que opera el código sigue el orden presentado en la Figura 4.1. Inicialmente se introducen los parámetros como n_r , n_z , dt y el tiempo que se desee simular, seguido por las dimensiones y condiciones físicas con las que opera el reactor; velocidad de entrada (u_0), diámetro b_{ed} , Φ , puntos inicio y término ignición, temperatura precalentado (en caso de considerarla) y porcentaje de CO_2 y H_2O al interior de la esfera

hueca (en consideración de sus porcentajes en el aire ambiente). Luego, se procede a resolver las ecuaciones gobernantes en el tiempo, con un ploteo de gráficos para observar el comportamiento de las temperaturas de sólido y gas, junto a la velocidad al interior del reactor en cada instante de tiempo.

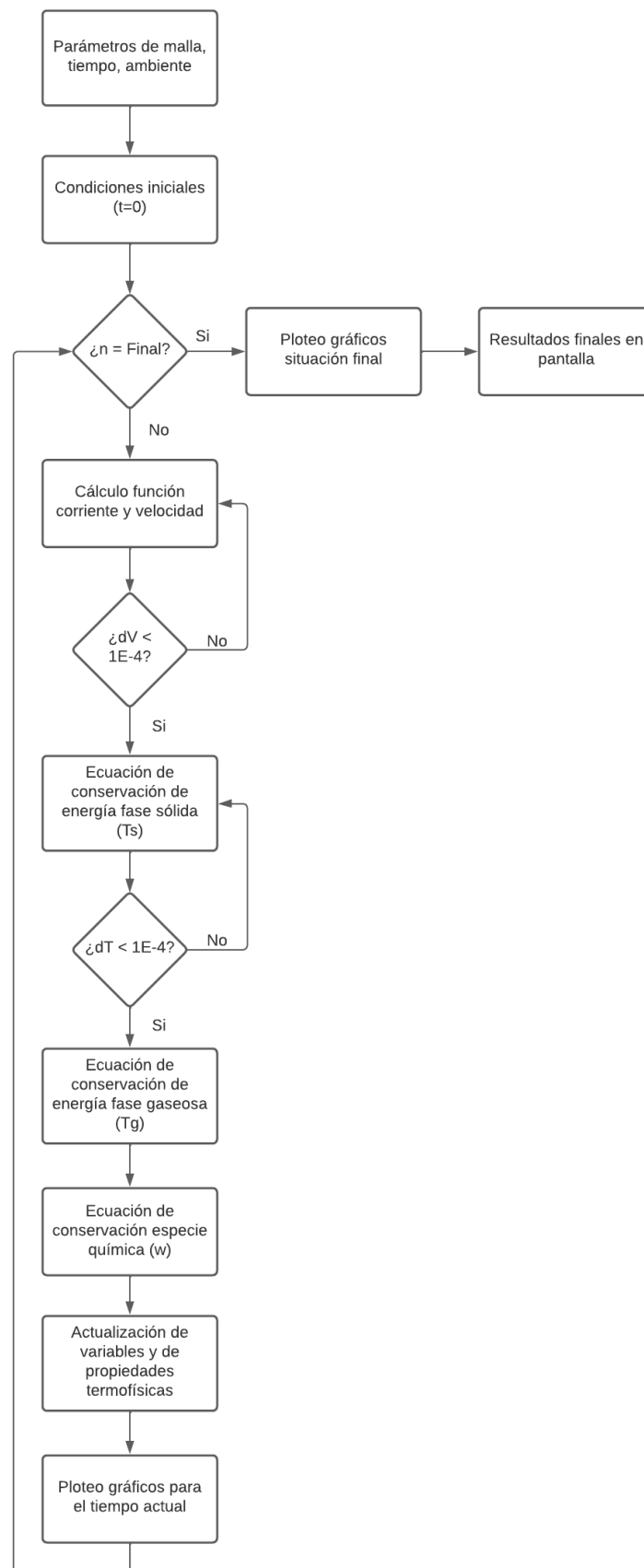


Figura 4.1: Diagrama de flujo para código computacional 2D

Capítulo 5

Diseño y procedimiento experimental

5.1. Banco de prueba

La construcción del banco de pruebas se llevó a cabo guiándose por un esquema y diseño propio (Figura 5.1). Ensamblando un tubo de cuarzo, difusor de gases de aluminio, base, estructura metálica y aislante. Seguido por el fitting en base de reactor, y la varilla cerámica portadora de termocuplas. Para las conexiones de gases se utiliza una manguera flexible desde el reactor hacia la válvula de corte, junto a una tee con el fin de hacer la mezcla entre las líneas de aire y gas natural proveniente de los controladores de flujo. La Figura 5.2 muestra el banco de trabajo de experimentación ensamblado.

Para mayor información sobre el proceso de ingeniería que se llevó a cabo para el armado del reactor, se puede revisar en detalle el Anexo B.

5.2. Registro de temperaturas

Una vez realizada la prueba de fuga, se procede a conectar los cables de compensación provenientes de la varilla de termocuplas, a un lector marca OMEGA modelo DAQ-USB-2400. Este último equipo se conecta vía USB a un ordenador, el cual corresponde a un dispositivo Mac que emula Windows. En el software correspondiente se debe señalar que las 6 termocuplas instaladas al interior del reactor son de tipo S (detalle en Anexo D), y que adicionalmente, se cuenta con 2 sensores de temperatura externos de tipo K. Uno ubicado a la altura de la termocupla 2 (T_{2e}) por el manto externo del reactor (8 cm bajo la salida del reactor), y otra por la zona de soldadura superior (T_{weld}) con el fin de poder determinar los efectos de temperatura radiales. Se considera un error de medición promedio de 60 K.

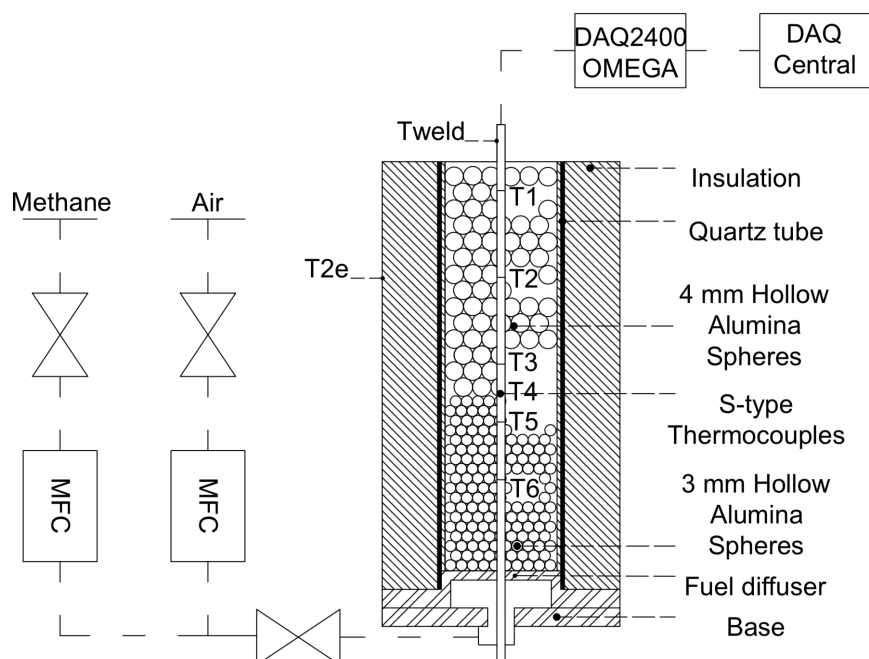


Figura 5.1: Esquema experimental utilizado para realizar los ensayos en laboratorio.



Figura 5.2: Reactor armado en su totalidad, varilla de termocuplas sin conexión a lector DAQ.

5.3. Puesta en marcha

Durante todo el período de experimentación se trabajó acorde a lo establecido en un protocolo de operación para el reactor de medios porosos inertes. El protocolo puede ser revisado en el Anexo E.

5.4. Ensayos

El foco de investigación se encuentra en el rango de mezclas pobres en combustible ($\Phi < 1$). El frente de llama desciende para el rango de caudales y relaciones de equivalencia utilizadas, puesto que se encuentran en la zona de temperaturas sub-adiabáticas [33].

Las temperaturas son monitoreadas en tiempo real, gracias a la lectura entregada por las termocuplas del sistema, y los datos son captados cada 1 segundo y son guardados en un archivo autogenerado del tipo *csv*. La termocupla número 6, es considerada como una lectura de seguridad, puesto que se encuentra a 45 mm de la parte baja del reactor. La temperatura máxima a la que podía llegar esta termocupla es al rededor de los 600 °C, ya que a tal valor, aun no se logra alcanzar el punto de fusión de la base de aluminio. Sin embargo, en la mayoría de los experimentos realizados, se cortaba el suministro de GN una vez la temperatura registrada por la termocupla número 5 empezaba a descender luego de haber alcanzado su máximo valor.

5.5. Variación de caudal

Tal como se señala, uno de los principales objetivos de la investigación era el determinar un punto en donde el frente de combustión se estabilizara mediante el uso de HS, es por aquello, que se decide operar con variados valores de v_f y compararlos con la velocidad de desplazamiento del frente de llama (u_{fc}). Las experiencias se iniciaban estableciendo la relación de equivalencia (Φ) con la cual se experimentaría (tal y como indica el protocolo de operación). Los caudales de mezcla gas natural - aire utilizados se encuentra en el rango desde 3 L/min a 20 L/min.

Capítulo 6

Presentación y análisis de resultados

En el presente capítulo se dan a conocer los resultados numéricos y experimentales obtenidos a lo largo de los distintos ensayos realizados junto a su respectivo análisis. Los valores numéricos fueron obtenidos considerando los efectos radiativos al interior de la HS con una mezcla gaseosa de $\text{H}_2\text{O}-\text{CO}_2$ en su interior, representativa de la composición del aire ambiente. Los resultados serán presentados mediante gráficos y/o tablas según sea más claro.

En primer lugar, se presentan y analizan los resultados numéricos de dependencia de malla y su contraste experimental en base a la temperatura. En segundo lugar, se dan a conocer los resultados preliminares obtenidos cuyo foco era un objetivo diferente al abarcado en este trabajo de tesis, luego se presentan los resultados finales partiendo por el análisis de velocidades experimentales, temperaturas numéricas y experimentales, y por último, los efectos numéricos generados al interior de la esfera hueca.

6.1. Dependencia de malla y contraste numérico

A continuación se presenta un estudio en base a una serie de simulaciones para el caso de $\phi = 0.7$ y $v_f = 0.8$ m/s, en donde experimentalmente la temperatura máxima registrada en el frente de combustión es de 1415 K. Los resultados mostrados en los Cuadros 6.1 a 6.3 no presentan variación en el eje radial, puesto que los resultados obtenidos usando 8, 9 y 11 nodos en dirección radial no presentaban cambios significativos (cambios en decimales de orden 10^{-5}).

Cuadro 6.1: Resultados para un paso de tiempo $dt = 0.1$ segundos.

	dt = 0.1 (s)			
Malla ($Z \times R$)	T_g (K)	T_s (K)	w_{CO_2}	w_{H_2O}
51x11	1733	1395	0.1076	0.0880
101x11	1695	1409	0.1077	0.0881
501x11	1688	1431	0.1083	0.0886
801x11	1626	1456	0.1082	0.0886
1001x11	1599	1470	0.1082	0.0885

Cuadro 6.2: Resultados para un paso de tiempo $dt = 0.05$ segundos.

	dt = 0.05 (s)			
Malla ($Z \times R$)	T_g (K)	T_s (K)	w_{CO_2}	w_{H_2O}
51x11	1713	1397	0.1077	0.0881
101x11	1709	1400	0.1077	0.0881
501x11	1806	1394	0.1093	0.0894
801x11	1809	1409	0.1104	0.0903
1001x11	1794	1411	0.1084	0.0885

Cuadro 6.3: Resultados para un paso de tiempo $dt = 0.01$ segundos.

	dt = 0.01 [s]			
Malla ($Z \times R$)	T_g (K)	T_s (K)	w_{CO_2}	w_{H_2O}
1001x11	1813	1414	0.1078	0.0882

Cuadro 6.4: Resultados para una malla de 1001×11 elementos.

	1001x11			
dt (s)	T_g (K)	T_s (K)	w_{CO_2}	w_{H_2O}
0.1	1599	1470	0.1082	0.0885
0.05	1794	1411	0.1084	0.0887
0.01	1813	1414	0.1082	0.0882
0.001	1813	1414	0.1082	0.0882

Los valores recientemente mostrados, corresponden a los puntos máximos numéricos obtenidos al interior del reactor.

Analizando los cuadros anteriores, es posible notar cambios en las temperaturas a medida que se va refinando la malla, mostrando convergencia y buen contraste con los

resultados experimentales en la malla de 1001 elementos en dirección axial y un paso de tiempo de 0.01 segundos.

Se observa que la malla de 1001 elementos requiere un paso de tiempo relativamente fino para que entregue resultados que tiendan a ser muy similares al valor experimental. En la sección de análisis de temperaturas (6.4), se presenta el campo de temperaturas utilizando una malla de 1001 elementos (Figura 6.12), mostrando la importancia de considerar una malla fina para notar aun más los efectos radiales correspondientes a las pérdidas de calor con el ambiente.

6.2. Resultados preliminares

Como se mencionó al inicio de este capítulo, el objetivo inicial del trabajo de tesis buscaba la estabilización de un frente de combustión al interior del reactor utilizando dos lechos porosos distintos conformados con esferas huecas. Sin embargo, al retornar al laboratorio tras la pandemia, no fue posible desarrollar experimentos debido al acotado rango de diámetros de esferas huecas disponibles (3-4 mm).

6.2.1. Temperaturas de simulación computacional

Las primeras simulaciones computacionales realizadas consideraron un reactor de medio poroso inerte compuesto por dos diámetros de esferas huecas de alúmina: en la parte superior de 10 mm y en la parte inferior de 4 mm. El cambio de lecho poroso se produce a los 0.1 m de altura de reactor.

Tras realizar simulaciones utilizando una relación de equivalencia $\phi = 0.8$ y una velocidad de filtración $v_f = 0.4$ m/s, se logró observar que tanto la temperatura como la velocidad del frente se ven afectadas por el cambio de lecho poroso. En la Figura 6.1 se puede notar que al realizar el cambio de lecho poroso de 10 mm a 4 mm, la temperatura del sólido se intensifica (aumenta) y su área se contrae (disminuye). En otras palabras, se concentra una alta temperatura en el medio poroso de 4 mm.

Desde la Figura 6.2 se puede observar que al utilizar esferas de mayor tamaño, el frente de llama abarca más área que al utilizar esferas de menor tamaño. Sin embargo, es posible notar que al tener esferas de menor tamaño, generan un frente de llama de menor área. Si se analizan las temperaturas al interior del reactor considerando solamente el centro de éste (como si se tratase de una lectura experimental con la varilla de termocuplas), se puede observar el cambio en éstas y como cambia la velocidad del frente de llama. En la Figura 6.3 se presenta el perfil de temperaturas en el lecho poroso de esferas de 10 mm

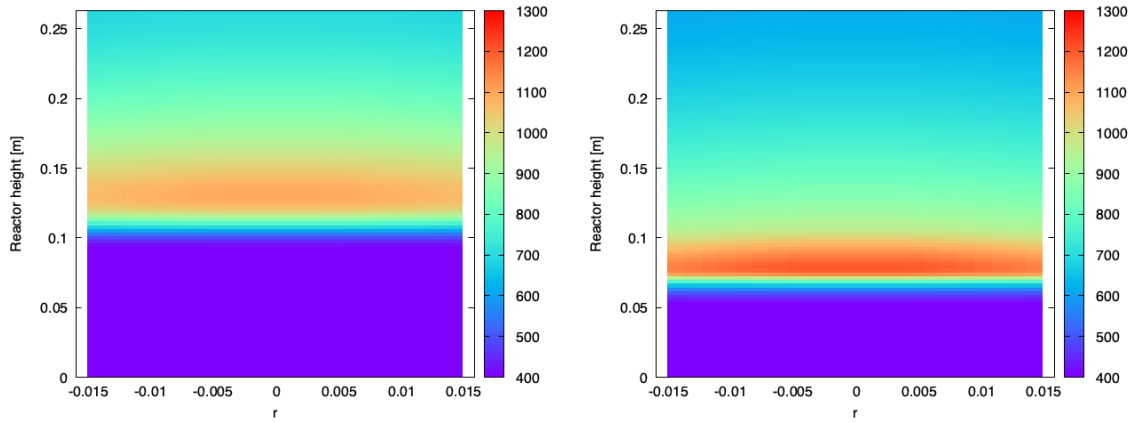


Figura 6.1: Campo de temperaturas del sólido al interior del reactor MPI, izquierda perfil para esferas de 10 mm, derecha perfil para esferas de 4 mm, con $\phi = 0.8$ y $v_f = 0.4$ m/s.

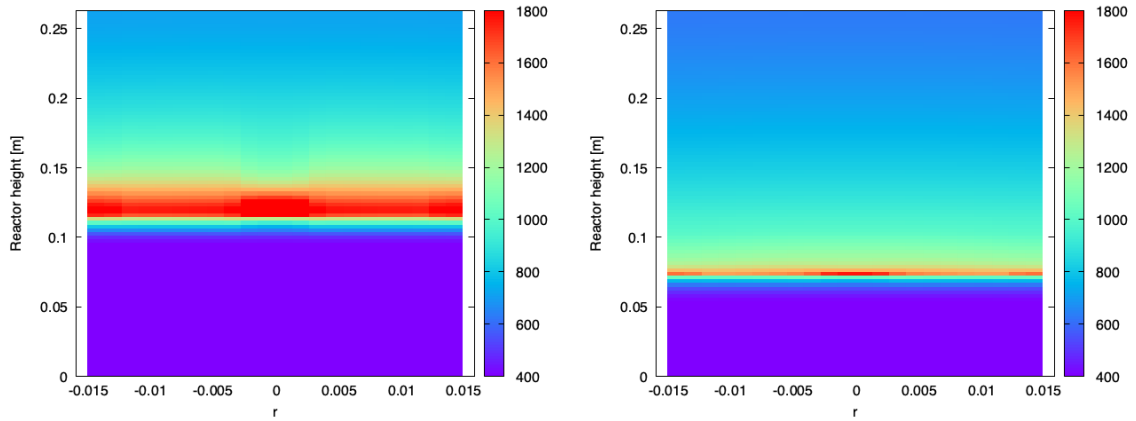


Figura 6.2: Campo de temperaturas del gas al interior del reactor MPI, izquierda perfil para esferas de 10 mm, derecha perfil para esferas de 4 mm, con $\phi = 0.8$ y $v_f = 0.4$ m/s.

y en la Figura 6.4 el perfil de temperaturas para las esferas de 4 mm. Desde las Figuras 6.3 y 6.4 es posible observar el cambio que se produce una vez que el frente se encuentra en lechos distintos, las temperaturas se modifican, al igual que la velocidad del frente de llama. Las temperaturas máximas obtenidas para el gas fueron: $T_{g_{bed1}} = 2080$ K y $T_{g_{bed2}} = 1765$ K, en el sólido fueron: $T_{s_{bed1}} = 1048$ K y $T_{s_{bed2}} = 1150$ K, y por último las velocidades fueron: $v_{bed1} = -0.026$ cm/s y $v_{bed2} = -0.028$ cm/s, donde bed1 y bed2 representan a la Figura 6.3 y Figura 6.4 respectivamente. La temperatura del sólido aumenta en 102 K mientras que la del gas disminuye en 315 K aproximadamente.

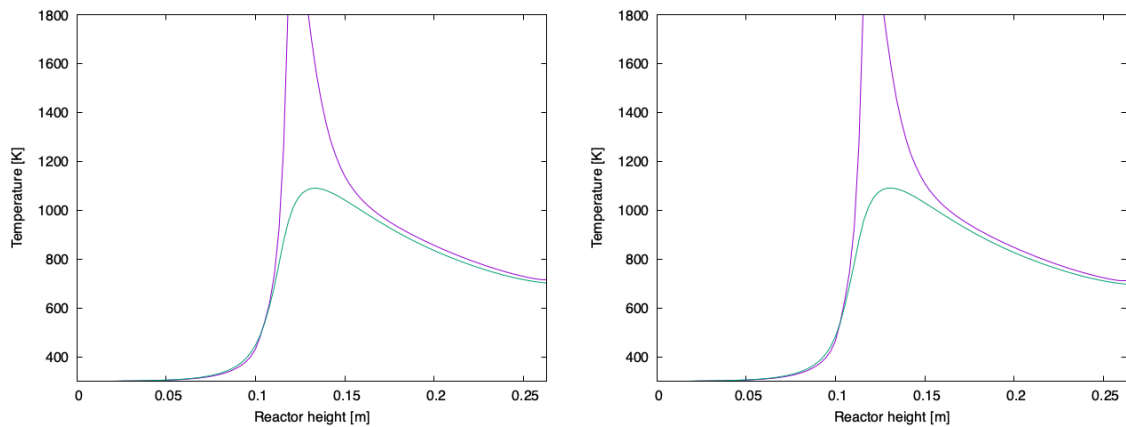


Figura 6.3: Perfiles de temperaturas al interior del reactor MPI para un lecho de esferas con diámetro 10 mm, con $\phi = 0.8$, $v_f = 0.4$ m/s y 10 segundos de diferencia.

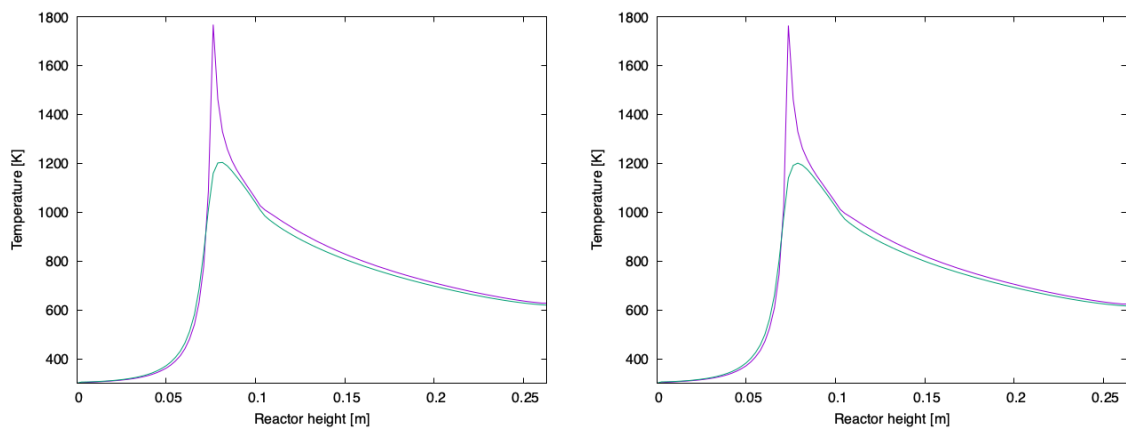


Figura 6.4: Perfiles de temperaturas al interior del reactor MPI para un lecho de esferas con diámetro 4 mm, con $\phi = 0.8$, $v_f = 0.4$ m/s y 10 segundos de diferencia.

En términos generales, los resultados muestran que un menor diámetro de esferas huecas genera una mayor área superficial de transferencia de calor entre las fases gaseosas y sólidas, por lo que las temperaturas del sólido se intensifican y el área de reacción se contrae o disminuye. Por su parte, las velocidades de frentes de combustión aumentan para diámetros menores de esferas huecas.

6.2.2. Temperaturas experimentales

El reactor construido en el banco de pruebas se encontraba con una configuración que consideraba un lecho poroso conformado con esferas huecas de 3 mm de diámetro,

que utilizase un 40 % de la altura del reactor y el resto otro lecho poroso con diámetro mayor (4 mm aproximadamente) en la parte superior. Las temperaturas registradas por las termocupas se presentan en la Figura 6.5.

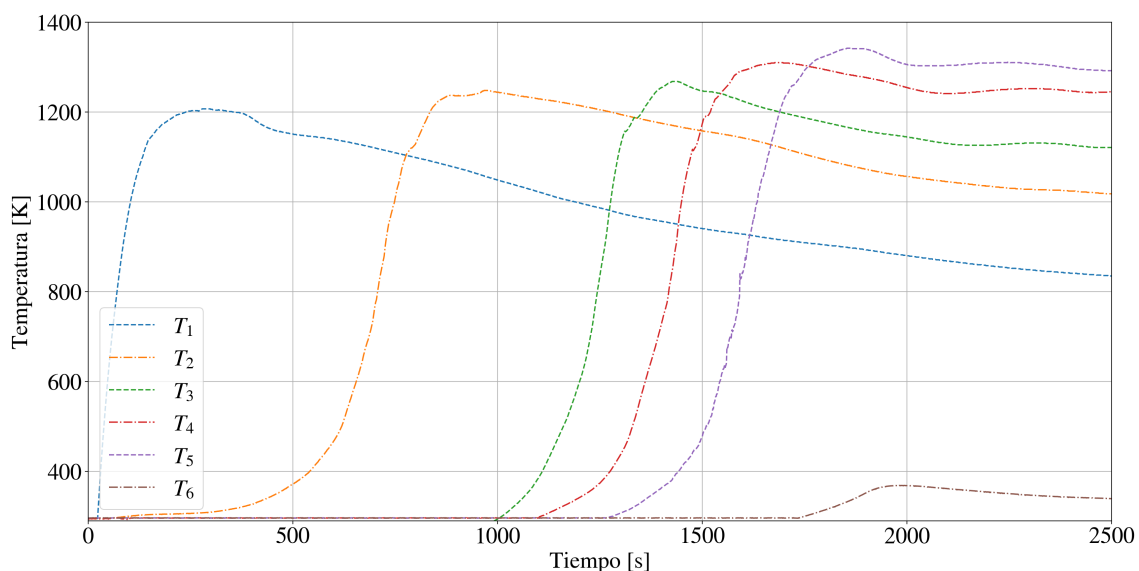


Figura 6.5: Temperaturas registradas al interior del reactor. Resultados para una relación de equivalencia $\phi = 0.7$ y una velocidad de filtración $v_f = 0.51$ m/s.

Es posible observar un cambio en la temperatura de las termocupas 4 y 5, las cuales se encontraban al interior del lecho poroso de menor diámetro. La temperatura media entre las termocupas 1 a 3 es de 1250 K aproximadamente, mientras que para las termocupas 4 y 5, la media es de 1340 K aproximadamente. Mostrando el mismo efecto predicho por el modelo matemático con un aumento promedio en la temperatura de 80 K, mientras que la velocidad de propagación del frente de llama en el lecho poroso de 4 mm fue de -0.011 cm/s y en el de 3 mm fue de -0.012 cm/s.

6.3. Velocidad de propagación experimental

La velocidad de propagación experimental se obtiene tras analizar las temperaturas registradas por las termocupas (como se ve en la Figura 6.5), tomando en consideración el tiempo que tarda el frente en marcar dos puntos máximos de temperatura y la separación con la que se encuentran dichos puntos de lectura (Anexo D.1). El registro de todas las velocidades registradas durante la experimentación se presenta a continuación en la Figura 6.6, considerando la variación del Fire Rate, objetivo principal de la presente tesis de investigación.

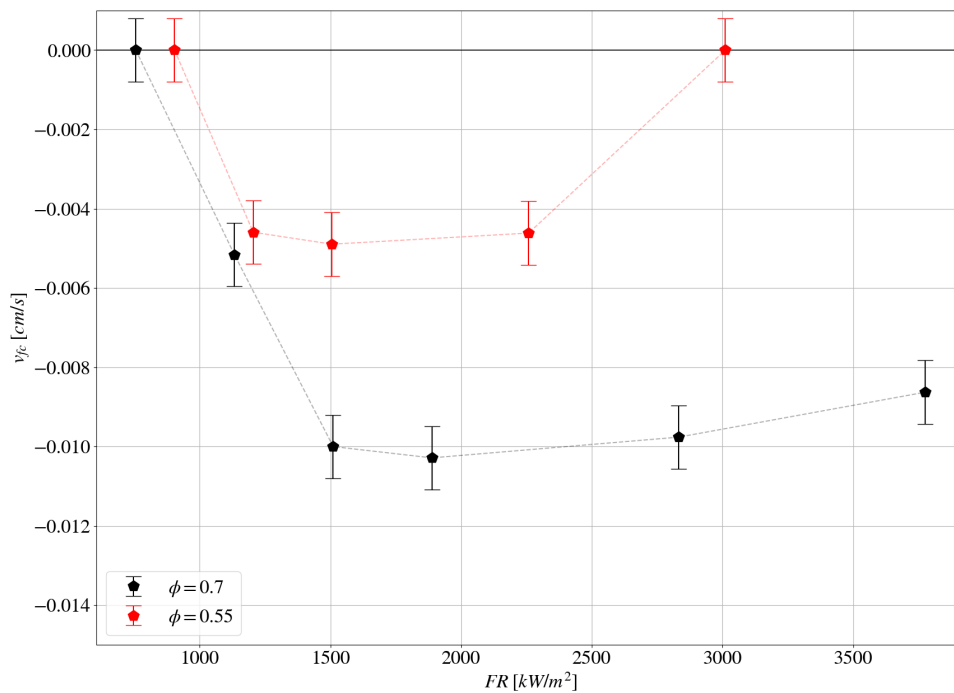


Figura 6.6: Velocidades experimentales desplazamiento frente de llama para variados Fire Rate.

Desde la Figura 6.6, se puede observar una fuerte dependencia del frente de llama con respecto al Fire Rate, puesto a que el reactor cuenta con una mayor cantidad de energía disponible. Se observa que para una relación de equivalencia $\phi = 0.55$ para los valores de Fire Rate $FR = 900 \text{ kW/m}^2$ y $FR = 3000 \text{ kW/m}^2$ el frente de llama se encuentra en un punto de estabilización, lo cual es causado por un equilibrio energético entre la re-circulación de calor al interior del reactor y la energía de combustión proveniente del combustible. Un registro y ejemplo de cómo se asumía un frente de llama estabilizado se presenta en la Figura 6.7.

Para la relación de equivalencia $\phi = 0.7$ se observa un aumento notorio en las velocidades del frente de llama, mostrando una tendencia de estabilización para un eventual Fire Rate superior a los 3700 kW/m^2 , sin embargo, no fue posible realizar experimentos con valores más altos debido a las altas temperaturas alcanzadas. Al realizarse la experimentación con el Fire Rate de mayor valor, el aislante térmico del reactor presentó un color rojizo a causa del elevado valor de temperatura, lo cual significaba un riesgo.

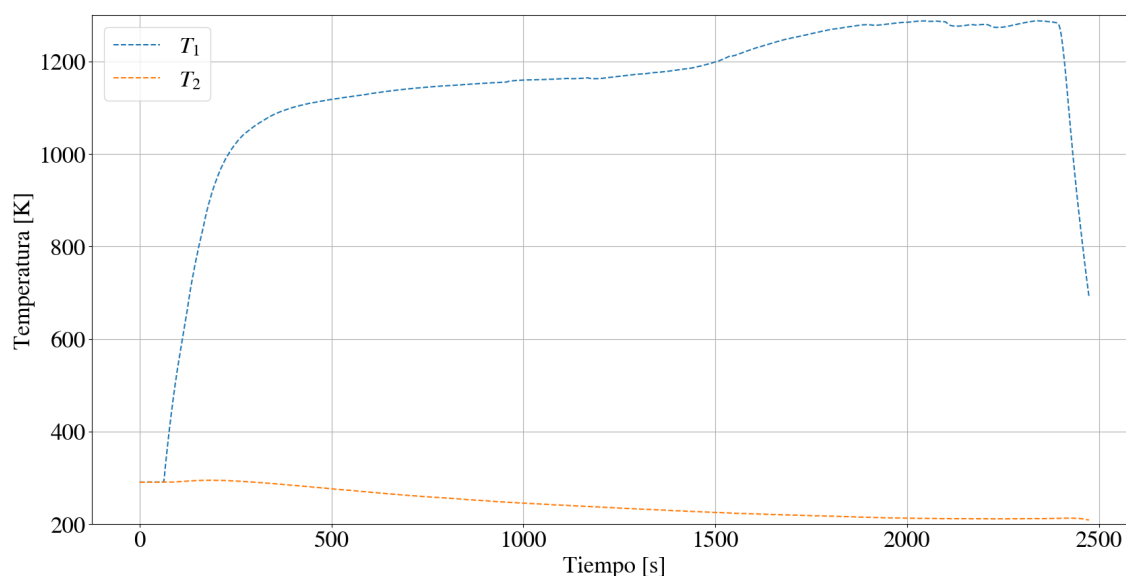


Figura 6.7: Temperaturas registradas al interior del reactor para un frente de llama estabilizado en T1. Resultados para una relación de equivalencia $\phi = 0.55$ y una velocidad de filtración $v_f = 1.04$ m/s.

Además de los resultados presentados en la Figura 6.6, se realizó experimentación con otras relaciones de equivalencia. Sin embargo, la cantidad de experimentos realizados no justifica el uso de gráfico para mostrar los valores, por lo que se presentan en el Cuadro 6.6.

Cuadro 6.5: Velocidades experimentales adicionales

$\phi = 0.4$		$\phi = 1$	
FR (kW/m ²)	v_{fc} (cm/s)	FR (kW/m ²)	v_{fc} (cm/s)
847	0.0	1572	-0.00625
1112	0.00126	2620	-0.01618

Se observa que para una relación de equivalencia de $\phi = 0.4$, el frente de llama se desplaza aguas abajo, representando una zona en donde la energía por re-circulación producto de la transferencia de calor, predomina por sobre la energía química. Sin embargo, para la relación de equivalencia $\phi = 1$ en el rango de FR = 1500 kW/m², la velocidad del frente de llama es menor que el señalado por $\phi = 0.7$, y en el rango de FR = 2500 kW/m² sobrepasa el valor indicado por $\phi = 0.7$. Siguiendo la tendencia marcada por los resultados mostrados en la Figura 6.6, se podría observar un eventual estabilización del frente de llama al rededor de FR = 1000 kW/m². Mostrando que mientras crezca la relación de equivalencia, las velocidades aguas arriba del frente de llama aumentan hasta un eventual valor de $\phi = 0.7$, donde empiezan a disminuir, puesto

que para relaciones de equivalencia mayores a $\phi = 1$, las temperaturas al interior del reactor comienzan a ser súper-adiabáticas, dando como resultado velocidades de desplazamiento positivas (aguas abajo) del frente de llama. Una representación de esto se muestra en la Figura 6.8, donde se pueden notar las tendencias de los resultados adicionales.

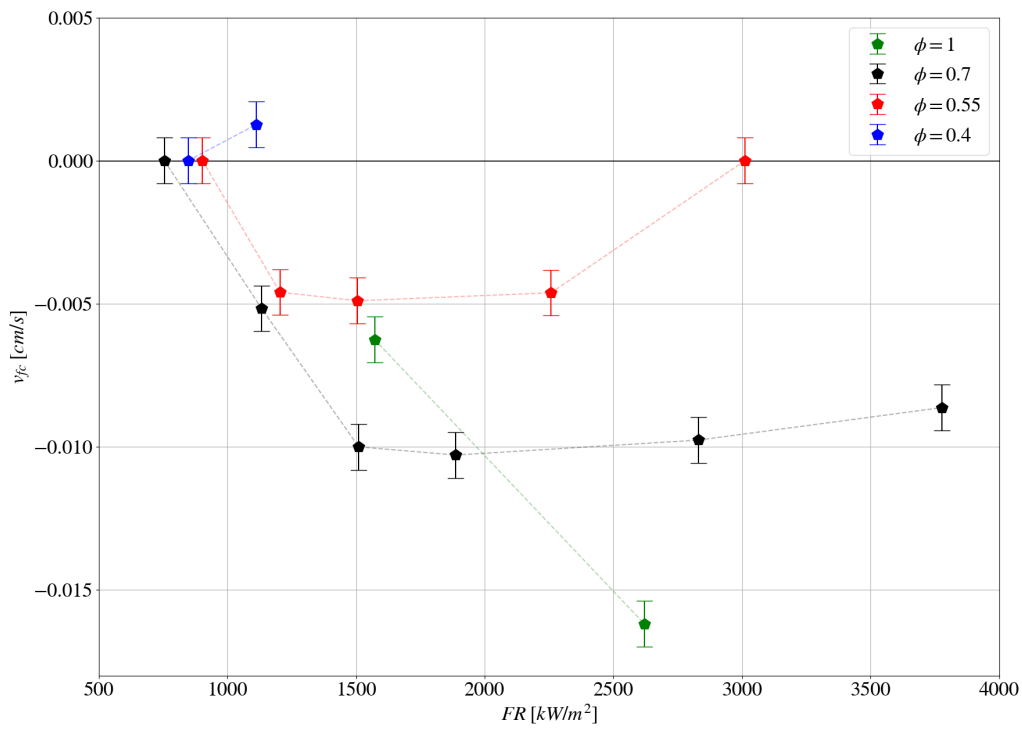


Figura 6.8: Velocidades experimentales desplazamiento frente de llama para variados Fire Rate.

6.4. Temperaturas experimentales y de simulación computacional

Las temperaturas presentadas y estudiadas en la siguiente sección, corresponden a un resumen de los experimentos realizados en el banco de prueba y las simulaciones realizadas utilizando el modelo bidimensional con esferas huecas. Los puntos de temperatura que serán mostrados a continuación, son una representación del promedio de los máximos registrados en laboratorio y la temperatura máxima del sólido arrojada por el modelo.

Al igual que para el caso de la velocidad, se aprecia una fuerte dependencia de la temperatura con respecto al Fire Rate, haciendo alusión a la cantidad de energía disponible en el combustible que ingresa al reactor. El mayor registro experimental para la relación de equivalencia $\phi = 0.7$ (Figura 6.9) fue un valor aproximado de 1500 K. Para esta relación de equivalencia la temperatura adiabática es de aproximadamente 1800K [34], por lo que siguiendo la tendencia presentada por los resultados tanto numéricos como experimentales, se podría estimar que se podría superar la temperatura de llama adiabática al utilizar un FR cercano a los 5500 kW/m². Se aprecia además que los resultados numéricos siguen una tendencia prácticamente idéntica al experimental.

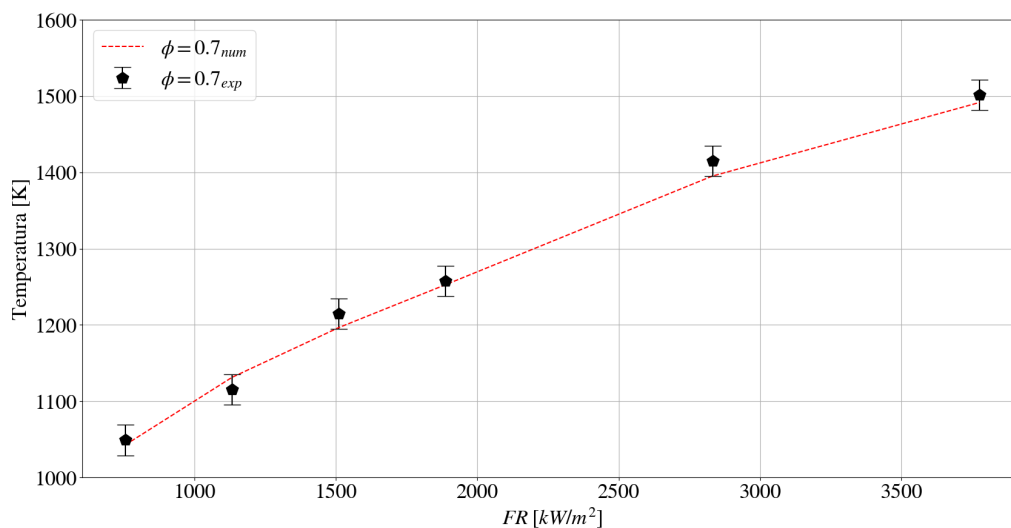


Figura 6.9: Temperaturas numéricas y experimentales registradas al interior del reactor para variados Fire Rate y una relación de equivalencia $\phi = 0.7$.

Para el caso de la relación de equivalencia $\phi = 0.55$ (Figura 6.10), la tendencia entre los resultados numéricos y experimentales siguen la misma tendencia para valores de Fire Rate menores a los 2000 kW/m², puesto que para valores superiores la temperatura

experimental comienza a llegar a un máximo. Un experimento con Fire Rate superior al máximo realizado, debiese contar con una temperatura similar a la presentada por los resultados numéricos y a su vez, un desplazamiento del frente de llama aguas abajo.

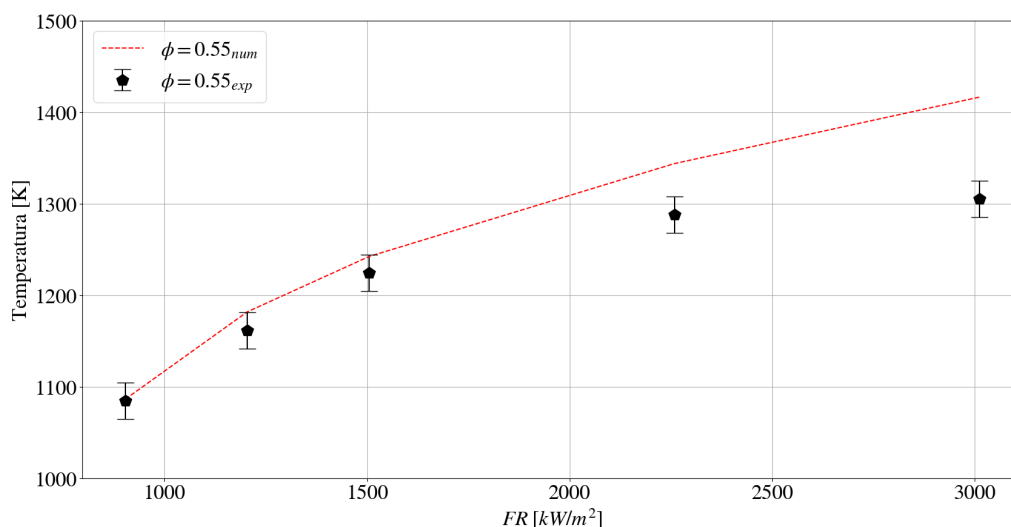


Figura 6.10: Temperaturas numéricas y experimentales registradas al interior del reactor para variados Fire Rate y una relación de equivalencia $\phi = 0.55$.

Al igual que en el capítulo anterior, se presentan las temperaturas adicionales obtenidas durante la experiencia, mostradas en el Cuadro 6.6. Donde cabe destacar la temperatura alcanzada por la relación de equivalencia $\phi = 0.4$, en donde el frente se desplazaba aguas abajo, marcando una temperatura que supera los 1282 K, correspondientes a la temperatura de llama adiabática [34]. Mientras que el punto de estabilización se presentó para una temperatura muy cercana a la de llama adiabática. Además, cabe destacar que la mayor temperatura registrada fue por parte de la relación de equivalencia $\phi = 1$ para un Fire Rate $FR = 2620 \text{ kW/m}^2$.

Cuadro 6.6: Temperaturas experimentales adicionales

$\phi = 0.4$		$\phi = 1$	
FR (kW/m^2)	T (K)	FR (kW/m^2)	T (K)
847	1278	1572	1286
1112	1311	2620	1602

Las temperaturas adicionales se presentan en la Figura 6.11 como un solo conjunto con las temperaturas obtenidas para las relaciones de equivalencia $\phi = 0.7$ y $\phi = 0.55$, presentados en las Figuras 6.9 y 6.10 respectivamente.

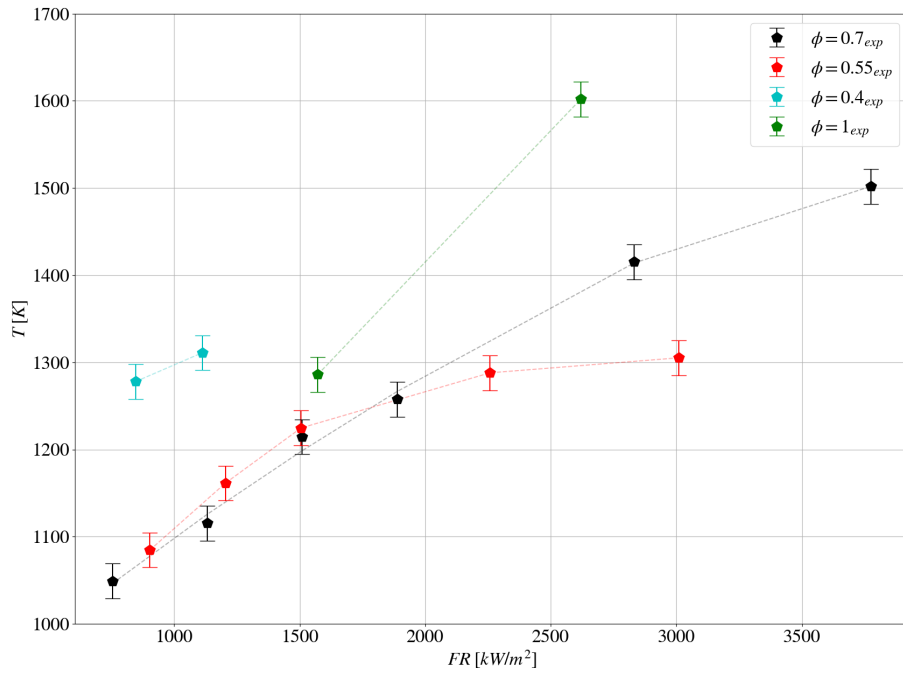


Figura 6.11: Temperaturas experimentales registradas al interior del reactor para variados Fire Rate y relaciones de equivalencia.

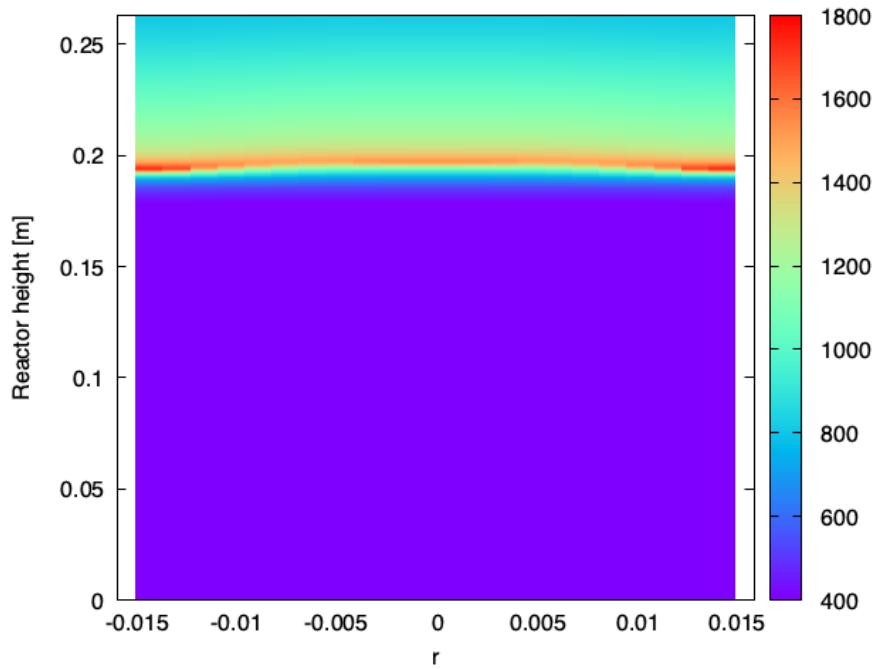


Figura 6.12: Campo de temperaturas del gas al interior del reactor MPI utilizando una malla de 1001×11 . Para $\phi = 0.7$ y $v_f = 0.51$ m/s.

En la Figura 6.12, se presentan las temperaturas al interior del reactor en 2

dimensiones. De ésta es posible apreciar que el perfil de temperatura radial se mantiene prácticamente constante. Una mirada unidimensional al frente de llama en el centro y borde del reactor se presenta en la Figura 6.13.

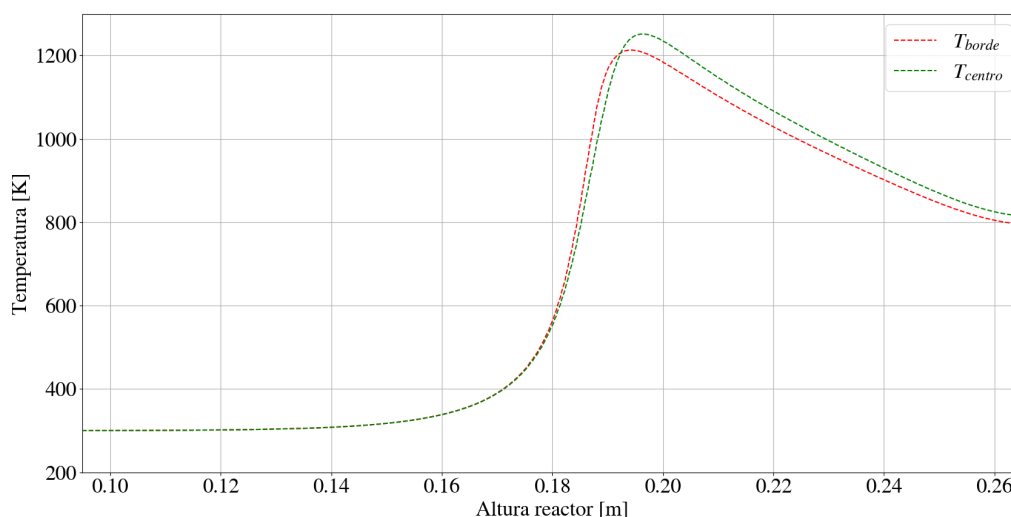


Figura 6.13: Temperatura en el centro y borde del reactor para el sólido, utilizando una malla de 1001×11 elementos. Resultados para una relación de equivalencia $\phi = 0.7$ y una velocidad de filtración $v_f = 0.51$ m/s.

Para observar los efectos de cómo varía la temperatura en la componente radial de forma empírica, se agregó una termocupla tipo K en la capa externa del recubrimiento de aislante del reactor. Los valores registrados por ambas termocuplas en función del tiempo se observan en la Figura 6.14

Al comparar los valores registrados por dos termocuplas a la misma altura pero a diferente posición radial, se aprecia un similar al efecto mostrado en los resultados numéricos, en donde la temperatura registrada al centro del reactor es mayor que en los extremos de éste, dando importancia al estudio del fenómeno de combustión en dos dimensiones. Sin embargo, para el caso experimental, la diferencia de temperaturas es de aproximadamente 660 K, mientras que para el caso numérico es del orden de los 40 K, lo cual es de esperar, ya que la lectura externa de temperatura cuenta con la capa de aislante interno, la conductividad del tubo de cuarzo y el aislante externo que recubre el reactor. La diferencia entre la temperatura presentada por el modelo (Figura 6.13) y la registrada por la termocupla 2 (Figura 6.14) es casi despreciable, ya que tan solo difieren en 35 K, resultado que se encuentra dentro de los márgenes de error (Anexo C).

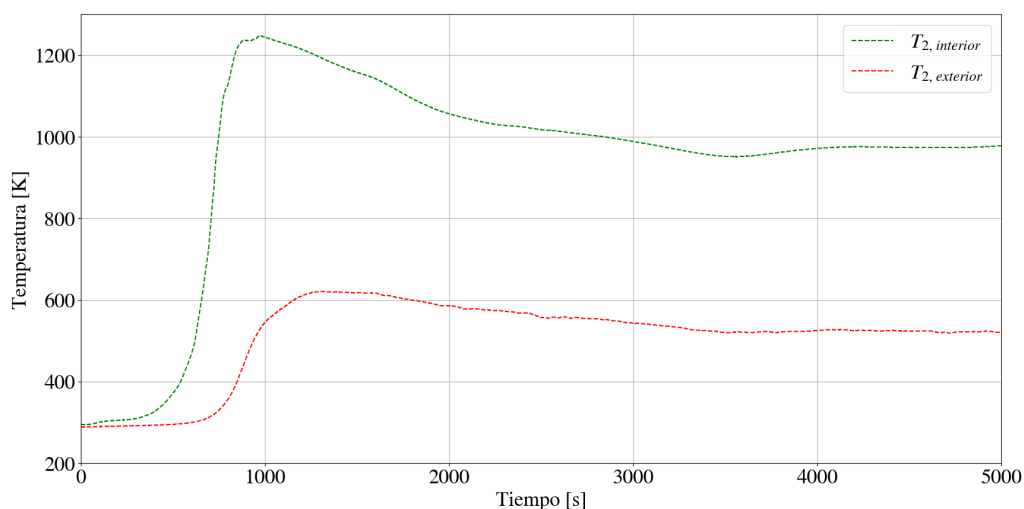


Figura 6.14: Temperatura en el centro y capa de aislante externa del reactor captado por las termocupas tipo S y K respectivamente. Resultados para una relación de equivalencia $\phi = 0.7$ y una velocidad de filtración $v_f = 0.51$ m/s.

6.5. Efecto radiativo interno y espesor de esfera

Se observa que al tener una HS con un interior activamente participativo en la transferencia de calor, se modifica la conductividad total (y efectiva) de la esfera tras estar sometida a los cambios de temperatura causados por el frente de llama (Figura 6.15). Esto permite a la esfera almacenar calor en su interior como si fuese una esfera sólida a menor escala, ayudando al frente de llama a mantener una temperatura más estable y controlada. El hecho de considerar los efectos radiantes al interior de la HS, permite tener una mayor conductividad.

En la Figura 6.16, se presentan las conductividades en detalle de cada propiedad del elemento inerte, como lo es la conductividad del material (alúmina), la conductividad generada por la radiación al interior de la esfera y la radiación generada por el interfaz entre esferas. La curva de conductividad de la esfera hueca obtenida, presenta un comportamiento similar al señalado por Fierro [15], con la modificación de contar con un agente extra al cambio de conductividad, como es la mezcla de aire en su interior.

También entra en efecto el espesor y diámetro (relación radio/espesor [15]), el cual genera cambios directos en el comportamiento del frente de llama. Esta relación modifica las temperaturas alcanzadas por el frente, la velocidad con la que éste se desplaza y el comportamiento de la conductividad de la HS. Dicho efecto se presenta de manera experimental en la sección 6.2, donde las termocupas T_4 y T_5 se encontraban en un lecho de menor tamaño (ver Figura 5.1).

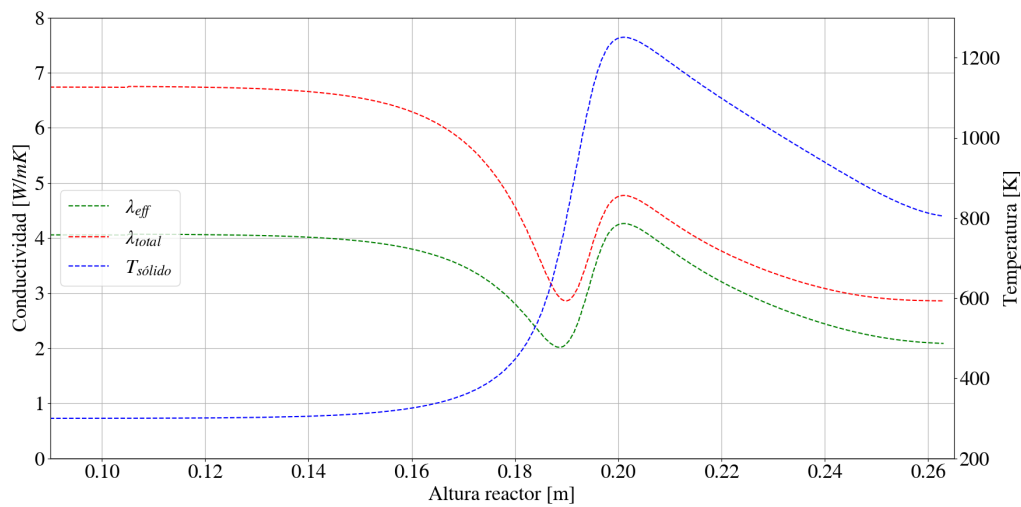


Figura 6.15: Resultados numéricos del comportamiento de la conductividad total y efectiva tras someterse a cambios de temperatura por el frente de llama. Resultados para una relación de equivalencia $\phi = 0.7$ y una velocidad de filtración $v_f = 0.51$ m/s.

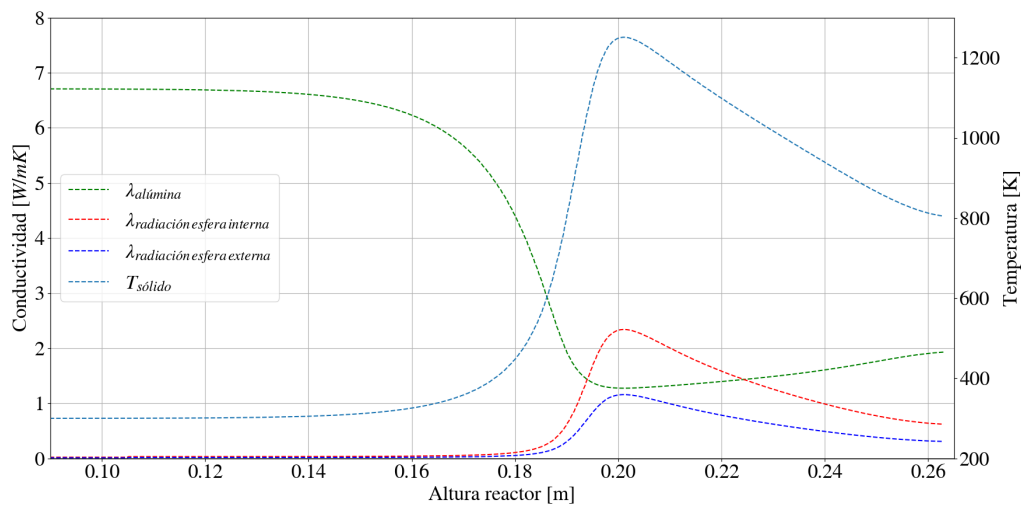


Figura 6.16: Resultados numéricos en detalle del comportamiento de la conductividad tras someterse a cambios de temperatura por el frente de llama. Resultados para una relación de equivalencia $\phi = 0.7$ y una velocidad de filtración $v_f = 0.51$ m/s.

Se observa que la curva de temperaturas registrada por las termocupas T_1 a T_3 no difieren en gran magnitud a diferencia del cambio que se produce entre las restantes (aproximadamente 80 K). Sin embargo, es más fácil observar estos cambios de manera numérica, tal como se presenta en la Figura 6.17, donde se aprecia que, tanto la temperatura como la velocidad con la que se desplaza el frente de llama al interior del reactor varía de manera inversamente proporcional al tamaño del espesor de la esfera. A medida que el espesor decrece, la velocidad con la que se desplaza el frente de llama

aumenta considerablemente al igual que su temperatura, esto se debe a la mínima cantidad de materia sólida que debe calentarse al interior del reactor, por lo que la combustión dispone de una mayor cantidad de energía para retro alimentarse. Además el cambio que se produce al interior de la esfera modifica la cantidad de gas en su interior y la longitud media de haz [35].

Los porcentajes mostrados en las Figuras 6.17 a 6.20 corresponden a la relación diámetro/espesor, con un límite de 50 % puesto que éste valor hace referencia a una SS.

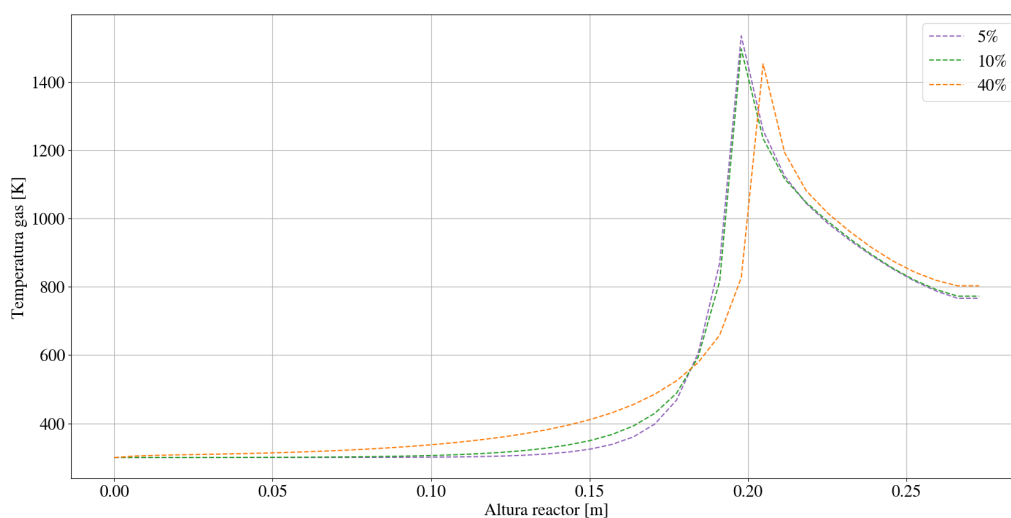


Figura 6.17: Perfil de temperaturas al centro del reactor, para variados porcentajes de espesor en una HS de 6.5 mm de diámetro tras 15 minutos del encendido.

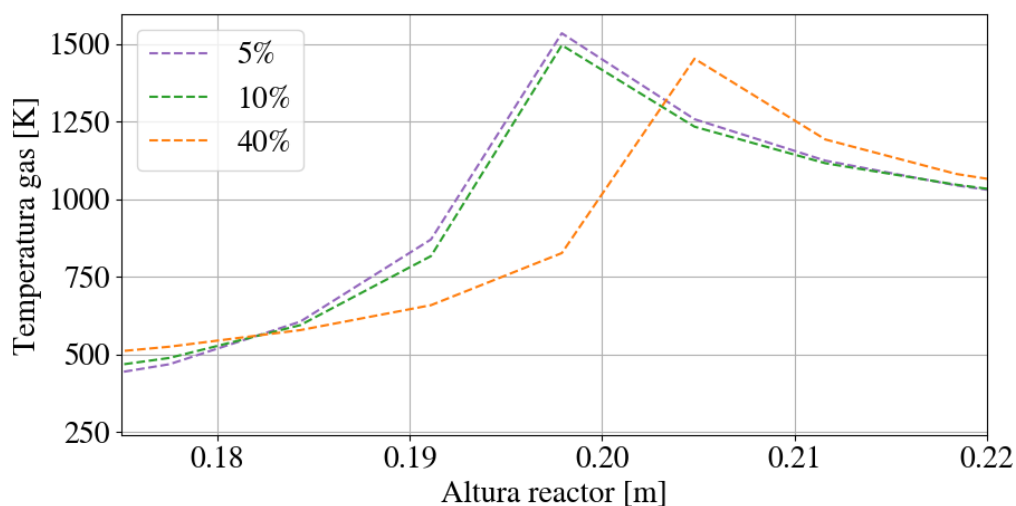


Figura 6.18: Detalle de perfiles de temperatura al centro del reactor, para variados porcentajes de espesor en una HS de 6.5 mm de diámetro tras 15 minutos del encendido.

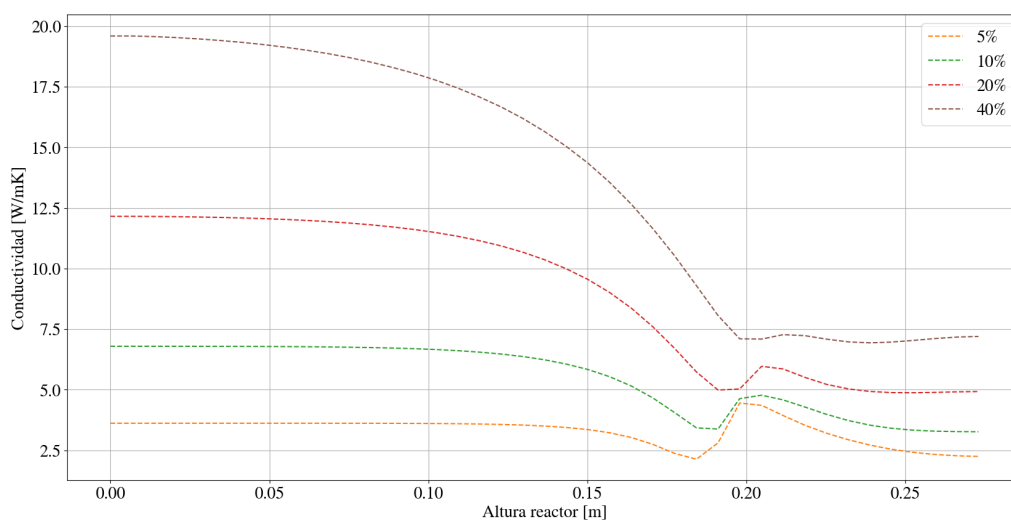


Figura 6.19: Conductividad de la HS con respecto a la temperatura, para variados porcentajes de espesor en una HS de 6.5 mm de diámetro tras 15 minutos del encendido.

En la Figura 6.19 se aprecia que, a medida aumenta el espesor de la esfera, menor es el aporte de la radiación interna y solo se hace significativo el aporte radiativo externo de esta, presentándose como un leve peak en la curva de 40 %. Sin embargo, para el caso de menor espesor se aprecia que la radiación interna juega un rol muy participativo, logrando puntos en donde la conductividad llega a ser mayor a la del material sólido.

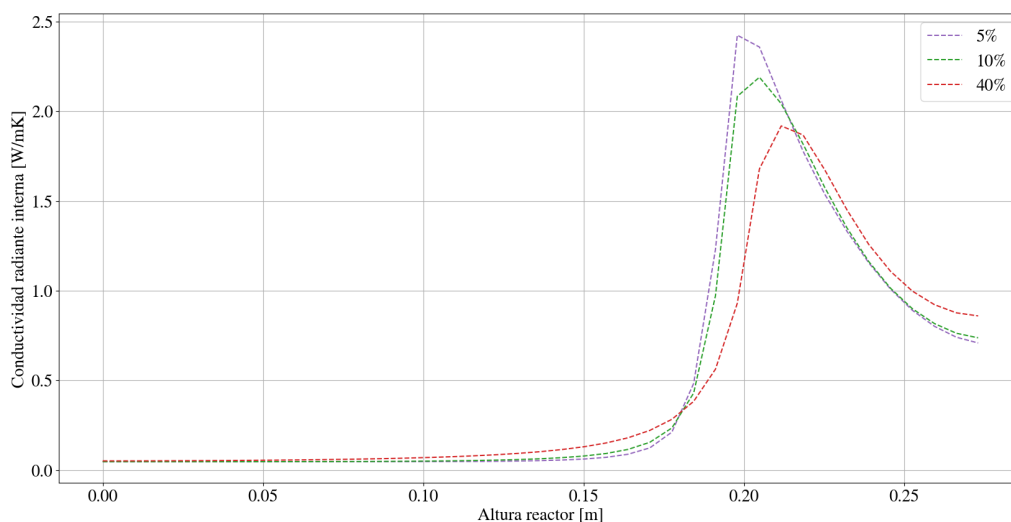


Figura 6.20: Conductividad radiante al interior de la HS, para variados porcentajes de espesor en una HS de 6.5 mm de diámetro tras 15 minutos del encendido.

Finalmente, en la Figura 6.20, se presenta en detalle la conductividad radiante interna de la HS, mostrando la misma tendencia de los gráficos anteriores. A medida que

el espesor de la esfera aumenta, el efecto radiativo interno disminuye su efecto y en consecuencia, disminuye la cantidad de energía disponible a causa de la cantidad de materia sólida que debe calentarse.

6.6. Mezcla interna

Como se presentó en el punto anterior, se destaca la importancia de considerar los efectos radiantes al interior de la HS. Inicialmente se llevó a cabo un estudio utilizando una mezcla gaseosa que participara como agente en la transferencia de calor mediante su emisividad, en este caso una mezcla de CO_2 - H_2O . La intensidad con la que participa se encuentra ligado a la fracción volumétrica de cada gas al interior de la esfera, tal y como indican los estudios de Hottel [36]. En la Figura 6.21, se puede observar que el vapor de agua tiene un comportamiento de emisividad inversamente proporcional con respecto a la temperatura, llegando a valores bajo 5×10^{-3} para temperaturas sobre los 1400 K, mientras que el CO_2 tiene un comportamiento cuadrático con máximo en los 800 K. Sin embargo, al considerar una mezcla de estos gases (Figura 6.22), el valor máximo de emisividad cambia su rango de temperaturas con respecto a la relación de mezcla.

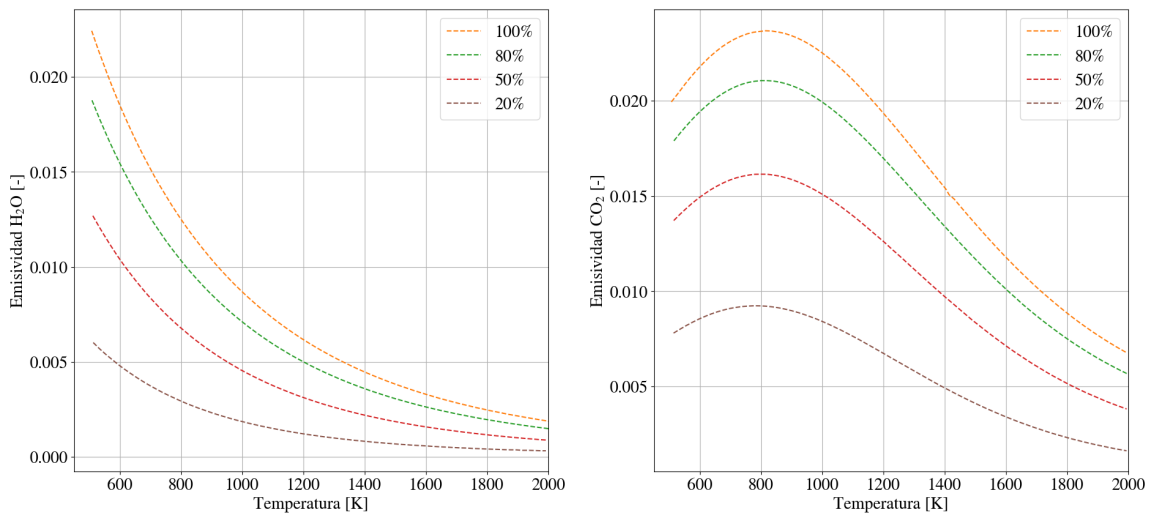


Figura 6.21: Emisividades de H_2O en estado vapor (izquierda) y CO_2 en estado gaseoso (derecha) con respecto a la temperatura y la cantidad volumétrica en la mezcla.

La configuración que entrega los mayores índices de emisividad se presenta en la relación 80 % CO_2 -20 % H_2O para un rango de temperaturas mayor a los 800 K, precisamente el rango donde la conductividad radiante al interior de la esfera empieza a ser significativa en la transferencia de calor (Figura 6.16). Durante las simulaciones

computacionales se utilizaron las mezclas 70 %-30 % 80 %-20 % y 90 %-10 % entregando resultados prácticamente similares que pueden ser considerados como despreciables para casos experimentales, con una temperatura del sólido de 1229 K para una simulación utilizando una relación de equivalencia de $\phi = 0.7$ y una velocidad de filtración $v_f = 0.51$ m/s. Las simulaciones fueron realizadas con una relación volumétrica de $\text{CO}_2\text{-H}_2\text{O}$ como 9 % y 1 % respectivamente con el fin de intentar recrear las condiciones con las que son elaboradas las esferas.

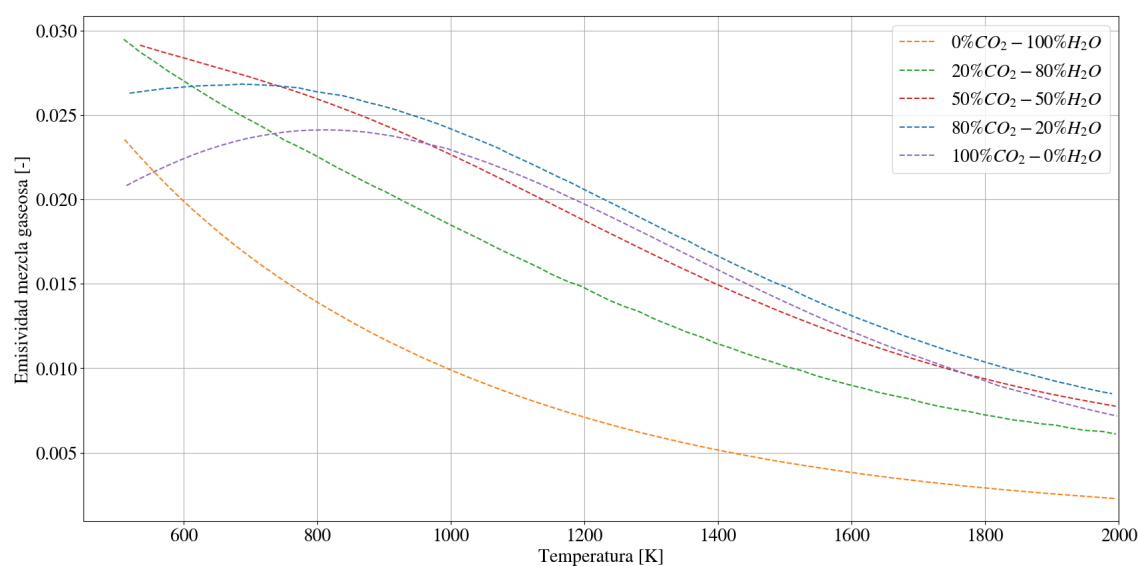


Figura 6.22: Curvas de emisividad mezcla $\text{CO}_2\text{-H}_2\text{O}$ para variadas configuraciones

El estudio a las temperaturas máximas con respecto a la cantidad volumétrica de mezcla mostró resultados que diferían numéricamente en órdenes de 1×10^{-3} , por lo que vale decir que mientras se mantenga la misma razón de mezcla, no se verá afectada la magnitud de la temperatura. La tendencia mostrada por los resultados señala que para un relación de 80 %-20 % de CO_2 y H_2O respectivamente con una tolerancia de $\pm 10\%$ los resultados finales no se verán afectados a nivel macroscópico o experimental, ya que la temperatura se mantuvo constante para los tres tipos de configuración en tres cantidades volumétricas distintas.

6.7. Gases producto

Los gases producto de la combustión fueron estudiados de manera numérica, puesto a que no fue posible realizar análisis de muestra mediante analizador de gases por disponibilidad de equipo y tiempos de experimentación. Sin embargo, los resultados

obtenidos en la simulación presentan resultados muy similares a los de Fierro [15]. La comparación según la relación de equivalencia se presenta en el Cuadro 6.7.

Cuadro 6.7: Comparación gases producto entre modelos

ϕ	w_{CO_2}	w_{CO_2} [15]	$w_{\text{H}_2\text{O}}$	$w_{\text{H}_2\text{O}}$ [15]
0.55	0.0851	0.0850	0.0697	0.0697
0.7	0.1082	0.1080	0.0882	0.0880

Capítulo 7

Conclusiones

Se ha desarrollado una investigación numérica y experimental sobre las temperaturas y velocidades de desplazamiento del frente de combustión de un reactor de medio poroso inerte compuesto por esferas huecas (HS) de alúmina, considerando diferentes mezclas de gases al interior de dichas esferas, y con variaciones del “Fire Rate” y la relación de equivalencia.

Un modelo bidimensional para el proceso de combustión en medios porosos inertes que considera las ecuaciones de conservación de masa, energía del sólido, gas y especie química, con las respectivas condiciones iniciales y de borde, se ha propuesto. Al modelo se incorpora la radiación interna de las HS mediante una conductividad radiativa equivalente considerando una mezcla de aire, vapor de agua (H_2O) y dióxido de carbono (CO_2). El modelo se discretiza utilizando el método ADI y se resuelve mediante un algoritmo TDMA.

Se ha diseñado e implementado un reactor cilíndrico de diámetro 45.1 cm y altura 28.5 cm que contiene HS de diámetro 3 mm y 4 mm (con aire en su interior), el cual utiliza una premezcla de gas natural y aire, con relaciones de equivalencia (ϕ) en el rango de 0.55-0.7 y “Fire Rate” entre 755 kW/m^2 y 3775 kW/m^2 . El reactor de medios porosos inertes considera los sistemas de medición y control de flujos y temperaturas.

Los resultados de simulación numérica y experimental para las máximas temperaturas del frente de combustión presentan un muy buen contraste, con un claro aumento de la temperatura mediante se incrementa el “Fire Rate”. Por su parte, estos resultados señalan que una disminución del diámetro de las esferas huecas produce aumentos en las temperaturas del sólido y en las velocidades del frente de combustión, debido a la mayor área superficial de transferencia de calor que generan. Por su parte, los resultados numéricos muestran que el espesor del frente de combustión se reduce con la disminución

de los diámetros de las esferas huecas.

Se demuestra experimentalmente la dependencia del comportamiento del desplazamiento de frente de llama con respecto al aumento del “Fire Rate” en un rango de $0.4 \leq \phi \leq 1.0$. Se encuentra una velocidad de desplazamiento aguas abajo para $\phi = 0.4$ y un $FR = 1.000 \text{ kW/m}^2$, cuatro velocidades de estabilización del frente de llama, y ocho velocidades de desplazamiento aguas arriba. En términos generales, un aumento del “Fire Rate” genera un aumento de la velocidad de desplazamiento aguas arriba. Desde los resultados de la simulación numérica, se contrastan de buena manera las velocidades de estabilización del frente de llama, sin embargo, para las otras velocidades de frentes de combustión el orden de magnitud es distinto al experimental.

Se analiza el efecto de la radiación en el interior de las esferas huecas, respecto de su espesor y diámetro, en donde se aprecia que la radiación interna juega un rol relevante para un espesor pequeño, logrando en algunos casos superar la conductividad del material sólido. Adicionalmente, se analiza el efecto de la composición gaseosa ($\text{CO}_2\text{-H}_2\text{O}$) en el interior de las esferas huecas, no presentando cambios significativos respecto de tener aire en su interior (como es el caso experimental).

Finalmente, el código utilizado, la conductividad radiante desarrollada y los fenómenos estudiados dan una base para futuras investigaciones utilizando esferas huecas como medio poroso inerte. Se sugiere investigar mezclas ricas en combustible para la producción de hidrógeno y reactores de medio poroso híbrido con variaciones del “Fire Rate”.

Apéndice A

Variables ecuaciones de Leckner

H ₂ O			CO ₂		
M, N	2,2		2,3		
$c_{00} \cdots c_{N0}$	-2.2118	-1.1987	0.035596	-3.9893	2.7669
\vdots, \vdots	0.85667	0.93048	-0.14391	1.2710	-1.1090
$c_{0M} \cdots c_{NM}$	-0.10838	-0.17156	0.045915	-0.23678	0.19731
P_E	$(p + 2.56 p_a / \sqrt{t}) / p_0$		$(p + 0.28 p_a) / p_0$		
$(p_a L)_m / (p_a L)_0$	13.2 t^2		0.054/ t^2 , $t < 0.7$ 0.225 t^2 , $t > 0.7$		
a	2.144, $t < 0.75$ 1.888 - 2.053 log ₁₀ t , $t > 0.75$		1 + 0.1/ $t^{1.45}$		
b	1.10/ $t^{1.4}$		0.23		
c	0.5		1.47		
$T_0 = 1000 \text{ K}, \quad p_0 = 1 \text{ bar}, t = T/T_0, (p_a L)_0 = 1 \text{ bar} \cdot \text{cm}$					

Figura A.1: Variables para ecuaciones de Leckner [29]

Apéndice B

Ingeniería armado reactor

B.1. Lugar de trabajo y propiedades

Como corroboración a los fenómenos entregados por el modelo matemático ya señalado, se construye un reactor de medios porosos en el laboratorio de termo fluidos (LTF) del departamento de ingeniería mecánica en las dependencias de la casa central de la Universidad Técnica Federico Santa María. Laboratorio que cuenta con línea de gas natural, el cual se estima con un grado de pureza de 96 % de CH_4 (muestra analizada mediante cromatógrafo en la universidad), y un compresor para alimentar la línea de aire comprimido.

El lugar de trabajo, corresponde al módulo número 3 del LTF, en donde se construye una mesa (ver figura B.1) con el fin de poder establecer el reactor de medios porosos y los instrumentos que éste requiere para su operación.



Figura B.1: Estado mesa construida previo a la instalación de respaldo, armado reactor y línea de gas.

B.2. Estructura

El reactor está conformado por un tubo de cuarzo de altura 285 mm, diámetro externo $D_e = 45.10$ mm y un espesor $t = 1.57$ mm. En su interior y exterior se incluye aislante de anchos 5 mm y 15 mm respectivamente. El aislante corresponde al modelo Durablanket - S de UNIFRAX.

El tubo de cuarzo se encuentra insertado en un difusor de aluminio afirmado con o'rings y sellado exteriormente con silicona roja de alta temperatura, con el fin de evitar fugas de pre-mezcla y/o calor. Además, el cuarzo cuenta con una varilla cerámica vertical, en la cual se encuentran instaladas unas termocuplas tipo S para efectuar la lectura de temperatura. La base del reactor se encuentra apernada a una plancha de acero con un soporte soldado. La Figura 5.1 muestra el esquema utilizado para los experimentos realizados y la Figura B.2 muestra en detalle las dimensiones del tubo de cuarzo y el espesor de la capa de aislante.

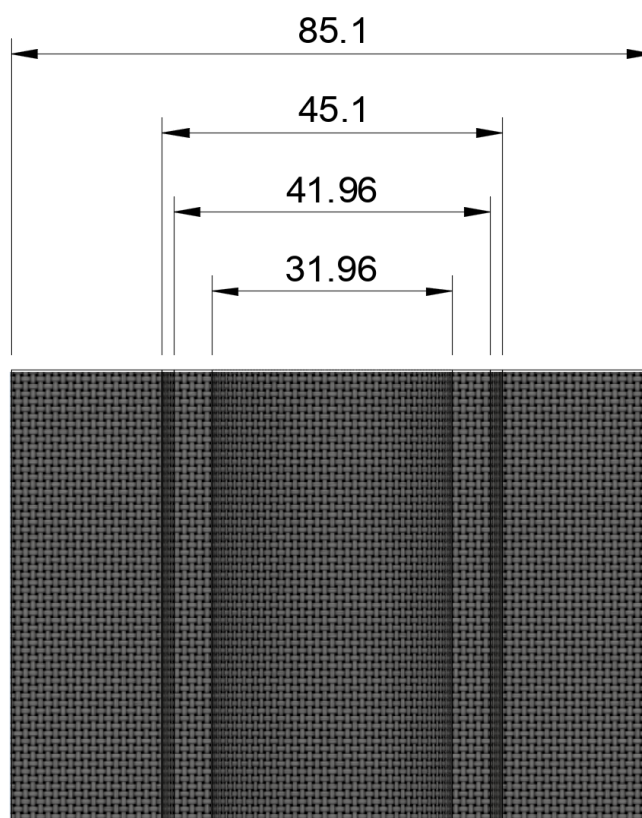


Figura B.2: Diámetros

B.3. Ensamblado termocuplas

A diferencia de los montajes experimentales ya realizados por Gutiérrez [6] o Toledo [37], se decide innovar en el montaje de los termopares, con el fin de abaratar costos. Gran parte de éste se encuentra en los filamentos de termocupla, bordeando un aproximado de 3.000 pesos chilenos el centímetro. Esta innovación consta en utilizar una soldadora de termocuplas, con el fin de hacer una fusión entre el cable compensado y su filamento correspondiente (ver figura B.3), los cuales se insertan en la varilla cerámica. La unión entre termocuplas se realiza mediante un entrelazado manual.

Los puntos de soldadura y puntos de lectura de temperatura se encuentra adjunto en el Anexo D, las termocuplas son del tipo S, con su conductor positivo (+) de aleación Platino - 10 % Rodio, y su conductor negativo (-) de Platino.



Figura B.3: Punto soldadura entre cable compensado y filamento correspondiente.

B.4. Equipos controladores

La premezcla que se introduce al reactor viene regulada por unos controladores de flujo marca AALBORG, de los cuales, el fabricante indica un porcentaje de error de medición menor a 1 %. Los controladores son de metano (CH_4) y aire, con sus rangos de caudales 0 – 5 L/min y 0 – 30 L/min respectivamente. Los controladores se encuentran conectados directamente a sus fuentes respectivas, y sus caudales son canalizados mediante mangueras de plástico a una unión tipo tee, la cual desemboca en una conexión rápida al reactor.

B.5. Difusor de calor

Debido al punto de soldadura utilizado en la parte superior del reactor, se implementa un diseño de difusor para evitar que la zona de soldadura eleve temperatura, puesto que esto generaría una dilatación en el punto, generando de tal manera un error en la medición, ya que el adquisidor de datos, leería el cambio de voltaje producido por la dilatación del punto.

El difusor consiste en un trozo de fibra de cemento (internit) cubierto del mismo aislante del reactor, con unos soportes para afirmarlo a la estructura del reactor. Además, sobre este trozo, se coloca aislante para cubrir el punto de soldadura.

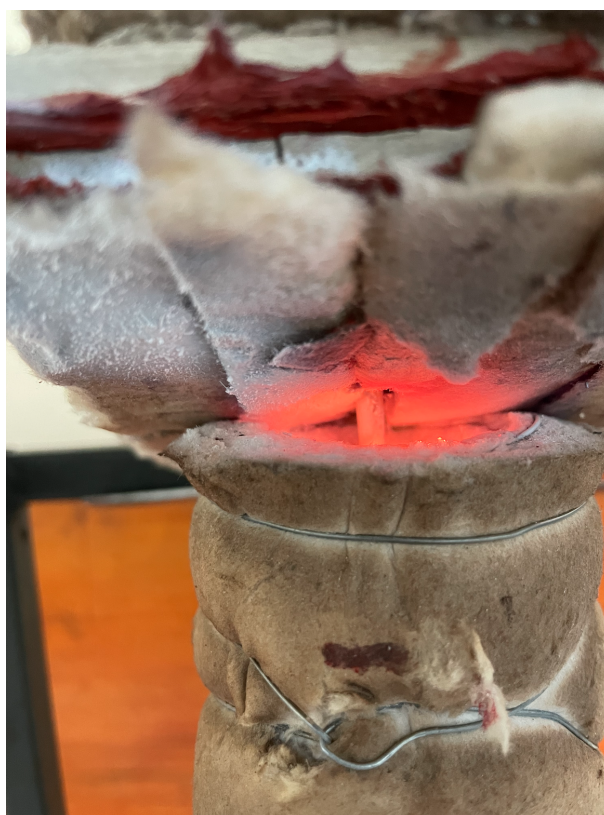


Figura B.4: Difusor de temperatura instalado sobre reactor de medio poroso.

Apéndice C

Error de lectura termocuplas

En el caso experimental, se considera un error de lectura por el orden de los 60 K, en donde se encuentra el margen de las termocuplas y la dispersión de datos iniciales. La dispersión se producía por la dilatación del punto de soldadura, puesto que el programa lo consideraba como una toma de temperatura errónea y en algunas ocasiones como una apertura de termocupla. Durante las primeras experimentaciones, se llegó a registrar temperaturas bajo los $-200\text{ }^{\circ}\text{C}$, es por aquello que se instaló un deflector de calor (mencionado en el Anexo B), mejorando considerablemente el error de lectura inicial mostrado en las imágenes de la Figura C.1.

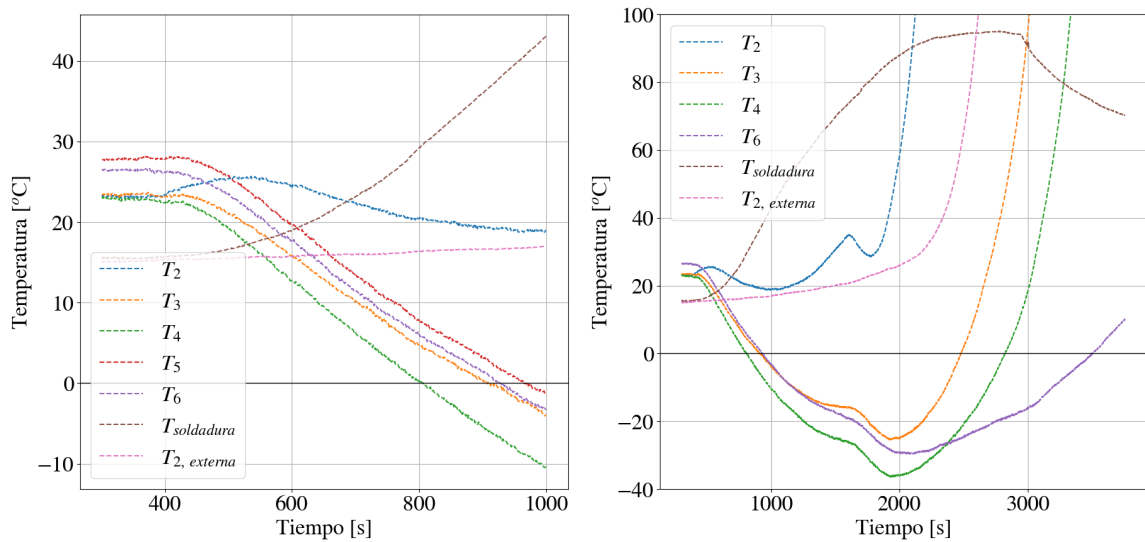


Figura C.1: Dispersión de temperaturas en detalle tras ignición de reactor, para $\phi = 0.7$ y $v_f = 0.51\text{ m/s}$.

Apéndice D

Reactor medio poroso interte

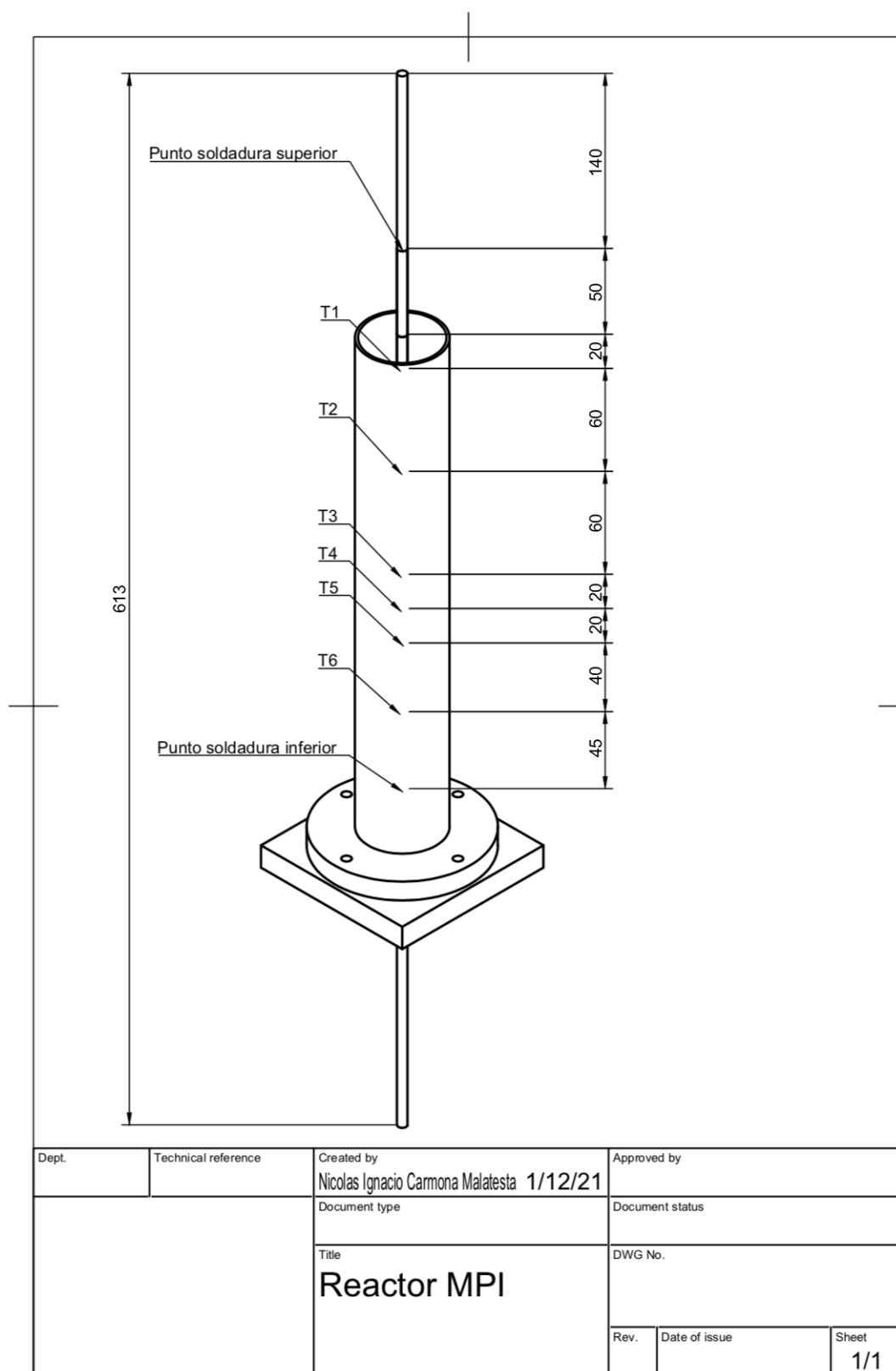


Figura D.1: Reactor de medio poroso interte utilizado para experimentación, en detalle las dimensiones de puntos de soldadura y distribución de termocuplas.

Apéndice E

Protocolo reactor medio poroso inerte

PROTOCOLO SEGURIDAD Y PUESTA EN MARCHA DE REACTOR MEDIO POROSO

■ SEGURIDAD

- Utilizar vestimenta adecuada a laboratorio (Pantalón largo, zapatos cerrados, guantes y lentes).
- Estar alerta ante cualquier evento generado por el reactor y sus alrededores.
- Nunca dejar reactor encendido sin alguien a cargo.
- Verificar que espacio de trabajo tenga buena ventilación.
- Revisar línea de aire y gas, comprobar que no existan fugas.
- Revisar estado compresor.
- Revisar válvulas de corte y su ubicación.
- Revisar que válvula de inyección esté cerrada

■ PUESTA EN MARCHA

- Verificar lo especificado en sección de seguridad.
- Revisar que línea de gas natural se encuentre abierta desde válvula inicial (frente a túnel de viento)
- Dar paso a válvula compresor de aire
- Encender controladores y esperar 15 a 20 minutos (electroválvula debe estar tibia) antes de activar línea de gas y aire.
- Abrir programa lector de datos en computador y seleccionar termocupla tipo S. Gráficos, tiempo de grilla y límites se deben seleccionar según lo deseado en la investigación.
- Revisar anomalías en lectura de termocuplas.
- Revisar estado protección zona soldadura termocuplas.
- Determinar relación ϕ que se utilizará y caudal total de mezcla a utilizar.
- Mediante ecuación (1), determinar caudales necesarios.
- Encender extractor de aire
- Pasado el tiempo de espera, activar línea de aire y setear caudal en controlador, luego abrir paso a línea de gas natural y realizar seteo con controlador de metano. (Seteo se realiza con un destornillador paleta de precisión por costado de controlador).
- Pasado 1 minuto de espera para homogenizar mezcla en reactor, encender en zona superior.
- Una vez finalizado experimento, dejar enfriar únicamente con línea de aire.

■ CAUDAL

$$Q_{CH_4} = \frac{Q_{Total}}{1 + \frac{9,52}{\phi}} \quad (1)$$

Apéndice F

Aparato generador de esferas huecas

U.S. Patent

Jul. 21, 1981

4,279,632

FIG. 2

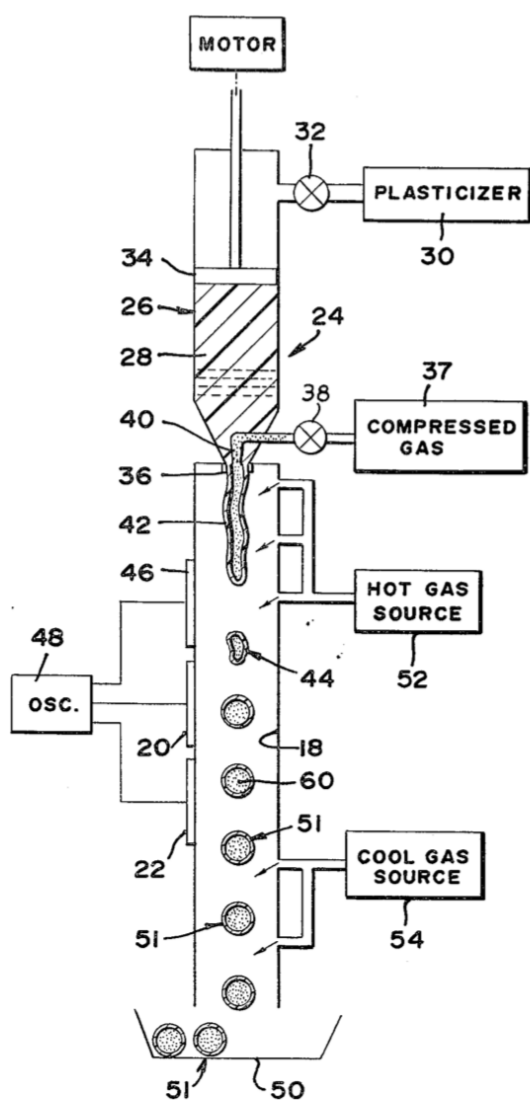


FIG. 1

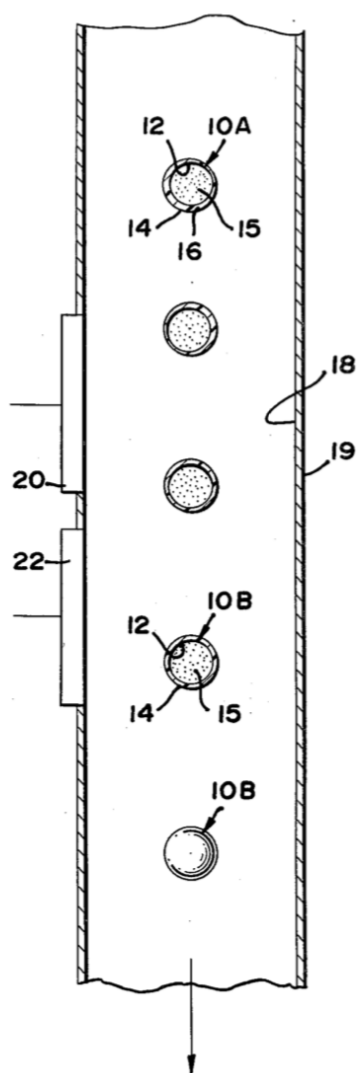


Figura F.1: Aparato generador de esferas huecas con gas en su interior.

Apéndice G

Código madre combustión en medio poroso inerte hueco 2D

Nombre del código: [Código MPI 2D](#)

Bibliografía

- [1] UN Department of Economic and Social Affairs – Population Division. *World population prospects 2019 highlights*. United Nations, New York, 2019.
- [2] Dawood F. & Shafiullah G. Anda M. Hydrogen production for energy: An overview. *College of Science, Health, Engineering and Education*, 2019.
- [3] Ogden J. Prospects for building a hydrogen energy infrastructure. *Annual Review of Energy and the Environment*, 1999.
- [4] Kaviany M. *Principles of Heat Transfer in Porous Media*. Springer, Second Edition, New York, USA.
- [5] Kambiz Vafai. *Handbook of Porous Media*, volume 3. 2015.
- [6] Gutiérrez C. *Investigación experimental del uso de " Alumina Bubble" en el proceso de gasificación de carbón*. Memoria de titulación, Departamento de Ingeniería Mecánica, Universidad Técnica Federico Santa María, 2019.
- [7] Toledo M. Bubnovich V. Analytical modelling of filtration combustion in inert porous media. *Applied Thermal Engineering*, 27(2007):1144–1149, 2006.
- [8] de Goey L. Boumaa P. *Premixed combustion on ceramic foam burners*. Combustion and Flame, ELSEVIER, 1999.
- [9] Vasconcelo D. Toledo M., Araus K. *Syngas production from coal in presence of steam using filtration combustion*. Departamento de ingeniería mecánica, UTFSM, Valparaíso, Chile, 2015.
- [10] Jazayeri A. Mohammadi A. Numerical simulation of combustion in porous media. *Numerical Simulation - From Theory to Industry*, 2012.

- [11] Öchsner A. Fiedler T., Solórzano E. *Numerical and experimental analysis of the thermal conductivity of metallic hollow sphere structures*. Materials Letters, ELSEVIER, 2007.
- [12] Resnick J. Tiny capsules enable a world of possibilities. *NASA Fabrication Technology, Energy and Environment*, 1984.
- [13] Kendall J. Fabrication of hollow spheres. *NASA Fabrication Technology*, 1984.
- [14] Kamal M. & Mohamad A. *Combustion in Porous Media*. Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part A: Journal of Power and Energy, 2006.
- [15] Matías Fierro, Cristóbal Gutierrez, Valeri Bubnovich, Nicolás Ripoll, and Mario Toledo. Thermal effect of hollow spheres in a filtration combustion process. *Applied Thermal Engineering*, 195:117037, 2021.
- [16] Alexei V. Saveliev A. A. Fridman Lawrence A. Kennedy, Jacques P. Bingue and Serguei I. Foutko. *Chemical structures of Methane-Aire filtration combustion waves for Fuel-lean and Fuel-rich conditions*. Proceedings of the Combustion Institute, Volume 28, Department of Mechanical Engineering, University of Illinois at Chicago, 2000.
- [17] Mario Toledo, Khriscia Utria, and Alexei V. Saveliev. Ultrarich filtration combustion of ethane. *Energy and Fuels*, 28(2):1536–1540, 2014. ISSN 08870624. doi: 10.1021/ef402264a.
- [18] Majid Nikfar Seyed Abdolmahdi Hashemi and Rohollah Motaghedifard. Experimental study of operating range and radiation efficiency of a metal porous burner. *Thermal science*, 19(1):11–20, 2015. doi: 10.2298/TSCI12522154H.
- [19] H. Gonzalez R. Salas V. Bubnovich, M. Toledo. Finite differences study of ignition in a methane–air mixture flow. *International Journal of Solids and Structures*, 19(40):4955–4963, 2003. doi: 10.1016/S0020-7683(03)00248-8.
- [20] Catalina Alejandra Diaz Lopez. Modelacion y simulacion bidimensional de un quemador de flujo reciproco en medios porosos inertes. 2010.
- [21] Xiaozhe Guo Hao Chen Liang Xue. Fluid flow in porous media. pages 47–67, 2020. doi: <https://doi.org/10.1142/11805>.

- [22] Jacob Bear. *Modeling Phenomena of Flow and Transport in Porous Media*. Springer, 31 edition, 2018.
- [23] Modest M. *Radiative Heat Transfer*. Elsevier, 3 edition, 2013.
- [24] Z. Jia, Z. Wang, D. Hwang, and L. Wang. Prediction of the Effective Thermal Conductivity of Hollow Sphere Foams. *ACS Applied Energy Materials*, 1(3): 1146–1157, 2018. ISSN 25740962. doi: 10.1021/acsaem.7b00264.
- [25] S.T. Surjikov. Coupled radiation, convection and conduction. *Thermopedia*. doi: 10.1615/AtoZ.c.coupled_radiation_convection_and_conduction.
- [26] Rosseland S. *Astrophysik: Auf Atomtheoretischer Grundlage*. Springer, Alemania, 1931.
- [27] Lin Chen Chao Xu Xiaoze Du Gaosheng Wei, Pingrui Huang. Experimental investigations on radiative properties of two kinds of open-cell porous ceramic materials. 2017. doi: <https://doi.org/10.1063/1.4984392>.
- [28] Viorel Badescu. Tables of rosseland mean opacities for candidate atmospheres of life hosting free-floating planets.
- [29] Leckner B. *Combustion and flame*. 1971.
- [30] John R. Howell Pei-feng Hsu. Measurements of thermal conductivity and optical properties of porous partially stabilized zirconia. *Experimental Heat Transfer*, pages 293–313, 2007. doi: 10.1080/08916159208946446.
- [31] Boles M. Çengel Y. *Termodinámica*. McGrawHill, 7 edition, 2011.
- [32] Skurtys O. *Dinámica de Fluidos Computacional*. 2021.
- [33] Saveliev A. Kennedy L. Toledo M., Bubnovich V. Comparative study of lean and rich filtration combustion of methane/air, ethane/air, and propane/air mixtures. *Int. Conf. Heat Transfer, Thermal Engineering, and Environment, WSEAS*, pages 146–152, 2006.
- [34] David G. Goodwin, Harry K. Moffat, Ingmar Schoegl, Raymond L. Speth, and Bryan W. Weber. Cantera: An object-oriented software toolkit for chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes, 2022. URL <https://www.cantera.org>. Version 2.6.0.

- [35] Walter W. Yuen. Definition and evaluation of mean beam lengths for applications in multidimensional radiative heat transfer: A mathematically self-consistent approach. 2008. doi: 10.1115/1.2969752.
- [36] Sarofim A.F. Hottel H.C. *Radiative Transfer*. McGraw-Hill, New York, 1967.
- [37] Henríquez L. Rosas C. Bubnovich V., Toledo M. and Romero J. Flame stabilization between two beds of alumina balls in a porous burner. *Applied Thermal Engineering*, 30(2-3):92–95, 2010.
- [38] Daniel Rebollo. Simulación numérica de la radiación térmica de gases no grises en cavidades multidimensionales. *Asociación Argentina de Mecánica Computacional*.
- [39] National Physical Laboratory (NPL). What is emissivity and why is it important. 2019.
- [40] L. Henríquez N. Gnesdilov V. Bubnovich. Numerical study of the effect of the diameter of alumina balls on flame stabilization in a porous-medium burner. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications: An International Journal of Computation and Methodology*, 2007.
- [41] Fernandez P. *Radiación en gases no transparentes*. Universidad Politécnica de Madrid, Madrid, España.
- [42] Leckner B. Spectral and total emissivity of water vapor and carbon dioxide. 1972.
- [43] Efstathios E (Stathis) . Michaelides. *Alternative Energy Sources*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Berlin, 2012. doi: 10.1007/978-3-642-20951-2.