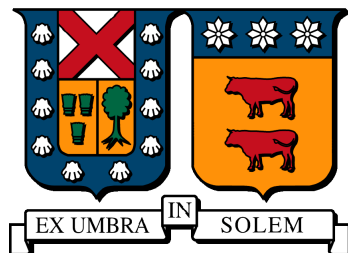


UNIVERSIDAD TÉCNICA FEDERICO SANTA MARÍA
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MECÁNICA
VALPARAÍSO-CHILE



**EFFECTO DE LA ADICIÓN DE VAPOR DE
AGUA EN LA EMISIÓN DE MATERIAL
PARTICULADO EN UN REACTOR DE
MEDIO POROSO INERTE DE FLUJO
RECÍPROCO**

TOMÁS FELIPE GÓMEZ CASTILLO

**MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE INGENIERO CIVIL MECÁNICO
MENCIÓN ENERGÍA**

PROFESOR GUÍA : DR. ING. MARIO TOLEDO T.
PROFESOR CORREFERENTE : DR. FABIÁN GUERRERO C.

Enero 2021

Agradecimientos

En primera instancia me gustaría agradecer a mis profesores quienes fueron los formadores de mi vida universitaria para lograr llegar a este momento generando en mi el querer siempre aprender cosas nuevas y este cariño que le tengo a la búsqueda de nuevos conocimientos que espero que me acompañe por el resto de mi vida. Los que me enseñaron a pensar como un ingeniero y ver las posibles soluciones a cada problemática de la vida desde otro punto de vista.

Agradecer además a mis compañeros tanto de la rama de rugby de la universidad que me aceptaron como uno más en estos últimos años en Casa Central como a los de clases que ambos me ayudaron a sortear cada momento de la vida universitaria en todos sus aspectos.

A mis amigos, quienes con su apoyo incondicional y quienes juntos a las experiencias vividas juntos han desarrollado aptitudes que trascienden el aprendizaje, forjando lazos que perduran en el tiempo y permiten un crecimiento personal.

Para terminar agradezco a los mas importantes, a mis padres Luis y Sandra quienes me apoyaron en los cambios que quise hacer en su momento lo que permitió ser la persona quien soy en este momento. A Pilar, quien fue un apoyo fundamental en los últimos años de mi etapa universitaria para lograr cerrar de a mejor manera posible todo este proceso y etapa de mi vida. A mis abuelas, Elcira y María Felipa, quienes han sido quienes desde sus hogares con sus llamadas me dan la tranquilidad de tener un angelito que me cuida en cada momento de la vida con sus buenos deseos y palabras de aliento en los momentos difíciles.

A cada uno de aquellos espero hacerlos sentir orgullosos de lo logrado hasta este momento y de lo que vendrá. A cada uno muchas gracias.

Dedicatoria

A mi familia.
”Solo sé que nada sé”
Sócrates.

Resumen

En el marco del proyecto FONDECYT "*Hydrogen production from chilean carbonaceous feedstock using a novel reverse flow porous media reactor*", el presente trabajo de título se desarrolla en el contexto de la pandemia por COVID 19 que afecta a nuestro país, razón por la cual el desarrollo experimental no es realizado en su totalidad. Por lo tanto, el objetivo principal consistió en el rediseño de un reactor de medio poroso inerte con flujo recíproco que considera la adición de vapor de agua y los sistemas de medición de gases y material particulado. Adicionalmente, se simula computacionalmente el proceso de combustión en el reactor.

Para el rediseño del reactor se definen los parámetros operacionales para todo el rango de relación de equivalencia, como es una velocidad $u_0 = 0.32 \text{ m/s}$ para un caudal de premezcla aire y combustible de $Q = 20.15 \text{ l/min}$. Para el caso de la adición de vapor de agua, se tiene un leve aumento del caudal hasta $Q = 20.39 \text{ l/min}$.

Los resultados de la simulación computacional muestran que el perfil de la temperatura dentro del reactor varía a medida que se realizan los cambios en los parámetros operacionales, como son: la velocidad de filtración (u_0), relaciones de equivalencia (ϕ), tiempo de semi ciclo (t_{sc}) y porosidad (por). Además, la simulación permitió realizar una comparación de los perfiles térmicos del reactor al modificar el medio poroso inerte desde una esponja cerámica a esferas de distintos materiales, como alúmina, cobre, cuarzo y grafeno.

Palabras claves: Medio poroso inerte, reactor de flujo recíproco, simulación.

Abstract

Under the project FONDECYT "*Hydrogen production from chilean carbonaceous feedstock using a novel reverse flow porous media reactor*", this title work is developed in the context of the COVID 19 pandemic that affects our country, which is why the experimental development is not carried out in its entirety. Therefore, the main objective consisted in the redesign of an inert porous medium reactor with reciprocal flow that considers the addition of water vapor and the measurement systems for gases and particulate matter. Additionally, the combustion process in the reactor is computationally simulated.

The operational parameters were defined to be $u_0 = 0.32 \text{ m/s}$ with a premix air and fuel flow rate of $Q = 20.15 \text{ l/min}$ for the entire range of equivalence ratio. In the case of the addition of water vapor, there is a slight increase in the flow rate up to $Q = 20.39 \text{ l/min}$.

The results of the computational simulation show that the temperature profile inside the reactor varies as the changes in the operational parameters are made; such as filtration speed (u_0), equivalence ratio (ϕ), half cycle time (t_{sc}) and porosity (por). Furthermore, the simulation made it possible to make a comparison of the thermal profiles of the reactor by modifying the inert porous medium from a ceramic sponge to spheres of different materials, such as alumina, copper, quartz and graphene.

Key words: Inert porous medium, reciprocal flow reactor, simulation.

Glosario de términos

Abreviaturas

MPI	Medio poroso inerte
ZTA	Alumina estabilizada de zirconio
PM	Material particulado
V-HDAS	Venacontra High-temperature Aerosol Sampler

Letras griegas

ϕ	Relacion de equivalencia	$[-]$
λ	Exceso de aire	$[-]$
ε	Porosidad del material	$[-]$
ϕ_i	Diámetro interior	$[mm]$
ϕ_e	Diámetro exterior	$[mm]$
ρ	Densidad	$[kg/m^3]$
λ_{ef}	Conductividad térmica efectiva del medio poroso	$[W/m \cdot K]$
β_v	Intercambio de calor con los alrededores	$[W/m^3 \cdot K]$
μ_g	Viscosidad del gas	$[kg/m \cdot s]$

Fórmulas químicas

CO	Monóxido de carbono
CO_2	Dióxido de carbono
H_2	Hidrógeno
CH_4	Metano
N_2	Nitrógeno
O_2	Oxígeno

H_2O	Agua
Al_2O_3	Cerámica de alúmina

Lista de símbolos

H_i	Entalpía molar en el i-ésimo componente	$[kJ/kg]$
Q	Caudal	$[l/min]$
$V_{a,e}^\circ$	Volumen de aire estequiométrico normalizado	$[m_N^3]$
u	Velocidad de filtración	$[m/s]$
v	Velocidad de la mezcla	$[m/s]$
A	Área	$[m^2]$
m_i	Masa del material i	$[kg]$
X_i	Fracción másica del material i	$[-]$
$\dot{V}_{total}$	Flujo del componente i	$[l/min]$
C_p	Calor específico	$[J/kg \cdot K]$
T_i	Temperatura del componente i	$[K]$
$\bar{w}$	Fracción en masa de combustible normalizada	$[-]$
Pr	Número de Prandtl	$[-]$
Re	Número de Reynolds	$[-]$
h	Tranmitancia térmica	$[W/m^2 \cdot K]$
d_p	Tamaño de poro	$[mm]$
t_c	Tiempo de ciclo	$[s]$
t_{sc}	Tiempo de semi ciclo	$[min]$
por	Porosidad	$[-]$

Índice general

1. Introducción y antecedentes de la investigación	1
1.1. Motivación	1
1.2. Objetivo general y específicos	2
1.3. Procesos Combustión / Pirólisis / Gasificación	2
1.3.1. Combustión	2
1.3.2. Pirólisis	4
1.3.3. Gasificación	5
1.4. Combustión en medios porosos inertes	9
1.4.1. Configuraciones	10
1.4.2. Propiedades	12
1.4.3. Parámetros	13
1.4.4. Combustión en medios porosos inerte versus combustión en llama libre	14
1.5. Reactores de Flujo Recíproco	15
1.5.1. Revisión bibliográfica de reactores de flujo recíproco	17
2. Diseño de reactor de flujo recíproco	20
2.1. Diseño del reactor	20
2.1.1. Dimensiones	22
2.1.2. Material cerámico	23
2.1.3. Aislamiento	23
2.1.4. Combustibles	25
2.2. Parámetros operacionales	25
2.2.1. Velocidad de filtración	25
2.2.2. Flujos de metano y aire	27
2.2.3. Flujos de vapor de agua	30

2.3.	Disposición general de la instalación	31
2.4.	Sistemas de medición y control	33
2.4.1.	Suministro de flujos del reactor	33
2.4.2.	Control de flujos	36
2.4.3.	Sistema de extracción de gases de escape	37
2.4.4.	Sistema de adquisición de datos de temperatura	40
2.5.	Procedimiento experimental propuesto	41
2.5.1.	Encendido del reactor	42
2.5.2.	Operación con inyección lateral de aire y combustible en pre- mezcla	43
2.5.3.	Operación con inyección central de combustible sin premezcla .	43
2.5.4.	Toma de muestras	45
2.5.5.	Apagado del reactor	46
3.	Modelo matemático del reactor de flujo recíproco	47
3.1.	Metodología	47
3.2.	Consideraciones al modelo matemático	47
3.3.	Modelo matemático de la combustión en medios porosos inertes cerámi- cos	49
3.4.	Condiciones iniciales y de borde	49
3.5.	Consideraciones generales	51
3.5.1.	Coefficientes intersticial de intercambio de calor, $a \text{ W/m}^3 \cdot K$. .	51
3.5.2.	Coefficiente de conductividad térmica efectivo del medio poro- so, $\lambda_{ef} \text{ W/m} \cdot K$	51
3.5.3.	Coefficiente de intercambio de calor con los alrededores, β_v $\text{W/m}^3 \cdot K$	52
3.5.4.	Difusividad de especies, $D \text{ m}^2/\text{s}$	52
3.5.5.	Reacción química	52
3.5.6.	Propiedades físicas del medio poroso y del gas	53
3.6.	Método de discretización y solución de las ecuaciones	54
3.6.1.	Diferencias finitas implícitas	54
3.6.2.	Algoritmo de la matriz tridiagonal TDMA	55
4.	Resultados de la simulación computacional	56
4.1.	Validación de resultados de simulación computacional	56

4.2.	Resultados numéricos	58
4.2.1.	Influencia de la velocidad de filtración	58
4.2.2.	Influencia de la variación de relación de equivalencia	59
4.2.3.	Influencia de la variación del tiempo de semi ciclo	61
4.2.4.	Influencia de la variación de la porosidad	62
4.2.5.	Influencia del material del medio poroso	63
5.	Conclusiones	68
6.	Recomendaciones para desarrollos futuros	70

Índice de figuras

1.1. Representación concepto de exceso de entalpía	4
1.2. Estabilización de frente de llama bajo un enfoque estacionario	10
1.3. Esquema enfoque transiente en un MPI	11
1.4. Zonas características en un quemador de MPI	13
1.5. Esquema reactor de flujo recíproco	16
1.6. Alternancia cíclica y perfil térmico típico de un reactor de flujo recíproco de MPI	16
1.7. Esquema de reactor de flujo recíproco utilizado por Contarin F.	17
2.1. Modelo 3D del reactor de flujo recíproco	21
2.2. Plano en corte del reactor de flujo recíproco	21
2.3. Flujo de calor radial en función del aislante térmico interno del reactor en milímetros	24
2.4. Perfil térmico con un espesor de 11.15 mm de aislante térmico	24
2.5. Layout de instalación del reactor de medio poroso de flujo recíproco	32
2.6. Reactor de MPI instalado bajo campana	33
2.7. Flujo de vapor v/s voltaje aplicado	34
2.8. Venacontra High-temperature Diluting Aerosol Sampler (V-HDAS) con acople de múltiples salidas	37
2.9. Analizador de gases de combustión industrial Testo 350	38
2.10. Analizador de partículas finas Testo 380	39
2.11. Espectrómetro portátil de aerosol Grimm 11-D	40
3.1. Discretización del eje espacial z	54
3.2. Discretización del eje tiempo	54

4.1. Evolución de la temperatura durante medio ciclo del reactor de flujo recíproco obtenido por Contarin. Las siglas HCB y HCE corresponden a los términos inicio medio ciclo y término medio ciclo, respectivamente	57
4.2. Simulación computacional propia con perfil de temperatura del sólido para $\phi = 0.3$, $u_0 = 0.5 \text{ m/s}$, $t_c = 10 \text{ s}$ y $T_{ig} = 1,150 \text{ K}$	57
4.3. Perfiles de temperatura de la fase sólida para $\phi = 0.5$ y $t_{sc} = 4 \text{ min}$	59
4.4. Perfiles de temperatura de la fase sólida para $u_0 = 0.2 \text{ m/s}$ y $t_{sc} = 4 \text{ min}$	60
4.5. Perfiles de temperatura de la fase sólida para $u_0 = 0.4 \text{ m/s}$ y $t_{sc} = 4 \text{ min}$	61
4.6. Perfiles de temperatura de la fase sólida para $\phi = 0.5$ y $u_0 = 0.2 \text{ m/s}$	62
4.7. Perfiles de temperatura de la fase sólida para $\phi = 1.0$, $u_0 = 0.2 \text{ m/s}$ y $t_{sc} = 4 \text{ min}$	63
4.8. Perfiles de temperatura de dentro del reactor para esferas de alúmina con $\phi = 0.55$ y $u_0 = 0.35 \text{ m/s}$	64
4.9. Perfiles de temperatura de dentro del reactor para esferas de cobre recubiertas de alúmina con $\phi = 0.55$ y $u_0 = 0.35 \text{ m/s}$	65
4.10. Perfiles de temperatura de dentro del reactor para esferas de cuarzo recubiertas de alúmina con $\phi = 0.55$ y $u_0 = 0.35 \text{ m/s}$	65
4.11. Perfiles de temperatura de dentro del reactor para esferas de grafeno recubiertas de alúmina con $\phi = 0.55$ y $u_0 = 0.35 \text{ m/s}$	66

Índice de tablas

1.1. Composición productos de la gasificación	6
2.1. Propiedades del acero ASTM A-53 A	22
2.2. Características técnicas del medio poroso	23
2.3. Caudal de la pre mezcla a inyectar en el reactor en función de la velocidad de filtración	26
2.4. Parámetros de operación del reactor	29
2.5. Nuevos parámetros operacionales del reactor	29
2.6. Flujos de operación para distintos ϕ con inyección de vapor/combustible	31
2.7. Voltaje estimado para operación del reactor	35
2.8. Flujos de operación a distintos ϕ con inyección vapor/combustible considerando límites de la caldera	35
2.9. Voltaje estimado para operación dentro de límites de la caldera	36
2.10. Características controladores de flujo	36
2.11. Listado de válvulas en diagrama instalación	42
4.1. Propiedades promedio de los materiales a utilizar	66
4.2. Propiedades promedio de las mezclas de materiales tipo esferas como medio poroso inerte	67

Capítulo 1

Introducción y antecedentes de la investigación

1.1. Motivación

Desde la creación del motor de combustión interna por el ingeniero alemán Nicolaus Otto en el año 1876 se ha dependido de combustibles fósiles para hacer la acción de combustión y así lograr el funcionamiento de las máquinas necesarias que se quieran utilizar. Esto puede ser para lograr el desplazamiento de un lugar a otro o la generación de energía eléctrica que son tan necesarias para la vida cotidiana que tenemos en el tiempo presente.

Con el pasar de los años nos hemos dado cuenta que no podemos depender este tipo de combustible para sostener nuestra constante alza de consumo energético dado que son extremadamente contaminantes y se llegó a un punto de escasez donde se hace necesario buscar alternativas.

Es por eso que se hace necesario la investigación en reactores de medios porosos inertes de flujo recíproco para la generación de hidrógeno como alternativa más limpia a los combustibles fósiles dado que el proceso de combustión con esta tecnología es mas amigable y eficiente con respecto a la combustión de llama libre.

1.2. Objetivo general y específicos

En el marco del proyecto FONDECYT N° 1190654 "*Hydrogen production from chilean carbonaceous feedstock using a novel reverse flow porous media reactor*", el presente trabajo busca diseñar un reactor de flujo recíproco y simular computacionalmente el proceso de combustión en medios porosos inertes de manera de establecer puntos de operación óptimos. Los objetivos específicos son:

1. Rediseñar e implementar mejoras a la operación de un reactor de flujo recíproco con medio poroso inerte, mediante la medición y control de temperaturas, flujos y emisiones de material particulado en línea.
2. Desarrollar simulaciones numérico-computacionales del proceso de combustión de la premezcla metano-aire en un reactor de flujo recíproco.
3. Analizar y comparar con otras investigaciones los resultados obtenidos, considerando tiempos de ciclo, velocidades de frente de combustión y temperaturas de operación del reactor.
4. Definir los parámetros de operación óptimos (relación de equivalencia, velocidades de filtración y porosidad) para la operación experimental.

1.3. Procesos Combustión / Pirólisis / Gasificación

1.3.1. Combustión

Un proceso de combustión es una reacción química de oxidación muy rápida acompañada de un flujo de calor exotérmico elevado y de un flujo de sustancias que desaparece, los reactivos, y de sustancias que aparecen, los productos. Para que ocurra un proceso de combustión se hacen necesarios tres factores: el comburente, el combustible y energía, siendo el oxígeno el comburente mas utilizado en la industria [1, 2].

Existen diferentes tipos de procesos de combustión. En general, siempre se asocia la existencia de una llama siendo ésta, una superficie muy delgada en la que tiene lugar las reacciones químicas como tal, clasificándose en combustión con llamas premezcladas y en llamas de difusión. Al hablar de una combustión con llamas premezcladas o

llamas de premezcla, se hace referencia al proceso en el cual los reactivos se encuentran mezclados en la proporción que uno determine antes que comience la combustión en sí. Bajo estas condiciones, la llama a la que también se le llama frente reactivo, separa físicamente los reactivos de los productos. En las llamas de difusión, los reactivos no se encuentran mezclados durante el proceso de combustión, siendo en la llama, donde se produce el encuentro de los reactivos, produciendo una reacción a una velocidad muy alta dando lugar a los productos. Existe un gradiente másico de cada uno de los reactivos y de los productos, produciendo un flujo másico por difusión hacia la llama, de los reactivos, y desde la llama, hacia los productos.

Ambos tipos de proceso, ya sea combustión en llama premezclada o en llama de difusión, pueden ser laminares o turbulentos dependiendo de como sea el flujo másico de la mezcla de reactivos o de cada uno de los reactivos por separados [1,2].

Combustión con exceso de entalpía

El término "exceso de entalpía" es usado para describir la entalpía entregada por los productos de combustión a los reactivos para incrementar su temperatura con efectos importantes sobre las velocidades de combustión, los límites de inflamabilidad y las temperaturas de llama, produciendo un incremento notable en la eficiencia de combustión, una disminución en las emisiones contaminantes y facilitando el quemado de combustibles con bajo poder calorífico [3].

La cantidad de energía durante el proceso de combustión está representada por la ecuación 1.1:

$$y = \int_{T_0}^{T_f} C_p dT = Q_c + Q_a = H_f - H_0 \quad (1.1)$$

Donde, T_f corresponde a la temperatura final, T_0 la temperatura inicial, Q_c el calor liberado por la conversión de energía química, Q_a el calor sensible debido al precalentamiento del aire, H_f y H_0 las entalpías en los dos estados mencionados anteriormente.

Para representar el concepto de exceso de entalpía se presenta la Figura 1.1.

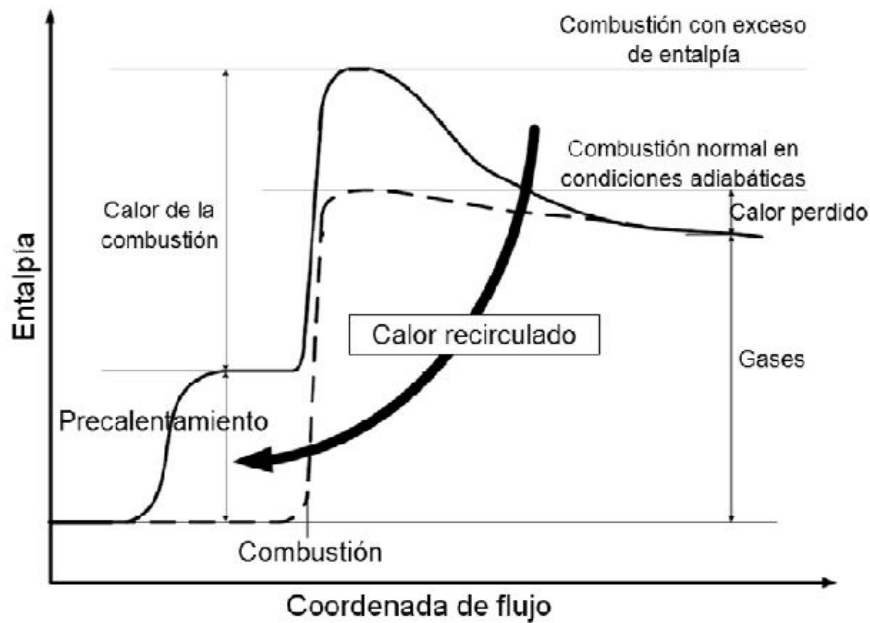


Figura 1.1: Representación concepto de exceso de entalpía [3].

En la Figura 1.1, el cambio de entalpía para la combustión normal sin precalentamiento del aire está señalado por la línea punteada. Debido a las pérdidas de calor, la temperatura no puede alcanzar completamente los valores que daría una llama en condición adiabática. Por otro lado, la variación de entalpía con la recuperación de calor es presentada por medio de la línea continua. Es observable que, el precalentamiento de los reactivos incrementa la entalpía permitiendo obtener temperaturas mayores a la de llama adiabática en condiciones normales [4].

1.3.2. Pirólisis

La pirólisis, al igual que la combustión como tal, es un proceso termoquímico mediante el cual el material orgánico de los subproductos sólidos se descomponen por la acción de calor en una atmósfera deficiente de oxígeno y se transforma en una mezcla líquida de hidrocarburos, gases combustibles, residuos secos de carbón y agua.

A través de los parámetros del proceso de pirólisis como el tipo de material orgánico, la temperatura máxima, las condiciones de la atmósfera de reacción, la tasa de calentamiento y el tiempo de permanencia de los productos en el reactor, es posible influir en la distribución y caracterización de sus principales productos. Por medio de

la pirólisis es posible obtener diferentes fracciones: un sólido, fracción que oscila entre el 5-10 % para los gasificadores de lecho fluidizado y el 20-25 % a los gasificadores de lecho fijo. En ella se encuentran fracciones de materiales inertes contenidos en la biomasa en forma de ceniza y una fracción de algo contenido en carbono, llamado 'Char' o 'subcoque'; un líquido o condensado, fracción llamada también como 'alquitranes', la cual representa aproximadamente entre el 1 al 5 % en peso, constituida generalmente por sustancias orgánicas complejas, condensables a bajas temperaturas y una fracción gaseosa compuesta por alrededor del 70 al 90 % en peso del material alimentado, y consiste principalmente de hidrógeno, monóxido de carbono, dióxido de carbono, hidrocarburos ligeros y trazas de gases ácidos e inertes. [5,6].

Por otra parte, los sistemas pirolíticos se pueden agrupar en dos grupos: pirólisis convencional y pirólisis a altas temperaturas. La pirólisis convencional puede efectuarse a baja temperatura o a temperatura media. Los procesos a baja temperatura rondan los 550 °C y son utilizados en la producción de aceites y alquitranes. Los procesos a temperatura media se llevan a cabo entre los 550 °C y los 800 °C, con lo cual se obtiene la producción de metano e hidrocarburos superiores. La pirólisis a alta temperatura se efectúa a temperaturas superiores de los 800 °C con lo cual se genera como producto un gas con un bajo poder calorífico. Este tipo de pirólisis es denominada pirólisis súbita o fast debido a su tiempo corto de operación y sus altas temperaturas de proceso (800 °C– 1000 °C). La pirólisis fast permite obtener una pequeña parte de material sólido, cercana al 10 % y es capaz de convertir un 60 % en gas rico en hidrógeno y monóxido de carbono, lo cual, permite que la pirólisis de este tipo compita con los métodos de gasificación convencionales [5,6].

1.3.3. Gasificación

La gasificación, es un proceso termoquímico, exotérmico y autotérmico, en el cual una base carbonosa (sustrato orgánico) sólido/líquido es transformado en una fase gas/vapor y una fase sólida mediante una serie de reacciones químicas. La fase gaseosa generada, llamada gas de síntesis o Syngas, se puede utilizar para la generación de energía o biocombustible.

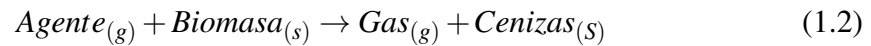
Esta transformación, representa una oxidación parcial del carbono presente en el material de alimentación, y generalmente, se lleva a cabo en presencia de un agente

gasificante, como aire, oxígeno, vapor u otro [7].

Para el caso de la biomasa, la materia prima es transformada mediante el proceso de gasificación para mejorar sus propiedades combustibles, permitiendo [8]:

- Aumentar el valor energético, retirando compuestos como el agua.
- Retirar azufre y nitrógeno, de manera de disminuir las emisiones de SO_x y NO_x a la atmósfera al momento de combustionar.
- Disminuir la emisión de material particulado al momento de combustionar.
- Aumentar la relación hidrógeno/carbono, lo que permite reducir las emisiones de CO_2 .

Finalmente, de manera muy general, la gasificación se puede resumir como:



Productos de la gasificación

Dentro de los productos de la gasificación, la fase gaseosa o gas de síntesis producido, es una mezcla compuesta generalmente de hidrógeno (H_2), metano (CH_4), monóxido de carbono (CO) y dióxido de carbono (CO_2) acompañado de otros hidrocarburos ligeros como, etano, propano e hidrocarburos más pesados como los alquitranes. Por otra parte, la fase sólida, generalmente carbón, es una mezcla entre una fracción de orgánico no convertido y ceniza, donde la cantidad de orgánico no convertido dependerá netamente del tipo de gasificador que se esté utilizando en el proceso.

En la Tabla 1.1 se presentan las composiciones habituales (en base seca) de los productos gaseosos producidos en la gasificación de la biomasa [9, 10].

Tabla 1.1: Composición productos de la gasificación [9, 10]

Compuesto	Syngas (%)
Monóxido de Carbono (CO)	40 – 50
Dióxido de Carbono (CO_2)	10 – 20
Hidrógeno (H_2)	25 – 80
Metano (CH_4)	4 – 8
Nitrógeno (N_2)	—

Etapas del proceso de gasificación

Las principales reacciones involucradas en el proceso de gasificación son endotérmicas y la energía requerida para que estas sean llevadas a cabo es, por lo general, otorgada por la oxidación parcial del material orgánico. La energía requerida para la gasificación, se puede suministrar tanto externamente mediante fuentes externas o internamente a través de una combustión parcial al interior del gasificador.

A pesar que, S.K. Sansaniwal [11], manifiesta que no es realista dividir el gasificador en diferentes zonas debido a la secuencia de múltiples y complejas reacciones termo-químicas, es posible ver la gasificación como una secuencia de varias etapas en conjunto, tales como: la oxidación, secado, pirólisis, reducción y una etapa de descomposición del alquitran.

■ Oxidación

La oxidación de parte del material carbonoso es necesaria para obtener la energía térmica requerida para los procesos endotérmicos y para mantener la temperatura de operación en el valor requerido. Esta es llevada a cabo en condiciones de falta de oxígeno con respecto a la relación estequiométrica para así oxidar solo una fracción del material orgánico utilizado [11, 12].

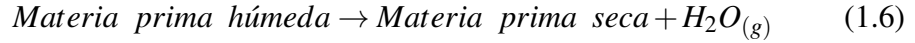


Esta etapa de oxidación parcial es crítica ya que en función de esta se decide el tipo y la calidad de los productos finales.

■ Secado

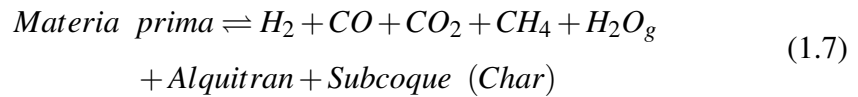
La etapa de secado consiste netamente en la evaporación de la humedad contenida en la materia prima. La cantidad de calor requerido para esta etapa es proporcional a la cantidad de humedad presente en la materia prima y generalmente es entregado por las otras etapas del proceso, considerando que el secado

está completo cuando se alcanza una temperatura de biomasa de 150 °C [13]. A modo general:



■ Pirólisis

En esta etapa se produce la descomposición termoquímica de los materiales carbonosos de la matriz tal como fue definida previamente en la sección anterior. Las reacciones de pirólisis ocurren a temperaturas cercanas a los 250 – 1000 °C, son endotérmicas, de la cual el calor requerido para ser llevadas a cabo proviene de la etapa de oxidación del proceso [11, 12].



■ Reducción

La etapa de reducción se produce después de la pirólisis y las reacciones correspondientes se llevan a cabo de forma paralela con la combustión, aunque el calor y los productos de la combustión, como el CO_2 y el H_2O son requeridos en esta etapa.

La reducción es la etapa mas compleja de todas, debido a que en ella se encuentran involucradas reacciones químicas entre hidrocarburos, H_2O , CO_2 , O_2 y H_2 , así como entre los gases desprendidos.

Por otra parte, la temperatura de reducción es un parámetro clave del proceso global, pues determina las características del residuo sólido y las del gas de síntesis.

Las reacciones ocurridas en la fase de reducción son:





Las reacciones (1.8) y (1.9) son endotérmica, mientras que las reacciones (1.10) y (1.11) son exotérmicas.

■ Descomposición del Alquitrán

Un paso adicional que se puede incluir en el proceso de gasificación, consiste en la descomposición de alquitrán. Con ella se puede tener en cuenta la formación de hidrocarburos ligeros debido a la descomposición de moléculas grandes de estas.



1.4. Combustión en medios porosos inertes

La combustión en un medio poroso presenta varias ventajas en comparación a la combustión convencional. Su principio de funcionamiento se basa en que la combustión propiamente tal tiene lugar dentro de una matriz sólida con cavidades lo suficientemente grandes para sostener la combustión. Dichas cavidades representan el medio poroso y es la característica que ofrece las ventajas en comparación a los quemadores convencionales.

Los quemadores de medios porosos generalmente trabajan con llamas constantes y premezcladas, donde en este caso, una mezcla de combustible y oxidante entran a la matriz porosa sólida donde se queman y forman los productos de la combustión. Se libera durante el proceso una alta cantidad de energía térmica, calentando por convección la matriz sólida porosa, la cual, posteriormente irradia y conduce calor precalentando así el combustible y el oxidante entrante. La recirculación interna de calor de las zonas de combustión y productos a la región de los reactivos, da lugar a una alta densidad energética, bajas emisiones contaminantes, altos índices de reducción y la capacidad de utilizar combustibles de bajo valor calorífico [14].

Las principales características de este tipo de medio se debe a la porosidad (ϵ), diámetro de poro y superficie interna específica. La porosidad se define como el cociente entre el volumen total ocupado por las cavidades y el volumen total ocupado tanto por la matriz sólida y las cavidades, mientras que la superficie interna se define

como el cociente entre la superficie interna total de la matriz sólida y el volumen total que ocupa [15].

1.4.1. Configuraciones

Las configuraciones comúnmente utilizadas para este tipo de combustión están asociadas a un enfoque estacionario y transiente. Cada una de ellas se definen a continuación:

- **Enfoque estacionario:** En este tipo de régimen de combustión, el frente de llama se estabiliza en una zona específica dentro del material poroso. Este tipo es ampliamente utilizado en quemadores de tipo radiante y calentadores de superficie debido a la alta emisividad de radiación por parte del sólido [16, 17]. La Figura 1.2, presenta la zona de estabilización de llama bajo un régimen estable.

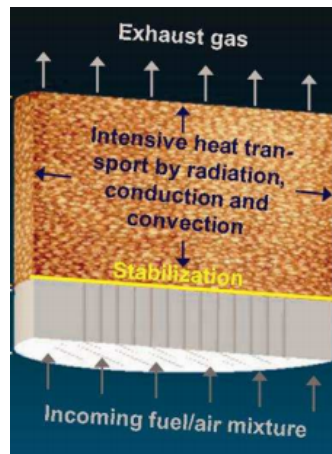


Figura 1.2: Estabilización de frente de llama bajo un enfoque estacionario [17]

La estabilidad de la llama al interior de la matriz porosa puede ser alcanzada bajo las siguientes técnicas de operación [17]:

1. Al enfriar zonas específicas de la matriz porosa donde la propagación de la llama no es deseable o,
2. Mediante la utilización del número de peclét (Pe), ya que determina la zona de estabilización del frente de llama entre dos zonas posibles: zona de extinción de la llama, cuando la porosidad posee un diámetro pequeño

($P_e < 65$) y la zona de combustión donde el diámetro de porosidad es grande ($P_e > 65$). Para la oxidación de metano y bajo un medio poroso inerte, $P_e = 65$ [18]. El número de Peclet se define como:

$$P_e = \frac{S_l \cdot d_m \cdot C_p \cdot \rho}{k} \quad (1.13)$$

donde,

- S_l : Velocidad laminar de llama.
 - d_m : Diámetro equivalente del poro en material poroso.
 - C_p : Calor específico de la mezcla de gases.
 - ρ : Densidad de la mezcla gaseosa.
 - k : Coeficiente de conductividad térmica de la mezcla.
- **Enfoque transiente:** en este tipo de régimen, el frente de combustión se propaga libremente a través del quemador creando una onda que viaja a través de este debido a la teoría del exceso de entalpía, donde una inestable zona de reacción es libre de propagarse como una zona de reacción que viaja a través de los flujos de energía. [17, 19]. La Figura 1.3 presenta un esquema de enfoque transiente en un quemador de medio poroso inerte.

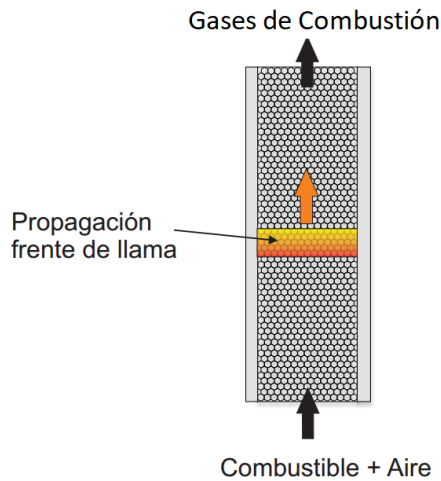


Figura 1.3: Esquema enfoque transiente en un MPI [17]

Bajo un régimen adiabático (sin pérdidas de calor), la energía liberada en la zona de combustión puede exceder la energía contenida de la mezcla, a su vez, una

mezcla muy rica puede ser parcialmente oxidada ya que solo una pequeña porción del combustible es usada para la energía [20,21].

Por otra parte, bajo un enfoque transiente se pueden identificar tres regímenes de propagación:

- Propagación aguas abajo.
- Propagación aguas arriba.
- Combustión estabilizada.

Si el contenido de combustible en la mezcla se encuentra entre los límites de inflamabilidad inferior y superior, la onda de combustión viajará aguas arriba (dirección contraria al flujo de combustible). Si el calor contenido en la mezcla, causado por radiación y conducción es exactamente igual al límite de inflamabilidad superior e inferior, la zona de reacción estará estabilizada en una determinada posición. Finalmente, la propagación aguas abajo desarrolla una onda de combustión en la misma dirección del flujo de combustible, causando que el calor producido en la zona de reacción caliente la matriz sólida, recuperando energía y precalentando los reactantes mediante el medio poroso aguas arriba que entren en la zona de reacción [19].

1.4.2. Propiedades

En la combustión en medios porosos es posible identificar tres zonas características al interior de un quemador, tal y como se presenta en la Figura 1.4. La primera zona corresponde a la que se encuentra anterior al frente de llama, donde los gases reactantes se mezclan y son precalentados por transferencia de calor entre el flujo de combustible-oxidante con la matriz porosa inerte.

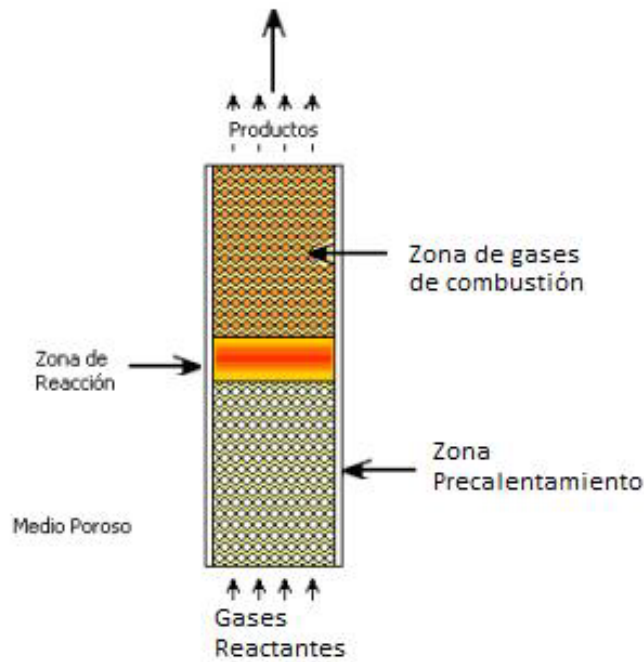


Figura 1.4: Zonas características en un quemador de MPI [9]

La segunda zona corresponde al lugar donde se produce la reacción química y se encuentra el frente de llama. En esta zona se libera una gran cantidad de entalpía, la cual es absorbida por el material poroso mediante convección. Este calor es transferido a través de radiación y conducción hacia la mezcla de gases que hacen ingreso al quemador, pre calentándose y produciéndose el fenómeno conocido de exceso de entalpía [22].

La tercera zona es donde los gases producto de la combustión, transfieren calor hacia el medio poroso inerte por convección, produciendo una recirculación de calor al interior del equipo. Debido a la eficiente recirculación de calor y el precalentamiento de la mezcla aire-combustible a la entrada, se alcanzan temperaturas súper adiabáticas.

1.4.3. Parámetros

Los parámetros que condicionan el proceso de combustión en medios porosos dentro de un quemador son la razón de equivalencia, velocidad de filtración, velocidad del frente de combustión, material del medio poroso inerte y el número de Peclet. Cada uno

de ellos es explicado a continuación salvo el número de Peclet, pues este fue definido anteriormente.

- Relación de equivalencia (ϕ): corresponde a la relación de aire estequiométrico (teórico) con respecto al aire que se utiliza realmente en el proceso de combustión, dicha relación queda presentada por:

$$\phi = \frac{1}{\lambda} = \frac{V_{a,e}}{V_{a,r}} \quad (1.14)$$

Cuando $\phi < 1$, se habla de mezcla pobre, es decir, existe un exceso de aire, o bien la mezcla tiene baja cantidades de combustible. Si $\phi > 1$, se habla de mezcla rica, es decir, existe un exceso de combustible, o bien, la mezcla contiene bajas cantidades de aire. La condición estequiométrica se da cuando $\phi = 1$, es decir, el aire real empleado es igual al aire teórico necesario.

- Velocidad de filtración (u_0): Corresponde a la velocidad a la cual la mezcla combustible-oxidante circula por los poros del material dentro de la matriz. Queda determinada por [19]:

$$u_0 = \frac{v}{\varepsilon} \quad (1.15)$$

Donde, v corresponde a la velocidad de la mezcla y ε a la porosidad del material.

- Velocidad del frente de combustión: Es la velocidad asociada a la propagación del frente de combustión a través de la matriz porosa.
- Material de la matriz porosa: El material asociado a la combustión en medios porosos inerte determina y condiciona en gran manera a la combustión debido a sus distintas propiedades físicas y químicas tales como conductividad térmica, emisividad, tamaño de poro, porosidad, temperatura de fusión, entre otras [17].

1.4.4. Combustión en medios porosos inerte versus combustión en llama libre

La combustión en MPI presenta diversas ventajas en comparación a la combustión convencional de llama libre tal y como se mencionó en la sección 1.3, todo esto gracias a la mejora en la eficiencia de la combustión y la reducción de emisiones de NO_x .

La convección es el mecanismo de transferencia de calor predominante en la combustión de llama libre debido a que la conductividad térmica de los gases es muy baja. Al incorporar un sólido en la zona de combustión, los cuales poseen una alta conductividad térmica, mejora notablemente la transferencia de calor mediante los mecanismos de radiación y conducción permitiendo alcanzar eficiencias mas altas por sobre la combustión convencional [23].

Algunas de las principales ventajas de la combustión en MPI son:

- Permite controlar la temperatura del frente de combustión provocando una disminución en la formación de NO_x y CO [17].
- Alta capacidad térmica gracias al fenómeno conocido como exceso de entalpía, permitiendo alcanzar una alta estabilidad térmica y combustionar mezclas en un rango extenso de ϕ .
- Permite alcanzar una alta densidad energética por sobre los $3 \text{ MW}/\text{m}^2$ [24].

1.5. Reactores de Flujo Recíproco

El concepto de flujo inverso o recíproco, se basa en el enfoque transitorio, donde la propagación de la zona de reacción es controlada a través de la composición de los reactivos premezclados en la entrada. Un reactor de flujo inverso consiste básicamente en un medio poroso inerte con dos salidas y dos entradas tal y como se muestra en la Figura 1.5. La operación de este tipo de reactores consiste en una alternancia cíclica de las entradas de los reactivos y las salidas de los productos, lo que permite el control de la posición de la zona de reacción bajo condiciones químicas establecidas por la dirección del flujo de los reactivos y sus composiciones.

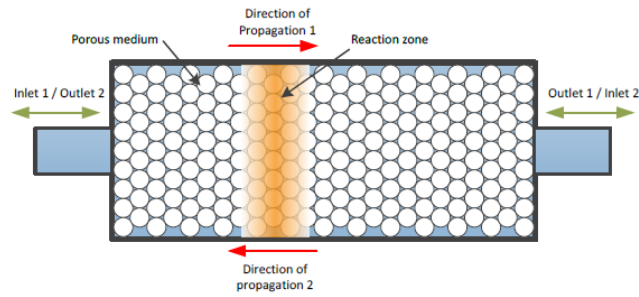


Figura 1.5: Esquema reactor de flujo recíproco [9]

Al momento de producir la alternancia cíclica, los reactivos frescos encuentran altas temperaturas en el medio sólido producto del semiciclo anterior en el lado de la entrada. Esta alta temperatura se genera por la transferencia de calor producida entre los gases de escape que abandona el equipo y el medio poroso inerte existente. Al invertir los flujos el calor acumulado es utilizado para precalentar la mezcla entrante, logrando temperaturas generalmente mas altas hacia la salida. Finalmente, cuando el periodo de tiempo del ciclo es ajustado, se logra una condición de estabilidad, produciendo un perfil de temperatura trapezoidal en lugar de un máximo en la zona de reacción. Un perfil de temperatura característico de este sistema es presentado en la Figura 1.6-C en conjunto a una descripción de la alternancia de flujo (Figura 1.6 A-B) [19, 25].

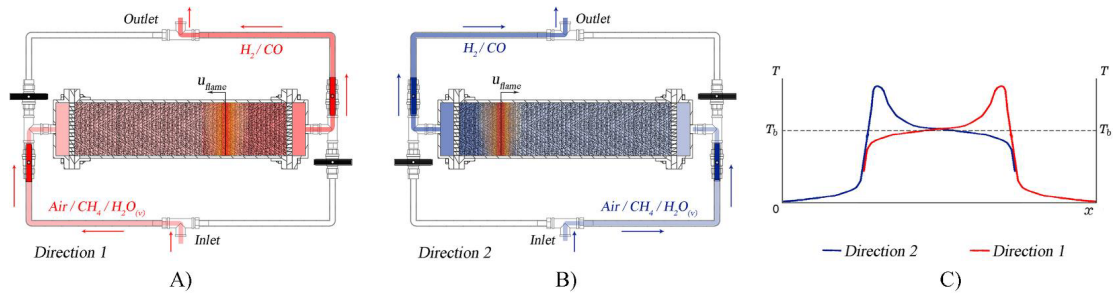


Figura 1.6: Alternancia cíclica y perfil térmico típico de un reactor de flujo recíproco de MPI [25]

1.5.1. Revisión bibliográfica de reactores de flujo recíproco

Este tipo de reactores a sido ampliamente estudiado a lo largo del tiempo, siendo introducido por ingenieros suecos en ADTEC Co. Ltd en 1990 [19]. A continuación, se resumen una serie de autores asociados a artículos revisados y estudiados basados en un desarrollo experimental y numérico de reactores de medios porosos inertes de flujo recíproco.

- Contarin F. [26] estudió el diseño de un reactor en medios porosos inertes de flujo recíproco utilizando una geometría cilíndrica. El modelo consideró las ecuaciones de transferencia de calor y materia unidimensionales en dirección axial utilizando un tiempo de semiciclo de 10 s. A los extremos del reactor, añadió dos intercambiadores de calor con la finalidad de limitar la combustión en la región central la cual aisló completamente. Para las pérdidas volumétricas de calor hacia el ambiente (β), fueron fijadas tal y como se presentan en la Figura 1.7,

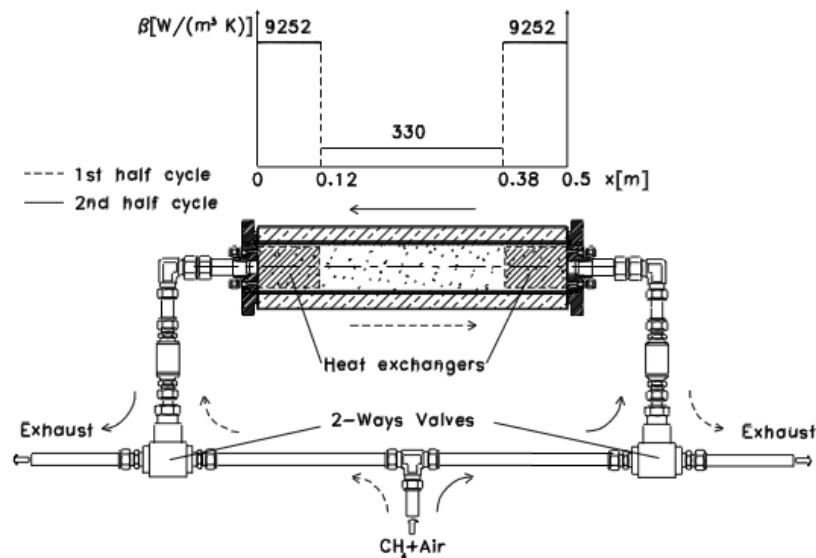


Figura 1.7: Esquema de reactor de flujo recíproco utilizado por Contarin F. [26]

Los perfiles de temperaturas obtenidos fueron del tipo trapezoidal, con un rango de temperatura cercanos a los 1300 K - 1600 K para una relación de equivalencia variable entre 0.15 a 0.7, con una velocidad de filtración de 0.15 m/s a 0.45 m/s.

- Henríquez L. [27] realizó un estudio analítico mediante una simulación computacional en ANSYS FLUENT de una mezcla pobre de combustión de etanol/aire

en un quemador de medio poroso inerte utilizando un modelo bidimensional para la filtración. Evaluaron un reactor de medio poroso estándar unidireccional y un quemador recíproco para determinar los límites de combustibilidad utilizando rangos de $\phi = [0.05-0.054]$ para esponjas de alúmina y $\phi = [0.044-0.048]$ para esferas de alúminas, utilizando velocidades de filtración entre $u_0 = [0.1-0.7]$ m/s, demostrando que una configuración recíproca proporciona una combustión permanente y estable incluso para tiempos de ciclos largos.

- Bubnovich V. [28] realizó una simulación computacional para un quemador de medio poroso de flujo recíproco de una mezcla de metano/aire para obtener la región de funcionamiento estable en función de la velocidad de filtración, razón de equivalencia y diámetro de las partículas de alúmina para dos configuraciones distintas, pérdida de calor volumétrica constante y pérdida de calor volumétrica en función de la temperatura. Se utilizó una relación de equivalencia $\phi = [0.1-1.0]$ y una velocidad de filtración de $u_0 = [0.25 - 1.0]$ m/s. Las pérdidas de calor volumétricas se evaluaron en tres zonas seccionadas en $\beta = [9252-330-9252]$ W/m³K para un β constante. Se concluyó que el aumento del diámetro de las partículas da como resultado un aumento en la región de estabilización para cada uno de los tipos de pérdida de energía.
- Liming Du [29] realizó un estudio numérico y analítico de la combustión superadiabática recíproca de una mezcla pobre de metano/aire basando su resolución mediante métodos de volúmenes finitos discutiendo la influencia de la velocidad de filtración, relación de equivalencia y tiempo de medio ciclo en el perfil de temperatura, la tasa de liberación de calor, el flujo radiativo y la eficiencia radiante asociada a la combustión. El efecto radiativo se analizó bajo una velocidad de filtración $u_0 = 0.2$ m/s y un $\phi = 0.6$, el efecto de la relación de equivalencia se analizó un rango de 0.075 a 0.20 bajo un $u_0 = 0.1$ m/s y el efecto de la velocidad de filtración bajo un $\phi = 0.15$ para un rango de $u_0 = [0.1-0.3]$ m/s demostrando que, para dichos parámetros estudiados el efecto de la radiación de calor juega un papel fundamental dentro de la cámara de combustión obteniendo una mejora notoria asociada a la estructura térmica en comparación a una combustión convencional en un medio poroso inerte.
- J.G Hoffmann [30] realizó un estudio experimental de un reactor de medio poroso inerte de flujo recíproco, centrándose en la influencia de los parámetros do-

minantes tales como la velocidad del flujo, tiempo de medio ciclo y relación de equivalencia en los perfiles térmicos del sólido poroso. Demostró que los límites de inflamabilidad crece a una relación de equivalencia (ϕ) igual a 0.026. Además estudió la influencia de los parámetros mencionados anteriormente en los niveles de emisión tanto de NO_x y CO. Obtuvo emisiones de NO_x extremadamente bajas de menos de un ppm para todas las condiciones estudiadas en el artículo.

Capítulo 2

Diseño de reactor de flujo recíproco

El equipo que se rediseño fue desarrollado durante el trabajo de titulación del alumno Pablo Requena [31]. Se consideró el cuerpo íntegro del reactor pero se le realizó una actualización de todos los sistemas de inyección y circulación de los gases para su funcionamiento ya que se tenía que aumentar la seguridad y confiabilidad de la operación del equipo.

2.1. Diseño del reactor

El diseño del reactor de flujo recíproco, consiste en una cañería de acero ASTM A-53 Schedule 40 de 73 *mm* de diámetro exterior en donde en su interior contiene 12 cilindros cortos de cerámicas de alúmina (Al_2O_3 90 %) templada en zirconio (ZrO_2 10 %). Estas cerámicas tienen una porosidad aproximada de 83,5 % y tamaños de poro de 0.25 *cm*. La superficie interna del tubo cubierta con una capa de 11.3 *mm* de aislante de fibra cerámica, además de 36 *mm* de espesor adicional de aislamiento para las altas temperaturas donde cubrirá la parte exterior del reactor, para evitar pérdidas de calor.

El reactor se compone de dos cámaras de premezcla para la inyección en los extremos del reactor, un sistema para la extracción de los gases de escape y 3 anillos para la inyección sin premezcla, cuenta con 7 varillas porta termocuplas instaladas de forma vertical y tiene incorporado una entrada para el encendido del reactor.

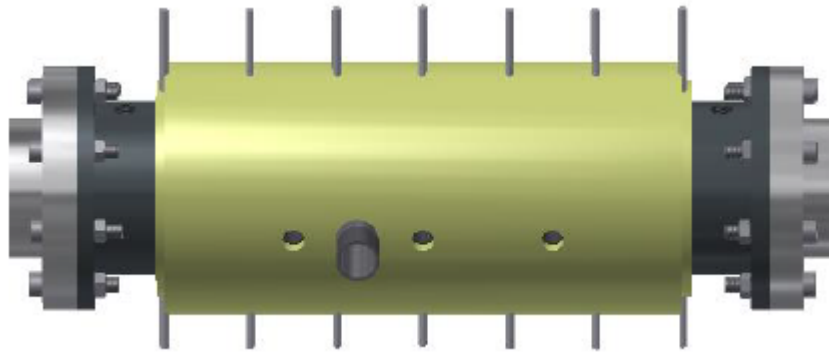


Figura 2.1: Modelo 3D del reactor de flujo recíproco [31]

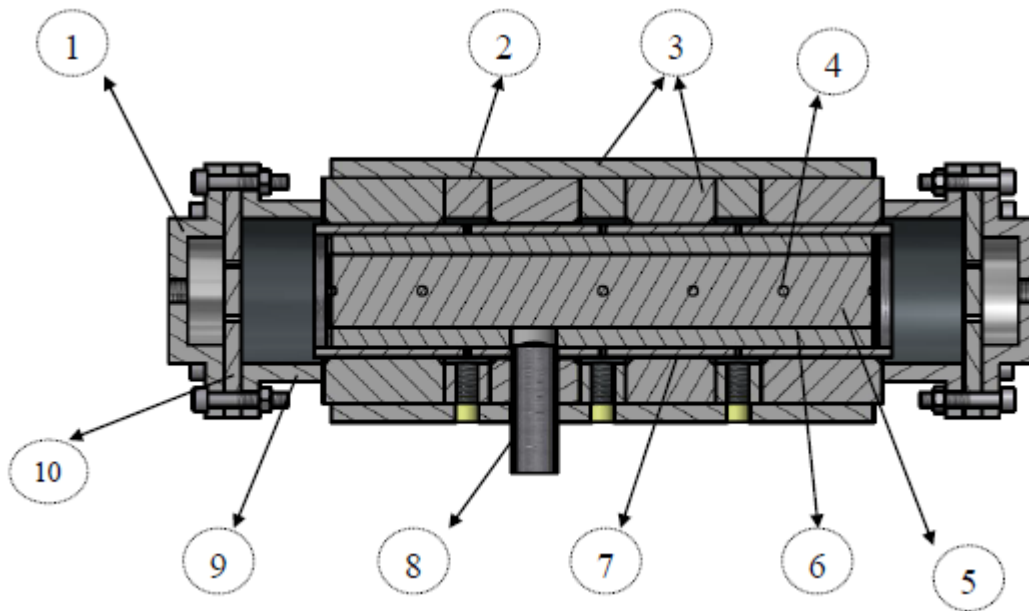


Figura 2.2: Plano en corte del reactor de flujo recíproco [31]

Lista de partes en plano de corte:

1. Cámara de premezcla (aluminio)
2. Anillo de inyección lateral del tubo (acero al carbono)
3. Aislante exterior de fibra cerámica 36 *mm* de espesor
4. Varilla porta termocuplas tipo S
5. Cerámica de alúmina templada en zirconio (medio poroso)

6. Aislante interior de fibra cerámica 11.3 *mm* de espesor
7. Cañería ASTM A-53 diámetro exterior 73 *mm*, espesor 5.16 *mm*
8. Tubo de 25.4 *mm* de diámetro (encendido del reactor)
9. Cámara de salida de gases de escape y entrada de gases reactantes (acero al carbono)
10. Placa de inyección lateral (aluminio)

2.1.1. Dimensiones

La cámara del reactor tiene un largo de 305 *mm* y un diámetro de 40 *mm*, lo cual lo hace un reactor de tamaño pequeño para lograr que el frente de combustión se demore menos en recorrerlo y obtener mayor cantidad de resultados en un menor tiempo.

Con respecto a las dimensiones generales del reactor son las siguientes:

- $\phi_e = 73 \text{ mm}$
- $\phi_i = 62.68 \text{ mm}$
- $L_t = 480 \text{ mm}$
- $L_{MP} = 305 \text{ mm}$
- $d_{varillas} = 50 \text{ mm}$

El material con el que está hecho el reactor es la cañería de acero ASTM A-53 Schedule 40 grado A y sus propiedades están en la Tabla 2.1:

Tabla 2.1: Propiedades del acero ASTM A-53 A

Calidad	Tensión mínima de Fluencia F_y	Tensión mínima de ruptura F_u	Densidad	Punto de Fusión
	<i>MPa</i>	<i>MPa</i>	<i>kg/m³</i>	<i>°C</i>
ASTM A53-Gr A	211	337	7.85	1,425-1,510

2.1.2. Material cerámico

El medio poroso que compone el interior del reactor está compuesto por 12 discos de esponjas cerámicas de alúmina, que se encuentran separada y las dimensiones de estos discos son los siguientes:

- Espesor: 25 *mm*
- Diámetro: 40 *mm*
- Porosidad: 83.5 %
- Tamaño de poro 2.5 *mm*

Las características técnicas se presentan en la Tabla 2.2:

Tabla 2.2: Características técnicas del medio poroso

Designación del producto	Alúmina estabilizada en Zirconio (ZTA)
Composición del producto	90 % alúmina - 10 % zirconio
Color	Blanco
Temperatura de uso típico	1,480 °C
Evaluación del ciclo térmico	6 (escala 1 -10)

2.1.3. Aislamiento

La aislación del reactor es fundamental para lograr las mínimas pérdidas de calor de este con el exterior por lo que se utiliza fibra de vidrio ya que es inerte. Este aislante se usa tanto en la zona interior como la exterior del reactor.

En el exterior del reactor se consideró un espesor de 36 mm para lograr las máximas temperaturas en el frente de combustión y disminuir las pérdidas.

Para el interior del reactor se tiene un mayor énfasis ya que se enfrentan a temperaturas mucho más elevadas en el acero. El punto de fusión del acero ASTM A-53 es de 1,425 – 1,510 °C, mientras que la temperatura del frente de llama que recorrerá el reactor está en un rango de 400 – 1,450 °C.

Se toma en consideración el estudio realizado en la memoria del alumno Hans González [32], en donde considera un supuesto de que el reactor opera con una temperatura de $1,300\text{ }^{\circ}\text{C}$ en su interior en donde al aplicar la Ley de Fourier se obtiene la figura 2.3, donde se muestra la variación del flujo de calor radial en función del espesor del aislante térmico interno.

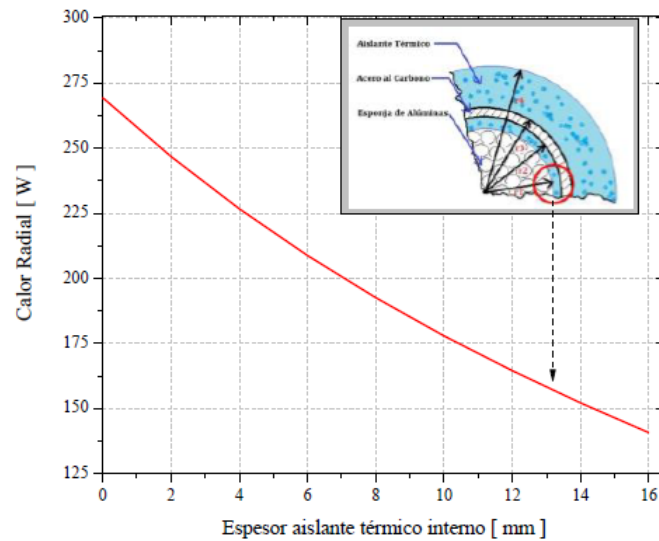


Figura 2.3: Flujo de calor radial en función del aislante térmico interno del reactor en milímetros [32]

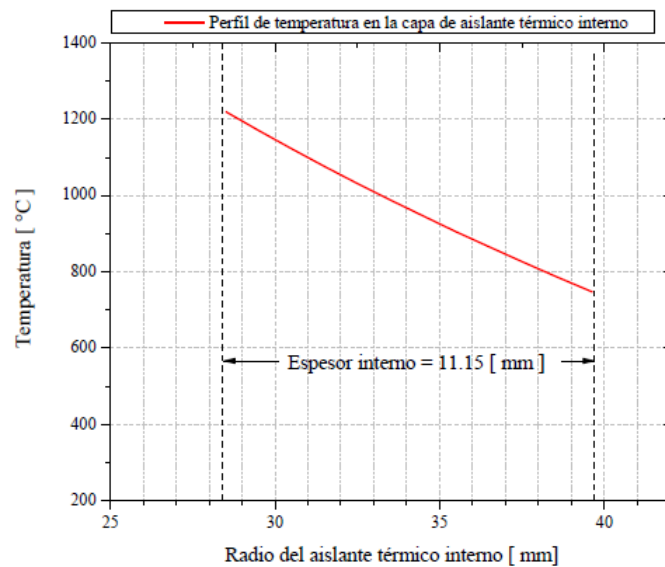


Figura 2.4: Perfil térmico con un espesor de 11.15 mm de aislante térmico [32]

Se concluye que con un espesor de 11.15 mm es el que corresponde para tener un flujo radial de 171 W , que implica que la temperatura máxima que está sometido el acero es de $804.06\text{ }^{\circ}\text{C}$. Para este equipo se utiliza un espesor de 11.3 mm en el interior y 36 mm en el exterior.

2.1.4. Combustibles

Para generar la combustión filtrada dentro del medio poroso se requiere de un gas que va actuar de combustible en la reacción química y este va a ser gas natural que se obtiene por la red de la Universidad el cual tiene una composición volumétrica de metano correspondiente al 96.6% , sin embargo para este trabajo se considera que la composición de este es del 100% dado que en los cálculos la diferencia se hace despreciable.

Otro de los gases necesarios para hacer funcionar el reactor es el aire como oxidante que en este caso será suministrado por un compresor que tiene una capacidad de 50 litros y una presión máxima de 10 bar , el cual contiene en la línea de aire un sistema de filtro que disminuye la humedad del aire.

Ahora en el caso del vapor de agua este será suministrado por una caldera que está compuesta por dos resistencias térmicas de $1,5\text{ kW}$ conectadas en paralelo. Para la regulación del flujo de vapor se le han conectado un variador de voltaje el cual se encarga de regular la potencia transmitida y así la tasa de generación de vapor que se suministra al reactor.

2.2. Parámetros operacionales

2.2.1. Velocidad de filtración

La velocidad de filtración como fue definida en el capítulo anterior es la ecuación 1.15 en donde la velocidad de la mezcla es en m/s y la porosidad es una unidad adimensional.

Con esta velocidad de la mezcla se determina el caudal a suministrar al reactor, el cual se calcula como:

$$Q = v \cdot A \quad (2.1)$$

$$v = \frac{Q}{A} = \frac{4 \cdot Q [l/min]}{\pi \cdot d_{util}^2 [m^2]} \cdot \frac{1}{60} \left[\frac{min}{s} \right] \cdot \frac{1}{1,000} \left[\frac{m^3}{l} \right] \quad (2.2)$$

De esto se logra determinar la velocidad de filtración con la siguiente ecuación:

$$u = \frac{Q [l/min]}{15,000 \cdot \varepsilon \cdot \pi \cdot d_{util}^2 [m^2]} \quad (2.3)$$

Se tiene como dato conocido que el diámetro es de 0.04 [m] lo que hace un área de 0.00502655 [m²] y considerando que la matriz porosa tiene una porosidad de 83.5 % se hace una iteración entre los valores de la velocidad de filtración y el caudal (ver Tabla 2.3).

Tabla 2.3: Caudal de la pre mezcla a inyectar en el reactor en función de la velocidad de filtración

Velocidad de Filtración [m/s]	Caudal [l/min]
0.10	6.30
0.12	7.55
0.14	8.81
0.16	10.07
0.18	11.33
0.20	12.59
0.22	13.85
0.24	15.11
0.26	16.37
0.28	17.63
0.30	18.89
0.32	20.15
0.34	21.41
0.36	22.66
0.38	23.92
0.40	25.18

El caudal de la pre mezcla metano más aire a suministrar al reactor de medio poroso es de 23.92 l/min con una velocidad de filtración de 0.38 m/s, esto se debe a que los medidores de flujo tienen un límite de caudal.

2.2.2. Flujos de metano y aire

La ecuación de combustión para mezclas pobres ($\phi < 1$) queda expresada de la siguiente forma:



Para la combustión de 1 *kmol* de metano se tiene las cantidades másicas de carbono y de hidrógeno.

$$m_C = 1 \text{ kmol} \cdot 12.01 \text{ kg/kmol} = 12.01 \text{ kg} \quad (2.5)$$

$$m_H = (1 \text{ kmol} \cdot 4) \cdot 1.008 \text{ kg/kmol} = 4.032 \text{ kg} \quad (2.6)$$

$$m_T = m_C + m_H = 16.042 \text{ kg} \quad (2.7)$$

Con el valor total de las masas se determina la composición elemental quedando de la siguiente manera:

$$X_C = \frac{m_C}{m_T} = 0.749 \quad (2.8)$$

$$X_H = 1 - X_C = 0.251 \quad (2.9)$$

Utilizando la composición elemental es posible calcular el aire estequiométrico para poder quemar 1 *kg* de metano. Como se utiliza aire atmosférico, es decir, sin enriquecimiento de oxígeno, este se compone en volumen de un 21 % de O_2 y un 79 % de N_2 .

El cálculo de aire estequiométrico se calcula con la fórmula que prosigue:

$$V_{a,e}^\circ = \frac{22.4}{0.21} \cdot \left(\frac{X_C}{12.01} + \frac{X_H}{4.032} + \frac{X_S}{32.06} - \frac{X_O}{32} \right) \left[\frac{m_N^3}{\text{kg combustible}} \right] \quad (2.10)$$

La constante 22.4 corresponde al volumen que utiliza 1 *kmol* de aire en condiciones normales.

Con la ecuación 2.10 se obtiene que a condiciones normales, hay un volumen de

aire estequiométrico de:

$$V_{a,e}^{\circ} = 12.592 \left[\frac{m_N^3}{kg \text{ combustible}} \right] \quad (2.11)$$

Con la relación de volumen de aire estequiométrico calculada anteriormente es posible determinar los flujos necesarios a emplear para obtener la velocidad de filtración deseada de 0.38 m/s anteriormente mencionada. Para poder determinar estos flujos es conocido el caudal total compuesto por el oxidante y el combustible que se inyectarán al reactor y esto se expresa de la siguiente manera:

$$\dot{V}_{total} = \dot{V}_{combustible} + \dot{V}_{oxidante} \quad (2.12)$$

En donde el volumen de oxidante puede quedar expresado en función del volumen de combustible inyectando al reactor. Esto se logra utilizando la ecuación 1.14 nuevamente y las siguientes relaciones:

$$\rho_{combustible} = \frac{P}{R_{CH_4} \cdot T} \left[\frac{kg}{m^3} \right] \quad (2.13)$$

donde P es la presión normalizada igual a 101.325 kPa , T es la temperatura normalizada igual a 273.15 K y R_{CH_4} es la constante gas metano igual a $0.5182 \text{ kJ/kg} \cdot \text{K}$.

$$\dot{V}_{oxidante} = \frac{\dot{m}_{combustible} \cdot V_{a,e}^{\circ}}{\phi} \quad (2.14)$$

Al utilizar la densidad del combustible (ecuación 2.13) en la ecuación anterior.

$$\dot{V}_{oxidante} = \frac{\dot{V}_{combustible} \cdot \rho_{combustible} \cdot V_{a,e}^{\circ}}{\phi} \quad (2.15)$$

Finalmente utilizando las relaciones anteriores se obtienen los flujos tanto de combustible como de oxidante para la operación del reactor a distintos valores de ϕ . Los resultados se muestran en la Tabla 2.4.

Tabla 2.4: Parámetros de operación del reactor

Caudal [l/min]	ϕ	Aire [l/min]	Metano [l/min]
23.92	0.1	23.64	0.28
	0.2	23.36	0.56
	0.3	23.10	0.82
	0.4	22.83	1.09
	0.5	22.58	1.34
	0.6	22.33	1.59
	0.7	22.08	1.84
	0.8	21.84	2.08
	0.9	21.60	2.32
	1.0	21.38	2.54

Como fue mencionado en el punto 2.2.1. en que por límites del caudal combinado de los medidores de flujo se seleccionó un caudal de 23.92 l/min. Pero también hay que tener en cuenta que en particular el medidor de flujo para el aire tiene un máximo de 20.00 l/min, por lo que se tiene que volver a determinar el caudal máximo para que esté dentro de ese parámetro y de ahí volver a calcular los parámetros de operación del reactor. El nuevo caudal máximo que se selecciona es de 20.15 l/min y por lo tanto una velocidad de filtración de 0.32 m/s quedando la nueva Tabla 2.5 de parámetros operacionales.

Tabla 2.5: Nuevos parámetros operacionales del reactor

Caudal [l/min]	ϕ	Aire [l/min]	Metano [l/min]
20.15	0.1	19.91	0.24
	0.2	19.68	0.47
	0.3	19.46	0.69
	0.4	19.23	0.92
	0.5	19.02	1.13
	0.6	18.81	1.34
	0.7	18.60	1.55
	0.8	18.40	1.75
	0.9	18.20	1.95
	1.0	18.01	2.14

2.2.3. Flujos de vapor de agua

Ya el reactor tiene conectado una caldera que genera vapor que se va a inyectar, hace necesario calcular el flujo. Se procederá a inyectar un flujo de vapor equivalente al flujo de combustible inyectado, dado lo anterior, para una relación de 1:1. Esto implica que el nuevo caudal que circulará por el interior del reactor será igual a 20.39 l/min , por lo que la velocidad de filtración quedaría en 0.32 m/s .

Se estimó que la relación de equivalencia igual a 0.1 dado que da la posibilidad de ocupar todo el espectro dentro de las mezclas pobre y estar dentro de los límites de equipos de medición. Se estiman flujos de tal forma que se mantenga la velocidad de filtración de 0.32 m/s , esto se logra de forma similar a la ecuación 2.12 quedando de la siguiente manera:

$$\dot{V}_{total} = \dot{V}_{combustible} + \dot{V}_{oxidante} + \dot{V}_{vapor} \quad (2.16)$$

Dado que se conoce el flujo de combustible este será equivalente al flujo de vapor, por lo que la ecuación queda expresada de la siguiente manera:

$$\dot{V}_{combustible} = \dot{V}_{vapor} \quad (2.17)$$

Utilizando las últimas dos ecuaciones y junto a la ecuación 2.15 queda:

$$\dot{V}_{total} = \dot{V}_{combustible} \cdot \left(2 + \frac{\rho_{combustible} \cdot V_{a,e}^{\circ}}{\phi} \right) \quad (2.18)$$

Con esta ecuación y las consideraciones anteriores los resultados de estos nuevos parámetros de operación se ven en la Tabla 2.6

Tabla 2.6: Flujos de operación para distintos ϕ con inyección de vapor/combustible

Caudal [l/min]	ϕ	Aire [l/min]	Metano [l/min]	Vapor [l/min]	u [m/s]
20.39	0.1	19.91	0.24	0.24	0.32
	0.2	19.46	0.46	0.46	
	0.3	19.03	0.68	0.68	
	0.4	18.61	0.89	0.89	
	0.5	18.22	1.08	1.08	
	0.6	17.84	1.27	1.27	
	0.7	17.47	1.46	1.46	
	0.8	17.12	1.63	1.63	
	0.9	16.79	1.80	1.80	
	1.0	16.47	1.96	1.96	

2.3. Disposición general de la instalación

La instalación del equipo en su totalidad se compone principalmente de cuatro sistemas principales, de los cuales ya el primero fue detallado en puntos anteriores y los demás serán profundizados en las partes siguientes. Estos sistemas son los siguientes:

- Reactor de medios porosos
- Sistema de suministro y control de flujos
- Sistema de adquisición de datos
- Sistema de extracción de gases de escape

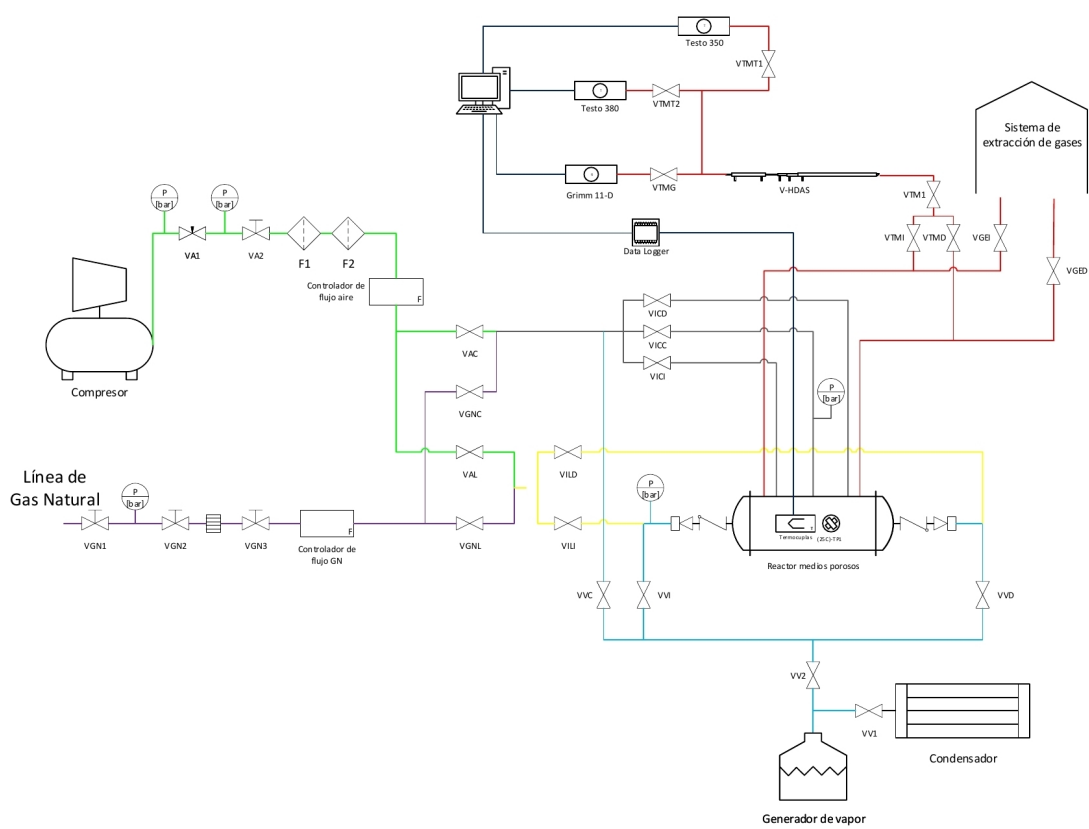


Figura 2.5: Layout de instalación del reactor de medio poroso de flujo recíproco

Como consecuencia de la pandemia que afectó al país durante el desarrollo del trabajo experimental este se vio detenido logrando una instalación como se logra ver en la Figura 2.6 y a consecuencia de esto se pasó a hacer simulaciones computacionales del equipo para poder continuar con el trabajo planteado en este trabajo de título.

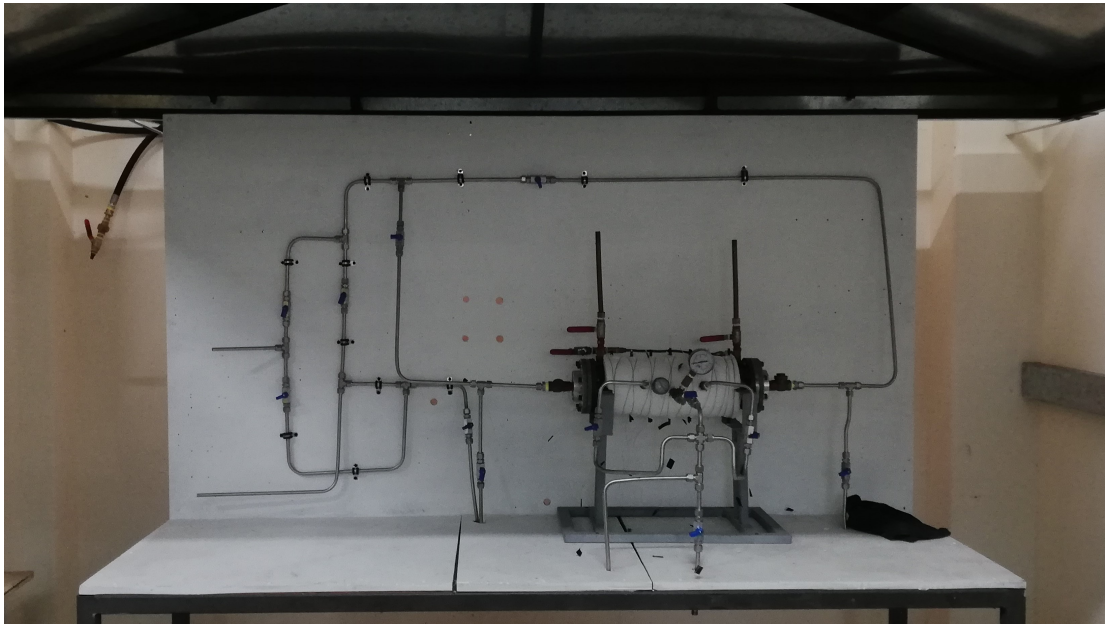


Figura 2.6: Reactor de MPI instalado bajo campana

2.4. Sistemas de medición y control

2.4.1. Suministro de flujos del reactor

Experimentalmente hay que inyectar al reactor aire como oxidante y gas natural, considerando este último que está compuesto de un alto porcentaje de metano en su composición volumétrica.

Suministro de aire

El aire es suministrado constantemente gracias a un compresor de pistón que se encuentra en el Laboratorio. El compresor entrega un caudal máximo de 260 l/min . Junto con lo anterior el sistema de aire cuenta con su sistema de filtros para garantizar la máxima eliminación de la humedad suministrada.

Suministro de gas natural

El gas natural es suministrado por una red interna que posee la Universidad la que tiene una válvula de acople en el laboratorio, este gas es suministrado por la empresa de la zona y que su composición volumétrica fue mencionado anteriormente.

Suministro de vapor

Este sistema consiste en una caldera elaborada a partir de un cilindro de 5 kilogramos de gas licuado el que fue cortado en la zona superior y reemplazado por un flange de acero. Este cilindro se encuentra aislado térmicamente a través de un recubrimiento de polietileno expandible, fibra cerámica de vidrio y plumavit con el objetivo de minimizar las pérdidas de calor al ambiente. En el flange se han situado dos resistencias térmicas de 1.5 kW conectadas en paralelo entre sí a fin de maximizar la potencia que transmiten al fluido a calentar estas resistencias se han conectado a variador de voltaje el cual es el encargado de regular la potencia transmitida a estas, y de esta forma regular eléctricamente la tasa de generación de vapor que es suministrado al reactor de medios porosos. Debido a lo anterior es que experimentalmente se efectuó una curva característica de la caldera en donde por cierto voltaje entregado por el variador es que se genera un flujo de vapor en litros por minuto para una presión dada de operación del generador.

Se presenta la curva característica de la caldera.

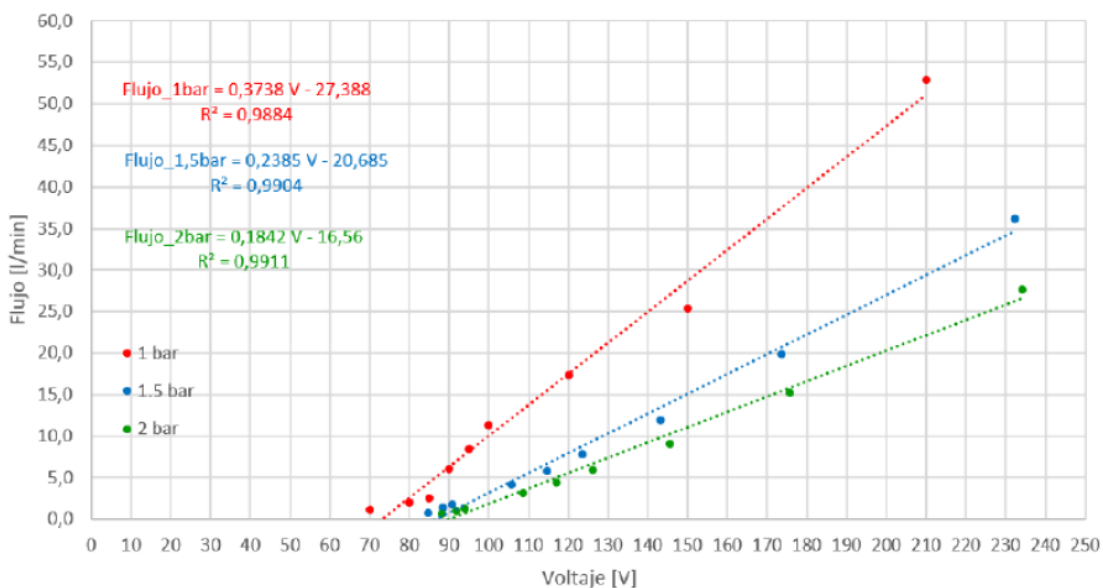


Figura 2.7: Flujo de vapor v/s voltaje aplicado [33]

Utilizando las ecuaciones de las curvas características extraídas de la figura 2.7 se obtiene los voltajes que se debiesen aplicar para lograr los flujos de vapor, estos se presentan en la Tabla 2.7:

Tabla 2.7: Voltaje estimado para operación del reactor

Flujo [l/min]	Voltaje estimado @ 1 bar [V]	Voltaje estimado @ 1.5 bar [V]	Voltaje estimado @ 2 bar [V]
0.24	73.9	87.7	91.2
0.46	74.5	88.7	92.4
0.68	75.1	89.6	93.6
0.89	75.6	90.4	94.7
1.08	76.2	91.3	95.8
1.27	76.7	92.1	96.8
1.46	77.2	92.8	97.8
1.63	77.6	93.6	98.8
1.80	78.1	94.3	99.7
1.96	78.5	94.9	100.5

Esta tabla tiene el rango de relación estequiométrica desde 0.1 – 1.0 pero dado cuenta de que el rango de flujo de vapor es 1.2 – 52.9 l/min se da a notar que los primero 5 valores no son posibles de suministrar por esta caldera por lo que se decide hacer una nueva tabla para los flujos de vapor partiendo desde un $\phi = 0.6$ (ver Tabla 2.8).

Tabla 2.8: Flujos de operación a distintos ϕ con inyección vapor/combustible considerando límites de la caldera

Caudal [l/min]	ϕ	Aire [l/min]	Metano [l/min]	Vapor [l/min]	u [m/s]
21.49	0.6	19.91	1.34	1.34	0.34
	0.7	18.42	1.54	1.54	
	0.8	18.05	1.72	1.72	
	0.9	17.70	1.90	1.90	
	1.0	17.36	2.07	2.07	

Ahora se considera el flujo de vapor 1.34 l/min y con el $\phi = 0.6$ se vuelve a calcular los voltajes estimados, quedando la Tabla 2.9.

Tabla 2.9: Voltaje estimado para operación dentro de límites de la caldera

Flujo [l/min]	Voltaje estimado @ 1 bar [V]	Voltaje estimado @ 1.5 bar [V]	Voltaje estimado @ 2 bar [V]
1.34	76.9	92.4	97.2
1.54	77.4	93.2	98.2
1.72	77.9	93.9	99.2
1.90	78.3	94.7	100.2
2.07	78.8	95.4	101.1

2.4.2. Control de flujos

El sistema de control es el encargado de regular los flujos de oxidante y combustible requeridos para el ensayo. En el laboratorio se dispone de dos controladores marca Aalborg los que entregan el caudal en l/min que fluyen por la línea de suministro.

El método de operación es de modo interno ya que registra el flujo másico del gas, el cual una pequeña parte es desviado a un tubo sensor de acero inoxidable capilar y el resto del gas pasa a un conducto de flujo primario.

La forma en que están diseñados el conducto primario y el del sensor es para asegurar un flujo laminar que mediante los principios de la mecánica de fluidos, los flujos de gas se relacionan entre sí para que su relación sea directamente proporcionales y así asegurar un flujo consistente al del sensor.

La forma en que se controla el flujo de gas es por medio de un tornillo sin fin que se opera de forma manual y se encuentra a un costado del controlador de flujo de manera que al hacerlo girar se permite obtener el flujo deseado. En la Tabla 2.10 se detallan los rangos de operación de estos controladores.

Tabla 2.10: Características controladores de flujo

Marca	Gas	Rango [l/min]	Resolución [l/min]	Presión max. [psi] ([kPa])
Aalborg	Aire	0 - 20	0.1	1,000 (6,800)
Aalborg	Metano	0 - 5	0.01	1,000 (6,800)

2.4.3. Sistema de extracción de gases de escape

Este es el sistema encargado de hacer el análisis de los gases de escape que produce el reactor durante su funcionamiento y así hacer un análisis del material particulado, la composición de los gases y sus propiedades.

Estos equipos están conectados a las líneas de gases directamente para hacer la toma de muestra en línea por lo que para poder hacer esto se tiene que tener en consideración la temperatura de los gases que se producen ya que los analizadores son muy sensibles a este parámetros que incluso podría hacer que estos quedaran inservibles. Por este motivo es que antes de estos se instala un dilutor de gases.

Venacontra High-temperature Diluting Aerosol Sampler (V-HDAS)

Este equipo es diseñado para la toma de muestra de gases producidos en la combustión a alta temperatura y su funcionamiento permite que mediante la incorporación de un fluido al sistema, a contra flujo, se logre que el gas que ha sido tomado de muestra pueda disminuir su temperatura y a la vez este se vaya diluyendo en dos etapas para un flujo de masa de alta calidad controlado y así tener una muestra lista para ser analizada.

La temperatura que soporta es hasta los $1,000^{\circ}\text{C}$ y se puede conectar directamente a la cámara de combustión sin afectar su funcionamiento, esto sumado a que tiene un acople con varias salidas para poder conectar varios equipos de medición a la vez sin mayores problemas.



Figura 2.8: Venacontra High-temperature Diluting Aerosol Sampler (V-HDAS) con acople de múltiples salidas

Pasando a lo que son los equipos de toma de muestra, estos son tres. Los que serán detallados a continuación.

Testo 350

Este es un analizador de gases que permite tomar distintos parámetros según los sensores que se acoplen al equipo siendo estos sensores de CO , NO , NO_2 , SO_2 , H_2S , $CxHy$ o CO_2 (ver Figura 2.9). Para poder hacer la muestra se le tiene que agregar una sonda que es la que toma la muestra gaseosa para que pueda ser analizada. Esta sonda tiene un filtro de partículas para proteger el analizador de posible suciedad y la posibilidad de agregar un termopar en caso de ser necesario.



Figura 2.9: Analizador de gases de combustión industrial Testo 350

Testo 380

El Testo 380 es un analizador de partículas in situ con un rango de medición de $0 - 300 \text{ mg}/\text{m}^3$ junto a que también, en caso de ser requerido, se pudiese hacer una medición paralela de O_2 y CO en tiempo real (ver Figura 2.10).

Cabe mencionar que este equipo también funciona con una sonda que es por donde se realiza la toma de muestra y tiene un sensor de temperatura en el punto de medición.



Figura 2.10: Analizador de partículas finas Testo 380

Grimm 11-D

Este equipo es un espectrómetro portátil de aerosol que sirve para monitorizar el polvo inhalable, valores de PM y concentración de número de partículas. Dentro de los parámetros medidos están el TSP , PM_{10} , PM_4 , PM_{25} , PM_1 y PM_{grueso} (ver Figura 2.11). Junto a la concentración en número y distribución de tamaño.

Los rangos de medición de masa de polvo que tiene es de $0 - 100,000 \mu g/m^3$ y para el tamaño de partículas es de $0.253 - 35.15 \mu m$. Hay que tener en cuenta que este equipo tiene un límite con el número de partículas que puede analizar siendo este de $0 - 3,000,000 p/L$ y es por esto que es necesario la instalación previa del V-HDAS que hace la función de diluidor asegurando su correcto funcionamiento.



Figura 2.11: Espectrómetro portátil de aerosol Grimm 11-D

2.4.4. Sistema de adquisición de datos de temperatura

El sistema de adquisición de datos de temperatura dentro del reactor se realiza mediante un conjunto de 7 termocuplas tipo S de 0.8 *mm* de diámetro, las cuales se instalan de forma vertical al reactor, a través de varillas termocuplas de cerámica, se posicionan cada una a una distancia de 50 *mm*.

El funcionamiento de las termocuplas consiste en un filamento de platino otro de platino-rodio, que se entrelazan entre sí y que al cambiar de temperatura emiten un diferencial de voltaje, este diferencial es captado por un adquisidor de datos el cual recibe la señal análoga y entrega una señal digital a un software quien es el encargado de entregar la temperatura. En el laboratorio se dispone del adquisidor de datos el cual es de la marca OMEGA modelo OMB-DAQ-56 y el software DAQ Central que transforma la señal análoga recibida por el adquisidor en una digital disponible para su análisis.

2.5. Procedimiento experimental propuesto

En el procedimiento experimental se detalla la operación del reactor de flujo recíproco para los distintos usos que se le asignan, desde el encendido, apagado, cambio de inyección entre otras configuraciones.

Hay que tener en cuenta que para la operación siempre se deben tener en cuenta la seguridad personal para el evitar posibles accidentes, esto es estar equipado con los Equipos de Protección Personal considerando los riesgos que implica operar un reactor de flujo recíproco.

Para el encendido del reactor se debe utilizar el detector de hidrocarburos para detectar posibles fugas en la operación. Se deben regular los caudales de aire y gas natural, para una configuración de relación de equivalencia igual a 1, también se debe regular la presión de la línea de aire a 1 *bar*, esta línea se regula con el manómetro que está ubicado en los filtros de aire. La presión de la línea de gas natural viene de manera normal regulada a 1 *bar*. Las válvulas que deben estar abiertas para el encendido del reactor son las de la línea de gas de escape VGED, la línea de gas natural VGN1, VGN2 y de la línea de aire las VA1 y VA2, todas estas se ven detalladas en la tabla 2.11.

Tabla 2.11: Listado de válvulas en diagrama instalación

	Descripción
Línea de Inyección Lateral	VILI: válvula de bola 1/2" inyección lateral izquierda VILD: válvula de bola de 1/2" inyección lateral derecha VICC: Válvula de bola 1/4" inyección central central VICD: Válvula de bola 1/4" inyección central izquierda
Línea de Gas Natural	VGN1: Válvula de bola gas natural 1 VGN2: Válvula de bola gas natural 2 VGN3: Válvula de bola gas natural 3 VGNL: Válvula de bola 3/8" gas natural lateral VGNC: Válvula de bola 3/8" gas natural central
Línea de Vapor	VV1: Válvula de bola vapor 1 VV2: Válvula de bola vapor 2 VVI: Válvula de bola 1/2" vapor izquierdo VVD: Válvula de bola 1/2" vapor derecho VVC: Válvula de bola 1/2" vapor central
Línea de Aire	VA1: Válvula de aguja aire 1 VA2: Válvula de bola aire 2 VAL: Válvula de bola 3/8" aire lateral VAC: Válvula de bola 3/8" aire central
Línea de Toma de Muestra	VTMI: Válvula de bola 1/4" toma de muestra izquierda VTMD: Válvula de bola 1/4" toma de muestra derecha VTM1: Válvula de bola 1/4" toma de muestra 1 VTMG: Válvula de bola 1/4" toma de muestra grimm VTMT1: Válvula de bola 1/4" toma de muestra testo 1 VTMT2: Válvula de bola 1/4" toma de muestra testo 2
Línea de Gases de Escape	VGEI: Válvula de bola 1/4" gases escape izquierda VGED: Válvula de bola 1/4" gases escape derecha

2.5.1. Encendido del reactor

- Se abre el programa DAQ Central del computador e inicio a grabar.
- Se realiza un precalentamiento de la matriz porosa mediante un soplete de gas licuado, que se introduce por la tapa entre los anillos.
- Una vez alcanzada la temperatura de 800 °C en Te, se abre las válvulas VGN3, VGNL, VILI dando paso al gas natural dentro del reactor (caudal regulado a relación de equivalencia igual a 1).

- Al alcanzar en T4 la temperatura de 700 °C, se abre el paso de flujo de aire al interior del reactor.
- Se da paso a sacar el soplete del reactor, y a introducir el tapón para garantizar el sellado.

2.5.2. Operación con inyección lateral de aire y combustible en premezcla

Para esta operación se ocupa el reactor solo con inyección lateral de aire y gas natural, donde se emplea cambios de inyección lateral cuando el frente de combustión esté cercano al otro extremo del reactor.

- Se regula el caudal de aire y combustible en *l/min* de acuerdo a la relación de equivalencia.
- Cuando el frente de combustión va desde A-B dentro del reactor, están abiertas las válvulas: VGED, VGN1, VGN2, VGN3, VGNL, VA1 VA2, VAL, VILI.
- Al alcanzar en T5 la temperatura máxima se emplea el cambio de inyección lateral con sentido B-A cerrando las válvulas VILI, VGED y abriendo simultáneamente las válvulas VILD, VGEI.
- Al alcanzar en T2 la temperatura máxima, se emplea el cambio de inyección lateral con sentido A-B nuevamente, cerrando las válvulas VILD, VGEI y simultáneamente las válvulas VILI y VGED.

2.5.3. Operación con inyección central de combustible sin premezcla

En esta operación para la inyección central de combustible, se inicia desde B-A cuando el frente de combustión está en el centro del reactor. Anteriormente se debe utilizar la configuración con premezcla.

* ICC: Se utiliza el anillo central para inyectar combustible.

* ICI: Se utiliza el anillo izquierdo para inyectar combustible.

Operación sin vapor

- Al alcanzar en T4 la temperatura de $1,200\text{ }^{\circ}\text{C}$ se cierra la válvula VGNL y se abre las válvulas VGNC y VICC, dando paso a la inyección de combustible por el centro del reactor.
- Cuando T3 comienza a bajar, se cierra la VICC y se abre la VICI, donde el frente de combustión se encuentra en la zona de la ICI.
- Cuando T2 comienza a bajar, se da paso a hacer el cambio de inyección lateral de aire, donde se cierran las válvulas VGEI, VILD y simultáneamente se abren las válvulas VILI y VGED.
- Al alcanzar T4 su temperatura máxima se da paso al cambio de ICI a ICC donde se cierra la VICI y se abre la VICC.
- Cuando T5 empieza a bajar se cambia la inyección central por inyección lateral (con premezcla), donde se cierran las válvulas VICC, VGNC y se abre la válvula VGNL.

Operación con vapor

La operación con vapor se hace más complicada ya que los flujos de vapor entregados por la caldera son inestables, lo que aumenta la posibilidad de apagado del reactor, además en los cambios de inyección lateral de vapor, existe una demora significativa desde que se da paso al vapor, hasta que realmente está entrando vapor al reactor, esto ocurre para la condensación que ocurre en la línea de vapor.

En la operación de la caldera en primera instancia, hay que calentar agua desmineralizada a un rango de $110\text{ }^{\circ}\text{C} - 120\text{ }^{\circ}\text{C}$, para tener un flujo de vapor todo el tiempo que dure la operación. Esto se logra utilizando el variador de voltaje a la mayor potencia, para disminuir el tiempo del calentamiento del agua. La caldera debe estar generando vapor al reactor antes de que se haga el primer cambio de inyección.

Se inicia desde el paso B-A cuando el frente de combustión está en el centro del reactor. Anteriormente se debe utilizar la configuración con premezcla con vapor a comienzo del ciclo B-A, para que se establezca de la mejor forma el flujo con el que se va a operar.

- Cuando T5 está a una temperatura mayor a los 1,000 °C se abren las válvulas VV2 y VVD, dando paso al flujo de vapor a la línea, en este momento se empieza a calentar la línea, hasta que comienza a entrar vapor al reactor.
- Al alcanzar T4 la temperatura de 1,200 °C se cierra la válvula VGNL y se abre las válvulas VGNC y VICC, dando paso a la inyección de combustible por el centro del reactor, con aire y vapor por la inyección lateral.
- Cuando T3 comienza a bajar, se cierra la VICC y se abre la VICI, donde el frente de combustión se encuentra en la zona de la ICI.
- Cuando T2 comienza a bajar, en primera instancia se cierra la válvula de vapor VVD y se da paso a hacer el cambio de inyección lateral de aire, donde se cierra las válvulas VGEI, VILD y simultáneamente se abre las válvulas VILI y VGED. En este momento abrir VV1 y VV2 para botar el condensado de vapor de la línea, luego cerrarlas.
- Abrir las válvulas de vapor VV2 y VVI para que comience a calentar la línea de vapor, para luego comenzar a introducirse en el reactor que aproximadamente T3 estará en su máxima temperatura.
- Al alcanzar T4 su temperatura máxima se da paso al cambio de ICI a ICC donde se cierra VICI y se abre la VICC.
- Cuando T5 empieza a bajar se cambia la inyección central por inyección lateral (con premezcla), donde se cierran las válvulas VICC, VGNC y se abre la válvula VGNL, además se cierran las válvulas de vapor VV2 y VVI.

Nota: Como recomendación desde la memoria de Pablo Requena [31] donde se probó hacer el cambio de inyección lateral del aire-vapor desde el ciclo B-A hacia A-B de forma simultánea, pero el reactor tendía a apagarse.

2.5.4. Toma de muestras

Cuando el reactor se encuentre en funcionamiento estable se procede a hacer el análisis en línea de los gases de escape. Para esto se hace lo siguiente:

- Se abren las válvulas VTM1, VTMI y VTMD antes de cerrar las válvulas VGEI y VGED para asegurar que no se genere una acumulación de gases nocivos dentro de las líneas.

- Ahora dependiendo de que equipos se desee utilizar para las mediciones se proceden a abrir las válvulas VTMG, VTMT1 o VTMT2 y así hacer que los equipos tomen los datos necesarios para su posterior análisis.
- Una vez finalizado el análisis deseado por los equipos se procede a abrir las válvulas VGEI y VGED antes de cerrar las válvulas VTMG, VTMT1 y VTMT2 primero.
- Se prosigue cerrando las válvulas restantes de la línea de toma de muestra VTMI antes que las VTMI y VTMD.

2.5.5. Apagado del reactor

Una vez tomadas las muestras y al tener los datos del registro de temperaturas de los ciclos B-A y A-B, es necesario apagar el reactor y desenergizar el resto de los dispositivos eléctricos, entre ellos el generador de vapor.

- Se detiene la grabación del programa DAQ Central, para proceder a desconectar todo.
- Se desconecta la caldera generadora de vapor cerrando las válvulas VVI, VVD.
- Se cierran las válvulas VA1, VA2 donde se restringe el paso de aire al reactor y se apaga el compresor.
- Se cierra las válvulas VGN1, VGN2 y VGN3 que dan paso al combustible, esperando que la lectura del controlador de flujo indique 0 l/min .
- Se espera que el manómetro de la línea de aire indique 0 bar .
- Se deja enfriar el reactor sin que ningún gas que fluya dentro ya que las variaciones rápidas de temperatura hacen más frágil el material.
- Se apagan los controles de flujo y el computador del laboratorio.
- Se apaga el detector de hidrocarburos.

Capítulo 3

Modelo matemático del reactor de flujo recíproco

3.1. Metodología

El sistema físico bifásico sólido-gas presentado es unidimensional, transiente y las propiedades tanto del sólido como del gas son variables.

El método de solución para las ecuaciones gobernantes del sistema que describen el fenómeno de la combustión en quemadores de medio poroso inertes son un conjunto de ecuaciones diferenciales que serán resueltas de forma numérica por el programa Fortran 90, el cual graban los campos de temperatura del sólido, temperatura del gas, densidad del gas y calor específico del sólido.

Paralelamente, el modelo se resuelve por el método de diferencias finitas en forma implícita y el método de matriz tridiagonal TDMA el cual hace sus iteraciones en el tiempo. Con los resultados obtenidos se hacen gráficos de los perfiles térmicos el cual representa la onda de combustión por el sistema.

3.2. Consideraciones al modelo matemático

Debido a las diferencias en las propiedades de transporte de calor entre la fase gas y la matriz sólida en el medio poroso, el calor perdido por el combustible gaseoso no es transferido inmediatamente a la matriz sólida. Esto quiere decir que la fase sólida

y gas se encuentran en un estado de no equilibrio térmico. Por lo tanto, se tiene que considerar dos ecuaciones de conservación de energía: una para el sólido y otra para el gas.

Para simplificar tanto el modelo matemático como la resolución numérica se toman en consideración las siguientes suposiciones:

- El modelo matemático es unidimensional y en régimen de flujo laminar.
- La temperatura inicial del medio sólido poroso en cada nuevo ciclo de operación corresponde al perfil de temperatura final obtenido en cada medio ciclo anterior.
- El modelo utilizado es unidireccional, la característica de recíproco es otorgado invirtiendo las condiciones iniciales en cada nuevo ciclo de simulación.
- La hidrodinámica del sistema se estudiará utilizando la ley de Darcy.
- La ecuación de continuidad se estudiará en estado estacionario.
- El medio poroso es químicamente inerte, homogéneo e isotrópico.
- La fase de gas se considera una mezcla general de sólo dos especies: reactantes y productos.
- La reacción de combustión es del tipo Arrhenius de primer orden, irreversible y de un sólo paso.
- No existe equilibrio térmico local entre la fase sólida y la fase gas, i.e. $T_s \neq T_g$
- Las propiedades físicas del sólido y de la mezcla gaseosa son en función de la temperatura.
- El sistema es no adiabático y las pérdidas de calor se realizan por convección libre y radiación térmica.
- La mezcla gaseosa sigue la ley de los gases ideales.
- Se desprecia el efecto de la dispersión para los fenómenos de transferencia de masa y calor en la fase gaseosa debido a que el número de Peclet es pequeño (menor a $48^{1/2}$)

3.3. Modelo matemático de la combustión en medios porosos inertes cerámicos

Las ecuaciones que gobiernan el proceso de combustión en MPI son:

Ecuación de continuidad para la mezcla:

$$\frac{\partial (\rho_g \cdot u_g)}{\partial z} = 0 \quad (3.1)$$

Ecuación de conservación de energía para el gas:

$$\varepsilon \cdot (\rho \cdot C_p)_g \left(\frac{\partial T_g}{\partial t} + u_g \frac{\partial T_g}{\partial z} \right) = \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon \cdot \lambda_g \frac{\partial T_g}{\partial z} \right) - a \cdot (T_g - T_s) + \Delta h_c \cdot K \cdot \bar{w} \cdot w_0 \cdot \varepsilon \cdot \rho_g \cdot e^{-E/R \cdot T_g} \quad (3.2)$$

Ecuación de conservación de energía para el sólido:

$$(1 - \varepsilon) \cdot (\rho \cdot C_p)_s \frac{\partial T_s}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_{ef} \frac{\partial T_s}{\partial z} \right) + a \cdot (T_g - T_s) - \beta_v \cdot (T_s - T_0) \quad (3.3)$$

Ecuación de continuidad para la especie química:

$$\frac{\partial \bar{w}}{\partial t} + u_g \frac{\partial \bar{w}}{\partial z} = \frac{1}{\rho_g} \frac{\partial}{\partial z} \left(D \cdot \rho_g \frac{\partial \bar{w}}{\partial z} \right) - K \cdot \bar{w} \cdot e^{-E/R \cdot T_g} \quad (3.4)$$

donde T_g y T_s son las temperaturas del gas y del sólido, respectivamente a el coeficiente intersticial de intercambio de calor, T_0 la temperatura ambiente, Δh_c es la entalpía de combustión de la mezcla y $\bar{w} = w/w_0$ es la fracción en masa de combustible normalizada con w_0 la fracción en masa inicial del metano.

3.4. Condiciones iniciales y de borde

Las condiciones iniciales y de borde dependen del semiciclo que se esté ejecutando. De forma análoga, se puede hacer énfasis a dos condiciones generales.

Independiente sea el semiciclo de operación se asume un equilibrio térmico entre el gas y el sólido, el premezclado previo de metano-aire entra en la sección $z = 0$ con el exceso de aire igual a ϕ (ver ecuación 3.17), y la velocidad inicial del gas u_0 (ver ecuación 3.6). A la salida del canal poroso semi-infinito se consideran las derivadas de las temperaturas y de la fracción en masa de combustible iguales a cero (ver ecuación 3.9).

El premezclado de metano-aire en el primer semiciclo de operación entra en la sección $z = 0$ a una temperatura inicial T_0 y se encuentra con un medio sólido inicialmente a la misma temperatura precalentado en la zona intermedia a una temperatura T_{ig} . En los semiciclos (S_c) posteriores, el premezclado entrará en la sección $z = 0$ (considerando una inversión del flujo) a una temperatura T_s correspondiente al perfil de temperatura del sólido invertido obtenido en el semiciclo anterior.

La selección de estas condiciones de borde son fundamentales para el desarrollo de la solución analítica del trabajo.

Las condiciones iniciales presentadas en la ecuación 3.5 son impuestas para la solución del modelo matemático. Adicionalmente, para construir la solución numérica, la mezcla se precalienta hasta la temperatura de ignición, T_{ig} , en una zona del canal, el resto del canal se mantiene a la temperatura inicial, T_0 .

$$t = 0, S_c = 1 : T_g = T_s = T_0 = 300 \text{ K}, w = w_0 = \frac{1}{1 + 17.16 \cdot (1 + \phi)} \quad (3.5)$$

$$t = 0, S_c = 2, 3, \dots, n : T_g = T_s(S_c = n - 1) \text{ K}, w = w_0 = \frac{1}{1 + 17.16 \cdot (1 + \phi)} \quad (3.6)$$

$$z = 0, S_c = 1 : T_g = T_s = T_0, u_g = u_0, w = w_0 \quad (3.7)$$

$$z = 0, S_c = 2, 3, \dots, n : T_g = T_s(S_c = n - 1) \text{ K}, u_g = u_0, w = w_0 \quad (3.8)$$

$$z \rightarrow \infty : \frac{\partial T_g}{\partial z} = \frac{\partial T_s}{\partial z} = \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (3.9)$$

3.5. Consideraciones generales

Dada la importancia de los mecanismos de transporte de calor y masa, así como la reacción química, en el desarrollo de las ondas de combustión en MPI, éstos se seleccionan e incorporan en el modelo matemático según algunas consideraciones generales.

3.5.1. Coeficientes intersticial de intercambio de calor, $a \text{ W/m}^3 \cdot K$

La transferencia de calor entre el sólido y la fase gaseosa se evalúa según resultados experimentales [34] como:

$$a = a_{gs} \cdot h_{gs} \quad (3.10)$$

donde a_{gs} es la superficie específica interna del medio poroso y h_{gs} , es el coeficiente convectivo interfásico, los cuales están dados por [34]:

$$a_{gs} = \frac{6 \cdot (1 - \varepsilon)}{d_p}, \quad h_{gs} = \frac{\lambda_g}{d_p} \left[2.0 + 1.1 \cdot Pr^{1/3} \cdot Re^{0.6} \right] \quad (3.11)$$

donde Pr y Re son los números de Prandtl y Reynolds, respectivamente, dados por [34]:

$$Pr = \frac{\nu \cdot \rho_g \cdot C_{pg}}{\lambda_g}, \quad Re = \frac{\varepsilon \cdot u_g \cdot d_p}{\nu} \quad (3.12)$$

3.5.2. Coeficiente de conductividad térmica efectivo del medio poroso, $\lambda_{ef} \text{ W/m} \cdot K$

La conductividad entre las esferas de alúmina se produce sólo a través de los puntos de contacto de las mismas, la estructura porosa en esencia es ópticamente densa alrededor de la zona de alta temperatura, y la radiación es incluida en el coeficiente de conductividad térmica efectivo del medio poroso:

$$\lambda_{ef} = (1 - \varepsilon) \cdot \lambda_s + \frac{32 \cdot \sigma \cdot d_p \cdot \varepsilon \cdot T^3}{9 \cdot (1 - \varepsilon)} \quad (3.13)$$

donde σ es la constante de Stefan-Boltzmann.

3.5.3. Coeficiente de intercambio de calor con los alrededores, β_v $W/m^3 \cdot K$

La transferencia de calor entre el sistema y el medio ambiente ocurre a través del medio poroso solamente por convección natural y radiación térmica, y el coeficiente efectivo de intercambio de calor con los alrededores es encontrado a partir de un balance de energía aplicado a un volumen de control cilíndrico de diámetro D_c y de largo dx :

$$[h(T - T_0) + \varepsilon' \cdot \varepsilon'' \cdot (T^4 - T_0^4)] \cdot dx \cdot \pi \cdot D_c = \beta_v \cdot (T - T_0) \cdot dx \cdot \frac{\pi \cdot D_c^2}{4} \quad (3.14)$$

entonces,

$$\beta_v = \frac{4}{D_c} \left(h + \varepsilon' \cdot \varepsilon'' \cdot \sigma \frac{T^4 - T_0^4}{T - T_0} \right) \quad (3.15)$$

donde $\varepsilon' = 0.45$ es la emisividad de la alúmina, $\varepsilon'' = 0.38$ es el factor de transmisividad del tubo de cuarzo, $h = 10 W/m^2 \cdot K$ es el coeficiente de transferencia de calor y σ es la constante de Stefan-Boltzmann.

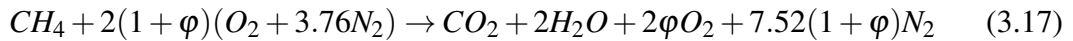
3.5.4. Difusividad de especies, $D m^2/s$

Para la difusividad de especies se asume que el número de Lewis es igual a la unidad:

$$D = \frac{\lambda_g}{\rho_g \cdot C_{pg}} \quad (3.16)$$

3.5.5. Reacción química

La combustión de la mezcla metano-aire es descrita por la reacción química global de un solo paso:



donde φ representa la proporción de exceso de aire en los reactantes que entran al sis-

tema.

La entalpía de combustión de la mezcla es $\Delta h_c = 50,150,000 \text{ J/m}^3$. Para la reacción se considera la ecuación en un solo paso de Arrhenius con la energía de activación $E_a/R = 15,643.8 \text{ K}$ y el factor pre-exponencial $K = 2.6 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1}$

3.5.6. Propiedades físicas del medio poroso y del gas

El medio poroso es construido con una esponja de alúmina con un tamaño de poro $d_p = 2.5 \text{ mm}$, con $\varepsilon = 0.83$ de porosidad. Las propiedades físicas de la alúmina son: densidad de masa $\rho_s = 4167 \text{ kg/m}^3$, calor específico $C_{ps} \text{ J/kg} \cdot \text{K}$ y conductividad térmica $\lambda_s \text{ W/m} \cdot \text{K}$ se consideran variables y están dados por:

$$C_{ps} = 29.567 + 2.61177 \cdot T_s - 0.00171 \cdot T_s^2 + 3.382 \cdot 10^{-7} \cdot T_s^3 \quad (3.18)$$

$$\lambda_s = -0.21844539 + 0.00174653 \cdot T_s + 8.2266 \cdot 10^{-8} \cdot T_s^2 \quad (3.19)$$

La densidad de masa inicial del gas es $\rho_{g,0} = 1.13 \text{ kg/m}^3$, es incompresible y obedece la ley del gas perfecto, por lo que:

$$\rho_g = \frac{\rho_0 \cdot T_0}{T} \quad (3.20)$$

Adicionalmente para el gas, su viscosidad $\mu_g \text{ kg/m} \cdot \text{s}$, su calor específico $C_{pg} \text{ J/kg} \cdot \text{K}$ y su conductividad térmica $\lambda_g \text{ W/m} \cdot \text{K}$ son variables y están dadas por [35]:

$$\mu_g = 3.37 \cdot 10^{-7} \cdot T_g^{0.7} \quad (3.21)$$

$$C_{pg} = 947.0 \cdot e^{1.83 \cdot 10^{-4} \cdot T_g} \quad (3.22)$$

$$\lambda_g = 4.82 \cdot 10^{-7} \cdot C_{pg} \cdot T_g^{0.7} \quad (3.23)$$

3.6. Método de discretización y solución de las ecuaciones

Luego de conocer las ecuaciones gobernantes que describen el fenómeno de la combustión en quemadores de medios porosos inertes se presentará el método de discretización y su solución.

3.6.1. Diferencias finitas implícitas

Las diferencias finitas corresponden a una discretización de cada ecuación diferencial del modelo matemático con el fin de convertirla en un sistema de ecuaciones lineales algebraicas cuya solución numérica puede ser encontrada con métodos tradicionales como por ejemplo Gauss - Seidel, de Jacobi o TDMA.

El espacio dimensional L en el eje z , como se muestra en la figura 3.1, se divide en $k - 1$ intervalos de tamaños iguales Δz . De esta misma manera se puede aplicar el mismo principio para discretizar el eje del tiempo, figura 3.2, pero con tamaños iguales a Δt . Considerando nn como el número total de pasos en el tiempo, los valores que esta variable puede asumir depende fuertemente del número de nodos considerados, llegando en algunos casos a valores muy elevados para poder subir la precisión de los cálculos. El hecho de aumentar el número de nodos y pasos en el tiempo se denomina aumentar el tamaño de malla.

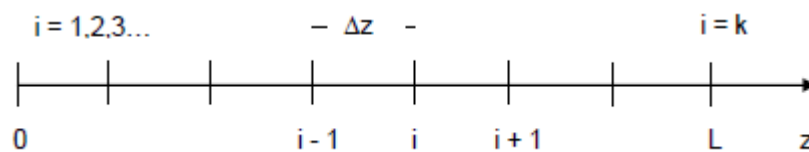


Figura 3.1: Discretización del eje espacial z

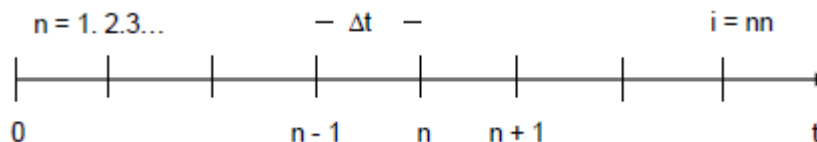


Figura 3.2: Discretización del eje tiempo

3.6.2. Algoritmo de la matriz tridiagonal TDMA

El algoritmo de la matriz tridiagonal (TDMA), también conocido como el algoritmo de Thomas, es una forma simplificada de la eliminación de Gauss que se puede utilizar para resolver sistemas de ecuaciones tridiagonal, donde un sistema tridiagonal puede ser descrito como para la variable arbitraria ξ :

$$A_{ij} \cdot \xi_{i-1j}^{n+1} - C_{ij} \cdot \xi_{ij}^{n+1} + B_{ij} \cdot \xi_{i+1j}^{n+1} = -F_{ij} \quad (3.24)$$

La implementación del algoritmo TDMA se realiza en base al supuesto de que la propiedad varía linealmente entre nodos, para la variable arbitraria ξ se tiene, para dos nodos vecinos de una malla para el instante $(n + 1)$:

$$\xi_{i-1}^{n+1} = \alpha_i \cdot \xi_i^{n+1} + \beta_i \quad (3.25)$$

Capítulo 4

Resultados de la simulación computacional

4.1. Validación de resultados de simulación computacional

Para presentar los resultados de la simulación computacional se tiene que validar primero si el código a utilizar entrega valores coherentes por lo que se utiliza como guía el trabajo realizado por Contarin [26]. El motivo para validar el modelo matemático con la información obtenida por Contarin es dado la similitud de su modelo considerando la forma en que está configurado el reactor. Se comparará una situación en donde la relación de equivalencia (ϕ) es 0.3, velocidad de filtración de la mezcla gaseosa (u_0) igual a 0.5 m/s y el tiempo de ciclo (t_c) de 10 s, los resultados a comparar quedan en las figuras 4.1 y 4.2 respectivamente.

Los peaks de temperatura es donde se produce la combustión. Dependiendo de la dirección del flujo, cuando es del sentido de derecha a izquierda este se produce corrido a la derecha dado que el frente que pasó primero en dirección contraria.

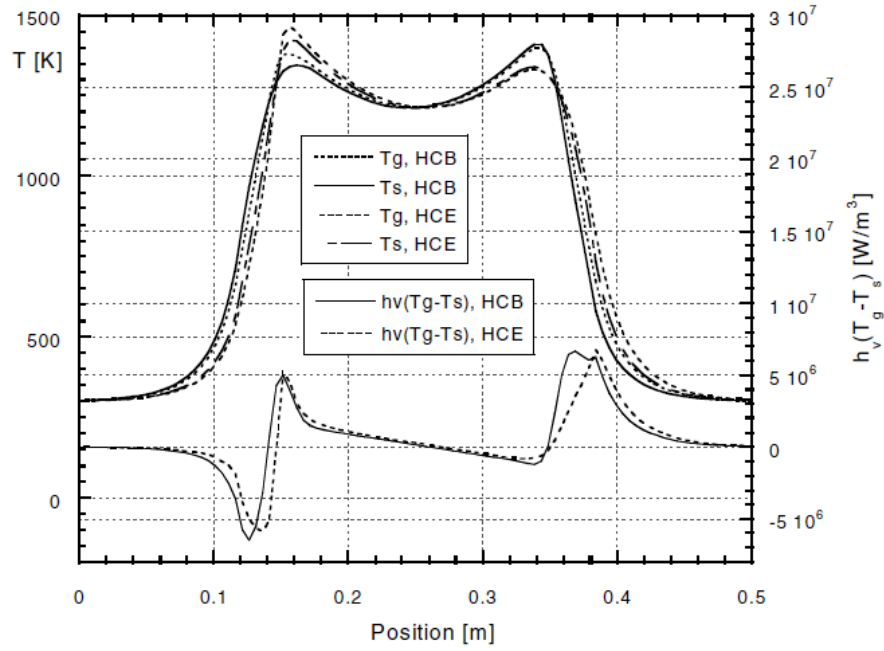


Figura 4.1: Evolución de la temperatura durante medio ciclo del reactor de flujo recíproco obtenido por Contarin [26]. Las siglas HCB y HCE corresponden a los términos inicio medio ciclo y término medio ciclo, respectivamente

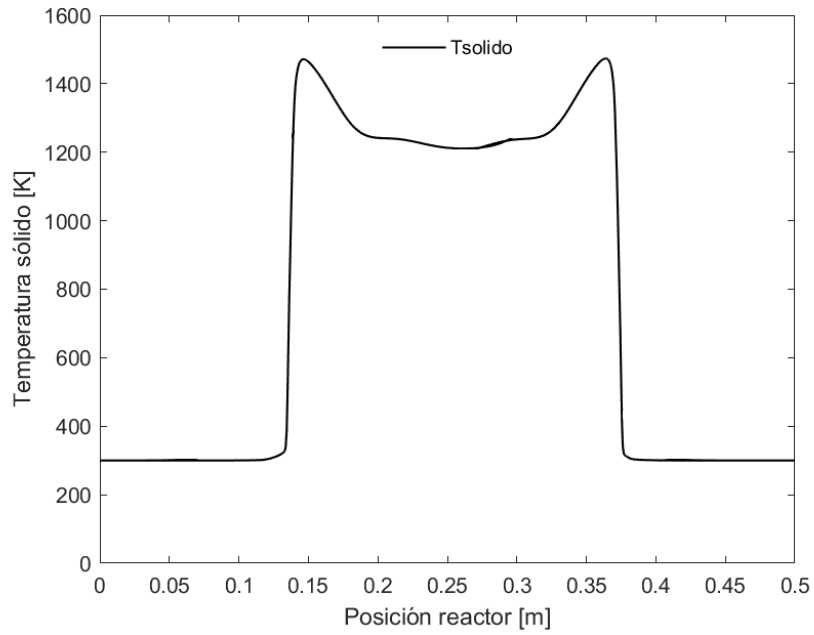


Figura 4.2: Simulación computacional propia con perfil de temperatura del sólido para $\phi = 0.3$, $u_0 = 0.5 \text{ m/s}$, $t_c = 10 \text{ s}$ y $T_{ig} = 1,150 \text{ K}$

Con estas figuras se muestra que la solución numérica obtenida con el perfil de temperatura es similar a la solución obtenida por Contarin [26]. Sin embargo, hay que considerar que las diferencias se deben a que las pérdidas de calor son impuestas a lo largo del reactor y con una diferencia notoria entre ellas dado que al centro es prácticamente aislado por lo que su temperatura en esa zona es mayor.

Teniendo esto en consideración se procede a desarrollar la simulación computacional para modelar el comportamiento de un quemador con flujo recíproco.

4.2. Resultados numéricos

Los resultados presentados muestran los perfiles de temperaturas de la fase sólida. Para todos los perfiles se considera a la esponja con una porosidad de 83 %, un tamaño de poro de 0.0025 m y una temperatura de ignición de 1,150 K .

4.2.1. Influencia de la velocidad de filtración

Para determinar la influencia de la velocidad de filtración en los perfiles de temperatura se realizaron una serie de simulaciones. Los valores que se utilizaron para este caso fueron 0.2, 0.3, 0.4 y 0.5 m/s .

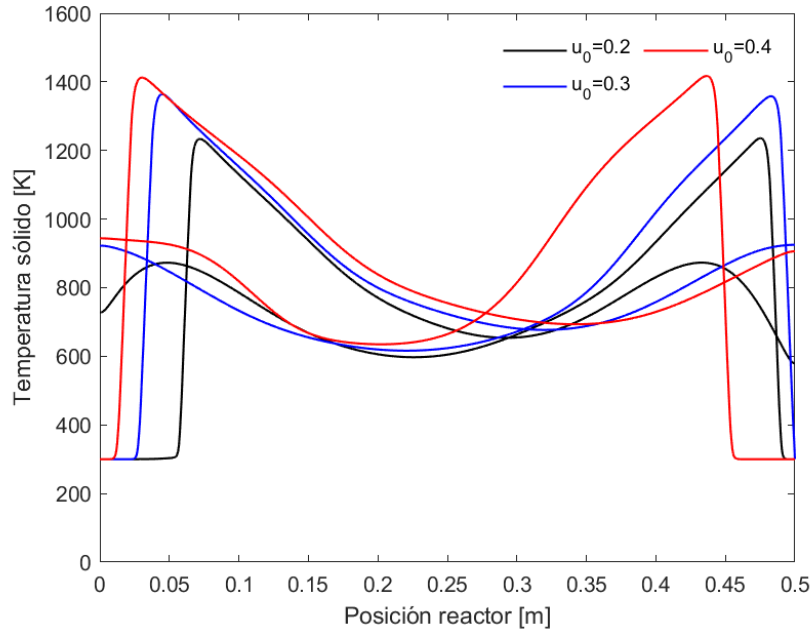


Figura 4.3: Perfiles de temperatura de la fase sólida para $\phi = 0.5$ y $t_{sc} = 4 \text{ min}$

Dado los resultados mostrados en la Figura 4.3, se nota como evoluciona la curva de temperatura a medida que va creciendo la velocidad de filtración teniendo en cuenta que los ciclos completos están representados de un mismo color pero separados según la dirección en que van ya que se modeló de forma que se hiciera por semi ciclo y así ver la influencia de una dirección sobre la otra.

Con respecto al evidente aumento de temperatura máxima alcanzada en los peaks se procede a tomar los extremos de velocidades y hacer la siguiente simulación donde se verá como afecta la temperatura del sólido mientras se hace variar la relación de equivalencia.

4.2.2. Influencia de la variación de relación de equivalencia

Partiendo por la mínima velocidad de filtración, $u_0 = 0.2 \text{ m/s}$, se hacen las pruebas para determinar como afecta al perfil de temperatura del sólido las distintas relaciones de equivalencia. Los valores utilizados para la construcción de estos perfiles fueron 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8 y 0.9.

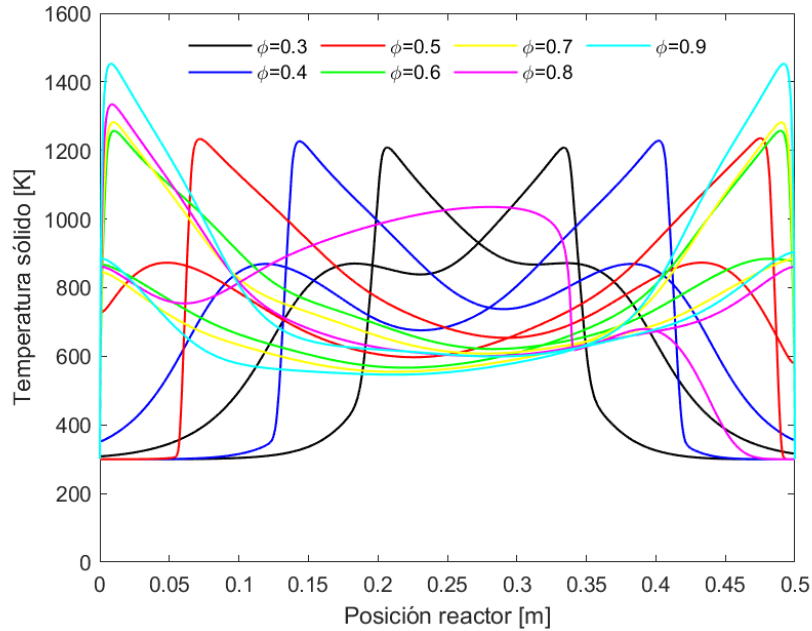


Figura 4.4: Perfiles de temperatura de la fase sólida para $u_0 = 0.2 \text{ m/s}$ y $t_{sc} = 4 \text{ min}$

Como se logra apreciar, al aumentar la relación de equivalencia se va expandiendo los perfiles de temperatura dentro del reactor hasta que pasado $\phi = 0.6$ se nota como las temperaturas máximas aumentan y estos puntos se encuentran prácticamente fuera del reactor, pero como el código está forzado a dar un resultado dentro de los márgenes, se notan como si estuvieran en las tapas. Con esto se podría decir que un buen rango de operación para esta velocidad de filtración sería entre $\phi = 0.3$ y $\phi = 0.6$. Además se aprecia que en el caso de $\phi = 0.8$ se forma una curva con una forma poco homogénea y esto se podría deber a que en ese punto pudiese haber un cambio de velocidad del frente de combustión.

Ahora pasando al otro extremo de velocidad de filtración, $u_0 = 0.4 \text{ m/s}$, se hacen las mismas pruebas para ver como se ve afectado el perfil de temperatura, pero esta vez con una nueva velocidad de filtración. Los valores para esta vez fueron 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7 y 0.8.

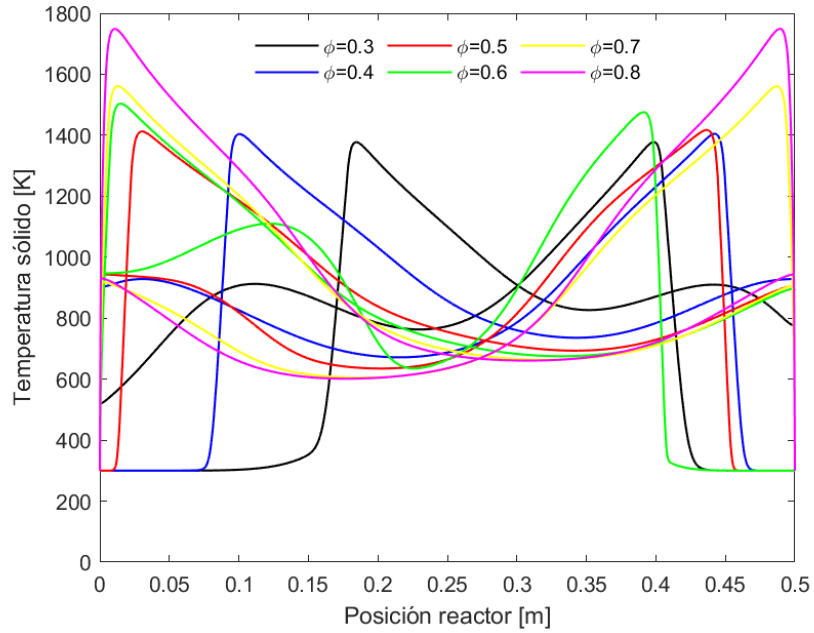


Figura 4.5: Perfiles de temperatura de la fase sólida para $u_0 = 0.4 \text{ m/s}$ y $t_{sc} = 4 \text{ min}$

Para este caso se ve desde un principio que las temperaturas máximas que se alcanzan son mayores que en la figura 4.4 incluso desde un $\phi = 0.3$ y no se nota la homogeneidad de una tendencia clara como el anterior. Además considerando que sólo se tomó hasta $\phi = 0.8$ ya que las temperaturas máximas estaban llegando a los 1,800 K.

4.2.3. Influencia de la variación del tiempo de semi ciclo

Como se había mencionado antes, la simulación computacional se conforma de dos semi ciclos para hacer un ciclo completo y es el tiempo de este semi ciclo el que se va a modificar para ver de que manera afecta a los perfiles de temperatura a medida que se aumenta este desde $t_{sc} = 4 \text{ min}$ hasta $t_{sc} = 10 \text{ min}$.

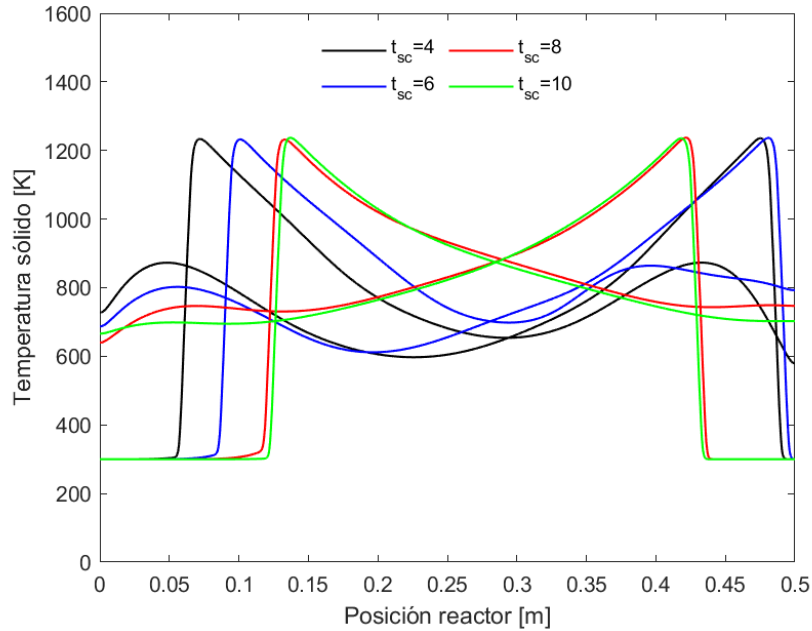


Figura 4.6: Perfiles de temperatura de la fase sólida para $\phi = 0.5$ y $u_0 = 0.2 \text{ m/s}$

En esta ocasión se logra apreciar como a medida que se aumenta el tiempo del semi ciclo este tiende a concentrarse en el centro del reactor pero siempre manteniendo las temperaturas máximas y mostrando su desplazamiento claro. Esto se debe a que a mayor sea el tiempo que se le da para desarrollarse este se tiende a estabilizar por lo que se encontraría de mejor manera contenido dentro del reactor.

4.2.4. Influencia de la variación de la porosidad

Con respecto a la porosidad este es un parámetro muy importante dado que el material del que se encuentra hecho la esponja se puede conseguir de varias formas distintas como esferas individuales hasta este formato de esponja, que es el que se instaló en el reactor del laboratorio. Esto implica que hay un margen importante dado que la porosidad de las esferas empaquetadas en la cámara de combustión tienen un valor aproximado del 40 % y en el caso de las esponjas se pueden encontrar con una porosidad de hasta valores cercanos al 90 %, es por esto que se toman estos valores como los márgenes a modelar.

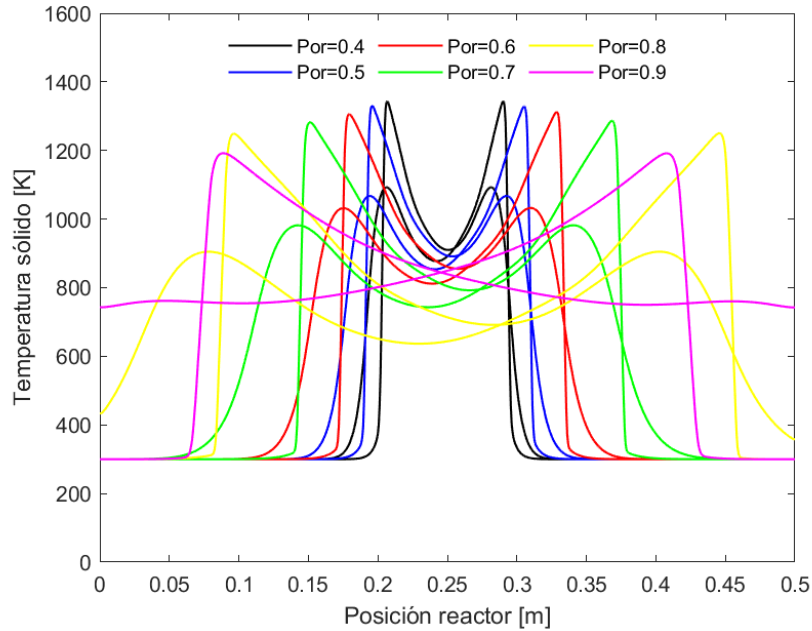


Figura 4.7: Perfiles de temperatura de la fase sólida para $\phi = 1.0$, $u_0 = 0.2 \text{ m/s}$ y $t_{sc} = 4 \text{ min}$

Con los resultados de la figura 4.7 se nota que a medida que aumenta la porosidad, es decir, el espacio vacío entre los sólidos, el perfil se va desarrollando y alargando en la zona central del reactor y a su vez disminuyendo las temperaturas máximas. Esto se debería a que a medida que se aumenta la porosidad la transferencia de calor mediante conducción disminuye permitiendo un desarrollo mas completo del perfil.

4.2.5. Influencia del material del medio poroso

Como trabajo adicional de investigación se hizo unas simulaciones computacionales en donde se quería verificar en como cambiaba los ciclos de combustión y sus temperaturas si es que se utilizaban otros materiales como núcleos del medio poroso inerte. Cabe mencionar que esta parte se tomaron en cuenta que se consideran todos los medios porosos simulados como esferas uniformes y no como esponjas, como en los resultados anteriores.

Para hacer estas esferas diferentes se toma el supuesto que el material que se cambia es el núcleo de las esferas. Es decir, pasan de ser esferas de alúmina sólidas a esferas de un núcleo del material a modelas y recubiertas con alúmina ya que al alcanzar altas

temperaturas estos materiales podrían llegar a superar su punto de fusión perdiendo su función como transmisor de temperatura, siendo este el motivo del recubrimiento de la alúmina y que tenga la función de aislante.

Los materiales que se utilizaron para comparar entre si fueron alúmina, como referencia, cobre, cuarzo y grafeno.

Las simulaciones de cada material fueron hechas haciendo variar distintos parámetros. Primero se consideraron tres distintas relaciones de equivalencia, $\phi = 0.3, 0.55$ y 0.8 , y para cada una se hicieron variar las velocidades de filtración, también en tres distintas, $u_0 = 0.2, 0.35$ y 0.5 m/s . Ahora con cada una de estas simulaciones se compararon al comportamiento de las esferas sólidas de alúmina lo que quedó plasmado en las Figuras 4.8, 4.9, 4.10 y 4.11.

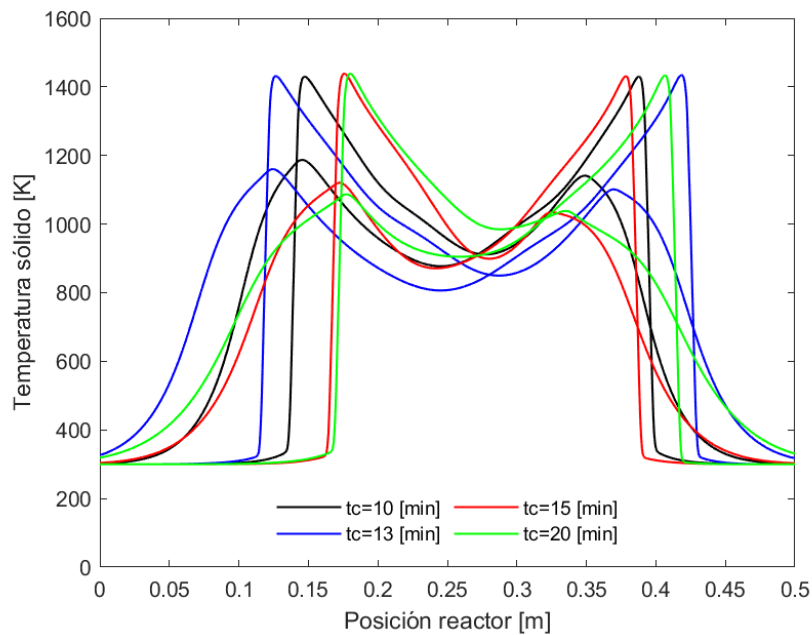


Figura 4.8: Perfiles de temperatura de dentro del reactor para esferas de alúmina con $\phi = 0.55$ y $u_0 = 0.35 \text{ m/s}$.

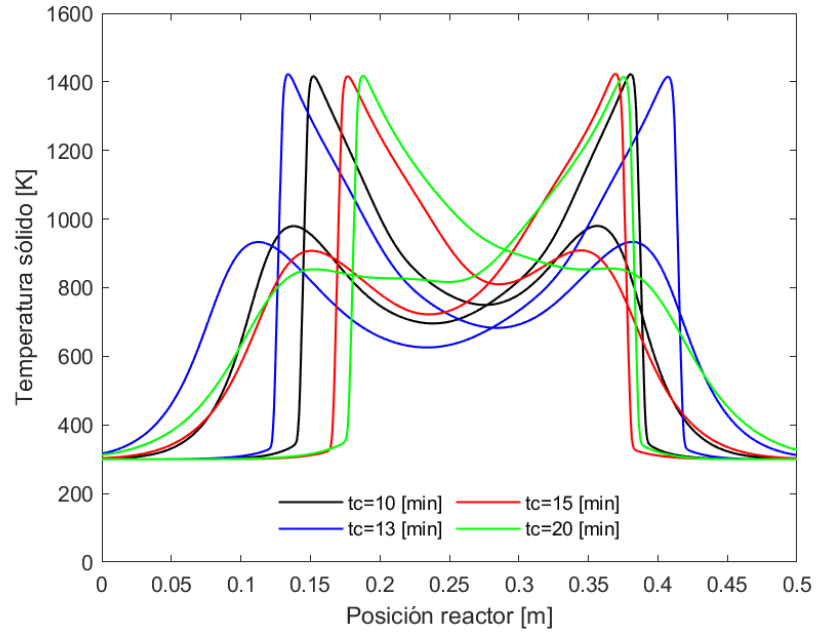


Figura 4.9: Perfiles de temperatura de dentro del reactor para esferas de cobre recubiertas de alúmina con $\phi = 0.55$ y $u_0 = 0.35 \text{ m/s}$.

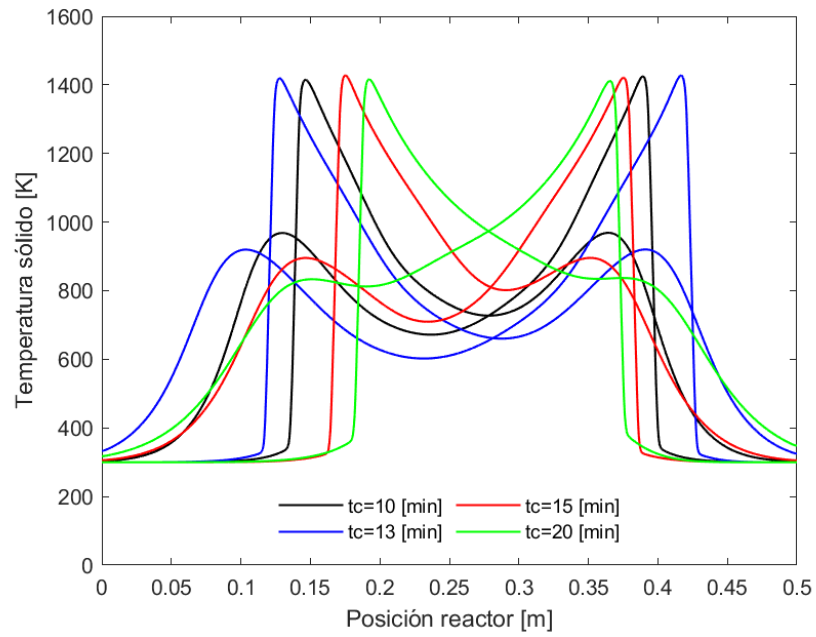


Figura 4.10: Perfiles de temperatura de dentro del reactor para esferas de cuarzo recubiertas de alúmina con $\phi = 0.55$ y $u_0 = 0.35 \text{ m/s}$.

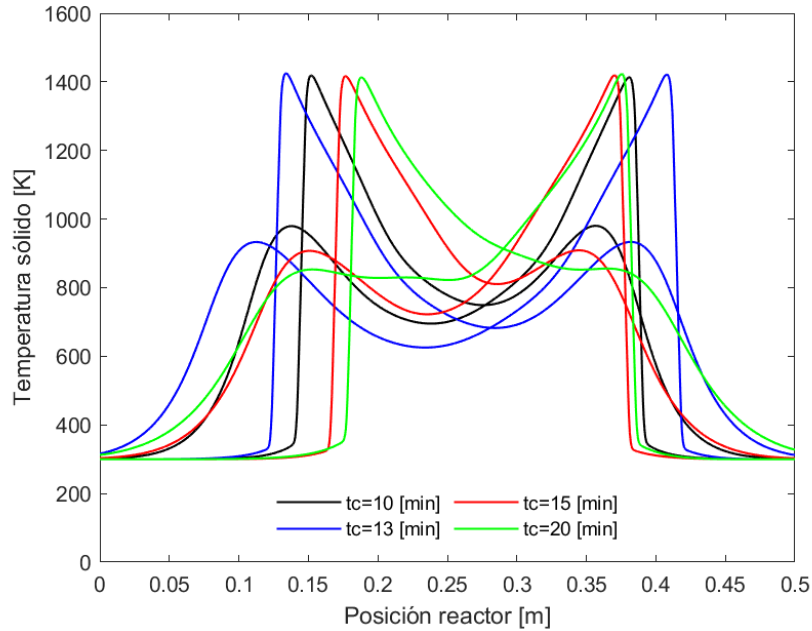


Figura 4.11: Perfiles de temperatura de dentro del reactor para esferas de grafeno recubiertas de alúmina con $\phi = 0.55$ y $u_0 = 0.35 \text{ m/s}$.

Se consideraron que para cada material se tomara el punto central dado que es donde se muestra de mejor manera el perfil desarrollado para cada tiempo de ciclo y es más claro ver las diferencias entre cada una de las figuras. En las cuales se muestra que al poner un material mas conductor al interior de una esfera de alúmina la mayor diferencia va a ser que se logra una mayor pérdida de temperatura al centro del reactor, que es la residual al pasar el frente de llama, por lo que se necesitaría mayor energía en mantener la temperatura en su interior y eso si aumentar las temperaturas máximas dentro del mismo.

Los resultados mostrados en los gráficos anteriores de esta sección están basados en las propiedades mostradas en la siguiente tabla.

Tabla 4.1: Propiedades promedio de los materiales a utilizar

	Alúmina	Cobre	Cuarzo	Grafeno
Conductividad [$\text{W/m} \cdot \text{K}$]	1.40	357.06	1.88	3,115.73
C_p [$\text{J/kg} \cdot \text{K}$]	1,132.05	444.59	1,278.74	1,851.95
Densidad [kg/m^3]	3,987	8,940	2,650	2,250

Con estos valores como referencia se procedió a realizar los cálculos necesarios

llegando a los siguientes resultados.

Tabla 4.2: Propiedades promedio de las mezclas de materiales tipo esferas como medio poroso inerte

	Alúmina	Alúmina Cobre	Alúmina Cuarzo	Alúmina Grafeno
Conductividad efectiva [W/m · K]	1.61	0.35	0.35	0.35
Cp [J/kg · K]	1,132.05	949.59	1,171.02	1,189.19
Densidad [kg/m ³]	3,987	3,182	2,179	2,115

Ahora con la tabla 4.2 se logra apreciar de mejor manera el motivo de por que los gráficos se parecen tanto unos a los otros y eso sería que a pesar de que se modifique el material del interior de las esferas, estas al ser tan pequeñas, son insignificante para la conductividad dentro del reactor.

Capítulo 5

Conclusiones

Para la presente investigación se logró rediseñar un reactor de flujo recíproco e instalarlo en su lugar de operación, pero dado la contingencia sanitaria nacional no se logró concluir las etapas finales de operación por lo que se procedió a realizar una simulación numérico computacional de la operación del equipo y como este se ve afecto a los cambios de una serie de parámetros operacionales.

Con respecto a la parte del cálculo de los parámetros operacionales se determinó que la velocidad de filtración de la mezcla al reactor sería de $u_0 = 0.32 \text{ m/s}$ lo que hace que el caudal de la premezcla sea de $Q = 20.15 \text{ l/min}$. Con estos dos parámetros como los límites de operación se determinaron los valores de caudal para el aire y el metano para las distintas relaciones de equivalencia (ver Tabla 2.5). Ahora en caso de operar el reactor con inyección de vapor/combustible se determinaron los valores de los caudales para cada uno, según la relación de equivalencia que se desee aplicar en la cámara de combustión (ver Tabla 2.6). Este último con un leve aumento del caudal, el que llega a $Q = 20.39 \text{ l/min}$.

Ahora para la parte de las simulaciones computacionales, después de comprobar su validez con el modelo a ejecutar, se muestra que a medida que se aumenta la velocidad de filtración se aumenta las temperaturas máximas alcanzadas dentro del equipo y que estas están dentro del rango de $u_0 = 0.2 - 0.4 \text{ m/s}$ para un $\phi = 0.5$ y un tiempo de semi ciclo $t_{sc} = 4 \text{ min}$.

Para las distintas relaciones de equivalencia se muestra que a medida que se au-

menta esta ($\phi = 0.3$ a 0.9) el perfil de temperaturas se va desarrollando a lo largo del reactor hasta que se llega al límite físico del mismo y un aumento de estas temperaturas máximas en la última relación de equivalencia, estás con respecto al parámetro más bajo de velocidad de filtración ($u_0 = 0.2 \text{ m/s}$). Ahora, con la diferencia única de que la velocidad de filtración se duplicó ($u_0 = 0.4 \text{ m/s}$) se muestra un desarrollo similar y solamente que en promedio las temperaturas máximas aumentaron dado este aumento en la velocidad de filtración.

Pasando a los diferentes tiempos de semi ciclos se mostró que las diferencias venían en que a mayor el tiempo los perfiles tienden a concentrarse en el centro en comparación a los de menor tiempo.

En cuanto a la porosidad, dentro del rango de $por = 0.4 - 0.9$, se muestra como a medida que se aumenta este parámetro se ve un desarrollo mayor y más holgado del perfil de temperatura dado que permite que los flujos fluyan de mejor manera dentro de la esponja si hay mayor cantidad de cavidades en ella.

Con respecto a los diferentes materiales con los que se pudiesen hacer esferas para rellenar el reactor y usarlas como el medio poroso inerte, se logró mostrar que aunque se agregue un material el cual es más conductivo que la misma alúmina, este solo logra que se en las zonas donde ya pasó el frente de llama se pierda más rápido esa temperatura por lo que en la zona media se notan que hay una baja de temperatura en comparación a las esferas de alúminas puras.

Capítulo 6

Recomendaciones para desarrollos futuros

- Mejorar el sistema de caldera para inyección de vapor de agua y que garantice un volumen constante de agua por un mayor tiempo y de manera más confiable.
- Hacer un estudio completo de análisis de gases de escape del reactor y buscar la manera de hacer estos equipos más eficientes y menos contaminantes.
- Mejorar el sistema de aislación para mejorar aún más la aislación evitando pérdidas de temperatura.
- Actualizar el sistema de salida de gases de combustión con nuevas válvulas y mayor espacio de trabajo.
- Verificar si con los cambios en la línea de inyección se generan mejores flujos y más controlados para la operación.
- Monitorear los cambios de color en el cuerpo del reactor a ver si se nota diferencia en cuanto las temperaturas alcanzadas por este.

Bibliografía

- [1] S. R. Turns et al., Introduction to combustion, vol. 287. McGraw-Hill Companies, 1996.
- [2] J. Warnatz, U. Maas, R. W. Dibble, and J. Warnatz, Combustion. Springer, 2006.
- [3] H. C. López, “Combustión con exceso de entalpía,” TecnoLógicas, no. 21, pp. 169–190, 2008.
- [4] T. Takeno and K. Sato, “An excess enthalpy flame theory,” Combustion Science and Technology, vol. 20, no. 1-2, pp. 73–84, 1979.
- [5] M. Klug, “Pirólisis, un proceso para derretir la biomasa,” Revista de Química, vol. 26, no. 1-2, pp. 37–40, 2012.
- [6] A. Gómez, W. Klose, and S. Rincón, Pirólisis de biomasa: cuesco de palma de aceite. kassel university press GmbH, 2008.
- [7] A. Molino, S. Chianese, and D. Musmarra, “Biomass gasification technology: The state of the art overview,” Journal of Energy Chemistry, vol. 25, no. 1, pp. 10–25, 2016.
- [8] P. Basu, Biomass gasification and pyrolysis: practical design and theory. Academic press, 2010.
- [9] A. M. Castello Belmar, “Diseño de un reactor continuo de gasificación de biomasa,” 2014.
- [10] J. M. Mendoza, A. J. Bula, R. D. Gómez, and L. A. Corredor, “Análisis exergético de la gasificación de biomasa,” Información tecnológica, vol. 23, no. 5, pp. 85–96, 2012.

- [11] S. Sansaniwal, K. Pal, M. Rosen, and S. Tyagi, "Recent advances in the development of biomass gasification technology: A comprehensive review," *Renewable and sustainable energy reviews*, vol. 72, pp. 363–384, 2017.
- [12] A. Kumar, D. Jones, and M. Hanna, "Thermochemical biomass gasification: a review of the current status of the technology," *Energies*, vol. 2, no. 3, pp. 556–581, 2009.
- [13] C. N. Hamelinck, A. P. Faaij, H. den Uil, and H. Boerrigter, "Production of ft transportation fuels from biomass; technical options, process analysis and optimisation, and development potential," *Energy*, vol. 29, no. 11, pp. 1743–1771, 2004.
- [14] I. Malico and M. A. Mujeebu, "Potential of porous media combustion technology for household applications.," 2015.
- [15] C. A. D. Lopez, "Modelación y simulación bidimensional de un quemador de flujo reciproco en medios porosos inertes," *Tesis de grado*, 2010.
- [16] F. El-Mahallawy and S.-D. Habik, *Fundamentals and technology of combustion*. Elsevier, 2002.
- [17] J. E. R. Piel, *Aplicación de la tecnología de combustión en medios porosos inertes en oxicomustión y generación de gas de síntesis. Trabajo de grado*, 2016.
- [18] Z. Al-Hamamre and A. Al-Zoubi, "The use of inert porous media based reactors for hydrogen production," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 35, no. 5, pp. 1971–1986, 2010.
- [19] F. J. E. C. Parra, *Análisis experimental del uso de vapor de agua en un reactor de flujo reíproco con suministro separado de aire y combustible para la generación de gas de síntesis. Trabajo de Título*, 2017.
- [20] V. Babkin, V. Drobyshevich, Y. M. Laevskii, and S. Potytnyakov, "Filtration combustion of gases," *Combustion, Explosion and Shock Waves*, vol. 19, no. 2, pp. 147–155, 1983.

- [21] A. Aldushin, I. Rumanov, and B. J. Matkowsky, "Maximal energy accumulation in a superadiabatic filtration combustion wave," *Combustion and Flame*, vol. 118, no. 1-2, pp. 76–90, 1999.
- [22] M. A. Mujeebu, M. Z. Abdullah, M. A. Bakar, A. Mohamad, R. Muhad, and M. Abdullah, "Combustion in porous media and its applications—a comprehensive survey," *Journal of environmental management*, vol. 90, no. 8, pp. 2287–2312, 2009.
- [23] A. Mohamad, "Combustion in porous media: fundamentals and applications," in *Transport phenomena in porous media III*, pp. 287–304, Elsevier, 2005.
- [24] F.-A. U. I. of FluidMechanics (LSTM), "Combustion in porous inert media," *Combustion, Explosion and Shock Waves*.
- [25] M. T. Torres, "Hydrogen production from chilean carbonaceous feedstocks using a novel reverse flow porous media reactor," *Fondecyt* 1190654.
- [26] F. Contarin, A. V. Saveliev, A. A. Fridman, and L. A. Kennedy, "A reciprocal flow filtration combustor with embedded heat exchangers: numerical study," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 46, no. 6, pp. 949–961, 2003.
- [27] L. Henríquez-Vargas, M. Valeria, and V. Bubnovich, "Numerical study of lean combustibility limits extension in a reciprocal flow porous media burner for ethanol/air mixtures," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 89, pp. 1155–1163, 2015.
- [28] V. Bubnovich, L. Henríquez, C. Díaz, and M. Maiza, "Diameter of alumina balls effect on stabilization operation region for a reciprocal flow burner," *International journal of heat and mass transfer*, vol. 54, no. 9-10, pp. 2026–2033, 2011.
- [29] L. Du and M. Xie, "Numerical prediction of radiative heat transfer in reciprocating superadiabatic combustion in porous media," *Journal of Environmental Sciences*, vol. 23, pp. S26–S31, 2011.
- [30] J. Hoffmann, R. Echigo, H. Yoshida, and S. Tada, "Experimental study on combustion in porous media with a reciprocating flow system," *Combustion and flame*, vol. 111, no. 1-2, pp. 32–46, 1997.

- [31] P. R. A. R. León, Diseño, construcción e implementación de un reactor de flujo recíproco de medio poroso inerte para la producción de hidrógeno y monóxido de carbono. Trabajo de Título, 2017.
- [32] H. F. G. Pérez, Modelación de un reactor para la producción continua de gas de síntesis a partir de biogás y polietileno. Trabajo de Título, 2014.
- [33] D. E. M. Reyes, Reformado de Biogás en H_2 : Operación de un reactor de medio poroso con biogás sintético y adición de vapor de agua para estudiar su efecto en la producción de gas de síntesis. Trabajo de Título, 2018.
- [34] N. S. and S. Kagei, Heat and mass transfer in packed beds. 1982.
- [35] J. L. C.L. Hackert, J. L. Ellzey and Ezekoye, "Effects of thermal boundary conditions on flame shape and quenching in ducts," Combust Flame, vol. 112, pp. 73–84, 1998.