



**UNIVERSIDAD MICHOACANA DE
SAN NICOLÁS DE HIDALGO**

FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA

DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE POSGRADO



Análisis energético integral de un sistema de combustión en ciclos químicos usando dinámica de fluidos computacional

Tesis que presenta:

M.C. Favio Antonio Ocampo Vaca

**A la División de Estudios de Posgrado
de la Facultad de Ingeniería Química
como requisito parcial para obtener el Grado de:**

**DOCTOR EN CIENCIAS EN
INGENIERÍA QUÍMICA**

**Director: Dr. Rafael Maya Yescas
Co-Director: Dr. Constantin Alberto Hernández Bocanegra**

Morelia, Michoacán de Ocampo. Abril de 2025.



Asunto: Impresión de Tesis.

M.P.P. Venecia Azereet Medina Ortiz.
Jefe del Departamento de Titulación de la
U.M.S.N.H.

Por este medio nos dirigimos a usted de la manera más atenta para notificarle, que después de haberle dado seguimiento al desarrollo de la tesis: "ANÁLISIS ENERGÉTICO INTEGRAL DE UN SISTEMA DE COMBUSTIÓN EN CICLOS QUÍMICOS USANDO DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL", después de haber revisado el manuscrito que presentó el alumno **FAVIO ANTONIO OCAMPO VACA**, con matrícula **0501130D**, concluimos que cumple con los requisitos académicos y con lo establecido en el Reglamento General de Estudios de Posgrado para el desarrollo de su Tesis.

Por lo anterior este Comité Tutorial da el aval para su impresión final.

Director de Tesis: Dr. Rafael Maya Yescas 04002040

Codirector: Constantin Alberto Hernández Bocanegra 18010098

Vocales:

Dra. Gladys Jiménez García 912999

Dra. Ma. del Carmen Chávez Parga 07001002

Dr. Rafael Huirache Acuña 11000201

Atentamente.

Morelia, Michoacán a 25 de marzo de 2025.

Dr. José Apolinar Cortés

Coordinador del Programa de Doctorado en Ciencias en Ingeniería Química



DIVISIÓN DE ESTUDIOS
DE POSGRADO

JAC/mcpa.

DEPARTAMENTO DE POSGRADO

Facultad de Ingeniería Química / Universidad San Nicolás de Hidalgo
Francisco J. Mújica S/N / Col. Feigitas del Río / C.P. 58060 / Morelia, Michoacán / Tel. y Fax: 443. 327 3534
<http://posgrado.fiq.umich.mx/>

Resumen

En el presente trabajo se propusieron las bases para llevar a cabo la simulación numérica del proceso de combustión en ciclos químicos, haciendo uso de la dinámica de fluidos computacional. Este proceso cuenta de dos reactores interconectados, siendo el primero llamado "regenerador" y el segundo llamado "combustor". En el primero de ellos suceden reacciones de oxidación del material "acarreador" de oxígeno, en este caso el óxido metálico natural conocido como ilmenita, y en el segundo se lleva a cabo la combustión de syngas ($\text{CO} + \text{H}_2$) en ausencia de aire. En la combustión en ciclos químicos, el acarreador proporciona el oxígeno para la combustión que se lleva a cabo en el combustor; el acarreador reducido se transfiere al regenerador donde vuelve a oxidarse en presencia de aire, completando así el ciclo. Esta técnica produce como gases de combustión CO_2 y H_2O que salen del combustor, posteriormente se les puede separar fácilmente y el CO_2 se envía a procesos productivos corriente abajo, evitando descargarlo a la atmósfera como "gas de efecto invernadero". Estructuralmente, el proceso de combustión en ciclos químicos consiste de dos reactores de lecho fluidizado interconectados. El regenerador funciona en régimen de arrastre de partículas o "elevador", y el combustor funciona en régimen de burbujeo. El interés de conocer y modelar este proceso se basa en que representa una alternativa factible para la separación inherente del CO_2 ; es decir, sin costos adicionales; lo que evita emitirlo como sucede en la combustión convencional. Debido a que la transferencia de masa se lleva en conjunto con el movimiento de partículas, tanto sólidas como gaseosas, en este proyecto se enfocó al modelado detallado del movimiento de las partículas, mediante dinámica de fluidos computacional usando el software comercial Ansys Workbench®. Se inició con el diseño geométrico del sistema usando el paquete *Desig Modeler* de Ansys Workbench®, las dimensiones se tomaron en base a trabajos previamente reportados en la literatura, y se realizaron algunas simulaciones con el paquete *Fluent* de Ansys Workbench®, a fin de conocer los patrones de movimiento que siguen las partículas. Previo al estudio del sistema con reacciones químicas se analizó el efecto del diámetro de partícula sobre la distribución de éstas dentro del sistema de reactores. Se analizaron diámetros de 80 μm , 120 μm , 150 μm , 180 μm , 220 μm y 270 μm , los resultados muestran que el diámetro de la partícula es una variable determinante, de este estudio se observó que el comportamiento más adecuado dentro del sistema de combustión en ciclos químicos (CLC, por sus siglas en inglés) es el mostrado por las partículas de 150 μm de diámetro. En seguida, se incorporaron las reacciones de oxidación y reducción, incluyendo también al balance de energía, simulando el sistema no isotérmico y realizando el análisis energético integral del proceso de combustión en ciclos químicos. Los resultados mostraron una baja conversión de los gases combustibles.

Palabras clave: *Balances de masa, balance de energía, cero emisiones de CO_2 , combustión en ciclos químicos, gas de síntesis.*

Abstract

In this work, the foundations were proposed to carry out the numerical simulation of the combustion process in chemical looping cycles, using computational fluid dynamics. This process consists of two interconnected reactors: the first one is called the "air reactor" and the second one is called the "fuel reactor." In the regenerator, oxidation reactions of the oxygen carrier material take place, which in this case is the natural metal oxide known as ilmenite, while in the combustor, the combustion of syngas ($\text{CO} + \text{H}_2$) occurs in the absence of air. In chemical looping combustion, the carrier provides the oxygen necessary for combustion in the combustor; the reduced carrier is then transferred to the regenerator, where it is re-oxidized in the presence of air, thus completing the cycle. This technique produces combustion gases such as CO_2 and H_2O that exit the combustor and can be easily separated. The CO_2 is then directed to downstream production processes, preventing its release into the atmosphere as a greenhouse gas.

Structurally, the chemical looping combustion process consists of two interconnected fluidized bed reactors. The regenerator operates in a particle entrainment regime, or "riser," while the combustor operates in a bubbling regime. The interest in understanding and modeling this process lies in the fact that it represents a feasible alternative for the inherent separation of CO_2 —i.e., without additional costs—avoiding emissions as occurs in conventional combustion.

Since mass transfer occurs alongside the movement of both solid and gaseous particles, this project focused on the detailed modeling of particle movement through computational fluid dynamics simulation. The process began with the geometric design of the system, based on reports from the literature, and several simulations were carried out to understand the particle movement patterns. Before studying the system with chemical reactions, the effect of particle diameter on particle distribution within the reactor system was analyzed. Particle diameters of 80 μm , 120 μm , 150 μm , 180 μm , 220 μm , and 270 μm were examined. The results showed that particle diameter is a determining variable, and the most favorable behavior within the CLC system was observed with particles of 150 μm diameter. Subsequently, oxidation and reduction reactions were incorporated, along with the energy balance, simulating the non-isothermal system and conducting an integral energy analysis of the chemical looping combustion process.

Keywords: Mass balances, energy balance, zero CO_2 emissions, chemical looping combustion, syngas.

Glosario

Balance de energía

Ecuación que describe la conservación de energía en un sistema de flujo.

Balance de masa

Ecuación que describe la conservación de la masa en un sistema de flujo.

CFD

Dinámica de Fluidos Computacional, herramienta numérica para analizar el flujo de fluidos y transferencia de calor.

CLC

Combustión en ciclos químicos, proceso que utiliza dos reactores para oxidar y reducir un material acarreador de oxígeno.

Combustor

Reactor donde ocurre la combustión del gas de síntesis en ausencia de aire.

Ecuaciones de conservación

Conjunto de ecuaciones matemáticas que describen la conservación de masa, cantidad de movimiento y energía.

Especies químicas

Componentes individuales involucrados en reacciones dentro de los reactores.

Ilmenita

Óxido metálico natural utilizado como acarreador de oxígeno en el proceso CLC.

Mallado

División del dominio computacional en pequeños volúmenes de control para resolver ecuaciones de flujo.

Mallado adaptativo

Proceso que ajusta la malla computacional para mejorar la precisión en zonas críticas.

Modelo Euleriano

Modelo multifásico utilizado en CFD para resolver ecuaciones de continuidad y transporte en cada fase.

Modelo Lagrangiano

Modelo multifásico que rastrea el movimiento de partículas discretas dentro del dominio fluido.

Oxidación

Reacción química donde un compuesto gana oxígeno.

Post-procesamiento

Etapas finales en CFD donde se analizan y visualizan los resultados simulados.

Pre-procesamiento

Fase inicial en CFD donde se definen la geometría, el mallado y las condiciones de frontera.

Reducción

Reacción química donde un compuesto pierde oxígeno.

Regenerador

Reactor donde el acarreador de oxígeno es re-oxidado en presencia de aire.

Simulación no isotérmica

Modelo donde se considera el intercambio de calor durante las reacciones químicas.

Turbulencia k- ϵ

Modelo de turbulencia basado en dos ecuaciones para la energía cinética de turbulencia y su tasa de disipación.

Volumen de control

Elemento diferencial donde se integran las ecuaciones de conservación para resolver el flujo de fluidos.

Contenido

1. INTRODUCCIÓN	1
1.1. ANTECEDENTES	1
1.1.1. Cambio Climático.....	1
1.1.2. Reducción de emisiones de CO ₂	3
1.1.3. Combustión en Ciclos Químicos.....	4
1.1.4. Simulación computacional de la dinámica de fluidos	5
1.2. JUSTIFICACIÓN.....	8
1.3. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA.....	8
1.4. HIPÓTESIS	9
1.5. OBJETIVOS	9
1.5.1. Objetivo General.....	9
1.5.2. Objetivos Particulares.....	9
2. MARCO TEÓRICO	11
2.1 UNIDAD DE COMBUSTIÓN EN CICLOS QUÍMICOS.....	11
2.1.1. Impacto y metas del proceso	13
2.1.2. Breve revisión a las reacciones químicas	14
2.1.3. Balances de masa	16
2.1.4. Balance de Energía	17
2.1.5. Características del acarreador de oxígeno	18
2.2 Simulación CFD	19
2.3 Modelos matemáticos	22
2.3.1. Modelos Multifásicos.....	23
2.3.2. Ecuación de continuidad	24
2.3.3. Ecuación de conservación de cantidad de movimiento	24
2.3.4. Ecuación de conservación de energía	25
2.3.5. Modelo de turbulencia $k-\epsilon$ estándar.....	25
2.3.6 Modelo de transporte de especies químicas.....	26
2.3.7 Modelos para las propiedades granulares.....	26
2.3.8 Modelos para las interacciones entre las fases.....	30

2.4. Solución numérica de las ecuaciones gobernantes.....	31
III. METODOLOGÍA.....	33
3.1. Etapa 1	34
3.1.1. Definición de los modelos matemáticos	34
3.1.2. Análisis de grados de libertad	36
3.1.3. Cálculo de Grados de Libertad en el Regenerador	38
3.1.4. Cálculo de Grados de Libertad en el Combustor.....	39
3.1.5. Propuesta de la geometría.....	39
3.1.6. Desarrollo de la malla.....	40
3.2. Etapa 2	46
3.3. Etapa 3.....	49
3.4. Etapa 4.....	49
IV.RESULTADOS Y DISCUSIÓN	51
4.1. Resultados de la calibración de los sub-modelos para las interacciones entre las fases.	51
4.2 Resultados del efecto del tamaño de partícula sobre la fluidodinámica dentro del sistema CLC.....	52
4.2.1 Distribución de partículas y del perfil de velocidad axial promedio para los diferentes diámetros.....	54
4.2.2 Perfiles de temperatura en las salidas del separador ciclón y del combustor para partículas de diferentes tamaños.....	60
4.3 Resultados de la simulación con reacción heterogénea	62
4.4 Resultados de las simulaciones con las modificaciones en las condiciones de frontera de temperatura y de velocidad de entrada de la fase gas.....	69
5. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES.....	71
5.1. Conclusiones	71
5.2. Recomendaciones para trabajo a futuro	71
REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	73

Índice de Tablas

- Tabla 2.1.** Resumen de procesos de combustión en ciclos químicos.
- Tabla 2.2.** Calor estándar de reacción para distintos acarreadores de oxígeno.
- Tabla 3.1.** Parámetros cinéticos.
- Tabla 3.2.** Grados de libertad en el regenerador.
- Tabla 3.3.** Grados de Libertad en el combustor.
- Tabla 3.4.** Parámetros de las diferentes mallas.
- Tabla 3.5.** Condiciones de frontera para el caso 1.
- Tabla 3.6.** Propiedades físicas de las partículas.
- Tabla 3.7.** Modelos para las propiedades granulares.
- Tabla 3.8.** Modelos para las interacciones entre las fases.
- Tabla 3.9.** Condiciones de frontera y de operación.

Índice de Figuras

- Figura 1.1.** Gases de invernadero más abundantes en la atmósfera.
- Figura 1.2.** Emisiones relativas de gases de invernadero a la atmósfera.
- Figura 1.3.** Comparación de la concentración de los 2 principales gases causantes de efecto invernadero en la atmósfera.
- Figura 1.4.** Sistema de combustión en ciclos químicos.
- Figura 2.1.** Esquema de diferentes configuraciones de procesos CLC.
- Figura 2.2.** Gráfico de la constante de equilibrio para la reacción de reducción con H_2 y CO .
- Figura 2.3.** Capacidad de transporte de oxígeno RO .
- Figura 2.4.** Tipos de celdas para el mallado.
- Figura 2.5.** Volumen de control fijo en el espacio, a través del cual pasa algún fluido.
- Figura 3.1.** Metodología general.
- Figura 3.2.** Diagrama de flujo del algoritmo de solución.
- Figura 3.3.** Distribución de variables de los balances de masa y de energía.
- Figura 3.4.** Diagrama de flujo CLC.
- Figura 3.5.** Espectro de métricas de malla.
- Figura 3.6.** Condiciones de frontera para la simulación del análisis de sensibilidad de malla.

Figura 3.7. Puntos de monitoreo de variables en el análisis de sensibilidad de malla.

Figura 3.8. Valor de la velocidad en el punto de monitoreo.

Figura 3.9. Valor de la presión en los puntos de monitoreo.

Figura 3.10. a) discretización de la geometría, b) contorno de fracción de volumen de ilmenita inicial y condiciones de frontera.

Figura 4.1. Contorno de fracción de volumen de ilmenita.

Figura 4.2. Contornos de fracción de volumen de ilmenita con diferentes diámetros de partículas.

Figura 4.3. Contornos transversales de fracción de volumen de ilmenita a 30 segundos del arranque, en la sección transversal a 0.1 m del fondo del regenerador.

Figura 4.4. Distribución de partículas a 0.5 m de altura en el regenerador.

Figura 4.5. Perfiles de velocidad a 0.5 m de altura en el regenerador.

Figura 4.6. Distribución de sólidos a 0.8 m de altura en el regenerador.

Figura 4.7. Perfiles de velocidad a 0.8 m de altura en el regenerador.

Figura 4.8. Distribución de sólidos a 1.5 m de altura en el regenerador.

Figura 4.9. Perfiles de velocidad a 1.5 m de altura en el regenerador.

Figura 4.10. Perfiles de distribución de partículas en el combustor.

Figura 4.11. Perfiles de velocidad de la fase granular a lo largo del combustor.

Figura 4.12. Perfiles de temperatura a la salida del ciclón.

Figura 4.13. Perfiles de temperatura a la salida del combustor.

Figura 4.14. Contornos de la velocidad de reacción.

Figura 4.15. Contorno del calor de reacción.

Figura 4.16. Contornos de temperatura.

Figura 4.17. Perfiles de temperatura en las salidas del ciclón y combustor.

Figura 4.18. Gráficos de perfiles de concentración.

Figura 4.19. Flujo másico de sólidos.

Figura 4.20. Relación de masa sólido-gas.

Figura 4.21. Porcentajes de conversión de H_2 y CO para el caso 1.

Figura 4.22. Gráfica de porcentaje de conversión para los casos 2, 3 y 4.

Tabla de Símbolos

Símbolo	Descripción	Unidades
α_q	Fracción de volumen de la fase	Adimensional
ρ_q	Densidad de la fase	kg/m ³
$\vec{v}_q$	Vector de velocidad de la fase	m/s
m_{pq}	Tasa de transferencia de masa de la fase a la fase	kg/s
S_q	Término fuente de masa	kg/s
P	Presión compartida entre fases	Pa
τ_q	Tensor de esfuerzo de la fase	Pa
μ_q	Viscosidad de corte de la fase	Pa·s
λ_q	Viscosidad volumétrica de la fase	Pa·s
g	Aceleración gravitacional	m/s ²
h_q	Entalpía específica de la fase	J/kg
$\vec{q}$	Flujo de calor	W/m ²
G_k	Generación de energía cinética turbulenta	m ² /s ³
G_b	Generación de energía cinética turbulenta por flotabilidad	m ² /s ³
e_{ss}	Coeficiente de restitución en colisiones de partículas	Adimensional
θ_s	Temperatura granular de la fase sólida	m ² /s ²
g_0	Función de distribución radial	Adimensional
d_s	Diámetro de partícula de la fase sólida	m
$F_{td,q}$	Fuerza de dispersión turbulenta para la fase	N
C_D	Coeficiente de arrastre	Adimensional
Re_s	Número de Reynolds de la fase sólida	Adimensional
σ_{pq}	Número de Prandtl de dispersión	Adimensional
C_{TD}	Constante de dispersión turbulenta	Adimensional
ϕ	Ángulo de fricción interna	Grados
I_{2D}	Segundo invariante del tensor de esfuerzo desviador	Adimensional
G	Módulo de elasticidad del material granular	Pa

1. INTRODUCCIÓN

1.1. ANTECEDENTES

1.1.1. Cambio Climático

El cambio climático es un fenómeno reconocido desde hace algunas décadas, cuyo impacto más negativo es que puede modificar la biodiversidad en la tierra (Gitay, 2002). Entre las causas identificadas de este fenómeno en los últimos 50 años, se encuentran la emisión de gases de combustión y de otras actividades, emitidos sin cuidado a la atmósfera (Smithson, 2001). En 2017 el calentamiento global inducido por el hombre alcanzó aproximadamente 1°C por encima de los niveles de los años preindustriales (1850-1900), habiendo aumentado la temperatura del planeta 0.2°C por década (Masson-Delmotte, y otros, 2018). Los principales gases que provocan el denominado efecto invernadero son H_2O , CO_2 , CH_4 , NO_2 , CFC y SF_6 (Masson-Delmotte, y otros, 2018). La contribución al efecto invernadero de los diferentes gases está relacionada a su potencial (Figura 1.1a), su longevidad (Figura 1.1b), y su concentración en la atmósfera en un momento dado.

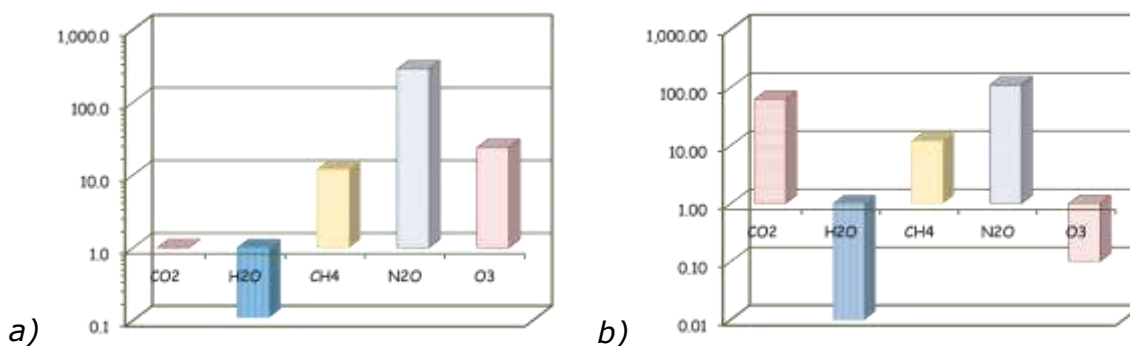


Figura 1.1. Gases de invernadero más abundantes en la atmósfera.
a) Potencial y b) longevidad, tomando como referencia al CO_2 .

En este sentido, se considera al CO_2 el gas que produce la mayor contribución al efecto invernadero, como consecuencia de dos factores: El primero es que, exceptuando al vapor de agua, el CO_2 representa las mayores emisiones de todas las emisiones antropogénicas a nivel mundial (Figura 1.2), con valores porcentuales de hasta el 75%. El segundo es su longevidad en la atmósfera,

estimada en alrededor de 12 años; sin embargo, se estima que sus consecuencias pueden durar más tiempo (Archer & Jacobson, 2005).

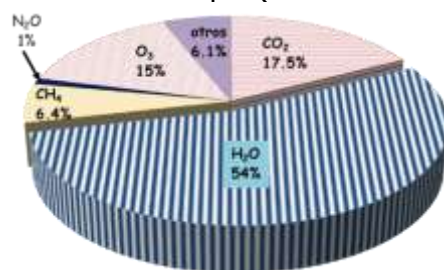


Figura 1.2. Emisiones relativas de gases de invernadero a la atmósfera.

Ahora bien, si se considera al óxido nitroso N₂O, se puede notar una molécula de éste causa tanto efecto invernadero como 292 de CO₂, y dura en la atmósfera más de 90 años, entonces este gas está por volverse un problema mayor, en términos de cambio climático antropomórfico, pues como puede notarse, está aumentando considerablemente su presencia en la atmósfera (Figura 1.3). La producción de óxido nitroso se da por la reacción entre el oxígeno y el nitrógeno atmosféricos (Ecuación 1.1), a temperaturas superiores a 876° C, como las que se alcanzan en las grandes carboeléctricas y termoeléctricas generadoras de energía eléctrica.

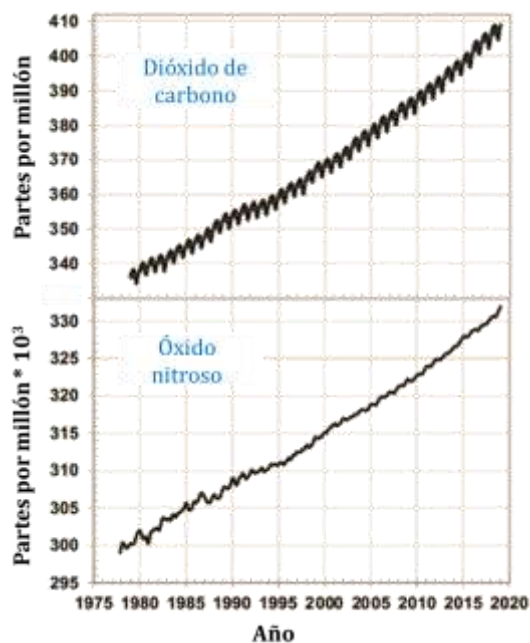


Figura 1.3. Comparación de la concentración de los 2 principales gases causantes de efecto invernadero en la atmósfera: a) CO₂ y b) N₂O (Adaptado de U.S. National Oceanic and Atmospheric Administration, 2020).



Por lo tanto, se acepta que es necesario reducir las emisiones de gases de efecto invernadero en general, lo antes posible. En 1997, las naciones que participan en la Convención Marco de las Naciones Unidas sobre el Cambio Climático redactaron el acuerdo histórico conocido como el Protocolo de Kyoto (Breidenich, Magraw, Rowley, & Rubin, 1998); el cual fue ratificado en 2005. Sus disposiciones incluyen la reducción media del 5.2% de las emisiones de gases de efecto invernadero de los 39 países más desarrollados, para el periodo 2008-2012, tomando como comparación los niveles de 1990.

1.1.2. Reducción de emisiones de CO₂

Hasta ahora, las opciones tecnológicas para reducir las emisiones totales de CO₂ a la atmósfera se han centrado en (Rubin & De Coninck, 2005): a) disminuir el gasto y consumo de energía, al aumentar la eficiencia en la utilización de la misma; b) cambiar a combustibles menos intensivos en carbono; c) aumentar el uso de fuentes de energía renovables (biocombustibles, energía eólica, etc.) o energía nuclear, y d) capturar el CO₂ al mejorar la capacidad de absorción biológica en bosques y suelos. Está claro que ninguna opción tecnológica, por sí sola, puede lograr las reducciones de emisiones necesarias. Incluso, los esfuerzos adicionales de todas las soluciones anteriores probablemente no permitirán alcanzar los niveles deseados de emisiones de CO₂.

Debe considerarse que las emisiones por combustión de energías de energéticos fósiles (gas, petróleo y carbón), energéticos que cubrirán más del 80% de la demanda de energía durante la primera parte del siglo XXI, aún no están listas para ser sustituidas por fuentes renovables, en el futuro cercano (Nakicenovic, 2007). Según el análisis realizado por el Grupo Intergubernamental de Expertos sobre el Cambio Climático (IPCC por sus siglas en inglés) y la Agencia Internacional de Energía (AIE por siglas en inglés) (Rubin & De Coninck, 2005) (International Energy Agency, 2006), la reducción del 19% del nivel actual de emisiones de CO₂ podría en este siglo estabilizar el cambio climático a un costo razonable. Por lo tanto, el desarrollo de tecnologías, tanto de captura como de no emisión de CO₂, es esencial para la producción de energía limpia a partir de combustibles fósiles, tanto para garantizar un papel de consumo continuo de

estos combustibles, en particular el carbón, como para reducir las emisiones globales de CO₂ (Agency, 2008).

1.1.3. Combustión en Ciclos Químicos

La unidad de combustión en ciclos químicos, o CLC por sus siglas en inglés: “*Chemical Looping Combustion*” (Figura 1.4), se sugirió entre las mejores alternativas para reducir el costo económico de la captura de CO₂ (Kerr, 2005). Además, el IPCC en su informe especial sobre la captura y almacenamiento de dióxido de carbono identificó a la combustión en ciclos químicos como una de las tecnologías más baratas para la captura de CO₂. Más tarde, el proyecto de la UE “Captura mejorada de CO₂” centró la investigación en el desarrollo de procesos de precombustión y oxidación rentables para la captura de CO₂, incluida la combustión en ciclos químicos (Ekström, y otros, 2009). Tomado como referencia una planta de energía alimentada con combustible pulverizado sin captura de CO₂ y utilizando carbón bituminoso como combustible, el aumento en el costo de generación de electricidad para una planta con combustión en ciclos químicos fue de aproximadamente 12%-22%. Este incremento en el costo de la electricidad fue más bajo que el calculado para otras tecnologías que incluyan procesos para captura y separación de CO₂. Además, si también se considera el impacto ambiental, la combustión en ciclos químicos produce menor impacto que cualquier otra opción que capture y separe al CO₂ (Petrakopoulou, Boyano, Cabrera, & Tsatsaronis, 2011).

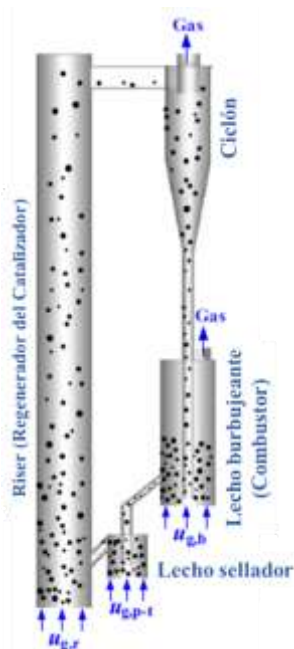


Figura 1.4. Sistema de combustión en ciclos químicos (Guan y col., 2014).

El principal inconveniente atribuido a la CLC es el bajo nivel de confianza, a consecuencia de su falta de madurez de la tecnología. Al considerar que esta es una tecnología emergente, se nota como un gran campo de oportunidad para estudiar la combustión en ciclos químicos, como lo es la simulación matemática, que puede brindar información muy valiosa para entender los fenómenos que ahí suceden y ayude a tomar decisiones que den solución a las diversas problemáticas.

1.1.4. Simulación computacional de la dinámica de fluidos

El modelado del flujo de fluidos por computadora es una herramienta muy útil, dado que permite recrear las condiciones que se tienen en planta, con la ventaja de no gastar en equipos para realizar experimentación, no se pone en riesgo la continuidad de un proceso y tampoco se ponen en riesgo recursos humanos. Esta técnica se ha ido perfeccionando con los años, pues con el uso de equipos computacionales cada vez más potentes se han podido hacer cálculos más robustos, lo que conlleva a mejores aproximaciones. En lo que compete a la simulación matemática de CLC, son pocos los trabajos que se han realizado; sin embargo la creciente utilización de softwares especializados en la simulación del flujo de fluidos es un indicativo de las grandes ventajas de usar estas técnicas y además de lo confiable que son los resultados que se obtienen.

Se puede considerar que el modelado de reactores de lecho fluidizado consiste de tres campos principales estrechamente interconectados:

- Dinámica de fluidos. Describe el tipo de contacto entre los gases que reaccionan y las partículas sólidas, así como su movimiento relativo y con respecto de las fronteras fijas de sus contenedores (reactores y tuberías).
- Esquemas de reacción y cinética química. Considera las reacciones independientes con las que se describen los cambios químicos que ocurren en los reactores, teniendo en cuenta la cinética de cada reacción.
- Equilibrio térmico. Es necesario para conocer la distribución de temperaturas en los reactores y el flujo de calor que se debe intercambiar con los reactores (Adanez, Abad, García-Labiano, Gayan, & Luis, 2012).

Hasta 2012 se habían realizado pocas simulaciones computacionales, incluyendo los 3 campos mencionados (CFD), de una unidad CLC completa, debido a las

complejidades de la geometría, la física del flujo, y la consideración de las múltiples reacciones químicas; lo que requiere gran esfuerzo computacional. Sin embargo, con la mejora de los métodos numéricos y las tecnologías de hardware, el uso de códigos CFD es cada vez más asequible. Recientemente se presentaron modelos CFD para lecho fluidizado burbujeante a escala comercial, tales como (Blaser & Chandran, 2009) y (Snider & Clark, Eulerian-lagrangian method for three dimensional thermal reacting flow-an example of a syngas gasifier, 2009). La dinámica de fluidos en modelo de flujo en frío a pequeña escala, se ha modelado con éxito para el circuito CLC completo, es decir, el regenerador, el ciclón y el combustor, utilizando códigos CFD (Snider, Guenther, Dalton, & Williams, 2010), (Shuai, y otros, 2011). La mayoría de los modelos CFD se han desarrollado para reactores en modo discontinuo, sin circulación de sólidos, o para sistemas CLC a pequeña escala. Se han realizado importantes avances en la validación de los modelos CFD con resultados experimentales obtenidos en instalaciones a pequeña escala que utilizan combustibles gaseosos (Mahalatkar K., Kuhlman, Huckaby, & O'brien, 2011) (Mahalatkar, Kuhlman, & Huckaby, 2011) o carbón (Mahalatkar, O'Brien, & Huckaby, 2010). Hasta 2012, el modelado más completo de un sistema CLC que utiliza códigos CFD fue la simulación de un lecho fluidizado burbujeante para combustor de metano acoplado a un regenerador que usa acarreadores de oxígeno Mn o Ni (Cloete, Johanse, & Amini, 2010) (Kruggel-Emden, Rickelt, Stepanek, & Munjiza, 2010).

En 2014 Guan et al. (Guan, Chang, Zhang, Wang, & Sun, 2014) establecieron el modelo hidrodinámico CLC, basado en el modelo multifásico euleriano con la teoría cinética del flujo granular. Se predijo la hidrodinámica detallada en el lecho fluidizado circulante de manera tridimensional (compuesto por tubo ascendente, lecho burbujeante, sello y ciclón). Los resultados cualitativos y cuantitativos indicaron que el modelo de arrastre considerado afectó significativamente al comportamiento del flujo. El elevador y el lecho burbujeante fueron operados individualmente en regiones de fluidización rápidas y burbujeantes. Las tres regiones distintas identificadas desde la parte inferior hasta la parte superior del elevador fueron: región de entrada, región a granel y región de salida. La fracción de volumen de sólidos fue mayor en la región cercana a la pared, pero menor en la región central tanto para el lecho ascendente como para el lecho burbujeante. Las características acopladas del lecho fluidizado se identifican predominantemente por el fuerte efecto de la

velocidad operativa del gas en el elevador sobre la hidrodinámica en el lecho burbujeante.

Posteriormente, Peng y cols., (Peng, y otros, 2015) estudiaron la tasa de circulación de sólidos en un sistema CLC, debido a **que** es un parámetro clave que determina el diseño, las condiciones de operación y la eficiencia general del sistema. En su trabajo, el flujo de gas de un modelo de flujo CLC fue simulado mediante dinámica de fluidos (CFD). Los resultados mostraron que la tasa de circulación de sólidos, en diferentes ubicaciones del sistema fluctúa con el tiempo con diferente amplitud, y la variación de dicha tasa es periódicamente estable. Se encontró que el régimen de flujo sólido junto con el gas turbulento en el regenerador era el mecanismo principal que impulsaba la variación de la tasa de circulación de sólidos y determinaba la frecuencia y amplitud de dicha variación. Los cambios en las condiciones de operación indujeron directamente el cambio en la masa de sólidos que fueron arrastrados desde el regenerador y la rapidez con la que los sólidos fueron transportados al mismo. Posteriormente se propuso una correlación para describir la tasa de circulación de sólidos en función de la retención sólida y la velocidad del flujo de gas en el regenerador. El tiempo de residencia de las partículas disminuyó en una ley de potencia a medida que aumentó dicha tasa. Se obtuvieron resultados que concuerdan razonablemente entre simulaciones y experimentos en términos de distribución de sólidos, patrones de flujo de sólidos de gas y perfiles de caída de presión.

En 2017 Menon y cols. (2017) usan un modelo 2D para simular el combustor de un sistema CLC mediante el análisis del proceso general, incluidas las interacciones entre partículas, las interacciones entre partículas de fluidos, las tasas de reacción y el rendimiento del reactor. Las reacciones de gasificación tienen lugar a una velocidad más baja de lo esperado; esto puede deberse al uso de la teoría de Arrhenius para definir la cinética de reacción. Se pueden esperar mejores resultados si se definen modelos perfectos de gasificación. El modelo 2D desarrollado puede explicar el comportamiento general del sistema de manera justificable. Cuando no se incluyen las cenizas, los resultados obtenidos están de acuerdo con el análisis termodinámico en el que el CuO muestra rendimiento superior que el portador mixto y el Fe_2O_3 . Pero, cuando se incluye la ceniza, el portador mixto exhibió un mejor rendimiento en comparación con el CuO y Fe_2O_3 solo. Se ha estudiado el efecto de la temperatura en el sistema y la variación en la concentración a lo largo del

reactor. Los estudios también revelan que si se requiere un rendimiento estable a pesar del cambio de temperatura, el Fe_2O_3 es más preferible que el portador mixto y el CuO . Las tasas de conversión del carbón también se estiman utilizando H_2O y N_2 como agente oxidante en lugar de H_2O y CO_2 .

1.2. JUSTIFICACIÓN

La concentración de dióxido de carbono en la atmósfera ha aumentado considerablemente en las últimas décadas como resultado de la dependencia de los combustibles fósiles para la producción de energía. La concentración atmosférica global de CO_2 aumentó de un valor preindustrial de aproximadamente 280 ppm a 390 ppm en 2010 (Pieter & Keeling, 2009). Para asegurar que el aumento en la temperatura promedio sea inferior a 2°C (que se considera el límite para evitar los cambios más catastróficos en el planeta), las concentraciones de CO_2 no deben exceder 450 ppm. Esto significa que la concentración atmosférica de CO_2 no debe aumentar más del 15% sobre las concentraciones actuales. En las últimas décadas, numerosos proyectos de investigación se han propuesto desarrollar procesos que permitan aprovechar combustibles, inclusive fósiles, sin que existan emisiones de CO_2 descargándose a la atmósfera. Hoy en día la combustión en ciclos químicos (CLC) es una alternativa importante y muy estudiada, y que se presenta como opción viable para reducir estas emisiones de CO_2 . Sin embargo, aún queda trabajo por hacer para efficientar el proceso al minimizar los costos energéticos de su propia operación.

Una técnica que ha sido poco explotada en esta área es la dinámica de fluidos computacional (CFD), y es por ello que este proyecto pretende analizar al proceso CLC mediante CFD, esperando con ello aportar información relevante de la distribución y dinámica de los fluidos, así como de la distribución de los gradientes térmicos, para que en un futuro cercano el proceso CLC pueda ser usado de manera eficiente, aprovechando la ventaja de que no se requiere capturar ni almacenar al CO_2 producido.

1.3. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

A fin de identificar los flujos de calor que puedan ser recuperados de las unidades de combustión en ciclos químicos, aumentando así su eficiencia energética, se requiere realizar su análisis energético integral. Una manera aproximada de llevar a cabo este análisis es usando un software comercial que simule la

dinámica del movimiento de las partículas mediante la solución de los balances de masa, energía y cantidad de movimiento en ambos lechos fluidizados, el combustor y el regenerador.

1.4. HIPÓTESIS

Al analizar a detalle la cantidad de movimiento de un conjunto representativo de las partículas sólidas y gaseosas que participan en cada uno de los reactores de combustión en ciclos químicos, será posible evaluar las cantidades de energía generadas tanto por la oxidación del combustible dentro del combustor como por la oxidación del acarreador de oxígeno (ilmenita) en el regenerador, que podrían recuperarse de forma que mejoren la eficiencia energética de este proceso.

1.5. OBJETIVOS

1.5.1. Objetivo General

Desarrollar un análisis energético integral, mediante el uso de la dinámica de fluidos computacional, para modelar a detalle el movimiento de partículas sólidas y gaseosas dentro de los reactores que conforman el proceso de combustión en ciclos químicos de gas de síntesis, a fin de aumentar su eficiencia energética.

1.5.2. Objetivos Particulares

- Analizar los grados de libertad en el Regenerador y el Combustor, identificando los datos independientes que deben proporcionarse para simularlos.
- Construir los balances detallados de momentum, energía y masa para los reactores del proceso de combustión en ciclos químicos, considerando la presencia de las reacciones químicas en cada uno de estos reactores.
- Generar los modelos virtuales, por medio de un software de dibujo asistido por computadora, y discretizarlos en pequeños elementos de volumen finito (creación de la malla) haciendo uso de un software dedicado especialmente a la creación de dichas mallas.
- Calibrar la simulación en comportamiento isotérmico y sin reacción química usando ANSYS.
- Complementar la simulación para comportamiento no isotérmico y con reacción química.

- Simular regiones de operación y escenarios probables de operación que mejoren el rendimiento de las reacciones dentro del proceso de combustión en ciclos químicos usando gas de síntesis como combustible.
- Analizar los resultados en busca de la mejora en la eficiencia energética integral del proceso.

2. MARCO TEÓRICO

2.1 UNIDAD DE COMBUSTIÓN EN CICLOS QUÍMICOS

El proceso de combustión en ciclos químicos (CLC, por sus siglas en inglés) es un sistema que emplea dos lechos fluidizados interconectados (combustor y regenerador). Dentro del combustor se llevan a cabo las reacciones de oxidación del gas de síntesis (que funge como el combustible), usando partículas de ilmenita como medio "acarreador de oxígeno" y catalizador metálico para la oxidación. En el regenerador, suceden las reacciones de regeneración del acarreador de oxígeno, es decir, la oxidación de la ilmenita que fue reducida en el combustor. En CLC se emplea un óxido metálico como material que acarrea el oxígeno para la combustión, desde el regenerador hasta el combustor. Una vez que aporta el oxígeno para la combustión en el combustor, el acarreador reducido se dirige al regenerador, en donde se vuelve a oxidar en presencia de aire; el ciclo del acarreador se completa al enviarse nuevamente al combustor para aportar de nuevo el oxígeno para la combustión. La gran ventaja de este proceso es que se evita el contacto entre los gases de combustión y los del aire y con ello facilita la captura del dióxido de carbono proveniente de la combustión. El objetivo final de la sistema de combustión en ciclos químicos es llevar a cabo la combustión del gas de síntesis (o cualquier otro combustible), aprovechar la energía generada por las reacciones exotérmicas y generar una corriente de gases de combustión pura (sin mezclarse con el aire), facilitando la separación del CO_2 del vapor de agua y evitando descargarlo a la atmósfera. La Tabla 2.1 muestra un resumen de los diferentes procesos de combustión en ciclos químicos propuestos en la literatura.

El acarreador sólido empobrecido en oxígeno debe ser regenerado por oxígeno del aire. En general, estos procesos se conocen con el término "Combustión en ciclo químico" (CLC, por sus siglas en inglés). En un proceso CLC se pueden utilizar materiales gaseosos o partículas sólidas como combustibles, para el caso de combustibles gaseosos, el acarreador de oxígeno reacciona directamente con el combustible que puede ser: gas natural, gas de refinería, gas de síntesis u otros.

En general el proceso CLC puede llevarse a cabo según las configuraciones de la Figura 2.1, (a) dos reactores interconectados de lecho fluidizado o en

movimiento; (b) reactores alternos empaquetados o de lecho fluidizado; o (c) un reactor rotativo.

Tabla 2.1. Resumen de procesos de combustión en ciclos químicos.

Propósito	Combustible	Proceso	Características
Combustión	Gas	CLC	-Combustión de combustible gaseoso con acarreadores de oxígeno.
Combustión	Sólido	Syngas – CLC	-Gasificación previa del combustible sólido. -Requerimiento de oxígeno para gasificación.
Combustión	Sólido	iG – CLC	-Gasificación del combustible dentro del combustor. -Son deseables acarreadores de O_2 de bajo costo.
Combustión	Sólido	CLAU	-Utiliza acarreadores de oxígeno con propiedades de liberación de O_2 . -Conversión rápida del combustible sólido.

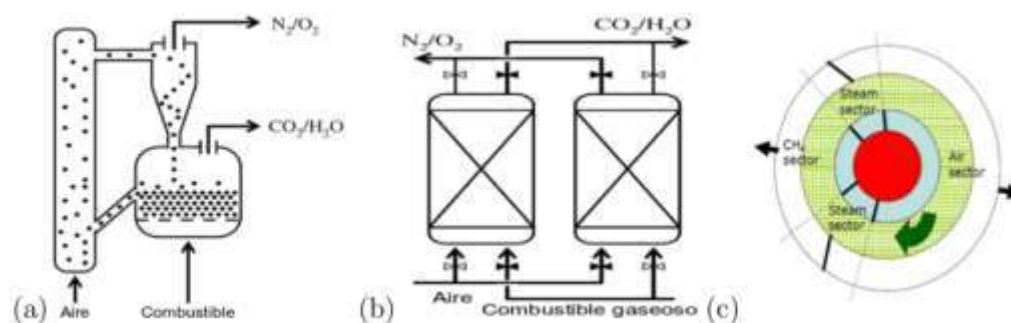


Figura 2.1. Esquema de diferentes configuraciones de procesos CLC.

Actualmente la mayoría de los procesos CLC existentes usan la configuración compuesta por dos reactores de lecho fluidizado interconectados. Además, se deben usar dos dispositivos de sellado en el ciclo para evitar fugas de gas entre los reactores y retroflujos.

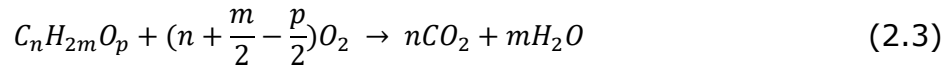
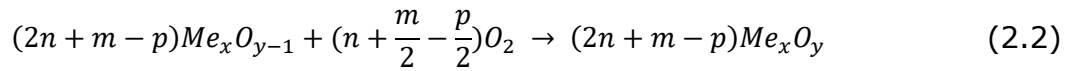
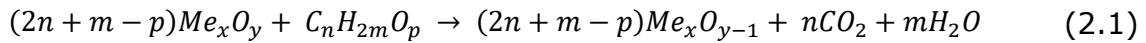
Los primeros diseños que se desarrollaron para la combustión de gases en ausencia de aire fueron a presión atmosférica, sin embargo se han realizado

varios trabajos para estudiar el diseño más apropiado del sistema. En 2001 Lyngfelt y cols. (Lyngfelt, Leckner, & Mattisson, A fluidized-bed combustion process with inherent CO₂ separation; application of chemical-looping combustion, 2001) propusieron un diseño basado en el principio de lecho fluidizado circulante (CFB, por sus siglas en inglés). Este diseño ofrece múltiples beneficios en comparación con otras opciones, dado que el proceso demanda una interacción efectiva entre el gas y las partículas sólidas, además de un movimiento continuo de material entre el combustor y el regenerador. Otros trabajos (Kronberger, y otros, 2004) (Kronberger & Lyngfelt, 2005) (Kolbitsch, Pröll, Bolhar-Nordenkamp, & Hofbauer, 2009) (Johansson, Lyngfelt, Mattisson, & Johnsson, 2003) demostraron que el CLC puede realizarse en diversas configuraciones, generalmente formadas por un elevador por arrastre o “*riser*” de alta velocidad y un lecho fluidizado burbujeante de baja velocidad, que funcionan como regenerador y combustor, respectivamente. La preferencia por este tipo de configuración se basa en las reactividades del acarreador de oxígeno (Lyngfelt & Thunman, 2005) (Ryu, Jin, & Yi, 2005) considerando que la mayoría de los acarreadores de oxígeno exigen un mayor tiempo de residencia de las partículas para la reacción de reducción que para la oxidación. El *riser* debe cumplir dos objetivos: dar la fuerza motriz para la circulación del material sólido y proporcionar oxígeno suficiente al acarreador para la oxidación combustible en el combustor. Otros autores han analizado el funcionamiento de ambos reactores en el régimen de lecho fluidizado burbujeante. (Adánez, y otros, 2006) (Ryu, Jo, Park, Bae, & Kim, 2010).

2.1.1. Impacto y metas del proceso

Como se mencionó anteriormente el proceso CLC se basa en el transporte de oxígeno del aire al combustible por medio de un acarreador de oxígeno sólido que evita el contacto directo entre el combustible y el aire. Como primer paso, el combustible se oxida a CO₂ y H₂O usando el oxígeno donado por un óxido metálico (Me_xO_y) que se reduce a su estado metal (Me) o alguna forma reducida (Me_xO_{y-1}). Si de manera general la composición del gas combustible puede expresarse como C_nH_{2m}O_p, entonces el proceso de reducción global viene dado por la (reacción 2.1.). El gas producido en este primer paso contiene principalmente CO₂ y H₂O. Después de la condensación y purificación del agua, se logra una corriente altamente concentrada de CO₂ lista para el transporte y el almacenamiento. Este concepto es la principal ventaja del proceso en relación con otras tecnologías de captura de CO₂. En este sentido, el CLC es un proceso

de combustión con separación inherente de CO₂, es decir, que evita la necesidad de unidades de separación de CO₂ y con una penalización menor en la energía, comparado con otras tecnologías. En un segundo paso, el metal u óxido metálico reducido se oxida con aire en el regenerador al entrar en contacto con aire, y el material regenerado está listo para comenzar un nuevo ciclo (reacción 2.2). La reacción química neta sobre los dos pasos, y por lo tanto la entalpía de combustión, es la misma que la combustión convencional donde el combustible se quema en contacto directo con el oxígeno del aire (reacción 2.3). Por lo tanto, la cantidad total de calor generado en el proceso de CLC es la misma que el de la combustión convencional (reacción 2.4); sin embargo, permite obtener una corriente de productos de combustión fácilmente separables, es decir, CO₂ y H₂O libre de N₂, de esta manera no se tiene que separar la mezcla de gases (CO₂ y N₂), lo cual representa costos elevados.



2.1.2. Breve revisión a las reacciones químicas

Identificar los compuestos sólidos capaces de transportar oxígeno en un sistema CLC es una tarea fundamental. Para que un compuesto sea considerado como acarreador de oxígeno en un sistema CLC, debe demostrar una alta capacidad para lograr una conversión eficiente del gas combustible en CO₂ y H₂O. Jerndal y cols. (Jerndal, Mattisson, & Lyngfelt, 2006) realizaron estudios de la termodinámica de diversos sistemas redox considerados factibles para CLC; encontraron óxidos de Cu, Ni, Co, Fe y Mn con termodinámica favorable para la conversión de CH₄, H₂ y CO. A temperaturas y presiones relevantes para CLC, el CH₄ no es estable termodinámicamente y podrían aparecer cantidades variables de CO₂, H₂O, CO y H₂ dependiendo del sistema redox. En la Figura 2.2 su puede observar la constante de equilibrio para la reacción de reducción con H₂ y CO con diferentes sistemas redox. Una constante de equilibrio mayor indica una mayor conversión del gas reductor. La selectividad hacia CO₂ y H₂O (que se ve afectada por la constante de equilibrio para CO y H₂, respectivamente), depende del sistema redox. Se pueden identificar tres comportamientos diferentes mediante el análisis de las constantes de equilibrio para CO y H₂ que se muestran

en la Figura 2.2. Los sistemas redox con constantes de equilibrio superiores a 10^3 muestran una conversión casi completa a CO_2 y H_2O . En una segunda categoría, se encuentran aquellos con constante de equilibrio de aproximadamente 10^2 , aquí, se pueden encontrar pequeñas cantidades de CO y H_2 que no han reaccionado. Para los sólidos de NiO, se obtiene una conversión en el rango de 99%-99.5% para H_2 y 98%-99% para CO en condiciones de equilibrio. Para el sistema CoO/Co, la termodinámica es menos favorable, obteniéndose una conversión máxima de 95%-97% para H_2 y 87%-95% para CO. El sistema redox CaSO_4 – CaS para la aplicación de CLC se ha considerado también por varios autores, pero tiene limitaciones termodinámicas similares al NiO para la conversión de H_2 y CO. Los pares Fe_3O_4 –FeO y FeO–Fe son representativos de la tercera categoría de sistemas redox, es decir, constantes de equilibrio inferiores a 10.

Por lo tanto, estos sistemas redox deben evitarse en un sistema CLC basado en la configuración de lechos fluidizados interconectados. Sin embargo, la reducción de Fe_2O_3 a sistemas FeO o Fe podría explotarse con combustión completa si se usaran configuraciones especiales del reactor de combustible, por ejemplo: con contraflujo de gas y sólidos (Fan, 2010) (Zeng, y otros, 2013). Esta configuración se ha sugerido en procesos de CLC que incluyen un paso intermedio de oxidación a Fe_3O_4 con vapor de agua para la generación de hidrógeno. No obstante en la oxidación de FeO o Fe a Fe_2O_3 con aire, normalmente se observan aglomeración de partículas en sistemas CLC (Cho, 2005).

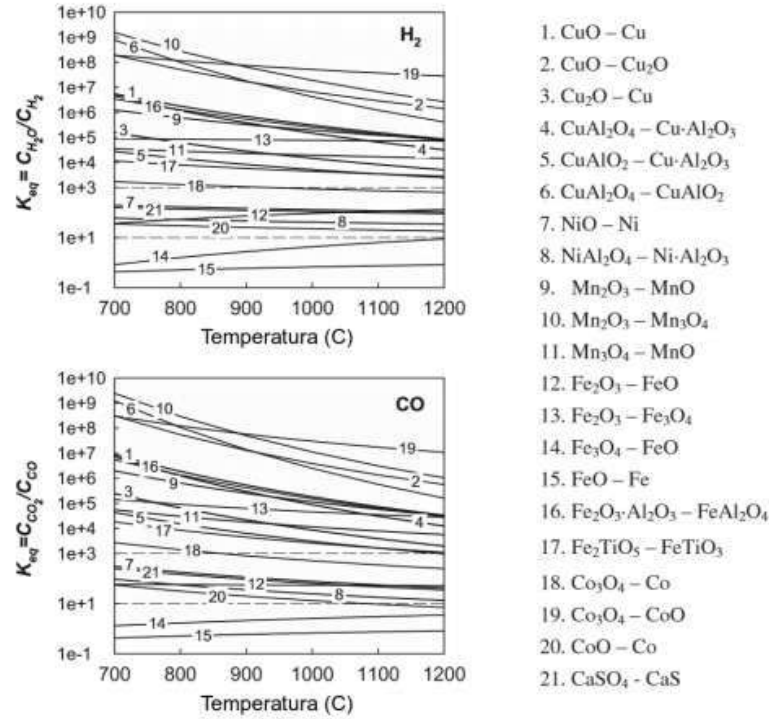


Figura 2.2. Gráfico de la constante de equilibrio para la reacción de reducción con H₂ y CO (Jerndal y col., 2006).

2.1.3. Balances de masa

El balance de masa establece la velocidad de flujo del portador de oxígeno entre el combustor y el regenerador, la cual está influenciada por el tipo de portador de oxígeno y combustible empleado. La conversión sólida del portador de oxígeno se determina por (2.5) (Ishida & Jin, 1994).

$$X_s = \frac{m - m_r}{m_o - m_r} = \frac{m - m_r}{R_{OC}m_o} \quad (2.5)$$

Donde, m es la masa instantánea y el denominador es el transporte máximo de oxígeno entre el acarreador de oxígeno totalmente oxidado (m_o) y reducido (m_r). La capacidad de transporte de oxígeno del material R_{OC} , definida por la ecuación 2.6, depende de la capacidad de transporte de oxígeno del óxido (R_o) y la fracción del compuesto activo para el transporte de oxígeno (x_{OC}).

$$R_{OC} = x_{OC}R_o \quad (2.6)$$

Debe tenerse en cuenta que los óxidos metálicos se suelen combinar con un inerte (Ishida & Jin, 1994), por lo tanto, el valor efectivo de la capacidad de transporte de oxígeno de un acarreador de oxígeno depende de la fracción de material activo para el transporte de oxígeno, x_{OC} . La capacidad de transporte de oxígeno, R_o (2.7), depende del óxido de metal y las reacciones redox consideradas. La Figura 2.3 muestra el valor de R_o para algunos sistemas redox de interés.

$$R_o = \frac{m_o - m_r}{m_o} \quad (2.7)$$

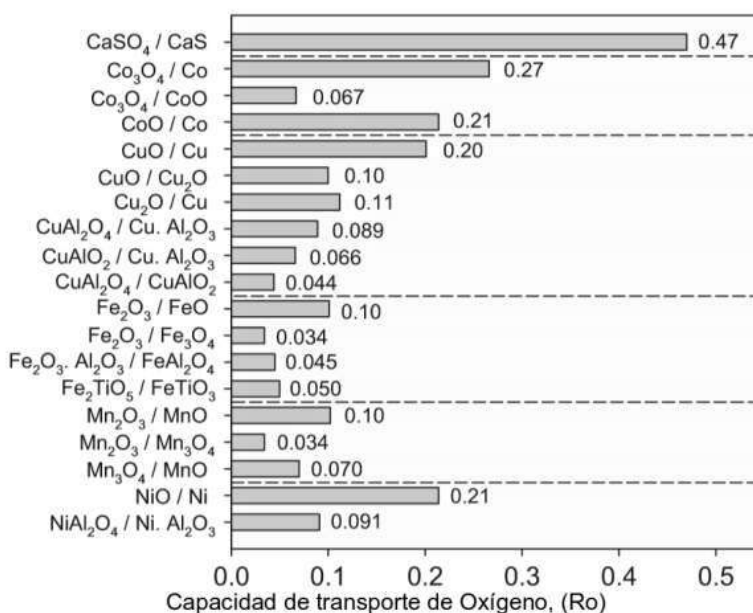


Figura 2.3. Capacidad de transporte de oxígeno R_o (Ishida & Jin, 1994).

2.1.4. Balance de Energía

La generación de calor en los dos reactores de un sistema CLC es similar a la combustión convencional, pero la distribución entre los reactores de combustible y aire depende tanto del gas combustible como del material utilizado para transportar el oxígeno. La Tabla 2.2 presenta las entalpías de oxidación y reducción para los distintos sistemas redox. La reacción de reducción es exotérmica o endotérmica dependiendo del sistema redox. La energía involucrada durante la reducción con CH_4 , que es el constituyente principal del gas natural, es significativamente diferente a la involucrada en la reducción con H_2 o CO , que componen al syngas. Por lo tanto, en la mayoría de los casos la

reducción con CH_4 es endotérmica, mientras que la reducción con H_2 o CO generalmente es exotérmica, como puede ser visto en la Tabla 2.2. Cuando la reacción de reducción es endotérmica, la reacción de oxidación muestra mayor calor de reacción que la combustión convencional del gas combustible con aire.

Tabla 2.2. Calor estándar de reacción para las reacciones de reducción y oxidación de diferentes acarreadores de oxígeno.

Sistema Redox	ΔH_r° (kJ/mol)				
	CH_4	H_2	CO	C	O_2
CaSO_4/CaS	158.6	-1.6	-42.7	86.9	-480.5
$\text{Co}_3\text{O}_4/\text{Co}$	107.9	-14.3	-55.4	61.6	-455.1
$\text{Co}_3\text{O}_4/\text{CoO}$	-19.8	-45.5	-86.6	-0.8	-392.7
CoO/Co	149.5	-3.9	-45.0	82.4	-475.9
CuO/Cu	-178.0	-85.8	-126.9	-81.4	-312.1
$\text{Cu}_2\text{O}/\text{Cu}_2\text{O}$	-236.6	-100.4	-141.6	-110.7	-282.8
$\text{Cu}_2\text{O}/\text{Cu}$	-119.5	-71.1	-112.3	-52.1	-341.4
$\text{CuAl}_2\text{O}_4/\text{Cu}\cdot\text{Al}_2\text{O}_3$	282.2	29.3	-11.8	148.7	-542.2
$\text{CuAl}_2\text{O}_4/\text{Cu}\cdot\text{Al}_2\text{O}_3$	-24.1	-47.3	-88.4	-4.4	-389.1
$\text{CuAl}_2\text{O}_4/\text{CuAlO}_2$	588.5	105.9	64.7	901.9	-695.4
$\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{Fe}_3\text{O}_4$	141.6	-5.8	-47.0	78.4	-472.0
$\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{FeO}$	318.4	38.3	-2.8	166.8	-560.3
$\text{Fe}_2\text{O}_3\cdot\text{Al}_2\text{O}_3/\text{FeAl}_2\text{O}_4$	-62.3	-56.8	-98.0	-23.5	-370.0
$\text{Fe}_2\text{TiO}_5/\text{FeTiO}_3$	106.5	14.6	-55.8	60.9	-454.4
$\text{Mn}_2\text{O}_3/\text{MnO}$	-48.0	-53.3	-94.4	-16.4	-377.1
$\text{Mn}_2\text{O}_3/\text{Mn}_3\text{O}_4$	-396.6	-140.4	-181.6	-190.7	-202.8
$\text{Mn}_3\text{O}_4/\text{MnO}$	126.3	-9.7	-50.8	70.8	-464.3
NiO/Ni	156.5	-2.1	-43.3	85.9	-479.4
$\text{NiAl}_2\text{O}_4/\text{Ni}\cdot\text{Al}_2\text{O}_3$	158.6	-1.6	-42.8	86.9	-480.4

2.1.5. Características del acarreador de oxígeno

Uno de los puntos clave para un buen rendimiento del sistema es el material acarreador de oxígeno, dicho acarreador de oxígeno debe cumplir las siguientes características:

1. Capacidad suficiente de transporte de oxígeno.
2. Termodinámica favorable con respecto a la conversión de combustible en CO₂ y H₂O.
3. Alta reactividad para reacciones de reducción y oxidación.
4. Resistencia al desgaste.
5. Depósito de carbono insignificante, pues esto liberaría CO₂ en el regenerador reduciendo la eficiencia de captura de CO₂.
6. Buenas propiedades de fluidización (sin presencia de aglomeración).
7. Bajo costo.
8. Características amigables con el ambiente.

Para el presente proyecto el acarreador de oxígeno usado es la mezcla natural de óxidos mixtos, conocida como "ilmenita" (~36.8%p Fe, 31.6%p Ti y 31.6%p O), que además de cumplir con los puntos descritos, no ofrece toxicidad para las personas que la manipulan.

2.2 Simulación CFD

La dinámica de fluidos computacional o CFD (por sus siglas en inglés) es el área de conocimiento que trata sobre la simulación numérica. Es una poderosa herramienta que sirve para el análisis de sistemas que involucran flujo de fluidos, transferencia de calor y fenómenos asociados, tales como reacciones químicas, por medio de la simulación computarizada (Versteeg & Malalasekera, 2007). El CFD tuvo origen a partir de la combinación de dos disciplinas: mecánica de fluidos y cálculo numérico. Las ecuaciones que rigen el flujo de fluidos tienen origen en la mecánica de fluidos y pueden ser resueltas por medio de diferentes métodos numéricos. La ecuación general resuelta vía fluidodinámica computacional es la ecuación de transporte de la variable de interés, representada por el símbolo Φ . Dicha ecuación es (Equipe ESSS, 2016):

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \Phi dV + \oint_S (\rho v \Phi) \cdot dA = \oint_S (\Gamma \nabla \Phi) \cdot dA + \int_V S_\Phi dV \quad (2.8)$$

Aquí:

t = tiempo

ρ = Densidad

Φ = Variable específica del fenómeno de transporte

V = Volumen

A = Área

Γ = Coeficiente de transporte

S = Fuente

Todas las ecuaciones de conservación resueltas por CFD poseen la forma anterior, con cuatro términos: el término transitorio, el término convectivo, el término difusivo y el término fuente. Para representar diferentes ecuaciones de conservación se alteran solo tres componentes de la ecuación: la variable ϕ , el coeficiente de difusión Γ y la fuente S .

Para la solución de las ecuaciones fundamentales de mecánica de fluidos (conservación de masa, cantidad de movimiento, energía, etc.) se hace uso de técnicas numéricas tales como: diferencias finitas, elemento finito o volumen finito. Los códigos computacionales que resuelven problemas de flujo de fluidos están estructurados alrededor de dichos algoritmos numéricos.

El usuario debe conocer distintas áreas para poder manejar de manera adecuada el software CFD, así como para interpretar correctamente los resultados generados por el mismo. Antes del desarrollo y la simulación de flujo de fluidos, existe una etapa de identificación de los fenómenos físicos y químicos que necesitan ser considerados. Es requisito que, además de las buenas habilidades de modelado, el programador posea conocimientos profundos de los procesos físicos y químicos que se llevan a cabo en el fenómeno a simular; pues en la gran mayoría de los casos es necesario hacer suposiciones para reducir la complejidad a nivel manejable, y se deben preservar las características más importantes del problema. De la elección correcta de las simplificaciones introducidas en esta etapa, dependerá la calidad y la fiabilidad de la información generada por el código de CFD, así que el usuario debe permanecer consciente en todo momento de todas las suposiciones hechas en la solución del problema.

También es crucial el buen entendimiento de la solución numérica del algoritmo. Tres conceptos matemáticos son usados en la determinación del éxito de tales algoritmos:

- **Convergencia.** Es la precisión a la que algún método numérico es capaz de acercar la solución obtenida a un límite decimal dado *a priori*.
- **Consistencia.** En los esquemas numéricos, se le llama a la capacidad de producir sistemas de ecuaciones algebraicas que demuestren ser equivalentes a la ecuación diferencial original, mientras el espaciamiento de la malla tienda a cero.
- **Estabilidad.** Está asociada con la disminución de los errores mientras el método numérico procede. Si una técnica no es estable, inclusive alrededor de los errores en los datos iniciales, puede causar oscilaciones o divergencia.

Los paquetes comerciales facilitan el acceso a los usuarios mediante una interfaz sofisticada, tanto para ingresar los datos y parámetros del problema como para examinar los resultados. Todos los códigos contienen tres elementos principales: a) pre-procesamiento, b) solución y, c) post-procesamiento.

a) Pre-procesamiento: Suele ser un servicio de interfaz amigable, que permite introducir los datos de entrada al programa de resolución, convirtiéndolos luego a un formato compatible para el software. Esta fase comprende:

1. Definición de la geometría a usar (dominio computacional).
2. Generación de la malla o división del dominio en un número suficiente de celdas o elementos que no se superpongan y que cubran toda la geometría, los cuales pueden ser bidimensionales o tridimensionales (Figura 2.4).
3. Identificación de los fenómenos físicos y químicos que pretenden modelarse.
4. Definición de las propiedades del fluido o los fluidos.
5. Especificación de las condiciones iniciales y de fronteras del problema.

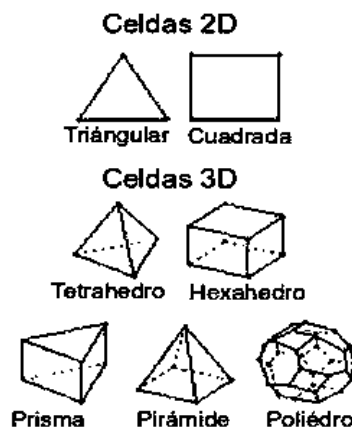


Figura 2.4. Tipos de celdas para el mallado.

La generación de la malla es muy importante, porque condicionará la calidad de los resultados. En principio, cuanto más fina sea la malla, más próxima a la solución real será la simulación. Además, un mallado eficiente siempre ha de ser más fino en aquellas zonas donde se prevé un mayor gradiente en las variables del flujo. Sin embargo, mallas extraordinariamente finas penalizan el tiempo de cálculo haciéndolo excesivamente largo (Oro, 2012). Las ejecuciones, en función de los modelos que resuelvan y del tamaño de la malla, pueden durar desde minutos hasta semanas (o meses) de cálculos en tiempo real.

b) Solución: Constituye la parte central del programa de resolución y es el encargado de resolver de forma iterativa las ecuaciones que se han activado previamente en el proceso (modelos). La ventaja del uso del software CFD es que el usuario del código solo ejecuta y, al obtener la solución del caso tiene tiempo de interpretar los fenómenos de transporte sin distraerse en la complejidad de la solución del sistema de ecuaciones (Oro, 2012).

c) Post-procesamiento: En este módulo se incluyen normalmente una serie de herramientas gráficas que permiten analizar los resultados. Es parte fundamental del software pues facilita gestionar la enorme cantidad de información que el código es capaz de generar. No sólo se trata de disponer de la interfaz gráfica, sino de una herramienta que permita proporcionar variables integradas y promediadas para ofrecer resultados globales (Oro, 2012); incluye:

1. Representación gráfica del dominio y la malla.
2. Mapas de contornos de las variables y ploteado de vectores y líneas de corriente.
3. Gráficas y distribuciones.
4. Gráficos de superficie, bidimensionales y tridimensionales.
5. Animaciones y exportación de resultados a otros formatos.

2.3 Modelos matemáticos

La dinámica de fluidos computacional (CFD), está basada en las ecuaciones fundamentales que gobiernan la mecánica de fluidos. Estas ecuaciones son las declaraciones matemáticas de tres principios físicos fundamentales sobre los cuales se basa la dinámica de fluidos (Anderson & Wendt, 1995):

1. Conservación de la masa.
2. Conservación de la cantidad de movimiento.
3. Conservación de la energía.

Típicamente, estas ecuaciones de gobierno de la mecánica de fluidos están expresadas en términos de variables específicas o intensivas, es decir de cantidades expresadas por unidad de masa. Dichas ecuaciones se deducen de aplicar cada balance a un elemento estático de volumen $\Delta x \Delta y \Delta z$ (Figura 2.5), a través del que está circulando el fluido (R. Bird, 1987). En los siguientes apartados se abordan los fundamentos matemáticos necesarios para realizar y analizar el flujo de fluidos por medio de la modelación matemática.

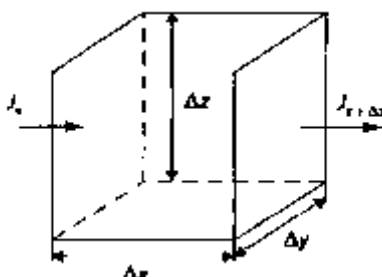


Figura 2.5. Volumen de control fijo en el espacio, a través del cual pasa algún fluido.

2.3.1. Modelos Multifásicos

Para calcular el comportamiento de un fluido mediante dinámica de fluidos computacional, es necesario determinar la técnica para la solución de las ecuaciones gobernantes dentro del dominio matemático. En el caso de estudio que nos atañe, nuestro sistema está conformado de dos reactores interconectados, dentro de ellos suceden reacciones heterogéneas entre una fase gaseosa y una fase granular, por tanto es necesario utilizar una técnica de cálculo multifásico que simule la interacción entre ambas fases. La manera en que se trata a los fluidos depende del enfoque que se dé a los mismos, Ansys Fluent cuenta con dos diferentes enfoques para calcular sistemas multifásicos: enfoque lagrangiano y enfoque euleriano. Dentro de los modelos de enfoque euleriano Ansys cuenta con el modelo de Euler, este modelo es el más robusto de los modelos multifásicos, en él se resuelven directamente las ecuaciones gobernantes en cada fase, incluidas las ecuaciones de continuidad, momento, energía, turbulencia, transporte de especies químicas, etc. Las interacciones fase

a fase y las transferencias interfásicas de momento, masa, especies y calor se modelan mediante submodelos físicos.

2.3.2. Ecuación de continuidad

El principio físico que rige esta ley es el de la conservación de la masa. La ecuación de continuidad (2.9) describe la rapidez de cambio de la densidad en algún volumen diferencial fijo, que resulta del movimiento de la masa a través de ese volumen diferencial (R. Bird, 1987).

$$\frac{1}{\rho_{rq}} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_q \rho_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \bar{v}_q) = \sum_{p=1}^n (\dot{m}_{pq} - \dot{m}_{qp}) \right] + S_q \quad (2.9)$$

Aquí, $\bar{v}_q$ es la velocidad de la fase q , α_q representa la fracción de volumen de la fase q , $\dot{m}_{pq}$ y $\dot{m}_{qp}$ corresponden a la transferencia de masa de la fase p a la fase q y viceversa y S_q es el término fuente.

2.3.3. Ecuación de conservación de cantidad de movimiento

La ecuación de conservación de momentum de un fluido expresa que la tasa de cambio de la cantidad de movimiento de una dada porción de fluido es igual a la resultante de las fuerzas que actúan sobre esta porción (2.10). En otras palabras, es la forma de la segunda ley de Newton aplicada al elemento de volumen diferencial, según la cual, "el producto de la masa por la aceleración es igual a la sumatoria de las fuerzas" (R. Bird, 1987).

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_q \rho_q \bar{v}_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \bar{v}_q \bar{v}_q) \\ = -\alpha_q \nabla p - \nabla p_s + \nabla \cdot \bar{\tau}_q + \alpha_q \rho_q \bar{g} \\ + \sum_{p=1}^n (K_{ls} (\bar{v}_l - \bar{v}_s) + m_{ls} \bar{v}_{ls} - m_{sl} \bar{v}_{sl}) + (\bar{F}_s + \bar{F}_{lift,s} + \bar{F}_{wl,s} \\ + \bar{F}_{vm,s} + \bar{F}_{td,s}) \end{aligned} \quad (2.10)$$

Aquí, ∇p_s es la presión de la fase sólida, K_{ls} es el coeficiente de intercambio de momentum entre la fase fluida y la fase sólida, ∇p representa el gradiente de presión estática compartida por todas las fases, $\rho_q \bar{g}$ es la fuerza de cuerpo causada por la aceleración gravitacional, $\bar{F}_{lift,q}$ es la fuerza de sustentación, $\bar{F}_{vm,q}$ es la fuerza de masa virtual, $\bar{F}_{td,q}$ es la fuerza de dispersión turbulenta, $\bar{F}_q$ es la

fuerza provocada por un cuerpo externo, $\bar{F}_{wl,q}$ es una fuerza de lubricación de pared y $\bar{R}_{pq}$ es el coeficiente de intercambio de cantidad de movimiento interfacial.

Además, $\bar{\tau}_q$ es el tensor de tensión de la fase q y se define como:

$$\bar{\tau}_q = \alpha_q \mu_q (\nabla \bar{v}_q + \nabla \bar{v}_q^T) + \alpha_q (\lambda_q - \frac{2}{3} \mu_q) \nabla \cdot \bar{v}_q \bar{I} \quad (2.11)$$

Aquí, μ_q es la viscosidad de la fase q y λ_q es el esfuerzo cortante.

2.3.4. Ecuación de conservación de energía

La ecuación de conservación de energía representa al balance de energía (2.12). Este balance se efectúa de manera similar al balance de masa y momentum; es decir, considerando un elemento de volumen en el cual un fluido se desplaza.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_q \rho_q \bar{h}_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \bar{u}_q h_q) \\ = \alpha_q \frac{\partial p_q}{\partial t} + \bar{\tau}_q + \nabla \bar{u}_q - \nabla \cdot \bar{q}_q + S_q \\ + \sum_{p=1}^n (Q_{pq} + \dot{m}_{pq} h_{pq} - \dot{m}_{qp} h_{qp}) \end{aligned} \quad (2.12)$$

Aquí, h_q es la entalpia específica de la fase q , $\bar{q}_q$ es el flux de calor, S_q es el término fuente, Q_{pq} representa la intensidad del intercambio de calor entre las fases y h_{pq} es la entalpia de la interfase.

2.3.5. Modelo de turbulencia k - ε estándar

La robustez, economía y la precisión razonable para muchos flujos turbulentos, explica la popularidad de este modelo en las simulaciones de flujos de fluidos (2.13) (2.14).

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M + S_k \quad (2.13)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \varepsilon u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (G_k + C_{3\varepsilon} G_b) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} + S_\varepsilon \quad (2.14)$$

Aquí:

G_k = generación de energía cinética de turbulencia debido a la velocidad media de gradientes.

G_b = generación de energía cinética de turbulencia debido a la flotabilidad.

Y_M = contribución de la dilatación fluctuante en la turbulencia compresible a la tasa de disipación total.

$C_{1\epsilon}$, $C_{2\epsilon}$ y $C_{3\epsilon}$ = constantes.

σ_k y σ_ϵ = números de Prandtl turbulentos para k y para ϵ , respectivamente.

S_k y S_ϵ = términos fuente.

2.3.6 Modelo de transporte de especies químicas

El software que se usará para el análisis CFD modela la fracción de masa local de cada especie, Y_i , mediante la solución de una ecuación de convección-difusión para esa i -ésima especie, de forma general (2.15).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i) + \nabla \cdot (\rho v Y_i) = -\nabla \cdot J_i + R_i + S_i \quad (2.15)$$

Aquí:

R_i = tasa neta de producción de especies por reacción química.

S_i = la tasa de creación por adición de la fase dispersa más cualquier fuente definida por el usuario.

J_i = Flujo de difusión de la especie i .

2.3.7 Modelos para las propiedades granulares

Cuando se utiliza el modelo multifásico euleriano para una fase granular es necesario calcular las propiedades granulares, Ansys Fluent cuenta con varios modelos que pueden ser utilizados para cada una de las propiedades.

2.3.7.1 Viscosidad granular

Ansys ofrece 2 expresiones para la viscosidad granular:

Syamlal et al:

$$\mu_s = \frac{\alpha_s d_s \rho_s \sqrt{\theta_s \pi}}{6(3 - e_{ss})} \left[1 + \frac{2}{5} (1 + e_{ss})(3e_{ss} - 1)g_0 \alpha_s \right] \quad (2.16)$$

Gidaspow y cols.

$$\mu_s = \frac{10d_s\rho_s\sqrt{\theta_s\pi}}{96\alpha_s(1+e_{ss})g_0} \left[1 + \frac{4}{5}g_0\alpha_s(1+e_{ss}) \right]^2 \alpha_s \quad (2.17)$$

2.3.7.2 Viscosidad granular del bulk

La viscosidad granular del bulk toma en cuenta la resistencia de la fase granular a la compresión y expansión (Lun y cols.).

$$\lambda_s = \frac{4}{3}\alpha_s^2\rho_sd_sg_0(1+e_{ss})\left(\frac{\theta_s}{\pi}\right)^{1/2} \quad (2.18)$$

2.3.7.3 Presión de sólidos

La presión total de sólidos es calculada e incluida en las ecuaciones de conservación de cantidad de movimiento, la presión de sólidos total es la sumatoria de la presión de sólidos de cada fase sólida:

$$P_{s,total} = \sum_{q=1}^n p_q \quad (2.19)$$

La formulación de la presión de sólidos está compuesta de un término cinético y un segundo término que corresponde a las colisiones de las partículas:

$$P_s = \alpha_s\rho_s\theta_s + 2\rho_s(1+e_{ss})\alpha_s^2g_{0,ss}\theta_s \quad (2.20)$$

Aquí, e_{ss} es el coeficiente de restitución para las colisiones de las partículas, $g_{0,ss}$ es la función de distribución radial y θ_s es la temperatura granular.

2.3.7.4 Temperatura granular

La temperatura granular para la fase sólida es proporcional a la energía cinética del movimiento aleatorio las partículas.

$$\theta_s = \frac{1}{3}u_{s,i}u_{s,i} \quad (2.21)$$

Aquí, $iu_{s,i}$ representa el componente de la velocidad fluctuante de los sólidos en el sistema de coordenadas cartesianas. Esto se define como un promedio de

conjunto de la velocidad aleatoria de las partículas dentro de un volumen finito en un período de tiempo.

La ecuación de transporte derivada de la teoría cinética tiene la forma:

$$\frac{2}{3} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\rho_s \alpha_s \theta_s) + \nabla \cdot (\rho_s \alpha_s v_s \theta_s) \right] = (-p_s \bar{I} + \bar{\tau}_s) : \nabla \bar{v}_s + \nabla \cdot (k_{\theta_s} \nabla \theta_s) - \gamma_{\theta_s} + \varphi_{ls} \quad (2.22)$$

Aquí:

$(-p_s \bar{I} + \bar{\tau}_s) : \nabla \bar{v}_s$ = la generación de energía por el tensor de esfuerzos del sólido

$k_{\theta_s} \nabla \theta_s$ = término de difusión de energía

γ_{θ_s} = representa la disipación de la energía debido a las colisiones

φ_{ls} = es el intercambio de energía entre la fase continua y la granular

La ecuación (2.21) contiene el término $k_{\theta_s} \nabla \theta_s$ que describe la difusión del flujo granular. Cuando se usa por default el modelo de Syamlal y cols. el coeficiente de difusión queda:

$$k_{\theta_s} = \frac{15 d_s \rho_s \alpha_s \sqrt{\theta_s \pi}}{4(41 - 33\eta)} \left[1 + \frac{12\eta^2}{5} (4\eta - 3) \alpha_s g_0 + \frac{16}{15\pi} (41 - 33\eta) \eta \alpha_s g_0 \right] \quad (2.23)$$

De forma opcional Ansys permite usar el modelo Gidaspow y cols. en donde el coeficiente de difusión queda:

$$k_{\theta_s} = \frac{150 d_s \rho_s \sqrt{\theta_s \pi}}{384(1 + e_{ss}) g_0} \left[1 + \frac{6 \alpha_s g_0}{5} (1 + e_s) \right]^2 + 2 \rho_s \alpha_s^2 d_s (1 + e_{ss}) g_0 \sqrt{\frac{\theta_s}{\pi}} \quad (2.24)$$

Ansys permite resolver la temperatura granular mediante las siguientes opciones:

- Formulación algebraica (default)
- Ecuación diferencial parcial
- Valor constate
- Función definida por el usuario

2.3.7.5 Función de distribución Radial

La función de distribución radial es un factor de corrección que modifica la probabilidad de colisiones entre granos cuando la fase sólida granular se vuelve densa.

$$g_0 = \frac{s + d_p}{s} \quad (2.25)$$

Aquí, s es la distancia entre granos. En la literatura existen varias formulaciones para la función de distribución radial, Ansys Fluent tiene cuenta con varias opciones, para una fase sólida usa:

$$g_0 = \left[1 - \left(\frac{\alpha_s}{\alpha_{s,max}} \right)^{1/3} \right]^{-1} \quad (2.26)$$

2.3.7.6 Viscosidad friccional

En flujos densos donde la fracción de volumen de la fase secundaria se acerca al límite de empaquetamiento, la generación de tensión se debe principalmente fricción entre las partículas. Si la viscosidad friccional es incluida, Ansys usa la expresión de Schaeffer:

$$\mu_{s,fr} = \frac{p_s \sin \phi}{2\sqrt{I_{2D}}} \quad (2.27)$$

2.3.7.7 Presión friccional

Especifica el término de gradiente de presión, $\nabla P_{friccional}$, en la ecuación de momento de la fase granular. Ansys Fluent permite usar distintos modelos, el basado en la Teoría Cinética de Flujo Granular (based-ktgf, por sus siglas en ingles) y el modelo de Syamlal-Obrien:

$$f = \frac{C_D Re_s \alpha_l}{24 v_{r,s}^2} \quad (2.28)$$

2.3.7.8 Fracción límite de empaque

Especifica el valor máximo para la fracción de volumen de la fase granular. Para esferas monodispersas, el límite de empaquetamiento es aproximadamente 0.63.

2.3.7.9 Módulo de elasticidad.

Es definido como:

$$G = \frac{\partial P_s}{\partial \alpha_s} \quad (2.29)$$

Para $G \geq 0$.

2.3.8 Modelos para las interacciones entre las fases

2.3.8.1 Coeficiente de arrastre

El coeficiente de intercambio entre la fase fluida y la fase granular K_{sl} puede ser escrito de la siguiente forma:

$$K_{sl} = \frac{\alpha_s \rho_s f}{\tau_s} \quad (2.30)$$

Aquí, f es definida de forma diferente según el modelo que se use para los coeficientes de intercambio entre las fases, τ_s es el tiempo de relajación.

Para el modelo de Syamal-Obrien (2.27), el coeficiente de arrastre se define:

$$C_D = \left(0.63 + \frac{4.8}{\sqrt{\frac{Re_s}{v_{r,s}}}} \right)^2 \quad (2.31)$$

El modelo de Gidaspow es una combinación del modelo de *Wen and Yu model* (Wen & Yu, 1966) y la ecuación de Ergun (Ergun, 1952). Cuando $\alpha_l > 0.8$, el coeficiente de intercambio entre la fase sólida y líquida K_{ls} queda definido de la siguiente forma:

$$K_{sl} = \frac{3}{4} C_D \frac{\alpha_s \alpha_l \rho_l |\bar{v}_s - \bar{v}_l|}{d_s} \alpha_l^{-2.65} \quad (2.32)$$

Aquí, el coeficiente de arrastre es:

$$C_D = \frac{24}{\alpha_l Re_s} [1 + 0.15(\alpha_l Re_s)^{0.687}] \quad (2.33)$$

2.3.8.2 Dispersión turbulenta

Para flujos multifásicos turbulentos donde se usa el modelo Euleriano, Ansys Fluent puede incluir los efectos de las fuerzas de dispersión turbulenta, las cuales explican la transferencia de momentum entre las fases. La fuerza de dispersión turbulenta actúa como una difusión turbulenta en flujos dispersos.

Modelo de Lopez de Bertodano:

$$\bar{F}_{td,q} = -\bar{F}_{td,p} = C_{TD}\rho_q k_q \nabla \alpha_p \quad (2.34)$$

Aquí, ρ_q es la densidad de la fase continua, k_q es la energía cinética turbulenta en la fase continua, $\nabla \alpha_p$ es el gradiente de la fracción de volumen de la fase discreta y C_{TD} es una constante igual a 1 por default.

Modelo de Simonin:

$$\bar{F}_{td,q} = -\bar{F}_{td,p} = C_{TD}K_{pq} \frac{D_{t,pq}}{\sigma_{pq}} \left(\frac{\nabla \alpha_p}{\alpha_p} - \frac{\nabla \alpha_q}{\alpha_q} \right) \quad (2.35)$$

2.4. Solución numérica de las ecuaciones gobernantes

Utilizando la técnica basada en el volumen de control, el CFD convierte las ecuaciones gobernantes (en su mayoría ecuaciones diferenciales parciales de orden superior) en ecuaciones algebraicas que se pueden resolver numéricamente. Esta técnica consiste en integrar la ecuación de transporte sobre cada volumen de control, produciendo una ecuación discreta que expresa la ley de conservación en cada volumen de control. Este procedimiento utiliza una técnica basada en el volumen de control, la cual se resume de la manera siguiente (ANSYS, 2013):

1. División del dominio en una cantidad definida de volúmenes de control a través de un mallado computacional.
2. Integración de las ecuaciones gobernantes en cada volumen de control individual para construir ecuaciones algebraicas para las variables dependientes, tales como la velocidad, presión, temperatura y conservación escalar.
3. Discretizar las ecuaciones gobernantes por cada volumen de control.
4. Linealización de las ecuaciones discretizadas y solución del sistema de ecuaciones lineales resultante para determinar los valores de las variables dependientes.

III. METODOLOGÍA

En la Figura 3.1 se muestra un diagrama de bloques en el cual se resume el procedimiento general propuesto el cual se desarrolló en 4 etapas generales,

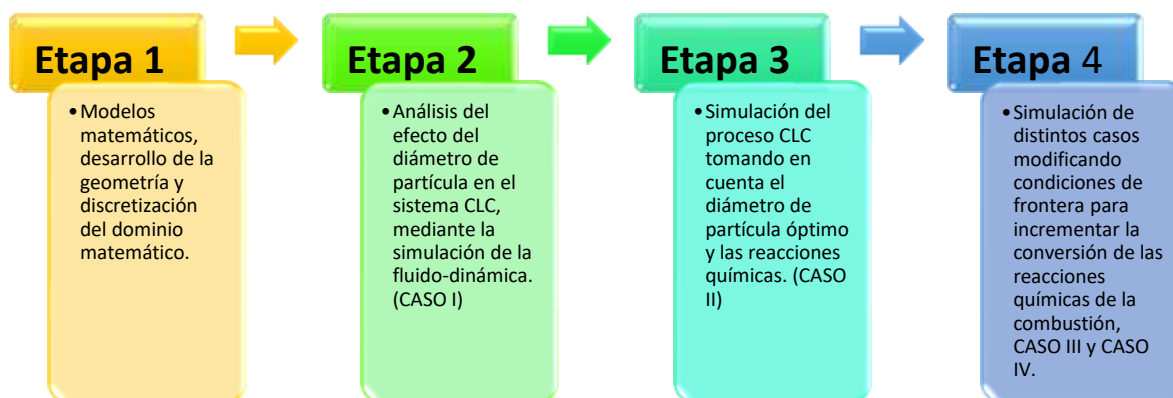


Figura 3.1. Metodología general.

1. La primera etapa consistió en la creación de la geometría, es decir, el dominio matemático en donde se resolvieron los modelos matemáticos que gobiernan al sistema, haciendo uso de un software de diseño asistido por computadora (CAD, por sus siglas en inglés). Posteriormente se realizó la discretización de dicho dominio matemático, lo que se conoce como mallado de la geometría, haciendo uso del paquete MESH de Ansys Workbench®.
2. En la etapa 2 se realizó un estudio con distintos diámetros de partículas para determinar el tamaño de idóneo de las mismas, para ello se simuló la fluidodinámica del sistema integral de un proceso CLC en 3D.
3. En la etapa tres se realizó la simulación integral del proceso CLC resolviendo la ecuación de energía y considerando las reacciones de oxidación y reducción en ambos reactores (combustor y regenerador) para partículas de 150 micras.
4. Finalmente, en la etapa cuatro se realizaron modificaciones en las condiciones de frontera y de operación con la finalidad de encontrar una configuración que mejore la conversión de los gases del combustible, posteriormente se llevó a cabo el análisis de los resultados obtenidos en las simulaciones.

El algoritmo de solución que se empleó en la simulación matemática por CFD se ilustra en la Figura 3.2 en forma de diagrama de flujo, a fin de enfatizar las decisiones que se tomaron para alcanzar el objetivo de cada etapa.

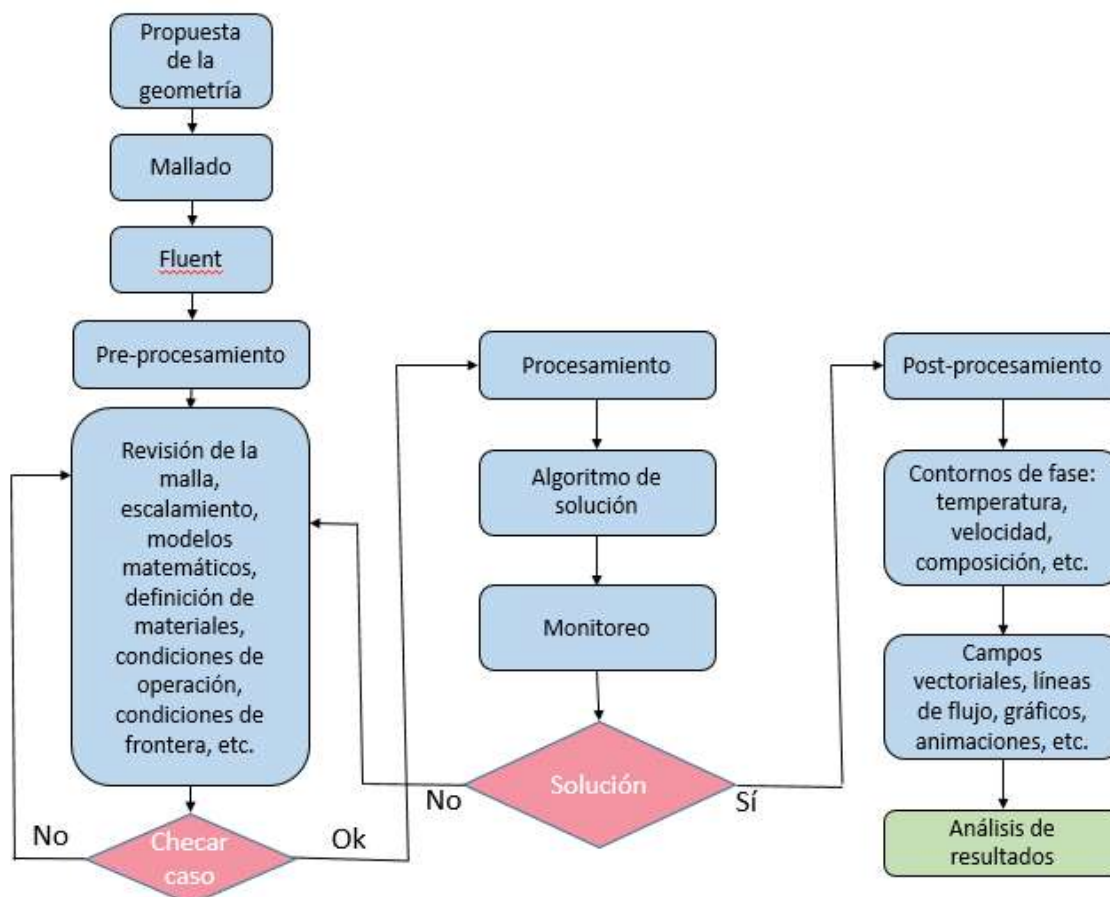


Figura 3.2. Diagrama de flujo del algoritmo de solución.

3.1. Etapa 1

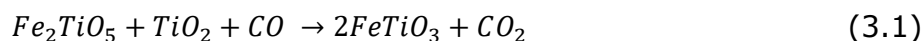
3.1.1. Definición de los modelos matemáticos

Tal como se mencionó en el esquema general de la metodología, en la primera etapa se hizo el análisis de los fenómenos que se llevan a cabo en el proceso de combustión en ciclos químicos del gas de síntesis en presencia de ilmenita, con la finalidad de determinar los modelos matemáticos y las reacciones químicas que posteriormente el software CFD deberá resolver. Estas ecuaciones fueron descritas en el marco teórico de este documento (2.9-2.15).

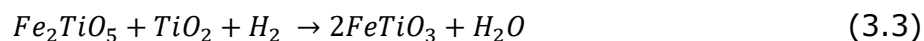
3.1.1.1. Estequiometría de las reacciones

Las reacciones que se llevan a cabo en la combustión del gas de síntesis en un sistema de combustión en ciclos químicos cuando se usa ilmenita como acarreador de oxígeno, se clasifican para su manejo en dos grupos: las que se llevan a cabo en el combustor (3.1, 3.2, 3.3 y 3.4), y las que suceden en el regenerador (3.5 y 3.6):

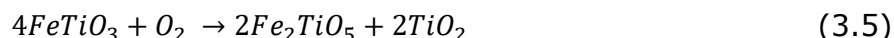
- Combustión de monóxido de carbono (3.1 y 3.2), usando oxígeno del acarreador.



- Combustión de hidrógeno (3.3, 3.4), usando oxígeno del acarreador.



- Reacciones de regeneración del acarreador (3.4, 3.6), usando oxígeno del aire.



Sin embargo, para llevar a cabo la simulación se simplificaron las reacciones, quedando como se muestran (3.7, 3.8 y 3.9) con la intención de poder usar los datos cinéticos obtenidos Abad y colaboradores (Abad, y otros, 2011) los cuales se resumen en la Tabla 2.3.

Combustión del monóxido de carbono, usando oxígeno del acarreador:



Combustión del hidrógeno, usando oxígeno del acarreador:



Reacción de regeneración del acarreador:



Tabla 3.1. Parámetros cinéticos.

Parámetro	H ₂	CO	O ₂
Energía de activación E_A (kJ / mol)	65	80.7	25.5
Orden de reacción n	1	0.8	1
Factor de frecuencia k_0 (mol ¹⁻ⁿ m ³ⁿ⁻² s ⁻¹)	6.2x10 ⁻²	1.1x10 ⁻¹	1.9x10 ⁻³

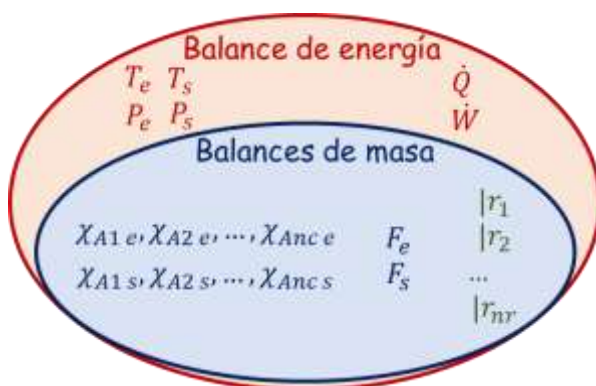
3.1.2. Análisis de grados de libertad

A fin de analizar cuidadosamente los datos requeridos por el balance de masa, base de los demás balances y, consecuentemente, de las simulaciones, se analizan los grados de libertad (Cerro, Higgins, Whitaker, 2007) en ambos reactores esquematizados en el Diagrama de Flujo del CLC (Figura 1.4).

Se inicia con el concepto de balance de ϑ , general para masa, energía y momentum (3.10).

$$\left\{ \frac{d\vartheta}{dt} \right\}_{Acumulación} = \left\{ \vartheta_E \right\}_{Entradas} - \left\{ \vartheta_S \right\}_{Salidas} \pm \left\{ R_{\vartheta} \right\}_{Generación} \quad (3.10)$$

El balance de masa es un subproblema del balance de energía (Figura 3.3), por lo que se pueden separar las variables que son exclusivas de este último y simplificar, así, tanto el análisis de grados de libertad como la solución del problema global de balance de energía.



T = Temperaturas de las corrientes.

P = Presiones de las corrientes.

Q = Flujos de calor que NO dependen de intercambio de masa.

W = Flujos de trabajo que **NO** dependen de intercambio de masa.

X_{Ai} = fracciones mol en cada corriente.

F_j = Flujo en la j -ésima corriente.

$|r_k$ = k -ésima reacción independiente.

Figura 3.3. Distribución de variables de los balances de masa y de energía.

Una vez separadas las variables relativas a la masa, que están en ambos balances, se puede analizar este subproblema previamente al balance de energía. Este desglose del análisis se aplica a cada uno de los reactores del proceso CLC.

El total de variables en cada reactor se puede calcular enumerando las propiedades de cada corriente y de cada reacción independiente (3.11).

$$n_V^m = n_{Corr} \cdot (n_C + 1) + n_{|r} \quad (3.11)$$

Aquí:

n_V^m = Número de variables del balance de masa.

n_{Corr} = Número de corrientes del proceso.

n_C = Número de moléculas diferentes (componentes).

$n_{|r}$ = Número de reacciones estequiométricamente independientes.

El número de ecuaciones independientes con los que se analiza el problema es n_C , puesto que se pueden hacer tantos balances de masa independientes como moléculas distintas hay, o bien, $(n_C - 1)$ balances para las moléculas más 1 balance global.

Además, al incluir a las n_C fracciones mol en la cuenta de variables, se incluye 1 de ellas como no independiente, porque la suma de fracciones mol suma 1; por lo que se debe eliminar agregando n_{Corr} restricciones del tipo (3.12).

$$\sum_{i=1}^{n_C} \chi_{i,j} = 1; j = 1, \dots, n_{Corr} \quad (3.12)$$

Y finalmente, dado que las reacciones químicas independientes no proporcionan información en todas las corrientes, se deben incluir $n_{|r}$ restricciones independientes acerca de las reacciones. En resumen, el conjunto de relaciones matemáticas (ecuaciones más restricciones) disponibles para el análisis queda como (3.13).

Balances de masa independientes,

n_C

Restricciones:

$$\begin{array}{l}
 \sum_{i=1}^{n_c} \chi_{i,j} = 1; j = 1, \dots, n_{Corr}, \quad n_{Corr} \\
 \text{Relativas a reacciones,} \quad n_{|r} \\
 \hline
 \text{Total de ecuaciones más restricciones, } n_E^m = n_c + n_{Corr} + n_{|r}
 \end{array} \quad (3.13)$$

Ahora, los grados de libertad que se tienen en el sistema son la diferencia entre el número de variables y el número de relaciones que se tienen (3.11) Esta metodología es aplicada a cada uno de los reactores que conforman el sistema CLC para gas de síntesis, utilizando ilmenita como acarreador de oxígeno.

$$n_D^m = n_V^m - n_E^m \quad (3.14)$$

3.1.3. Cálculo de Grados de Libertad en el Regenerador

Considerando que al regenerador entran ilmenita reducida (corriente E_{SR}) y aire (corriente E_{GR}), se llevan a cabo las reacciones (3.5, 3.6), y salen ilmenita oxidada (corriente S_{SR}) y aire empobrecido de oxígeno (corriente S_{GR}), se llega a los resultados en la Tabla 4.1.

Tabla 3.2. Grados de Libertad en el Regenerador

Número de Variables, subproblema de Balances de Masa	
$n_c = 7$	$O_2, N_2, FeTiO_3, FeO_4, Fe_2TiO_5, TiO_2, Fe_2O_3.$
$n_{Corr} = 4$	$E_{GR}, E_{SR}, S_{GR}, S_{SR}$ (G= gas; S= sólido, R= regenerador)
$n_{ r} = 2$	(3.5, 3.6)
$n_V^m = n_{Corr} \cdot (n_c + 1) + n_{ r}$	$n_V^m = 4 \cdot (7 + 1) + 2 = 34$
Número de Ecuaciones, subproblema de Balances de Masa	
$n_c = 7$	Balances de masa independientes
$n_{Corr} = 4$	$\sum_{i=1}^{n_c} \chi_{i,j} = 1; j = 1 \dots n_{Corr}$. Eliminación de redundancia.
$n_{ r} = 2$	$K_{eq r1R}; K_{eq r2R}$ Por el momento, suponiendo que ambas operan en equilibrio
$n_E^m = 13$	Total de ecuaciones
Grados de Libertad, subproblema de Balances de Masa	
	$n_D^m = n_V^m - n_E^m = 34 - 13 = 21$

Por tanto, se requiere identificar 21 datos independientes de balances de masa. En este momento se están identificando los 21 datos independientes, para con ellos iniciar la simulación del regenerador del sistema CLC.

3.1.4. Cálculo de Grados de Libertad en el Combustor

Considerando que al regenerador entran ilmenita reducida (corriente E_{SR}) y aire (corriente E_{GR}), se llevan a cabo las reacciones (3.5, 3.6), y salen ilmenita oxidada (corriente S_{SR}) y aire empobrecido de oxígeno (corriente S_{GR}), se llega a los resultados en la Tabla 4.2.

Tabla 3.3. Grados de Libertad en el Combustor.

<i>Número de Variables, subproblema de Balances de Masa</i>	
$n_C = 9$	$H_2, CO, CO_2, H_2O, FeTiO_3, FeO_4, Fe_2TiO_5, TiO_2, Fe_2O_3.$
$n_{Corr} = 4$	$E_{SC}, E_{GC}, S_{SC}, S_{GC}.$ (G= gas; S= sólido, C= combustor)
$n_{lr} = 4$	(3.1, 3.2, 3.3, 3.4)
$n_V^m = n_{Corr} \cdot (n_C + 1) + n_{lr}$	$n_V^m = 4 \cdot (9 + 1) + 4 = 44$
<i>Número de Ecuaciones, subproblema de Balances de Masa</i>	
$n_C = 9$	<i>Balances de masa independientes</i>
$n_{Corr} = 4$	$\sum_{i=1}^{n_C} \chi_{i,j} = 1; j = 1 \dots n_{Corr}.$ Eliminación de redundancia.
$n_{lr} = 4$	$K_{eq 74R}; K_{eq 76R}; r_{3R}; r_{5R}$
$n_V^E = 17$	Total de ecuaciones
<i>Grados de Libertad, subproblema de Balances de Masa</i>	
	$n_D^m = n_V^m - n_V^E = 44 - 17 = 27$

Por tanto, se requiere identificar 27 datos independientes de balances de masa.

3.1.5. Propuesta de la geometría

La geometría del sistema de estudio toma en cuenta los siguientes aspectos:

- La geometría se generó a partir de datos encontrados en la literatura (Guan, Chang, Zhang, Wang, & Sun, 2014); se incluye la localización de las reacciones químicas usada en el Análisis de Grados de Libertad (Figura 3.4).
- La geometría consta solamente de los fluidos (no se considera ninguna región sólida).
- Se consideran 2 fases distintas: la fase gaseosa (aire, combustible y gases de reacción) y la fase granular correspondiente a la ilmenita.
- La construcción del modelo se realizó mediante el uso del paquete Design Modeler del software comercial Ansys Workbench®.

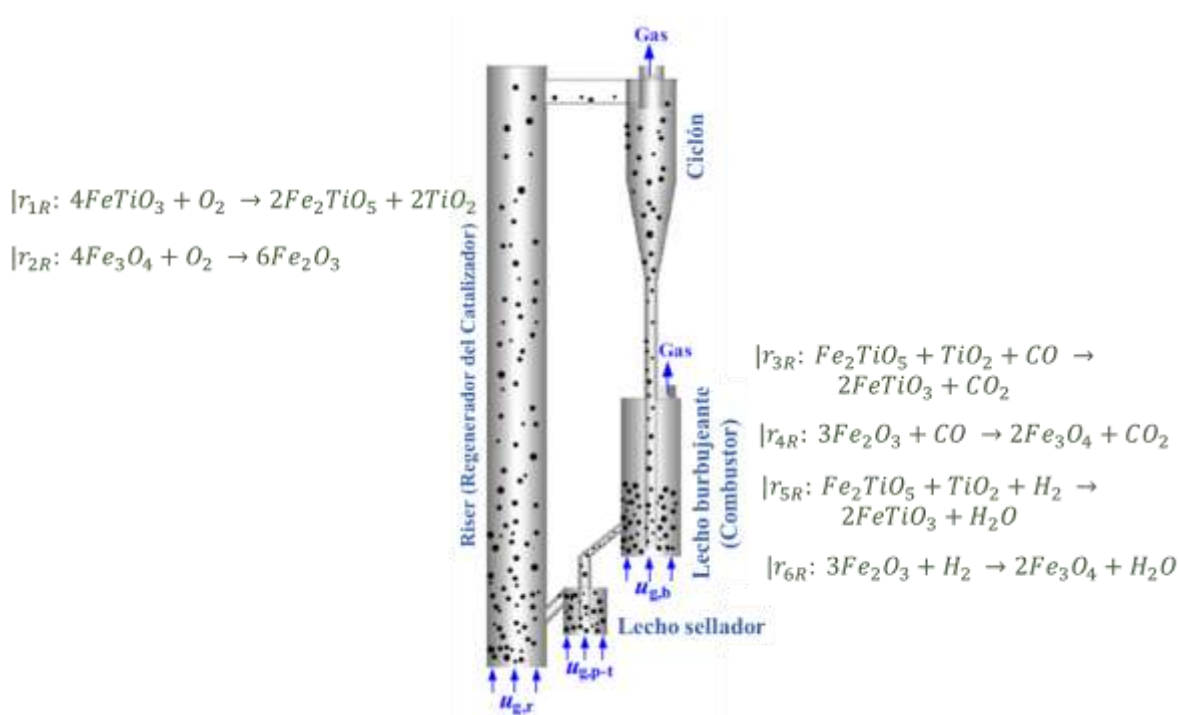


Figura 3.4. Diagrama de flujo CLC (Guan, Chang, Zhang, Wang, & Sun, 2014).

3.1.6. Desarrollo de la malla

Posterior a la construcción de la geometría se realizó la discretización del dominio matemático. Para realizar el mallado de las diferentes geometrías se utilizó el módulo *Mesh* del software comercial Ansys Workbench®, de acuerdo con los siguientes pasos:

- Se revisó que todos los volúmenes, caras, ejes y puntos estuvieran completamente definidos.

- Se procedió a realizar el mallado estructurado en caras regulares y definidas y en los volúmenes complejos e irregulares se realizó un mallado híbrido tetraédrico o poliédrico, según conviniera.
- Se realizó el análisis de sensibilidad de malla con la finalidad de determinar el tamaño y el número de elementos más adecuado para la simulación.

Se generaron 3 diferentes mallas con distinto número de elementos (Tabla 3.4), con la intención de realizar el análisis de sensibilidad de estas, y así poder elegir la malla con el número de elementos más conveniente. Los parámetros más importantes considerados para cada una de las mallas fueron Calidad, Ortogonalidad y Oblicuidad de sus elementos; estos parámetros son evaluados por el propio paquete “*Mesh*”.

Tabla 3.4 Parámetros de las 5 diferentes mallas.

	Element os	Calidad elemento	de Ortogonalid ad	Oblicuida d
Malla 1	385556	0.84	0.77	0.23
Malla 2	629584	0.84	0.77	0.22
Malla 3	978413	0.84	0.78	0.22

Los valores deseables para cada una de las métricas de los parámetros de malla se muestran en forma de espectro en las Figuras 3.5a y 3.5b. Observando la Figura 3.5 se puede concluir que la calidad de las 3 mallas es adecuada y, por lo tanto, todas ellas son apropiadas para su utilización en el software *Fluent*.

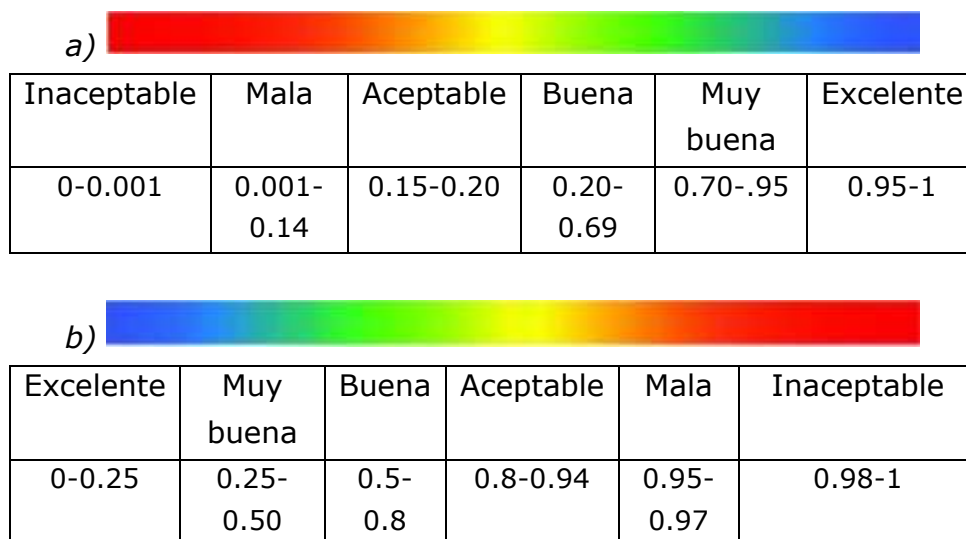


Figura 3.5 Espectro de métricas de malla. a) Calidad de elemento y Ortogonalidad y b) Oblicuidad del elemento.

Para continuar con el análisis de sensibilidad, se llevó a cabo la simulación de la operación CLC (12 segundos), con cada una de las 3 mallas, usando las condiciones de frontera que se muestran en la Figura 3.6, y a las siguientes condiciones de operación:

- Estado transitorio.
- Proceso Isotérmico.
- Sin reacción química.
- Únicamente se considera aire como fluido.
- Proceso completamente turbulento.
- Inicialmente el sistema contiene aire, únicamente.

Las velocidades de entrada de aire fueron propuestas de 1.5 m/s, mientras que las presiones entrada se consideran iguales a la atmosférica.

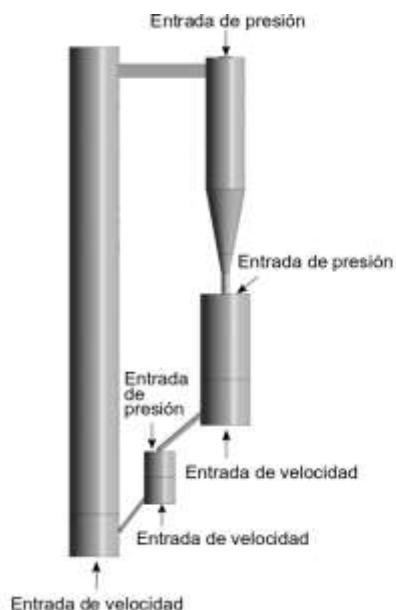


Figura 3.6. Condiciones de frontera para la simulación del análisis de sensibilidad de malla.

Una vez realizadas las simulaciones con las 3 diferentes mallas se analizaron y compararon los resultados obtenidos, para ello se graficaron dos de las variables más importantes del proceso: velocidad y presión. Estas variables se midieron en dos puntos diferentes del dominio: el Punto 1 que corresponde a la región central del regenerador y el Punto 2 que corresponde a la región central del combustor (Figura 3.7).

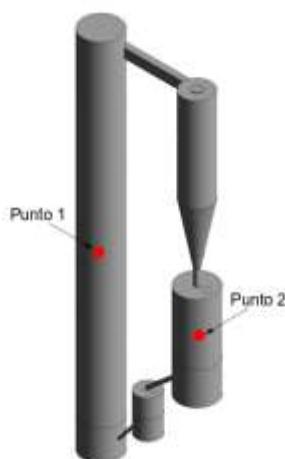
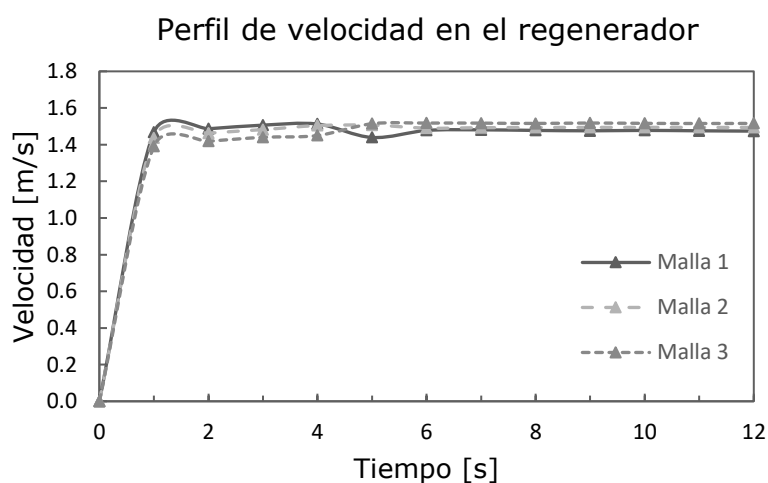


Figura 3.7. Puntos de monitoreo de las variables en el análisis de sensibilidad de malla.

Posteriormente se compararon los resultados y se analizó la influencia que tiene el número de elementos de la malla en los perfiles de velocidad en el Punto 1 (Figura 3.8a) y en el Punto 2 (Figura 3.8b). Se puede apreciar que los resultados no son visiblemente diferentes en ninguno de los dos puntos de monitoreo para las 3 mallas. Los valores de la velocidad están prácticamente superpuestos en el caso del regenerador, mientras que en el combustor se notan ligeras discrepancias en los perfiles de velocidad, sin embargo, estas discrepancias son muy pequeñas.

(a)



(b)

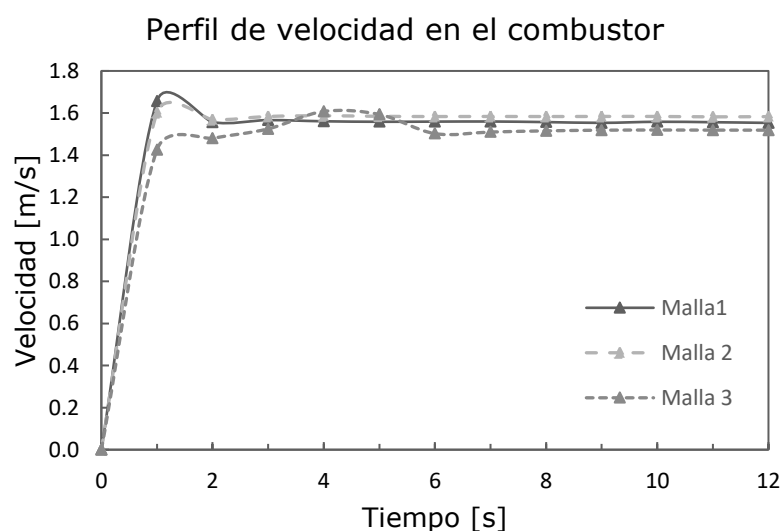
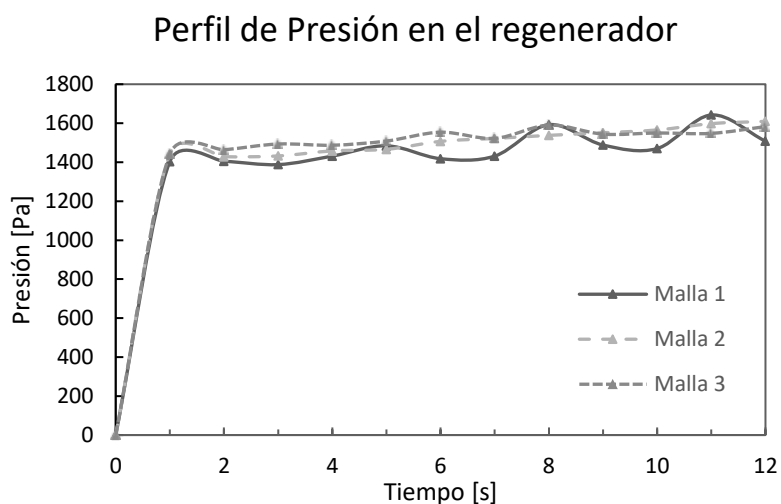


Figura 3.8. Valor de la velocidad en el punto de monitoreo. a) punto de Análisis 1 y b) punto de análisis 2.

Con respecto a la presión, se aprecia una ligera variación en el perfil obtenido con la malla 1, tanto en el regenerador como en el combustor. En cambio, con las mallas 2 y 3 se observan perfiles más estables y con poca variación; además su comportamiento es muy similar (Figura 3.9).

(a)



(b)

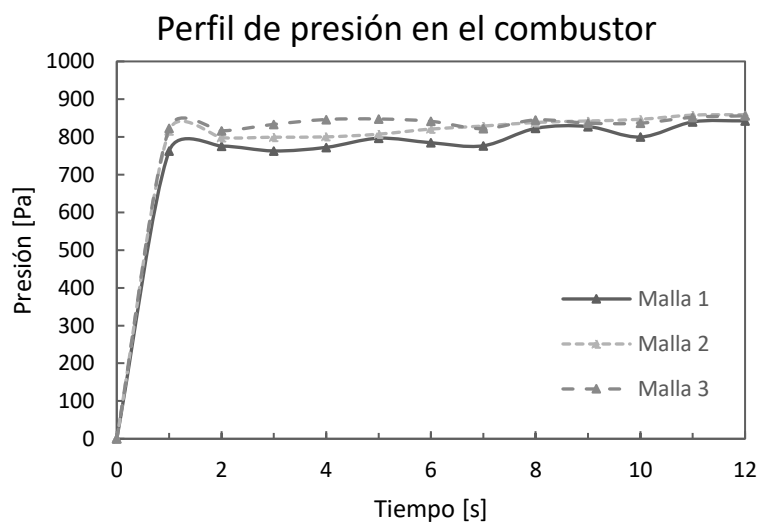


Figura 3.9. Valor de la presión en los puntos de monitoreo. a) punto de análisis 1 y b) punto de análisis 2.

Derivado del análisis anterior, es posible decir que el número de elementos de la malla tiene poca influencia en los resultados obtenidos, la cual es ligeramente más notoria en el combustor, tanto para la velocidad como para la presión. Sin embargo, los resultados de las mallas 2 y 3 mostraron diferencias muy pequeñas, por lo que se puede concluir que no tiene sentido refinar la malla más allá de los 629 mil elementos; y por tanto se determinó utilizar la malla 2 para la simulación del presente proyecto, la Figura 3.9a muestra la malla de la geometría.

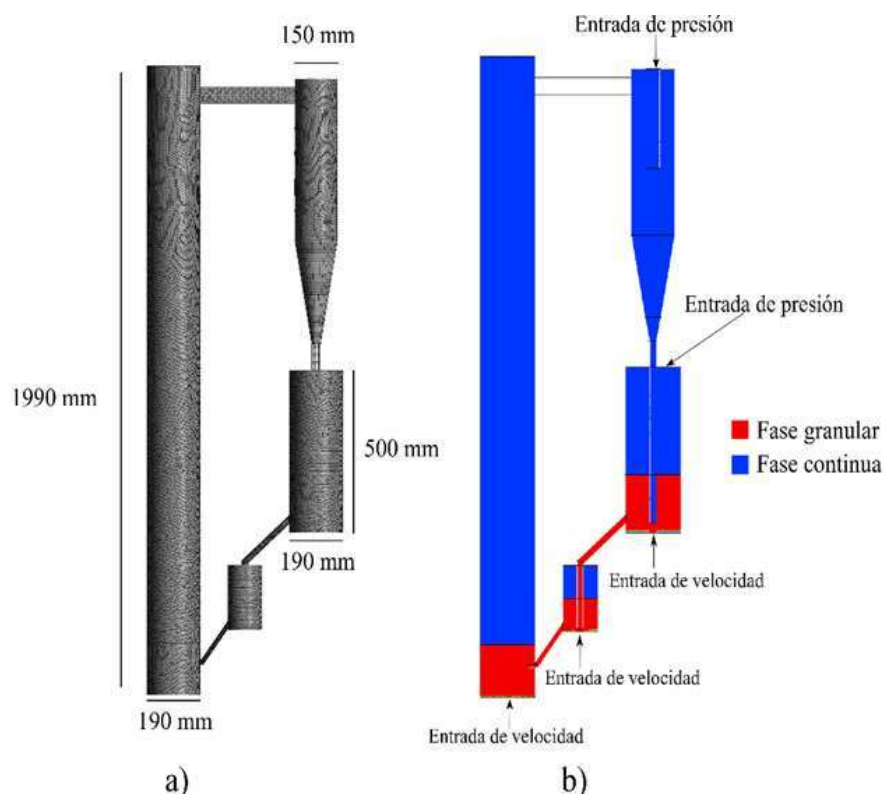


Figura 3.10. a) discretización de la geometría, b) contorno de fracción de volumen de ilmenita inicial y condiciones de frontera.

3.2. Etapa 2

En esta etapa se realizaron las simulaciones del Caso 1, con la finalidad de analizar el diámetro de partícula óptimo en el proceso CLC, para las condiciones de frontera y de operación dadas. El estudio consistió en simular la fluidodinámica (sin contemplar las reacciones químicas) de 5 tamaños de partícula distintos: 80 μm , 120 μm , 150 μm , 220 μm y 270 μm .

Una vez creada y definida la malla, se procedió a realizar las simulaciones el paquete Fluent de Ansys Workbench®. Las condiciones de frontera y las propiedades físicas de la fase fluida y la fase granular se muestran en la Tabla 3.5 y en la Tabla 3.6, respectivamente.

Tabla 3.5. Condiciones de frontera para el caso 1.

Condición de Frontera	Valor
Velocidad de entrada al regenerador	0.8 m/s
Velocidad de entrada al lecho sellador	0.004 m/s
Velocidad de entrada al combustor	0.05 m/s
Presiones en las entradas	1 atm
Temperatura del gas (°K)	873

Tabla 3.6. Propiedades físicas de las partículas.

Propiedad	Aire	Ilmenita
Densidad	1.225 kg/m ³	2600 kg/m ³
Viscosidad	1.789*10 ⁻⁵ kg/m s	Teoría cinética*
Peso molecular	28.996 kg/kmol	153 kg/kmol

* En caso de no saber el valor preciso de la viscosidad, Fluent ofrece la opción de calcularla haciendo uso de la teoría cinética.

El paquete Fluent permite elegir al usuario entre dos tipos de algoritmos para la solución de las ecuaciones: "*Pressure-based*" o "*Density-based*". Históricamente hablando, el enfoque "*Pressure-based*" se desarrolló para flujos incompresibles de baja velocidad, mientras que el enfoque "*Density-based*" se utilizó principalmente para flujos compresibles de alta velocidad. Sin embargo, recientemente ambos métodos se han ampliado y reformulado para resolver y operar una amplia gama de condiciones de flujo más allá de su intención tradicional u original (ANSYS, 2013). El tipo de solucionador que se eligió fue el "*Pressure-based*", dado que este tipo de solucionador es mayormente utilizado para flujos incompresibles o ligeramente compresibles que se desplazan a bajas velocidades. Con respecto al algoritmo de solución se usó el esquema *SIMPLE Fase Acoplada*. El criterio de convergencia se determinó del orden de 1×10^{-4} y el tamaño de paso inicial fue de 1×10^{-5} s, el cual se incrementó paulatinamente hasta llegar a 1×10^{-3} s. La distribución inicial ($t = 0$) de las fases dentro del dominio matemático se muestra en la Figura 3.9b.

Debido a la robustez del modelo multifásico euleriano y con la intención de determinar las condiciones de frontera, parámetros de operación y modelos para las propiedades de la fase granular (apartado 2.3.7), y para las interacciones entre ambas fases (apartado 2.3.8), se calibró todo lo anterior mencionado con una serie de simulaciones en 2D, esto permitió disminuir los tiempos de cálculo y posteriormente correr las simulaciones en 3D. La Tabla 3.7 resume los modelos usados para las propiedades granulares y la Tabla 3.8 los modelos para las interacciones entre las fases.

Tabla 3.7. Modelos para las propiedades granulares.

Modelo	Caso a	Caso b	Caso c	Caso d
Viscosidad granular	Syamlal O.	Gidaspow	Syamlal O.	Syamlal O.
Viscosidad granular del bulk	Lun y cols.	Lun y cols.	Lun y cols.	Lun et al.
Presión de sólidos	Lun y cols.	Syamlal O.	Syamlal O.	Syamlal O.
Temperatura granular	Algebraico	Algebraico	Algebraico	Algebraico
Viscosidad friccional	Schaeffer	Schaeffer	Schaeffer	Schaeffer
Presión friccional	Based-ktgf	Based-ktgf	Based-ktgf	Syamlal et al.
Fracción límite de empaque	0.61	0.61	0.61	0.61
Distribución radial	Lun y cols.	Lun y cols.	Syamlal O.	Syamlal O.
Módulo de elasticidad	Derived	Derived	Derived	Derived

Tabla 3.8. Modelos para las interacciones entre las fases.

Modelo	Caso a	Caso b	Caso c	Caso d
Coefficiente de arrastre	Gidaspow	Syamlal O.	Syamlal O.	Syamlal O.
Dispersión turbulenta	López de Bertodano	Simonin	López de Bertodano	López de Bertodano

3.3. Etapa 3

Esta etapa consistió en el desarrollo de la simulación en 2D del proceso CLC (Caso 2) contemplando las reacciones químicas y para partículas de 150 micras de diámetro. Previamente a la simulación del proceso completo, se hicieron pruebas únicamente en el combustor, con la finalidad de calibrar la simulación de la reacción heterogénea. Posterior a ello, se simuló el proceso completo. Las condiciones de frontera son las mismas que las que se muestran en la Figura 3.9 b y en la Tabla 3.5, las propiedades termo-físicas se enlistan en la Tabla 3.6.

3.4. Etapa 4

En esta etapa del trabajo se realizaron modificaciones en la temperatura del gas y en las velocidades de entrada de los gases. La Tabla 3.9 resume las condiciones de frontera y de operación.

Tabla 3.9. Condiciones de frontera y de operación para los casos 3 y 4.

Condición de frontera	Caso 3	Caso 4
Velocidad de entrada al regenerador ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$)	1.2	1.2
Velocidad de entrada al lecho sellador ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$)	0.004 m/s	0.004 m/s
Velocidad de entrada al combustor ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$)	0.02	0.08
Presiones en las entradas (atm)	1	1
Temperatura del gas (K)	1300	1300

Los valores para la temperatura y las velocidades de entrada de gas al combustor y regenerador se tomaron a partir de las condiciones de las simulaciones del caso 1 y 2, que sirvieron como referencia.

IV.RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En este capítulo se muestran y discuten los resultados obtenidos en cada una de las simulaciones en Fluent de Ansys Workbench®.

4.1. Resultados de la calibración de los sub-modelos para las interacciones entre las fases.

En la Figura 4.1 es posible observar los contornos de fracción de volumen de ilmenita después de 1 segundo en la geometría 2D con diferentes modelos para las propiedades granulares y de interacción entre las fases.

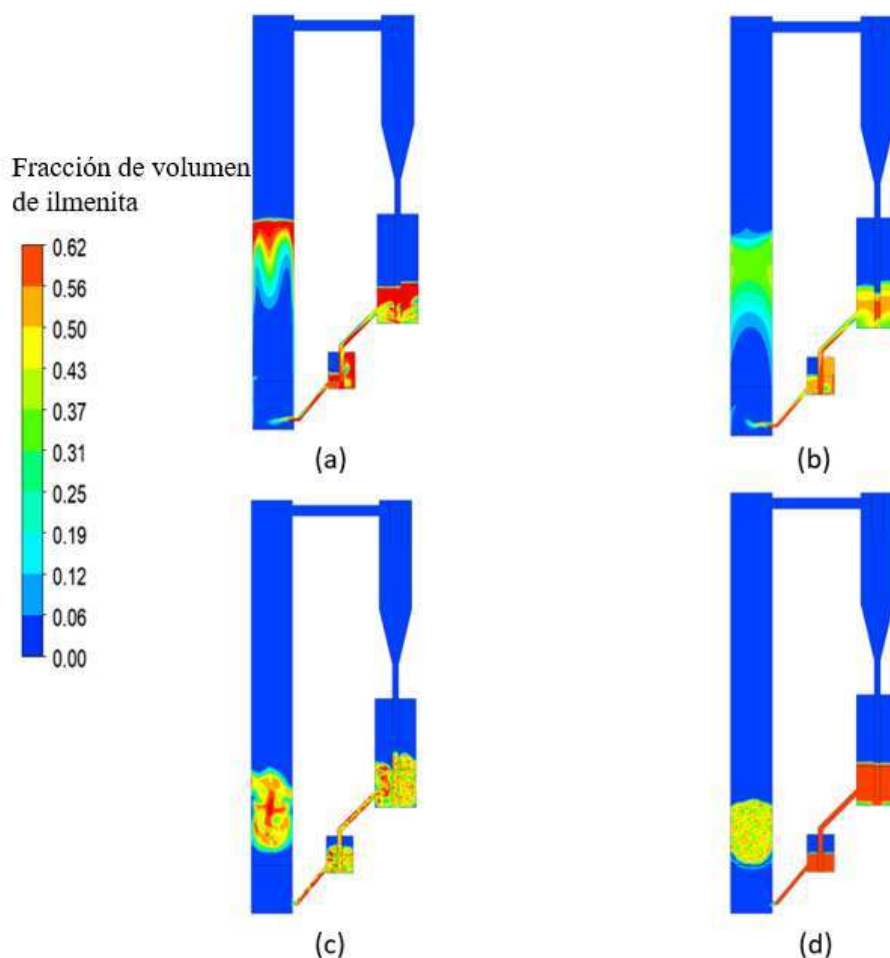


Figura 4.1. Contorno de fracción de volumen de ilmenita con diferentes modelos para las propiedades granulares y de interacción entre las fases. a) caso a, b) caso b, c) caso c y d) caso d.

A partir del análisis de los resultados obtenidos con las simulaciones en 2D, se decidió tomar los modelos usados en la simulación del caso b, dado que representa de mejor manera el perfil que se espera describan las partículas de ilmenita al ser arrastradas por el aire en el regenerador y en el combustor, ambos en régimen de lecho fluidizado.

4.2 Resultados del efecto del tamaño de partícula sobre la fluidodinámica dentro del sistema CLC.

En la Figura 4.2 se muestran contornos de fracción de volumen de la fase granular a 30 s para cada uno de los diferentes diámetros. Si en el sistema CLC se tienen partículas de 80 μm (Figura 4.2 a)), los contornos axiales muestran que la fase granular es arrastrada fuera del sistema por la fase gaseosa, tanto en el regenerador como en el combustor; por lo tanto, no es factible usar este tamaño de partícula. En el caso de partículas de 120 μm (Figura 4.2 b)), se nota un comportamiento similar en el regenerador debido a que la fase granular es completamente arrastrada; por otro lado, en el combustor y en el lecho sellador aún hay presencia de partículas, pero en régimen de fluidización no burbujeante. Cuando se usan partículas de 150 μm (Figura 4.2 c)), en el regenerador se observa un régimen de fluidización turbulento con transporte neumático de partículas, mientras que en el combustor y en el lecho sellador se observa un régimen de fluidización burbujeante, lo que indica que este tamaño de partícula es adecuado para el sistema CLC. En caso de usar partículas de 180 μm (Figura 4.2 d)) o 220 μm (Figura 4.2 e)), en el regenerador se aprecia un comportamiento similar al régimen de "slugging plano" con partículas formando aglomeraciones que dificultan el transporte neumático; mientras que en el combustor y en el lecho sellador se observa un nivel bajo de la fase granular, debido a que el efecto de la fuerza de gravedad hace que las partículas se desplacen con dirección descendente. Finalmente, si se utilizan partículas de 270 μm (Figura 4.2 f)), se puede observar que la fase granular se encuentra en régimen de fluidización mínima en todo el sistema CLC, lo que imposibilita el transporte de las partículas entre regenerador y combustor. Es claro que el régimen de fluidización que más favorece a las reacciones de oxidación y reducción de la ilmenita en el regenerador es el régimen de fluidización turbulenta con arrastre neumático en el regenerador, dado que permite mejor

la interacción de ambas fases, este régimen corresponde a partículas de 150 μm de diámetro.

En la (Figura 4.3), se analizan los contornos transversales de fracción de volumen. Cuando se usan partículas de 80 μm (Figuras 4.3 a)) o 120 μm (Figura 4.3 b)), se observa baja presencia de la fase granular, similar a lo observado en los contornos axiales (Figuras 4.2 a) y 4.2 b)). Por otro lado, cuando las partículas en el sistema son de 150 μm , también se constata mejor distribución de las partículas, como en los perfiles axiales de contorno (Figura 4.2c). Al emplear partículas de 180 μm (Figura 4.3 d)), es evidente la presencia considerable de la fase granular en la sección transversal, esta concentración de partículas se corresponde con lo mostrado en los perfiles axiales (Figura 4.2 d)); sin embargo, esa concentración alta de la fase granular no se mantiene a lo largo del regenerador, como puede verse en el contorno axial del plano vertical de la (Figura 4.2d), hay regiones con baja concentración de partículas. Al usar partículas de 220 μm (Figura 4.3e), se observa una región central sin presencia de la fase granular y alrededor de esta, una región con poca concentración de partículas, lo que claramente indica que no hay buen régimen de fluidización. Finalmente, en la (Figura 4.3f) podemos observar que la fase granular ocupa completamente el espacio mostrado en el contorno del plano, esto debido a que las fuerzas gravitacionales superan a las fuerzas de arrastre.

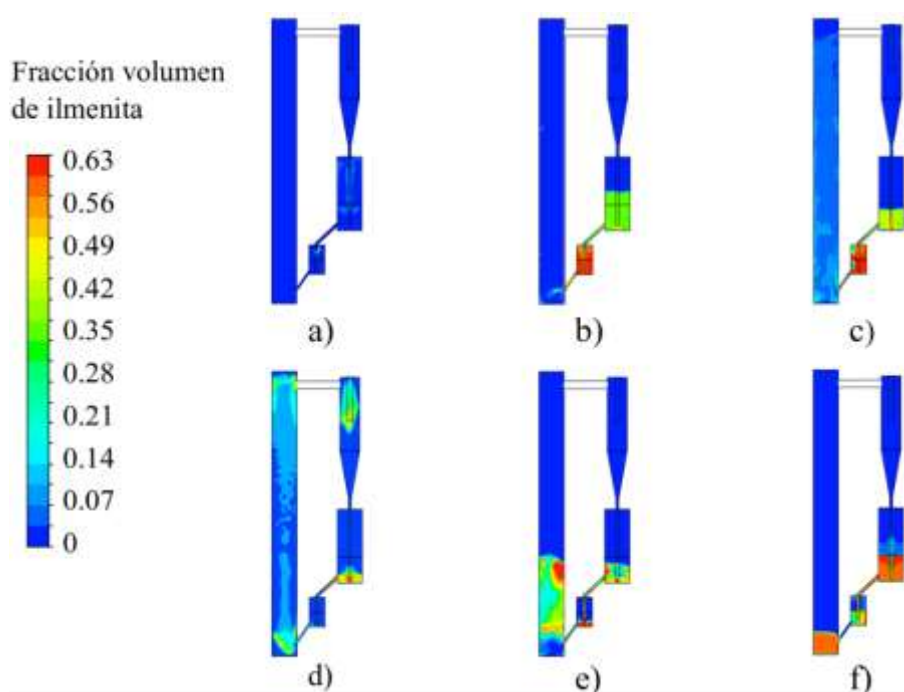


Figura 4.2. Contornos de fracción de volumen de ilmenita con diferentes diámetros de partículas: a) 80 μm , b) 120 μm , c) 150 μm , d) 180 μm , e) 220 μm y f) 270 μm .

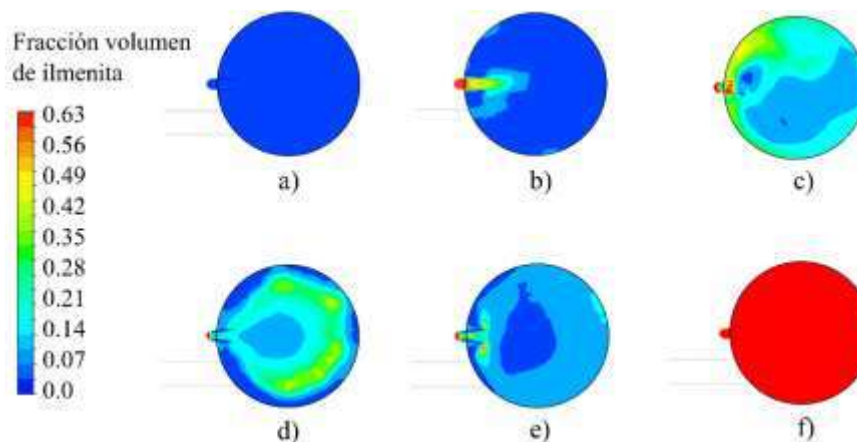


Figura 4.3. Contornos transversales de fracción de volumen de ilmenita a 30 segundos del arranque, en la sección transversal a 0.1 m del fondo del regenerador. a) 80 μm , b) 120 μm , c) 150 μm , d) 180 μm , e) 220 μm , f) 270 μm .

4.2.1 Distribución de partículas y del perfil de velocidad axial promedio para los diferentes diámetros.

En esta sección se analizan los perfiles de distribución de partículas y de velocidad axial promedio en el regenerador, a tres distintas alturas: 0.5 metros, 0.8 metros y 1.5 metros.

En la Figura 4.4 se muestra la distribución de las partículas a 0.5 metros de altura donde es posible apreciar que es diferente para cada tamaño. La curva para las partículas de 80 μm se muestra casi horizontal con una fracción de volumen bajo. La distribución de las partículas de 120 μm muestra una fracción de volumen similar a las de 80 μm , sin embargo, el perfil no es horizontal sino cóncavo, es decir, con una mayor concentración de la fase granular en las cercanías de las paredes. Las partículas de 150 μm también presentan un perfil cóncavo, pero con una concentración mayor a la mostrada por las partículas de 120 μm , este perfil de distribución de las partículas es similar al obtenido en trabajos que se han desarrollado anteriormente para diámetros de 150 μm (Guan, Chang, Zhang, Wang, & Sun, 2014) (Shuai W. , y otros, 2011). La

distribución observada en las partículas de 180 μm es parecida a la observada en la curva de 150 μm . En la curva de distribución de partículas de 220 μm se observa un ligero incremento en la concentración de la fase granular en la región central de regenerador, sin embargo, el perfil es ligeramente convexo. La curva de fracción de volumen de las partículas de 270 μm es nulo, debido a que estas partículas no son arrastradas por el flujo de aire.

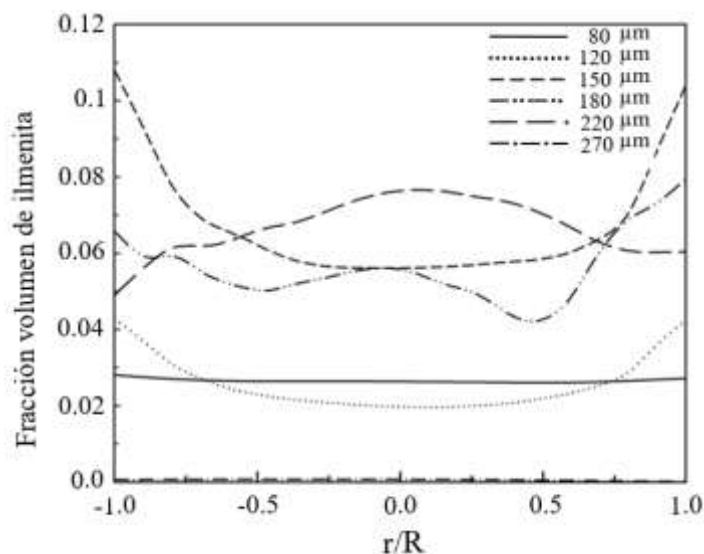


Figura 4.4. Distribución de partículas a 0.5 m de altura en el regenerador.

Por otro lado, los perfiles de velocidad axial mostrados en la Figura 4.5 exhiben curvas convexas para las partículas de 120 μm y 150 μm , estas curvas revelan un comportamiento ascendente en la región central del regenerador y en regiones cercanas a las paredes vemos velocidades negativas, indicando con esto un movimiento descendente. Estos perfiles se corresponden con los reportados en el trabajo de Guan y colaboradores (Guan, Chang, Zhang, Wang, & Sun, 2014). Los perfiles para los demás diámetros son cercanos a cero.

A 0.8 metros de altura (Figura 4.6), la distribución de las partículas es similar a la observada en el gráfico a 0.5 metros (Figura 4.4). Las partículas con diámetros de 120 μm y 150 μm exhiben perfiles cóncavos, siendo mayor la fracción de sólidos de la curva de 150 μm .

El perfil de velocidades axiales a 0.8 m de altura (Figura 4.7) es similar al mostrado para 0.5 m de altura. Se puede apreciar que, de nuevo, las curvas

para las partículas de 120 μm y 150 μm mantienen un perfil convexo, sin embargo, se puede observar la disminución en la velocidad máxima alcanzada por la fase granular.

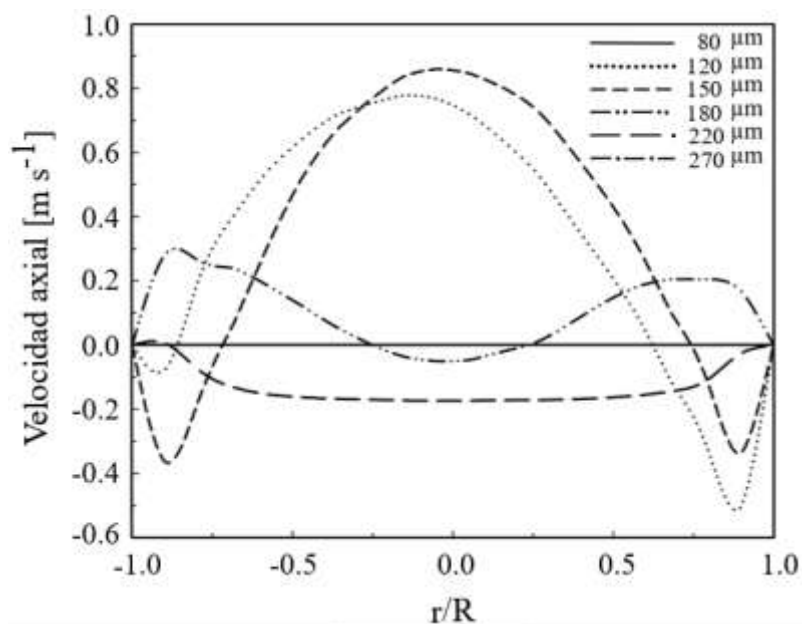


Figura 4.5. Perfiles de velocidad a 0.5 m de altura en el regenerador.

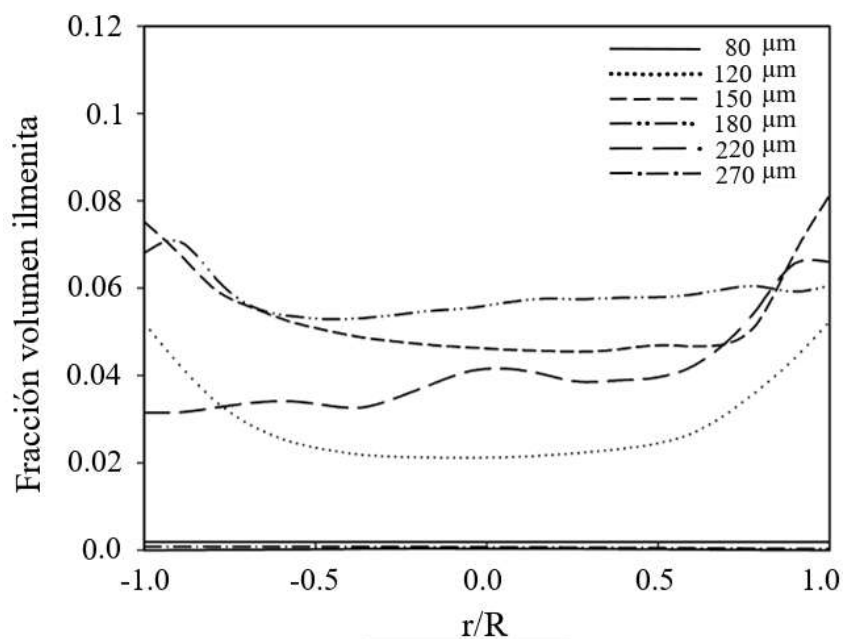


Figura 4.6. Distribución de sólidos a 0.8 m de altura en el regenerador.

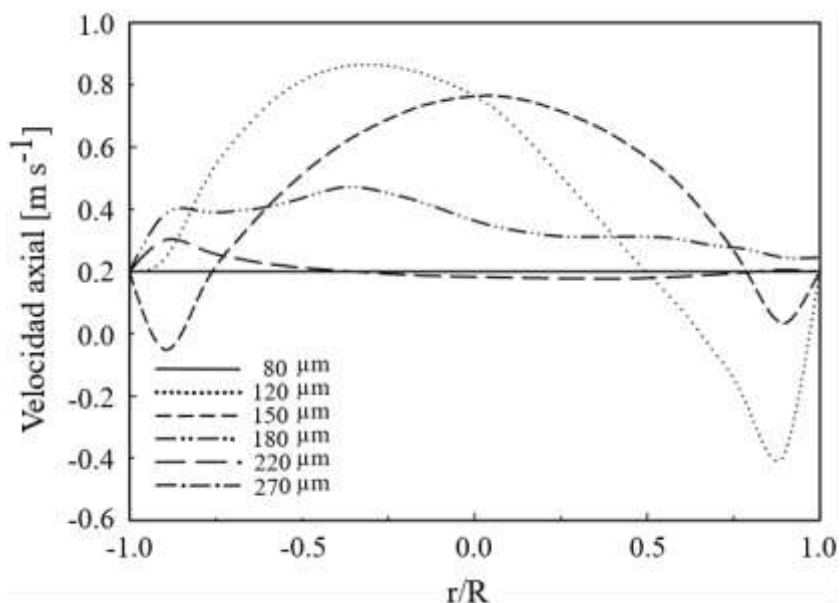


Figura 4.7. Perfiles de velocidad a 0.8 m de altura en el regenerador.

Para 1.5 metros de altura se observa la misma tendencia para los perfiles de concentración de la fase granular (Figura 4.8) observados a 0.8 metros (Figura 4.6); sin embargo difieren en la concentración de la fase granular, pues a 1.5 metros de altura la fracción de volumen de sólidos disminuye ligeramente.

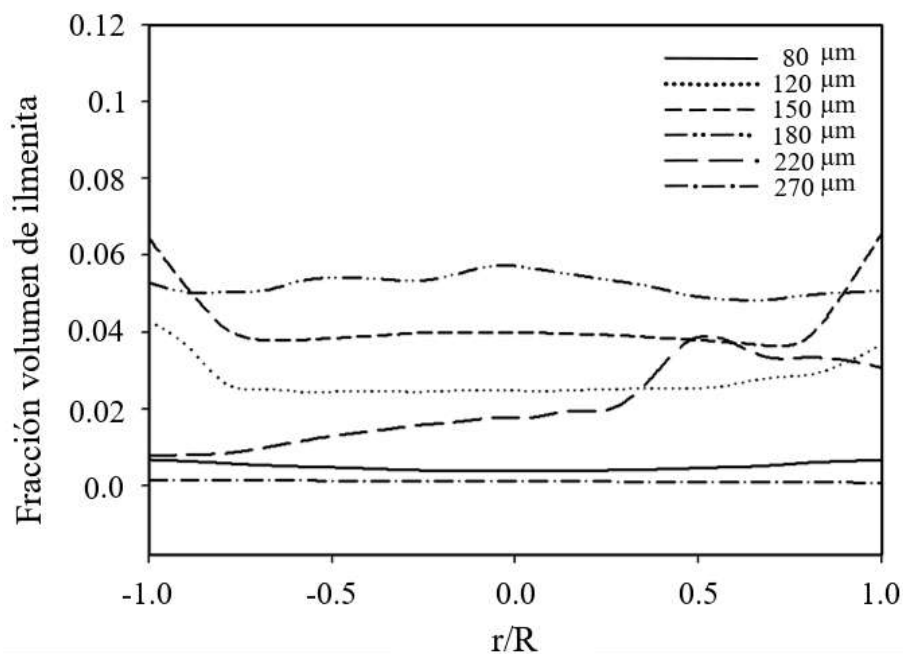


Figura 4.8. Distribución de sólidos a 1.5 m de altura en el regenerador.

De manera similar los perfiles de velocidad axial a 1.5 m de altura (Figura 4.9) se observan similares a los anteriores, pero se aprecia de nuevo disminución en la velocidad axial de las partículas, de nuevo el perfil mostrado por las partículas de 120 μm y 150 μm es similar a los reportados en trabajos anteriores (Guan, Chang, Zhang, Wang, & Sun, 2014) (Shuai W. , y otros, 2011).

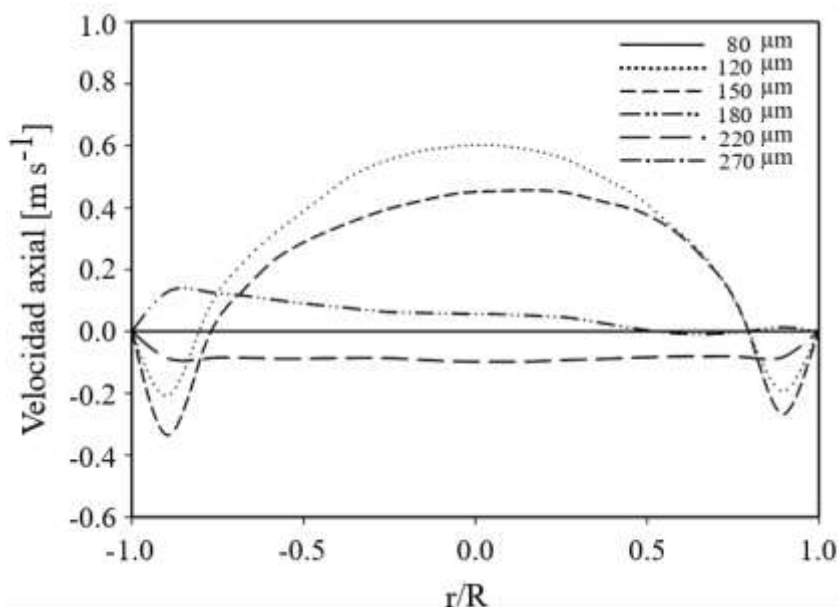


Figura 4.9. Perfiles de velocidad a 1.5 m de altura en el regenerador.

En la Figura 4.10 se muestra la distribución de las partículas en el combustor. En la gráfica es evidente que en general para todos los diámetros de partículas el lecho fluidizado se encuentra por debajo de 0.22 metros de altura, sin embargo, existen claras diferencias en la distribución de las partículas de distintos diámetros, las partículas de 270 μm muestran una concentración alta por debajo de 0.2 metros, esto se debe a que el lecho es difícilmente fluidizado por el flujo de aire. Las partículas de 120 μm , 150 μm y 180 μm muestran distribuciones similares por debajo de 0.2 metros con fracciones de volumen máximas de 0.44, esto es conveniente debido a que permite mayor fracción de volumen para la fase gaseosa y en consecuencia mejores condiciones para la reacción de combustión; sin embargo, no es deseable tener valores altos de fracción de volumen en regiones altas del combustor, dado que esto podría causar que las partículas sean arrastradas fuera del sistema, en este sentido, las partículas de 150 μm son las que tienen una menor fracción de volumen por encima de los 0.2 m de altura.

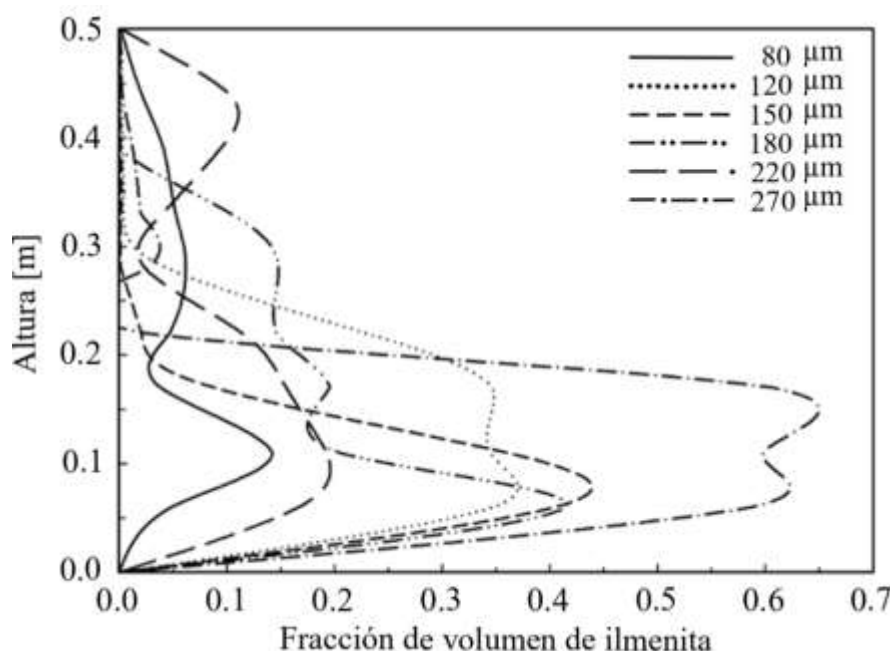


Figura 4.10. Perfiles de distribución de partículas en el combustor.

Con respecto a las partículas de 80 μm y 220 μm , se puede observar una fracción de volumen máxima de 0.2 la cual no es conveniente dado que puede perjudicar a la reacción de combustión. Los resultados en el combustor mostrados por los perfiles de la (Figura 4.10) indican de nuevo que las partículas de 150 μm de diámetro son las que tienen el comportamiento más idóneo dentro del combustor, este tamaño de partícula coincide con lo reportado por Sornumpol y colaboradores (Sornumpol, Uraisakul, Kuchonthara, Chalermssinsuwan, & Piumsomboon, CFD simulation of fuel reactor in chemical looping combustion, 2017), quienes a partir de un diseño de experimentos concluyen que el mejor tamaño de partícula corresponde a 150 μm .

Los perfiles de velocidad de la fase granular a lo largo del regenerador muestran que las partículas de 120 μm y 150 μm se encuentran satisfactoriamente fluidizadas, estos perfiles muestran cierta similitud con los obtenidos en el trabajo de Guan y colaboradores (Guan, Chang, Zhang, Wang, & Sun, 2014). De igual manera que en dicho trabajo, los perfiles de 120 μm y 150 μm muestran tres regiones: una región de entrada, una región de "bulk" y una región de salida, tal como se aprecia en la (Figura 4.11).

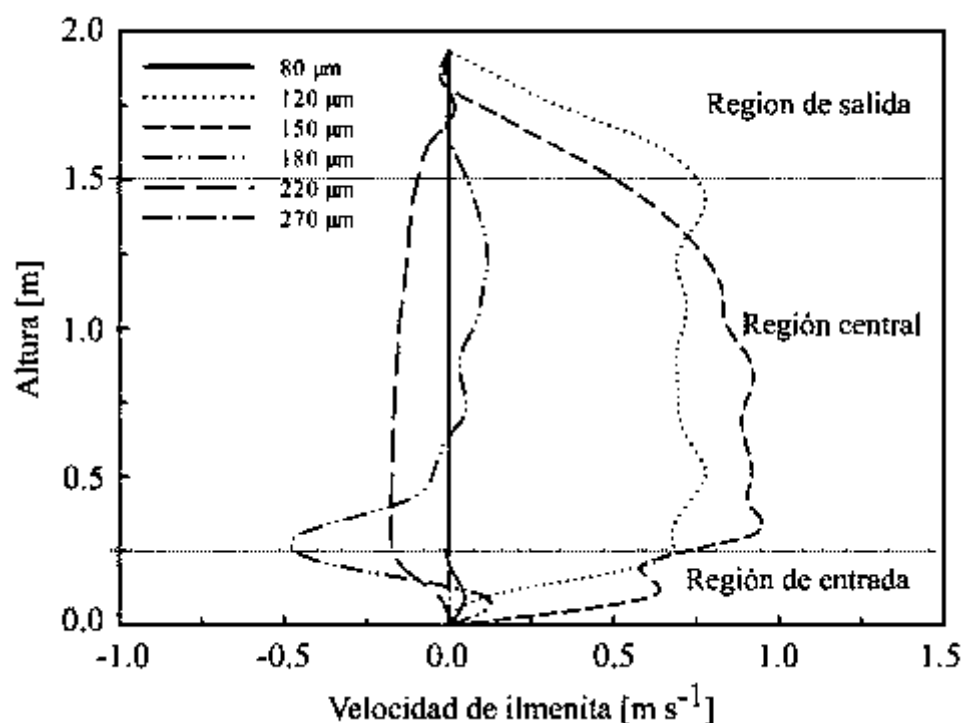


Figura 4.11. Perfiles de velocidad de la fase granular a lo largo del combustor.

4.2.2 Perfiles de temperatura en las salidas del separador ciclón y del combustor para partículas de diferentes tamaños.

Se muestran perfiles de temperatura en las salidas del separador ciclón en la Figura 4.12 y del combustor en la Figura 4.13 para los diferentes diámetros de partícula. Tanto en la (Figura 4.12) como en la (Figura 4.13) se observa que el sistema que mejor guarda el calor corresponde a las partículas de 150 μm de diámetros. Los casos que muestran mayor enfriamiento corresponden a las partículas de 80 μm y 270 μm de diámetro. Las partículas de 120 μm , 180 μm y 220 μm muestran temperaturas finales muy cercanas entre sí, sin embargo, todas están por debajo de la temperatura final del sistema de partículas de 150 μm . Estos perfiles de temperatura sugieren que los regímenes adecuados de fluidización para la fase granular, tanto en el regenerador como en el combustor, permiten reducir las pérdidas de calor por las salidas del sistema, mientras que los sistemas con peores regímenes de fluidización muestran perfiles de temperatura con mayor enfriamiento.

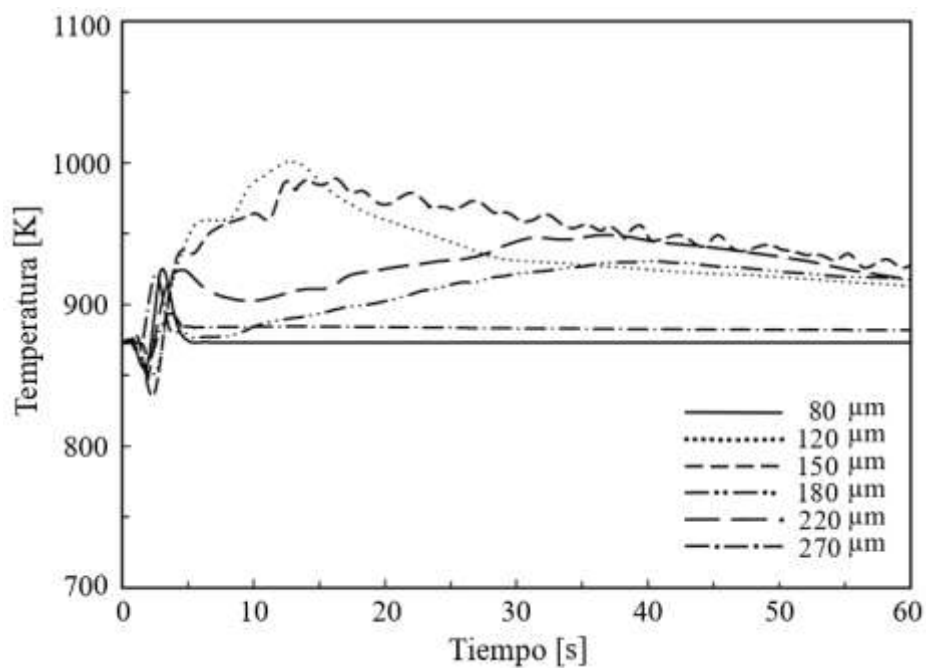


Figura 4.12. Perfiles de temperatura a la salida del ciclón.

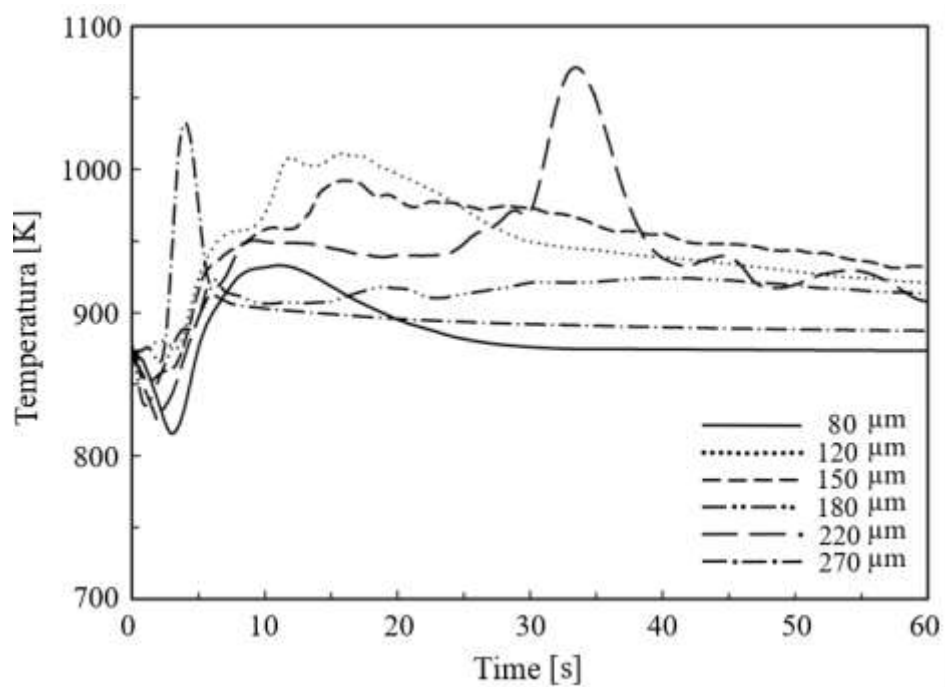


Figura 4.13. Perfiles de temperatura a la salida del combustor.

4.3 Resultados de la simulación con reacción heterogénea

Se desarrolló la simulación en 2D, considerando las reacciones químicas tanto en el combustor como en el regenerador. En esta etapa se usaron los parámetros cinéticos reales de las reacciones proporcionados en el trabajo de Abad y col. (Abad, y otros, 2011).

Para 60 segundos de simulación, en la Figura 4.14 se muestran los contornos de fracción de volumen de la fase granular, en él es posible observar un régimen de fluidización suave que permite la interacción adecuada entre la fase gaseosa y la fase granular, de manera que las reacciones se puedan llevar a cabo. Las reacciones simuladas fueron las mencionadas previamente en el apartado 3.1.1, es decir, las reacciones 3.7, 3.8 y 3.9. La Figura 4.14 muestra los contornos de la velocidad de reacción para las reacciones de combustión del gas de síntesis en el combustor (reacciones 1 y 2) y la oxidación de la ilmenita en el regenerador (reacción 3). Estos contornos verifican las reacciones dentro del sistema CLC y permiten identificar las partes del sistema donde ocurren. Los contornos de las velocidades de reacción 1 y 2 son muy similares porque corresponden a las reacciones de oxidación de los componentes del gas de síntesis (CO y H_2). También se puede observar que la velocidad de reacción es apreciable para los contornos de 30 y 50 segundos, lo que indica la presencia de la fase granular oxidada descendiendo a través del separador ciclónico. Con respecto al contorno de la velocidad de reacción 3, se observa que la reacción de oxidación de la fase granular tiene lugar en casi toda el área del regenerador. A los 30 segundos de simulación, también es posible observar la reacción ocurriendo en el separador ciclónico, incluso en la parte inferior, lo que indica cierto arrastre de oxígeno que no sale por la parte superior del separador ciclónico.

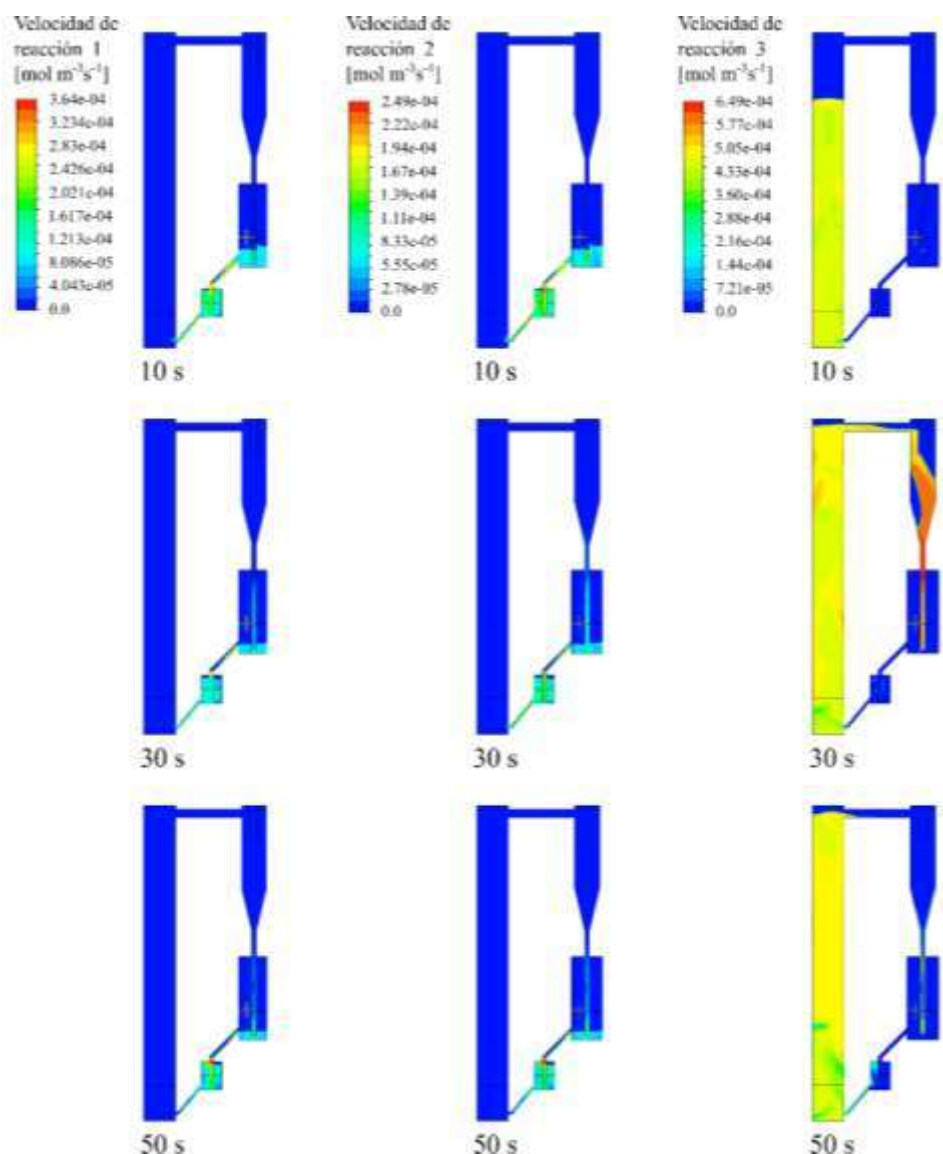


Figura 4.14. Contornos de la velocidad de reacción a los 10, 30 y 50 segundos de simulación. a) Reacción 1, b) Reacción 2, y c) Reacción 3.

Por otro lado, la Figura 4.15 muestra un contorno del calor de reacción a los 10 segundos de simulación, a partir del cual podemos observar en qué parte del sistema ocurren las reacciones más exotérmicas. En este caso, tienen lugar en el combustor.

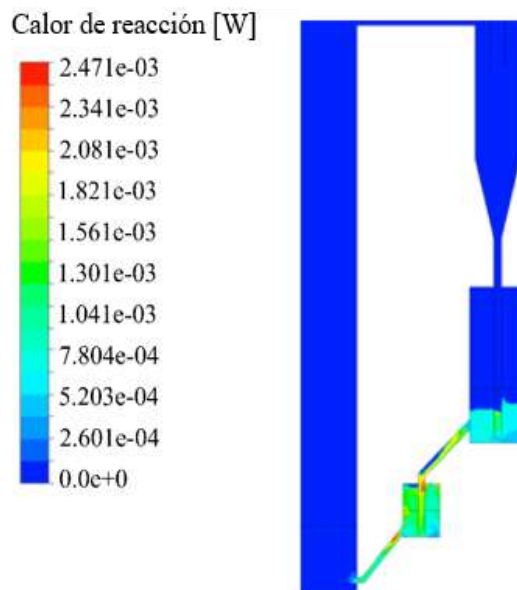


Figura 4.15. Contorno del calor de reacción a los 10 segundos de simulación.

En la Figura 4.16, se observan los contornos de temperatura en diferentes momentos, donde es posible apreciar que la región con la temperatura más alta se encuentra en el combustor y en el lecho sellador, precisamente los dos recipientes donde ocurren las reacciones de oxidación del gas de síntesis. Estos contornos de temperatura son muy útiles debido a que proporcionan una visión general del comportamiento térmico del sistema CLC. Aunque la región más caliente está en el combustor, las partículas transportadoras de oxígeno de este reactor llevan consigo parte de esa energía térmica. Por lo tanto, sería necesario aprovechar la mayor cantidad de calor posible antes de que las partículas lleguen al regenerador.

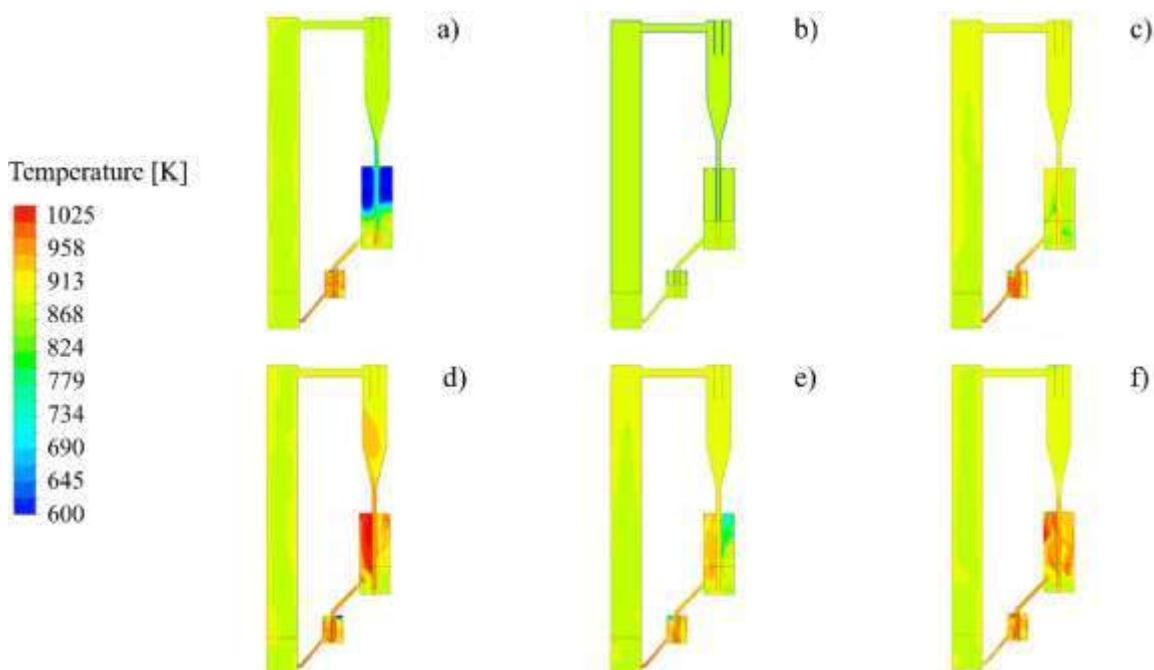


Figure 4.16. Contornos de temperatura. a) 0 s, b) 10 s, c) 20 s, d) 30 s, e) 40 s, and f) 50 s.

El gráfico mostrado en la Figura 4.17 presenta los perfiles de temperatura en las salidas del sistema (separador ciclón y combustor). Según estos gráficos, los gases en las salidas del sistema exhiben alta temperatura, alrededor de 900 K, y es precisamente este calor el que podría utilizarse para generar vapor y aprovecharlo en una planta de generación de energía. La Figura 4.17 también muestra la resiliencia en términos de mantener la temperatura del sistema, lo cual es crucial para la viabilidad del aprovechamiento energético. Específicamente, las curvas en el gráfico revelan que el comportamiento térmico es estable a la salida del separador ciclónico. Al mismo tiempo, el combustor exhibe comportamiento variable atribuido al lecho fluidizado burbujeante mantenido en ese equipo.

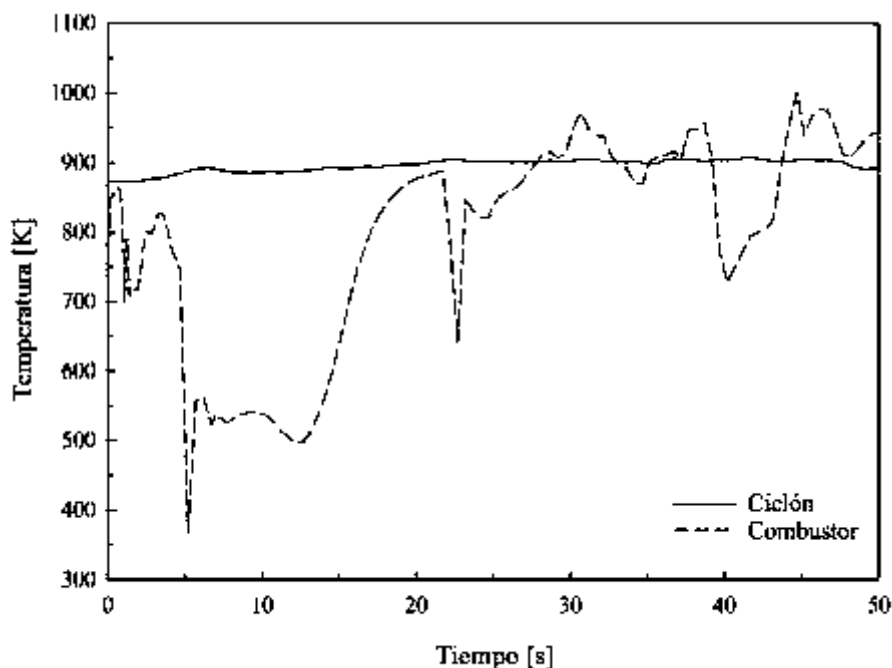


Figura 4.17. Perfiles de temperatura en las salidas del separador ciclón y del combustor.

La Figura 4.18 presenta gráficos de la concentración molar tanto para los gases de combustión (CO_2 y H_2O) como para los componentes del gas de síntesis (CO y H_2). En la Figura 4.18 a), se observa un aumento en la concentración de los gases de combustión en los primeros 15 segundos, seguido de una disminución después de 15 segundos, estabilizándose en una concentración aproximada de $1 \times 10^{-4} \text{ mol m}^{-3}$. Por otro lado, la Figura 4.18 b) muestra la concentración de los gases del gas de síntesis. Es posible observar una disminución en la concentración molar de hidrógeno en los primeros 23 segundos, seguida de un comportamiento más o menos constante. En contraste, el monóxido de carbono muestra un aumento en los primeros segundos, seguido de una disminución y un comportamiento similar a la concentración molar de hidrógeno.

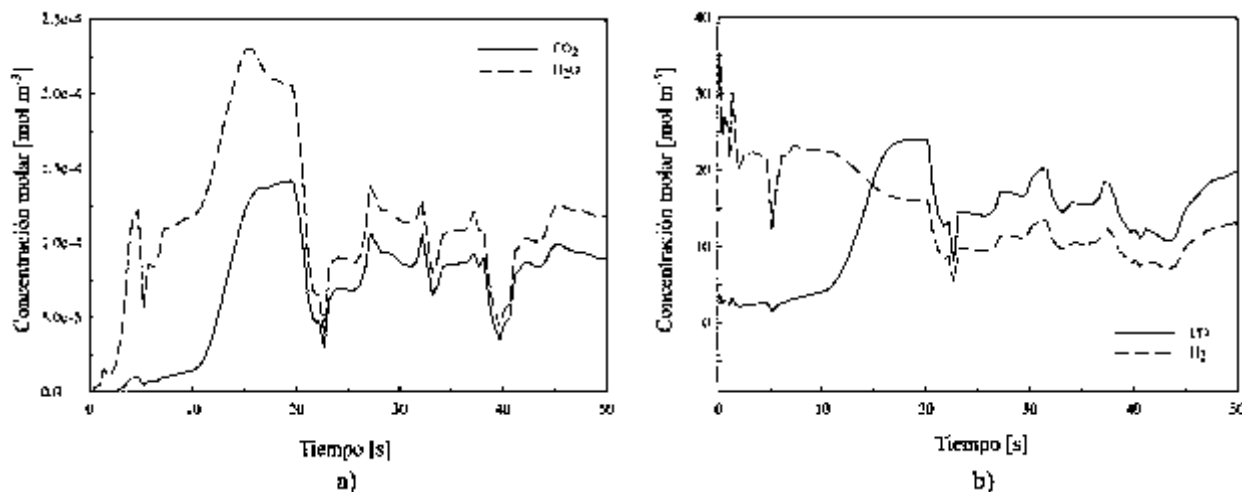


Figura 4.18. Gráficos de perfiles de concentración. a) Gases de combustión y b) gas de síntesis.

En la Figura 4.19, se muestran los gráficos del flujo másico de sólidos en el regenerador (Figura 4.19 a)) y el combustor (Figura 4.19 b)). En cuanto al regenerador, se puede observar que el flujo varía constantemente entre valores positivos y negativos, lo que indica la presencia de flujo de sólidos tanto ascendente como descendente. Sin embargo, el promedio medido durante los 60 segundos de simulación es de $-1.56 \text{ kg}\cdot\text{s}^{-1}$, lo que significa que es predominantemente ascendente. Por otro lado, en el combustor, hay menos variación en el flujo, con períodos donde el flujo de sólidos es prácticamente cero, esto se debe a que la fase granular forma un lecho fluidizado en el dicho reactor, lo que significa que no hay arrastre de sólidos. Durante los 60 segundos de simulación, el promedio es de $0.17 \text{ kg}\cdot\text{s}^{-1}$, con el signo que indica una dirección descendente, correspondiente a los sólidos que descienden a través de la pierna del separador ciclónico.

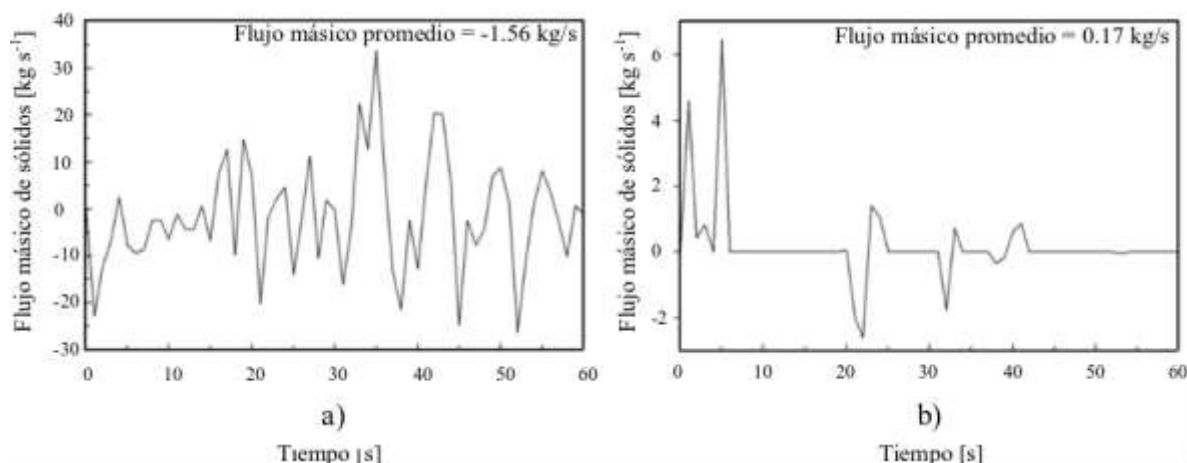


Figura 4.19. Flujo másico de sólidos. a) Regenerador y b) Combustor.

En la Figura 4.20 se muestra la relación de masa entre la fase granular y la fase gaseosa, tanto en el regenerador como en el combustor. Como era de esperar en una simulación en estado transitorio, se observan variaciones en las relaciones de masa dentro de los reactores a lo largo del tiempo. El gráfico muestra que la relación de masa en el combustor varía menos que en el regenerador, permaneciendo cercana a cero. Los promedios en el regenerador y en el combustor son 2.81 y 1.94, respectivamente.

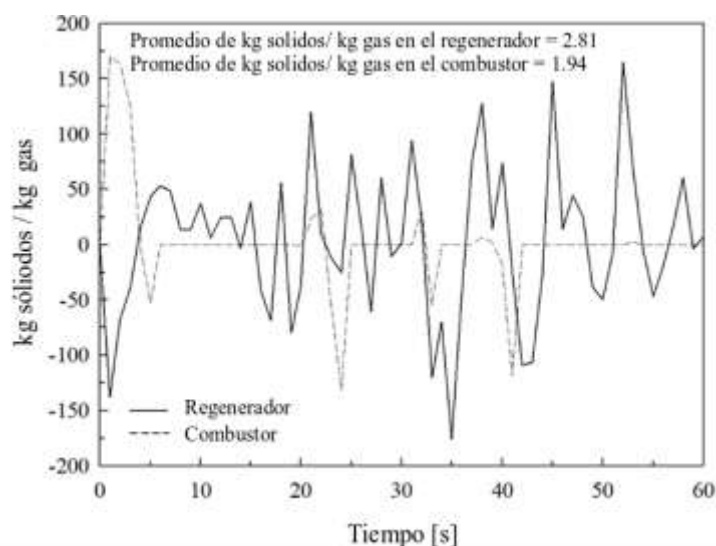


Figura 4.20. Relación de masa sólido-gas.

Finalmente, la Figura 4.21 presenta un gráfico del porcentaje de conversión de CO y H₂, mostrando porcentajes de conversión muy bajos para ambos gases. En la Figura 4.18b, se puede observar una cantidad significativa de gas de síntesis

no reaccionado; por otro lado, en la Figura 4.20, se puede ver a partir de las relaciones de masa que hay fase granular disponible en ambos reactores. Sin embargo, la Figura 4.21 demuestra conversiones muy bajas. Esto podría mejorarse buscando condiciones que favorezcan la cinética de las reacciones, puesto que no se trata de un problema de falta de reactivos, sino de la velocidad de reacción.

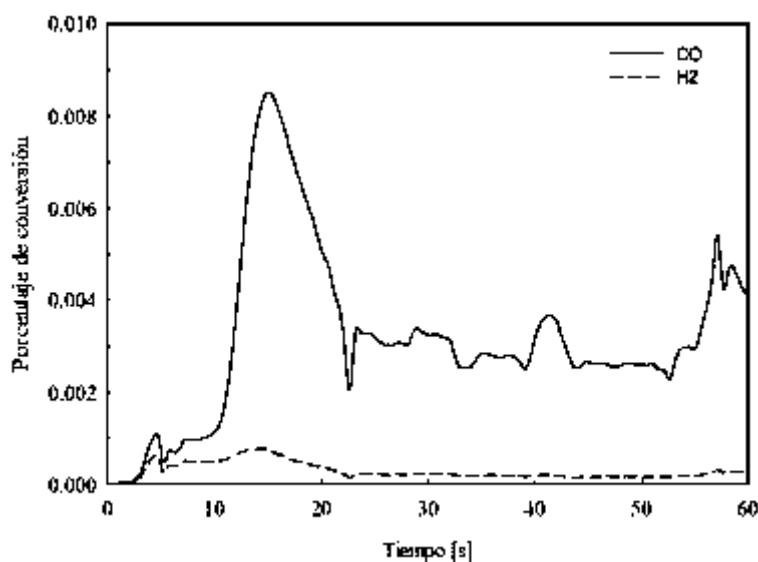


Figura 4.21. Porcentajes de conversión de H_2 y CO para el caso 1.

4.4 Resultados de las simulaciones con las modificaciones en las condiciones de frontera de temperatura y de velocidad de entrada de la fase gas.

Posteriormente a la simulación del caso 2 se procedió a modificar la temperatura y la velocidad de entrada de los gases al sistema, con la finalidad de mejorar la conversión de los gases combustibles. Los resultados de las simulaciones 3 y 4 se muestran en la Figura 4.22, en ella se observa un incremento en el porcentaje de conversión tanto para el hidrógeno (Figura 4.22a) como para el monóxido de carbono (Figura 4.22b), esto es atribuible a la modificación de la temperatura de la fase gaseosa, esto significa que un incremento en la temperatura resulta favorable para la cinética de la reacción.

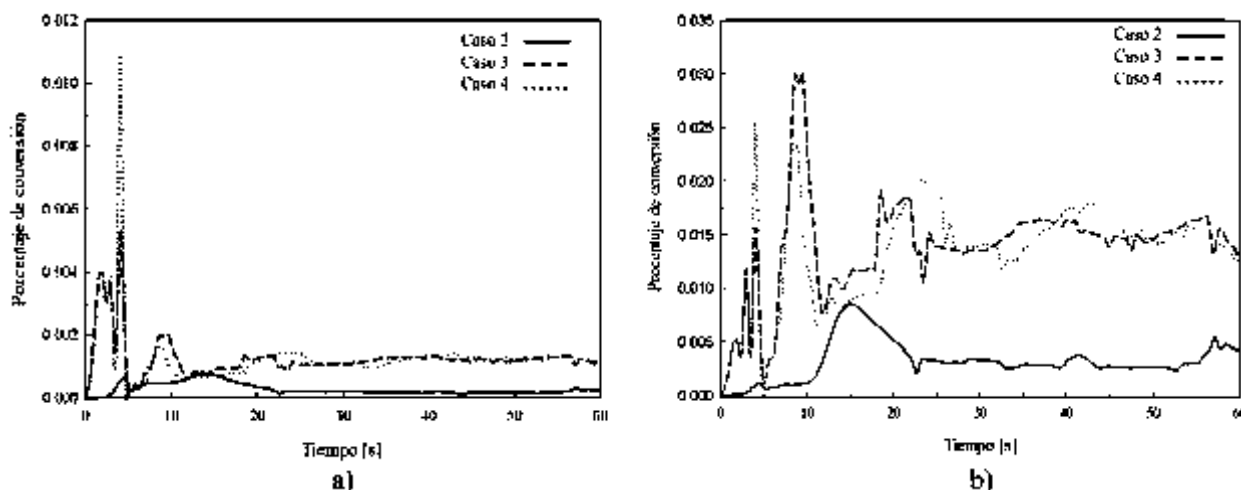


Figura 4.22. Gráfica de porcentaje de conversión para los casos 2, 3 y 4. a) Porcentaje de conversión para el hidrógeno y b) porcentaje de conversión para el dióxido de carbono.

Por otro lado, la variación de la velocidad de entrada de los gases combustible (H_2 y CO) impacta poco en lo que respecta a la conversión, esto puede verse en las gráficas de la Figura 4.22, pues las curvas para la conversión en los casos 2 y 3 varían poco una de otra, y dado que en lo único que difieren es en la velocidad de entrada de los gases, puede deducirse que esta variable (al menos en el rango en que se varió) afecta muy poco a la conversión.

5. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

5.1. Conclusiones

Los resultados obtenidos en este trabajo revelaron dos regímenes de fluidización distintos: un régimen de arrastre en el regenerador y un régimen de fluidización suave en el combustor. Este comportamiento, confirmado por el gráfico de distribución de partículas, muestra una concentración mayor de partículas en las regiones cercanas a las paredes del regenerador, lo cual es consistente con estudios previos encontrados en la literatura.

A pesar de que se logró simular las reacciones en el combustor y en el regenerador, los contornos de fracción molar indican que los gases combustibles (CO y H_2) no se consumen por completo, lo que se traduce en porcentajes de conversión bajos. Este hallazgo sugiere que las condiciones de reacción no son lo suficientemente óptimas, y que se deben mejorar para aumentar la conversión de estos gases. Se encontró también que el aumento en la temperatura de operación de la fase gaseosa demostró tener un efecto positivo sobre la conversión de los gases del combustible, lo que subraya la importancia de optimizar las condiciones térmicas en el proceso. De acuerdo con lo anterior, se identificaron varias alternativas para mejorar el diseño y las condiciones operativas del sistema. Reducir el diámetro de las partículas del material portador de oxígeno podría aumentar el área de contacto con el combustible y mejorar la conversión. Aumentar la altura de los reactores permitiría extender el tiempo de residencia de los gases combustibles, favoreciendo una mayor conversión. Finalmente, la implementación de un sistema de recirculación de los gases de escape ricos en combustible también podría ser clave para optimizar la eficiencia del proceso de combustión. Estas mejoras permitirían aumentar la conversión de los gases, lo que se traduciría en una mayor eficiencia energética del sistema de combustión en ciclos químicos.

5.2. Recomendaciones para trabajo a futuro

Para trabajos futuros se recomienda:

1. Desarrollar la simulación en tres dimensiones.

2. Validar con un modelo físico la distribución de las partículas dentro de sistema CLC.
3. Realizar modificaciones en la geometría para aumentar la conversión de las reacciones de oxidación del combustible, tales como incrementar la longitud del combustor, de manera que se incremente el tiempo de residencia de las especies químicas.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Pieter, & Keeling, R. (2009). *ESRL*. Obtenido de NOAA: www.esrl.noaa.gov/gmd/ccgg/trends/
- Abad, A., Adanez, J., Cuadrat, A., Gracia-Labiano, F., Gayan, P., & Luis, F. (2011). Kinetics of redox reactions of ilmenite for chemical looping combustion. *Chemical Engineering Science* 66(4), 689-702.
- Adanez, J., Abad, A., García-Labiano, F., Gayan, P., & Luis, F. (2012). Progress in chemical-looping combustion and reforming technologies. *Progress in energy and combustion science* 38 (2), 215-282.
- Adánez, J., Gayán, P., Celaya, J., de Diego, L., García-Labiano, F., & Abad, A. (2006). Chemical looping combustion in a 10 kWth prototype using a CuO/Al₂O₃ oxygen carrier: Effect of operating conditions on methane combustion. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 45(17), 6075-6080.
- Agency, I. E. (2008). IEA Energy Policies Review: The European Union. *OECD Publishing*.
- Anderson, J., & Wendt, J. (1995). Computational fluid dynamics. *Springer*.
- ANSYS. (2013). Ansys Fluent Theory Guide. *Theory Guide*.
- Archer, C., & Jacobson, M. (2005). Evaluation of global wind power. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 110(D12).
- Blaser, P., & Chandran, R. (2009). Computational simulation of fluidization dynamics inside a commercial biomass gasifier. *Proceedings of the 2009 AIChE Annual Meeting, Nashville, TN, USA*.
- Breidenich, C., Magraw, D., Rowley, A., & Rubin, J. (1998). The Kyoto protocol to the United Nations framework convention on climate change. *The American Journal of International Law*, 315-331.
- Cho, P. (2005). Development and characterisation of oxygen carrier materials for chemical looping combustion. *Chalmers University of Technology Göteborg, Sweden*.
- Cloete, S., Johanse, S., & Amini, S. (2010). Multiphase CFD based models for a chemical looping combustion process. *Proceedings of the 1st International Conference on Chemical Looping, Lyon, France*.
- Ekström, C., Schwending, F., Biede, O., Franco, F., Haupt, G., De Koeijer, G., & Rokke, P. (2009). Techno-economic evaluations and benchmarking of pre-combustion CO₂ capture and oxy-fuel processes developed in the European ENCAP project. *Energy Procedia* 1(1), 4233-4240.

- Equipe ESSS. (Junio de 2016). *Dinámica de Fluidos Computacional*. Obtenido de <https://www.esss.co/es/blog/dinamica-de-fluidos-computacional-que-es/>
- Ergun, S. (1952). Fluid flow through packed columns. *Chem. Eng. Prog.*, 48, 89-94.
- Fan, L. (2010). *Chemical Looping Systems for Fossil Fuel Energy Conversions. Inc., Publication, Hoboken, New Jersey, USA.*
- Gitay, H. (2002). Biodiversity IPCC Technical Paper. *Change Climate*.
- Guan, Y., Chang, J., Zhang, K., Wang, B., & Sun, Q. (2014). Three dimensional CFD simulation of hydrodynamics in an interconnected fluidized bed for chemical looping combustion. *Powder technology* 268 , 316-328.
- International Energy Agency. (2006). Energy technology perspectives. *Office of Energy Technology, R&D. and Group of Eight (Organization)*.
- Ishida, M., & Jin, H. (1994). A novel combustor based on chemical-looping reactions and its reaction kinetics. *Journal of chemical engineering of Japan* 27(3), 296-301.
- Jerndal, E., Mattisson, T., & Lyngfelt, A. (2006). Thermal analysis of chemical-looping combustion. *Chemical Engineering Research and Design* 84(9), 795-806.
- Johansson, E., Lyngfelt, A., Mattisson, T., & Johnsson, F. (2003). Gas leakage measurements in a cold model of an interconnected fluidized bed for chemical-looping combustion. *owder Technology* 134(3), 210-217.
- Kerr, H. (2005). Capture and separation technologies gaps and priority research needs. *Elsevier Ltd. Oxford, UK*, 38(1).
- Kolbitsch, P., Pröll, T., Bolhar-Nordenkamp, J., & Hofbauer, H. (2009). Design of a chemical looping combustor using a dual circulating fluidized bed (DCFB) reactor system. *Chemical Engineering & Technology: Industrial Chemistry-Plant Equipment-Process Engineering-Biotechnology* 32(3), 398-403.
- Kronberger, B., & Lyngfelt, A. (2005). Design and fluid dynamic analysis of a bench scale combustion system with CO₂ separation chemical looping combustion. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 44(3), 546-556.
- Kronberger, B., Johansson, E., Löffler, G., Mattisson, T., Lyngfelt, A., & Hofbauer, H. (2004). A two-compartment fluidized bed reactor for CO₂ capture by chemical-looping combustion. *Chemical Engineering & Technology: Industrial Chemistry Plant Equipment Process Engineering Biotechnology* 27(12), 1318-1326.
- Kruggel-Emden, H., Rickelt, S., Stepanek, F., & Munjiza, A. (2010). Development and testing of an interconnected multiphase CFD-model for chemical looping combustion. *Chemical engineering science* 65(16), 4732-4745.

- Lyngfelt, A., & Thunman, H. (2005). Construction and 100 h of operational experience of a 10 kW chemical looping combustor. *Carbon dioxide capture for storage in deep geologic formations results from the CO₂ capture project (1)*, 625-645.
- Lyngfelt, A., Leckner, B., & Mattisson, T. (2001). A fluidized-bed combustion process with inherent CO₂ separation; application of chemical-looping combustion. *Chemical Engineering Science* 56(10), 3101-3113.
- Mahalatkar, K., Kuhlman, J., & Huckaby. (2011). Computational fluid dynamic simulations of chemical looping fuel reactors utilizing gaseous fuels. *Chemical engineering science* 66(3), 469-479.
- Mahalatkar, K., Kuhlman, J., Huckaby, E., & O'brien, T. (2011). Simulations of a circulating fluidized bed chemical looping combustion system utilizing gaseous fuel. *Oil & Gas Science and Technology* 66(2), 301-311.
- Mahalatkar, K., O'Brien, T., & Huckaby. (2010). Computational fluid dynamic simulation of the fuel reactor of a coal fired chemical looping combustor. *Proc 1st Int Conf on Chemical Looping. Lyon, France*.
- Masson-Delmotte, V., Zhai, P., Pörtner, H., Roberts, D., Skea, J., Shukla, P., . . . Pidcock, R. (2018). *Global Warming of 1.5 OC: An IPCC Special Report on the Impacts of Global Warming of 1.5° C Above Pre-industrial Levels and Related Global Greenhouse Gas Emission Pathways, in the Context of Strengthening the Global Response to the Threat of Climate Chang*. Geneva, Switzerland: World Meteorological Organization.
- Menon, K., Kavitha, G., & Patnaikuni, V. (2017). CFD simulation of fuel reactor for chemical looping combustion of Indian coal. *Fuel* 203, 90-101.
- Nakicenovic, N. (2007). World energy outlook 2007: China and India insights. *IEA/OECD*.
- Oro, J. M. (2012). *Técnicas numéricas en ingeniería de fluidos*. España: Reverté.
- Peng, Z., Doroodchi, E., Alghamdi, Y., Yusif, Shah, K., Luo, C., & Moghtaderi, B. (2015). CFD-DEM simulation of solid circulation rate in the cold flow model of chemical looping systems. *Chemical Engineering Research and Design* 95, 262-280.
- Petrakopoulou, F., Boyano, A., Cabrera, M., & Tsatsaronis, G. (2011). Exergoeconomic and exergoenvironmental analyses of a combined cycle power plant with chemical looping technology. *International Journal of Greenhouse Gas Control* 5(3), 475-482.
- R. Bird, W. S. (1987). *Fenómenos de Transporte: Un estudio sistemático de los fundamentos del transporte de materia, energía y cantidad de movimiento*. REPLA, S.A.

- Rubin, E., & De Coninck, H. (2005). IPCC special report on carbon dioxide capture and storage. UK: Cambridge University Press. TNO (2004): *Cost Curves for CO₂ Storage, Part 2*, 14.
- Ryu, H., Jin, G., & Yi, C. (2005). Demonstration of inherent CO₂ separation and no NO_x emission in a 50kW chemical looping combustor: continuous reduction and oxidation experiment. *Greenhouse Gas Control Technologies* 7, 1907-1910.
- Ryu, H., Jo, S., Park, Y., Bae, D., & Kim, S. (2010). Long term operation experience in a 50 kWth chemical looping combustor using natural gas and syngas as fuels. *1st International Conference on Chemical Looping*, 17-19.
- Shuai, W., Guodong, L., Huilin, L., Juhui, C., Yurong, H., & Jiaxing, W. (2011). Fluid dynamic simulation in a chemical looping combustion with two interconnected fluidized beds. *Fuel Processing Technology* 92(3), 385-393.
- Shuai, W., Yunchao, Y., Huilin, L., Jiaxing, W., Pengfei, X., & Guodong, L. (2011). Hydrodynamic simulation of fuel-reactor in chemical looping combustion process. *Chemical Engineering Research and Design* 89(9), 1501-1510.
- Smithson, P. (2001). Climate change 2001. *ContributioThird Assessment Report of Intergovernmental Panel on Climate Change*. Cambridge University, UK.
- Snider, D., & Clark, S. (2009). Eulerian-lagrangian method for three dimensional thermal reacting flow-an example of a syngas gasifier. *Proceedings of the 2009 AIChE Annual Meeting, Nashville, TN, USA*.
- Snider, D., Guenther, C., Dalton, J., & Williams, K. (2010). Eulerian-Lagrangian numerical scheme applied to the NETL bench-top chemical looping experiment. *1st International Conference on Chemical Looping*.
- Thomas, D., & Benson, S. (2005). Carbon Dioxide Capture for Storage in Deep Geologic Formations-Results from the CO₂ Capture Project: Vol 1-Capture and Separation of Carbon Dioxide from Combustion, Vol 2-Geologic Storage of Carbon Dioxide with Monitoring and Verification. *Elsevier*.
- Versteeg, H., & Malalasekera, W. (2007). An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method. *Pearson education*.
- Wen, & Yu, C. (1966). Mechanics of fluidization. *Chem. Eng. Prog. Symp. Ser.*, 62, p. 100-111.
- Zeng, L., Li, F., Kim, R., Bayham, S., McGiveron, O., Tong, A. & Wang, F. (2013). Coal Direct Chemical Looping Retrofit to Pulverized Coal Power Plants for In-Situ CO₂ Capture. *Ohio State University Research Foundation*.



Favio Antonio Ocampo Vaca

Análisis energético integral de un sistema de combustión en ciclos químicos usando dinámica de fluid

 Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo

Detalles del documento

Identificador de la entrega

trn:oid:::3117:443473678

Fecha de entrega

28 mar 2025, 8:20 a.m. GMT-6

Fecha de descarga

28 mar 2025, 8:24 a.m. GMT-6

Nombre de archivo

Análisis energético integral de un sistema de combustión en ciclos químicos usando dinámica de....pdf

Tamaño de archivo

1.3 MB

87 Páginas

21.001 Palabras

118.230 Caracteres

Formato de Declaración de Originalidad y Uso de Inteligencia Artificial

Coordinación General de Estudios de Posgrado
Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo



A quien corresponda,

Por este medio, quien abajo firma, bajo protesta de decir verdad, declara lo siguiente:

- Que presenta para revisión de originalidad el manuscrito cuyos detalles se especifican abajo.
- Que todas las fuentes consultadas para la elaboración del manuscrito están debidamente identificadas dentro del cuerpo del texto, e incluidas en la lista de referencias.
- Que, en caso de haber usado un sistema de inteligencia artificial, en cualquier etapa del desarrollo de su trabajo, lo ha especificado en la tabla que se encuentra en este documento.
- Que conoce la normativa de la Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, en particular los Incisos IX y XII del artículo 85, y los artículos 88 y 101 del Estatuto Universitario de la UMSNH, además del transitorio tercero del Reglamento General para los Estudios de Posgrado de la UMSNH.

Datos del manuscrito que se presenta a revisión		
Programa educativo	Doctorado en Ciencias en Ingeniería Química	
Título del trabajo	Análisis energético integral de un sistema de combustión en ciclos químicos usando dinámica de fluidos computacional	
	Nombre	Correo electrónico
Autor/es	Favio Antonio Ocampo Vaca	0501130d@umich.mx
Director	Rafael Maya Yescas	rafael.maya.yescas@umich.mx
Codirector	Constantin Alberto Hernández Bocanegra	constantin.hb@morelia.tecnm.mx
Coordinador del programa	José Apolinar Cortés	jose.apolinar@umich.mx

Uso de Inteligencia Artificial		
Rubro	Uso (sí/no)	Descripción
Asistencia en la redacción	No	N/A

Formato de Declaración de Originalidad y Uso de Inteligencia Artificial

Coordinación General de Estudios de Posgrado
Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo



Uso de Inteligencia Artificial		
Rubro	Uso (sí/no)	Descripción
Traducción al español	No	N/A
Traducción a otra lengua	No	N/A
Revisión y corrección de estilo	No	N/A
Análisis de datos	No	N/A
Búsqueda y organización de información	No	N/A
Formateo de las referencias bibliográficas	No	N/A
Generación de contenido multimedia	No	N/A
Otro	No	N/A

Datos del solicitante	
Nombre y firma	Favio Antonio Ocampo Vaca
Lugar y fecha	Morelia, Michoacán a 27 de marzo de 2025