

# MODELADO CFD DE OXICOMBUSTIÓN EN UN REACTOR VERTICAL

Gonzalez Tellez Paulina Blizey (1), Ramírez Vázquez Juan Antonio (2)

1 [Lic. en Ingeniería en Energías Renovables, Universidad de Guanajuato] | [Dirección de correo electrónico: pb.gonzaleztellez@ugto.mx]

2 [Departamento de Ciencias Ambientales, División Ciencias de la Vida, Campus Irapuato-Salamanca, Universidad de Guanajuato] | [Dirección de correo electrónico: juan.ramirez@ugto.mx]

## Resumen

La Oxidación actualmente es considerada una de las principales opciones para captura de CO<sub>2</sub>. El carbón es quemado con una mezcla de oxígeno y se redirige para su captura. Se utilizó el modelado de la dinámica de fluidos computacional (CFD) para diferentes atmósferas (21%-35% vol. O<sub>2</sub>) en un reactor vertical. Se predijeron y compararon los perfiles de temperatura, las tasas de combustión y las concentraciones de los gases. Se observó la velocidad de combustión en una atmósfera 21% O<sub>2</sub>/79% CO<sub>2</sub> en comparación con las propiedades del aire (21% O<sub>2</sub>/ 79% N<sub>2</sub>). Los resultados numéricos de la combustión con aire fueron reemplazados por CO<sub>2</sub> para 21% O<sub>2</sub>, y para una concentración de oxígeno superior al 30%.

## Abstract

Oxy-fuel combustion is currently considered one of the major options for CO<sub>2</sub> capture. The coal is combusted with a mixture of oxygen and recycled for sequestration. The modeling of computational fluid dynamics (CFD) for different atmospheres (21% -35% vol. O<sub>2</sub>) in a vertical reactor was used. The temperature profiles, burning rates and concentrations of species, were predicted and compared. The combustion rate was observed in an atmosphere 21% O<sub>2</sub> / 79% CO<sub>2</sub> compared to the air properties (21% O<sub>2</sub> / 79% N<sub>2</sub>). The numerical results of the combustion with air were replaced by CO<sub>2</sub> for 21% O<sub>2</sub>, and for an oxygen concentration higher than 30%.

## Palabras Clave

Oxidación; Dinámica de fluidos computacional; Modelo de turbulencia K- ε Realizable; Discretización Ordinaria)

## INTRODUCCIÓN

En la actualidad el efecto invernadero es una alarmante problemática, siendo una consecuencia del desarrollo económico, tecnológico e industrial de la humanidad, ya que durante las diferentes actividades para lograr dicho desarrollo son liberadas grandes emisiones de CO<sub>2</sub>. Existen alternativas para reducir la cantidad de CO<sub>2</sub> emitido a la atmósfera, sin embargo, estas no han sido suficientes, pues las emisiones siguen en aumento con el paso de los años [1]. La Oxidación es una tecnología que permite obtener gases de salida con CO<sub>2</sub> relativamente puro, facilitando así la captura y almacenamiento de este. La Oxidación consiste, básicamente, en la eliminación del nitrógeno (N), del aire (gas oxidante) para que la combustión sea llevada a cabo en una atmósfera compuesta por oxígeno y gases de salida ricos en CO<sub>2</sub>. De esta manera, el gas de salida consiste principalmente en CO<sub>2</sub> y vapor de agua. Por lo tanto, es una solución prometedora para reducir emisiones de CO<sub>2</sub> de las actividades industriales, además puede utilizarse para diferentes combustibles (Gas natural, carbón, biomasa) [2]. El modelado de la Dinámica de fluidos computacional (CFD) es una poderosa herramienta predictiva utilizada en la simulación de combustión, puede ser de gran ayuda para comprender las características de la combustión. El objetivo es evaluar el efecto que tiene un exceso de oxígeno en la combustión de diferentes tipos de carbón sometidos a diferentes condiciones [3].

## MATERIALES Y MÉTODOS

El método de modelado CFD consiste en discretizar una región del espacio creando una “malla espacial”, esta divide una región del espacio en pequeños volúmenes de control, después se resuelve en cada uno de ellos las ecuaciones de conservación discretizadas, de forma que en realidad se resuelve una matriz algebraica en cada celda de forma iterativa hasta que el residuo es suficientemente pequeño. Para realizar este tipo de modelado se utilizó el programa ANSYS FLUENT para simular el proceso de combustión con el modelo de turbulencia K-epsilon Realizable (RNG k- $\epsilon$ ) y el modelo de radiación de discretización Ordinaria (DO).

Se utiliza el modelo de Discretización Ordinaria debido a una mayor precisión y menor longitud óptica. El coeficiente de absorción de la mezcla de gases se calcula utilizando la suma ponderada del modelo de gases grises (WSGGM) [4]. Se tomó un valor de 0.9 para la emisividad del carbón de combustión. Se supone que la densidad inicial de las partículas es 1550 kg / m<sup>3</sup> para la semiantracita y 1400 kg / m<sup>3</sup> para las altas cantidades de carbón volátil, y se asume un calor específico de 0,68 J / kg K para todas las brasas involucradas. Se supone que las partículas son esféricas y su distribución de tamaño se ajusta a una distribución de Rosin-Rammler que varía de 75 a 150  $\mu$ m, con un tamaño promedio de 115  $\mu$ m. En este enfoque, las concentraciones de componentes individuales para las especies de interés se derivan de la distribución de fracciones de mezcla predicha. Se han incluido veinte especies que incluyen especies químicas (CO<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, CO, H<sub>2</sub>O, H<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> y SO<sub>2</sub>) y radicales y especies intermedias (C, H, O, N, S, OH, CS ...)

## RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Se han realizado simulaciones para el carbón HVN en aire y ambientes de oxígeno definidos, El objetivo de estas simulaciones es obtener una comprensión del comportamiento de la combustión de diferentes carbones en condiciones de oxidación. La fig. 1 muestra el perfil de temperaturas. La Fig. 2 muestra la concentración de O<sub>2</sub> en los gases de salida. Se observa como la flama comienza antes de la escala utilizada en el modelado, lo que provoca el nitrógeno es retrasar la reacción y la flama se desplaza hacia abajo (caso I) En cambio el CO<sub>2</sub> no, este se acerca a la zona de entrada del carbón. Pues el Cp del N<sub>2</sub> es diferente al del CO<sub>2</sub>. Y si se aumenta la concentración del oxígeno la flama se va acercando cada vez más a la entrada (caso II, III y IV). En La Fig. 4. Se muestra la referencia del mallado para el modelado CFD.

## REFERENCIAS

- [1] Bartolomé Muñoz C., Mora Peris, P. & Recalde Rodríguez, J. D. (2011). Estado del arte de las tecnologías de captura del CO<sub>2</sub> en la industria del cemento. Agrupación de fabricantes de cemento de España, ISBN 978-84-5702-8.
- [2] Esteban Hernando, M. P., Apellidos, B. B. & Apellidos, C. C. (año). Analisis de la transferencia de calor en la zona convectiva de una caldera de oxicomustión . Nombre de la revista, universidad de zaragoza.
- [3] Álvarez, L., Gharebaghi, M., Pourskashanian, M., Williams, A., Riaza, J., Pevida, C., Pis, J.J. & Rubiera, F. (2011). CFD modelling of oxy-coal combustion in an entrained flow reactor. Fuel Processing Technology, volume (92), doi: 10.1016/j.fuproc.2011.03.010
- [4] Hampartsoumian, E., Hainsworth, D., Taylor J. M., Williams, A., (2001). The radiant emissivity if some materials at high temperatures-review, Journal of the institute of energy, 74 91-99.

## TABLAS

**Tabla 1: CFD entradas para los gases y tasas de alimentación**

Atmósfera	Entrada de gas (g/min)	HVN
21%O <sub>2</sub> / 79% N <sub>2</sub>	1.548	0.110
21% O <sub>2</sub> / 79%CO <sub>2</sub>	2.118	0.110
30%O <sub>2</sub> / 70% CO <sub>2</sub>	2.058	0.157
35% O <sub>2</sub> / 65% CO <sub>2</sub>	2.016	0.182

HVN: Hullera vasco Leonesa, España

**Tabla 2: Análisis próximo y final, alto valor calórico de los carbones**

Muestra	HVN
Origen	España
Rango	Semiantracita
<b>Análisis aproximado (%peso, daf)</b>	
Contenido de humedad	1.1
Ceniza	10.7
VM	9.2
FC	80.1
<b>Análisis elemental (%peso, daf)</b>	
C	91.7
H	3.5
N	1.9
S	1.6
O	1.3

daf: bases secas y libres de ceniza

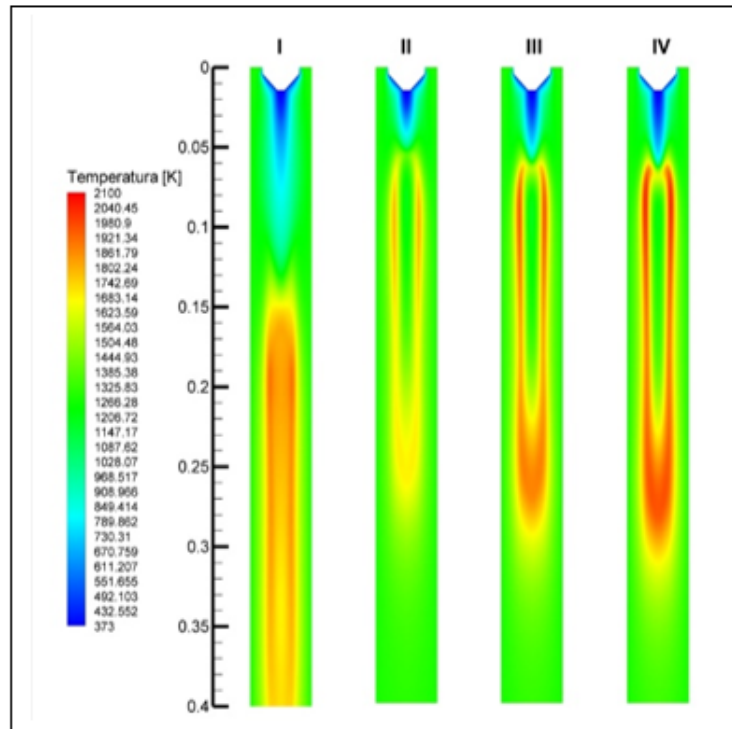


Figura 1: Perfil de temperatura (K) para el carbón HVN, para condiciones de atmósfera 21%O<sub>2</sub> / 79% N<sub>2</sub> (I); 21%O<sub>2</sub> / 79% CO<sub>2</sub> (II); 30% O<sub>2</sub>/ 70%CO<sub>2</sub>(III) Y 35%O<sub>2</sub> / 65%CO<sub>2</sub> (IV)

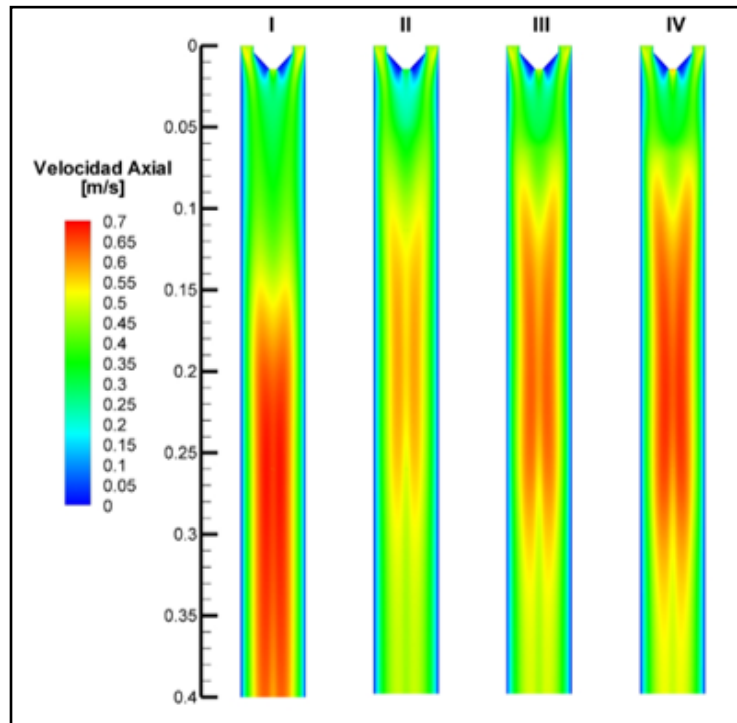
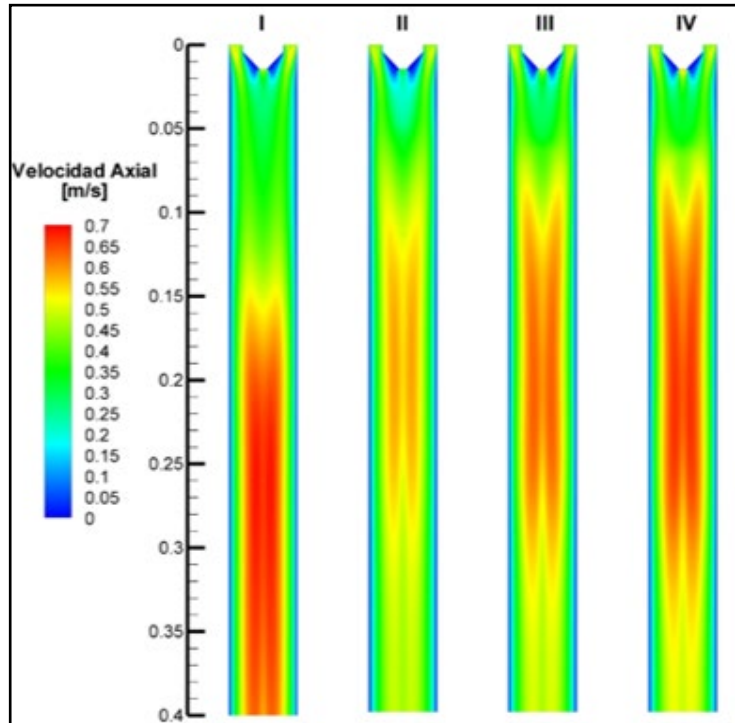
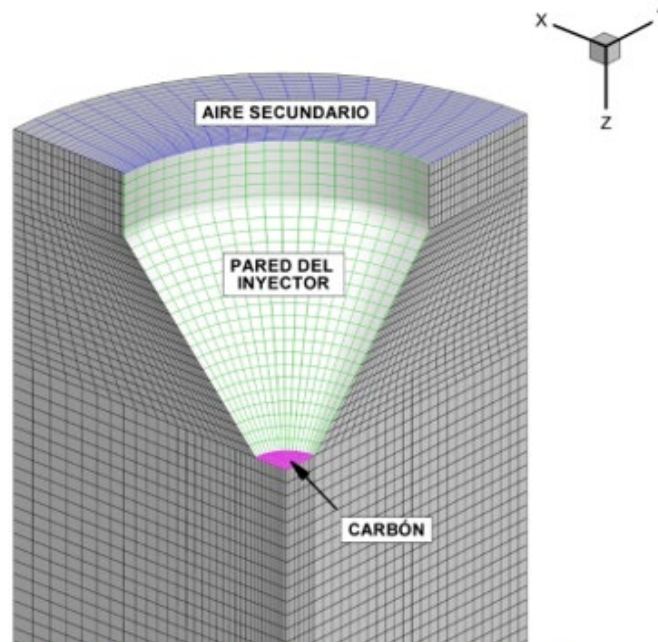


Figura 3: Concentración de O<sub>2</sub> en gases de salida para el carbón HVN (Semiantracita). Para condiciones de atmósfera 21% O<sub>2</sub>/79% N<sub>2</sub>(I), 21%O<sub>2</sub>/79%CO<sub>2</sub> (II); 30%O<sub>2</sub> /70%CO<sub>2</sub> (III) y 35%O<sub>2</sub> /65%CO<sub>2</sub> (IV)



**Figura 3: Velocidad axial para el carbón HVN (Semiantracita). Para condiciones de atmósfera 21% O<sub>2</sub>/79% N<sub>2</sub>(I), 21%O<sub>2</sub>/79%CO<sub>2</sub> (II); 30%O<sub>2</sub> /70%CO<sub>2</sub> (III) y 35%O<sub>2</sub> /65%CO<sub>2</sub> (IV)**



**Figura 4: Malla computacional utilizada en el modelado CFD**