



UNIVERSIDAD VERACRUZANA
FACULTAD DE INGENIERÍA MECÁNICA Y ELÉCTRICA

**“ESTUDIOS PRELIMINARES EN EL DISEÑO
DE UN REACTOR SOLAR PARA LA
GASIFICACIÓN POR VAPOR DE COQUE DE
PETRÓLEO”**

TESIS

**Que para obtener el título de:
INGENIERO MECÁNICO ELÉCTRICISTA**

**PRESENTA:
JOSÉ MARÍA SERRANO CORNELIO**

**DIRECTOR:
DRA. HEIDI ISABEL VILLAFÁN VIDALES**



XALAPA, VER.

MARZO 2015



UNIVERSIDAD VERACRUZANA
FACULTAD DE INGENIERÍA MECÁNICA Y ELÉCTRICA



AL C.
JOSE MARIA SERRANO CORNELIO
P R E S E N T E.

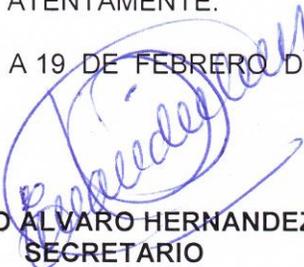
EN RELACION A SU SOLICITUD RELATIVA, ME ES GRATO TRANSCRIBIR A USTED A CONTINUACIÓN EL TEMA QUE APROBADO POR EL H. CONSEJO TÉCNICO Y LA DIRECCIÓN DE ESTA FACULTAD QUE PROPUESTO POR DR. HEIDI ISABEL VILLAFAN VIDALES LO DESARROLLE EN LA MODALIDAD DE TESIS DE INGENIERO MECANICO ELECTRICISTA.

“ESTUDIOS PRELIMINARES EN EL DISEÑO DE UN REACTOR SOLAR PARA LA GASIFICACION POR VAPOR DE COQUE DE PETROLEO”

CAPITULO I	INTRODUCCION
CAPITULO II	REACTORES SOLARES
CAPITULO III	ANALISIS DE DISTRIBUCION DE RADIACION
CAPITULO IV	SIMULACION DE FLUJO MASICO
CAPITULO V	SELECCIÓN DE MATERIALES Y DESCRIPCION DEL DISEÑO DE LA PIEZAS
	CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES FUTURAS
	REFERENCIAS

ATENTAMENTE.

XALAPA, VER. A 19 DE FEBRERO DEL 2015.


ING. GUILLERMO ALVARO HERNANDEZ VIVEROS
SECRETARIO

*jcc

Dedicada a:

*Mi mamá,
por ser mi motor, mi fuente de inspiración
y mi más grande motivación.*

*Mi papá,
porque tu lucha, experiencia y consejos
hacen que seas mi mayor ejemplo a seguir.*

*Mi hermano,
por ser una persona única e incomparable,
por brindarme tu apoyo en todo momento
y porque nunca termino de aprender de ti.*

AGRADECIMIENTOS

A la Dra. Heidi Isabel Villafán Vidales, mi directora de tesis, por su invaluable enseñanza, consejo, paciencia, apoyo y principalmente, su amistad.

Al Dr. Claudio A. Estrada Gasca, por compartirme parte de su valiosa experiencia, de su extenso conocimiento y principalmente, por abrirme las puertas de esta grandiosa experiencia dentro del Instituto de Energías Renovables de la Universidad Nacional Autónoma de México.

Al M. en C. Alejandro Bautista Orozco, por permitirme ser parte de este maravilloso proyecto. Por su excelente enseñanza, apoyo, orientación y amistad.

Al Dr. Moisés Montiel González, por su apoyo y orientación profesional. Por su amable hospitalidad y por el tiempo compartido en la realización de esta tesis.

A la Universidad Veracruzana, por brindarme todas las herramientas necesarias para mi crecimiento personal y profesional.

Al Instituto de Energías Renovables de la Universidad Nacional Autónoma de México, por el espacio, experiencia y por las clases complementarias a la elaboración de la tesis, las cuales fueron de gran ayuda para su elaboración.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT), por darme la oportunidad de ser parte del proyecto CONACYT 123767, Laboratorio Nacional de Sistemas de Concentración Solar y Química Solar, Segunda etapa.

Al Dr. Juan José Marín Hernández, de quien me siento afortunado de haber sido alumno en varias ocasiones, y de quien espero seguir aprendiendo mucho más.

A todos mis maestros de la Facultad de Ingeniería Mecánica Eléctrica de la Universidad Veracruzana, por haber inculcado en mí una pasión por los distintos campos del conocimiento de la noble labor que es la ingeniería.

A todos mis amigos cercanos, por compartir conmigo esta aventura de vida, por su excelente apoyo, paciencia y porque sé que siempre están ahí para verme crecer.

A todas esas personas inolvidables con las que he tenido la fortuna de coincidir, porque cada una me ha brindado momentos de aprendizaje y motivación, que me impulsan a superarme día con día.

ÍNDICE

AGRADECIMIENTOS	I
ÍNDICE DE FIGURAS	VI
ÍNDICE DE TABLAS	XVI
SÍNTESIS	XVIII
CAPÍTULO 1	1
1 INTRODUCCIÓN	1
1.1 Marco conceptual.....	1
1.1.1 Importancia de las energías renovables en el mundo.....	1
1.1.2 Energía Solar.....	3
1.1.3 Energía de concentración solar térmica.....	3
1.1.4 Sistemas de Concentración Solar.....	4
1.2 Generación termosolar de potencia.....	9
1.2.1 Impacto de la tecnología termosolar de concentración a nivel mundial.....	13
1.3 Situación energética actual en México.....	14
1.4 Laboratorio Nacional de Concentración y Química Solar.....	17
1.5 Energía solar en la producción de combustibles solares.....	21
1.5.1 Métodos termoquímicos solares de producción de hidrógeno.....	23
1.5.2 Reactores químicos solares.....	27
1.6 Conclusiones del capítulo.....	27
1.7 Objetivos del estudio.....	28
1.7.1 Estructura general del trabajo.....	29
CAPÍTULO 2	30
2 REACTORES SOLARES	30
2.1 Coque de petróleo.....	30
2.1.1 Elección del coque de petróleo.....	32
2.2 Gasificación.....	32
2.3 Reactores solares.....	33
2.3.1 Clasificación general.....	34
2.4 Estado del arte en reactores solares para la gasificación térmica de materiales carbonáceos.....	40

2.5 Propuesta preliminar del reactor solar para la gasificación térmica por vapor de coque de petróleo mexicano.....	54
2.6 Conclusiones del capítulo.....	56
CAPÍTULO 3.....	58
3 ANÁLISIS DE DISTRIBUCIÓN DE RADIACIÓN.....	58
3.1 Introducción.....	58
3.2 Radiación térmica.....	59
3.2.1 Absortividad, reflectividad y transmisividad	59
3.3 Descripción del código SolTrace	60
3.3.1 Metodología del código SolTrace	61
3.4 Modelado del sistema.....	62
3.5 Estudio de Independencia de rayos.....	65
3.6 Pruebas de distancia entre ventana y muestra para el reactor preliminar.....	67
3.7 Pruebas de distancia entre ventana y muestra para el reactor optimizado.	81
3.8 Conclusiones del capítulo.....	84
CAPÍTULO 4.....	85
4 SIMULACIÓN DE FLUJO MÁSSICO.....	85
4.1 Introducción.....	85
4.2 Propiedades termofísicas de los fluidos	85
4.3 Ecuaciones gobernantes del flujo.....	88
4.3.1 Principio de conservación de la masa	89
4.3.2 Principio de conservación de la cantidad de movimiento.....	92
4.3.3 Velocidad promedio.....	95
4.4 Métodos de solución numérica.....	95
4.4.1 Métodos de discretización	95
4.4.2 Convergencia	98
4.4.3 Ecuación de convección- difusión	98
4.4.4 Esquemas de aproximación de bajo orden.....	99
4.4.5 Métodos de acople Presión-Velocidad	100
4.5 Fenómeno de Turbulencia.....	101
4.5.1 Propiedades de la turbulencia	102
4.5.2 Modelado de la turbulencia	103
4.6 Dinámica de fluidos computacional (CFD).....	106

4.6.1	Metodología	106
4.6.2	Criterios de convergencia en software CFD	107
4.6.3	Visualización del flujo	109
4.6.4	Ventajas y Desventajas	111
4.6.5	Conclusiones de la herramienta CDF	112
4.7	Simulación de flujo másico en el reactor preliminar	112
4.7.1	Modelado de la geometría	112
4.7.2	Elaboración de la malla numérica	115
4.7.3	Configuración de la simulación	117
4.7.4	Resultados de la primera aproximación	119
4.7.5	Análisis de independencia de malla	120
4.7.6	Visualización de flujo	122
4.7.7	Validación del modelo	129
4.7.8	Conclusiones de la simulación del reactor preliminar	132
4.8	Simulación de flujo másico en el reactor optimizado	133
4.8.1	Modelado de la geometría	134
4.8.2	Elaboración de la malla numérica	135
4.8.3	Configuración de la simulación	137
4.8.4	Resultados de la primera aproximación	137
4.8.5	Análisis de independencia de malla	138
4.8.6	Visualización de flujo	140
4.8.7	Validación del modelo	145
4.8.8	Conclusiones de la simulación del reactor optimizado	147
CAPÍTULO 5		148
5	SELECCIÓN DE MATERIALES Y DISEÑO DE LAS PIEZAS	148
5.1	Generalidades de algunos dispositivos y accesorios	148
5.1.1	Bridas	148
5.1.2	Pasamuros Eléctricos (PME)	151
5.1.3	Transductores de presión	151
5.1.4	Termopares	152
5.2	Reactor Preliminar	153
5.2.1	Selección de Materiales	153
5.2.2	Diseño de las piezas del reactor preliminar	154

5.2.3	Ensamble final del reactor preliminar.....	168
5.3	Reactor Optimizado.....	170
5.3.1	Selección de materiales	170
5.3.2	Diseño de las piezas del reactor optimizado.....	171
5.3.3	Ensamble final del reactor optimizado	183
	Conclusiones y recomendaciones futuras.....	187
	Referencias.....	191

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1.1: Emisiones de CO ₂ por combustibles desde 1971 al 2012. "Otros" hace referencia a desechos industriales u otros desechos municipales no renovables (IEA, 2014). -----	2
Figura 1.2: Consumo global total en Mtoe (Equivalente a millones de toneladas de petróleo) de 1973 a 2012. En Renovables se incluyen las energías Solar, Eólica, Geotérmica, Hidráulica, etc. (IEA, 2014). -----	2
Figura 1.3: Insolación normal directa global. Datos basados en DLR-ISIS del Centro Alemán Aeroespacial (Breyer & Knies, 2009).-----	4
Figura 1.4: Sistemas de concentración solar más utilizados. (CSP Global Outlook, 2009).-----	6
Figura 1.5: Parte trasera de un helióstato usado en la planta piloto Solar One en Barstow, California. (Southern California Edison Co.).-----	7
Figura 1.6: Componentes de un Horno Solar (Riveros - Rosas, 2008). -----	8
Figura 1.7: Diagrama simplificado de una planta con tecnología CSP (Romero & González Aguilar, 2013). -----	9
Figura 1.8: Operación continua en un día de una planta CSP con almacenamiento térmico y combustible de respaldo (Geyer, SolarPACES Annual Report 2007).-----	10
Figura 1.9: Esquema del proyecto Solar Two (Pacheco et al., 2002). -----	11
Figura 1.10: Implementación de la tecnología CSP en el mundo en el año 2009.-----	13
Figura 1.11: Evolución de la producción y el consumo nacional energético (SENER, 2014). --	14
Figura 1.12: Producción energética primaria en México en Petajoules (PJ). A la izquierda comparación entre 2012 y 2013, a la derecha gráfica de estructura porcentual para el año 2013 (SENER, 2014).-----	15
Figura 1.13: PSTFAR ubicado en el IER- UNAM, Temixco, Morelos. -----	17
Figura 1.14: Campo de Pruebas de Helióstatos (CPH) ubicado en Hermosillo, Sonora. -----	18
Figura 1.15: Horno Solar de Alto Flujo Radiativo (HoSIER) ubicado en IER - UNAM, Temixco, Morelos. -----	18
Figura 1.16: Helióstato H81 del HoSIER compuesto por 30 facetas. -----	19

Figura 1.17: Distancias focales para cada grupo de facetas del concentrador del HoSIER (Riveros-Rosas et al, 2011). A la derecha una foto del mismo. -----	20
Figura 1.18: Ensamble sobre la mesa experimental del reactor rotativo de 10 kW del IER, UNAM.-----	20
Figura 1.19: A la izquierda las características del hidrógeno. A la derecha la distribución de los modos de producción de hidrógeno (Koumi & Njomo, 2012).-----	21
Figura 1.20: Rutas para la producción de hidrógeno solar (Steinfeld & Meier, 2004). -----	23
Figura 1.21: Ciclo termoquímico de dos etapas (Alonso, 2014). -----	24
Figura 1.22: Rutas termoquímicas solares para la producción de H ₂ utilizando combustibles fósiles. A la izquierda el craqueo solar y a la derecha el reformado y gasificación solar (Steinfeld & Meier, 2004).-----	25
Figura 1.23: Comparación exergética de los procesos termoquímicos de producción de hidrógeno (Koumi & Njomo, 2012).-----	26
Figura 2.1: Precios de los combustibles susceptibles a ser gasificados por unidad de energía en el periodo 2006-2035 (Fernández et al., 2007). -----	31
Figura 2.2: Reactor tubular para la disociación de metano (Rodat et al., 2009). -----	35
Figura 2.3: Reactor de doble cámara para la gasificación de materiales y residuos carbonosos (Wieckert et al., 2009).-----	35
Figura 2.4: Reactor solar volumétrico para el reformado solar de metano del proyecto SOLREF, (Steinfeld A., 2005). -----	37
Figura 2.5: Prototipo de SPCR desarrollado en el Laboratorio Nacional de Sandia. -----	37
Figura 2.6: Reactor solar para la reducción de óxidos metálicos (Meier et al., 1996).-----	38
Figura 2.7: Reactor de lecho fluidizado irradiado directamente (Flamant, 1980).-----	39
Figura 2.8: Reactor rotativo para la reducción de óxidos metálicos. Campaña experimental realizada en el HoSIER – UNAM.-----	39
Figura 2.9: Reactor de cama compactada en forma de L irradiado directamente (Greg et al., 1980).-----	41
Figura 2.10: Reactor solar propuesto por (Taylor et al., 1983). A la izquierda reactor de lecho fijo directamente irradiado y a la derecha un reactor de lecho fluidizado utilizado para la comparación de resultados. -----	42

Figura 2.11: Reactor directamente irradiado utilizando cama compactada y lecho fluidizado al mismo tiempo (Murray & Fletcher, 1994).-----	43
Figura 2.12: Reactor irradiado directamente para la pirolisis de partículas de celulosa en alberca de sales fundidas (Adinberg et al., 2004).-----	44
Figura 2.13: Reactor solar con flujo de vapor en forma de vórtice cargado de partículas de coque de petróleo propuesto por (Z'Graggen, 2006). -----	46
Figura 2.14: Esquema del concepto del reactor de lecho fluidizado con circulación interna (Kodama et al., 2008).-----	46
Figura 2.15: Reactor irradiado indirectamente compuesto por dos cavidades separadas por una placa emisora (Piatkowski & Steinfeld, 2008).-----	47
Figura 2.16: Esquema de reactor solar indirectamente irradiado con flujo de arrastre y CPC en la parte superior (Melchior et al., 2009).-----	48
Figura 2.17: Reactor de lecho fluidizado irradiado directamente por un simulador solar, para la gasificación por CO ₂ de coque de carbón (Kodama et al., 2010).-----	49
Figura 2.18: Reactor irradiado indirectamente con flujo de arrastre y tubos absorbedores. A la izquierda esquema del reactor y a la derecha una vista isométrica del mismo (Lichy et al., 2010).-----	50
Figura 2.19: Reactor tubular en forma de serpentín irradiado indirectamente, diseñado por (Chen et al., 2010) para la gasificación por vapor de biomasa en agua supercrítica.-----	51
Figura 2.20: Reactor tubular con sección superior de lecho fluidizado y sección inferior de lecho fijo (Kruesi et al., 2014).-----	52
Figura 2.21: Muestra de coque de petróleo. a) Esferoides con diámetros entre 15 y 45mm como se obtienen de la refinera. b) Coque pulverizado con molino de discos vibratorios con tamaños de partículas de 106 µm. c) Pastillas de 40 mm de diámetro y 16 mm de altura. 54	
Figura 2.22: Reactor preliminar para la gasificación de coque de petróleo del IER- UNAM, a la izquierda reactor completo y a la derecha un corte transversal.-----	55
Figura 3.1: Reactor preliminar para la gasificación de coque de petróleo del IER- UNAM. -----	58
Figura 3.2: Absorción, reflexión y transmisión de la radiación incidente en un material semitransparente (Holman, 1998). -----	60
Figura 3.3: Dibujo del Horno solar de alto flujo radiativo del Laboratorio Nacional de Energías Renovables (NREL) mostrando la definición de etapa y elemento (Wendelin, Dobos, & Lewandowski, 2013). -----	62

Figura 3.4: Perfil solar de Temixco, Morelos, configurado en SolTrace. -----	63
Figura 3.5: Arreglo de brida refrigerante con ventada de cuarzo. De izquierda a derecha, vista frontal, vista posterior y dos vistas isométricas. -----	63
Figura 3.6: A la izquierda configuración con helióstato y a la derecha configuración sin helióstato del arreglo del HoSIER en SolTrace. -----	64
Figura 3.7: Gráfica de la densidad de flujo solar pico en función del número de rayos. -----	67
Figura 3.8: Ventana de Cuarzo sujeta por una brida CF10. -----	68
Figura 3.9: Transmisividad del cuarzo óptico en el rango del espectro solar (Newport Corporation (NASDAQ: NEWP)). -----	68
Figura 3.10: Representación de interfases ópticas. A la izquierda esquema de la ventana vista lateralmente, y a la derecha representación en SolTrace. -----	69
Figura 3.11: Brida CF10 para la refrigeración de la ventana. -----	70
Figura 3.12: Configuración anular para la brida CF10 en SolTrace. -----	70
Figura 3.13: Ensamble de ventana de cuarzo con la brida CF10 de refrigeración. A la izquierda 2 vistas isométricas del dibujo y a la derecha representación del ensamble en SolTrace. -----	71
Figura 3.14: Esquema de las diferentes posiciones de la brida y la ventana con respecto a la zona focal. -----	72
Figura 3.15: Funcionamiento del HoSIER simulado en SolTrace. -----	72
Figura 3.16: Densidad de flujo solar en la pared frontal de la ventana de cuarzo de 21.368 cm, posicionada a 16 cm de la zona focal. Número de Bins: X: 20 y Y: 20. Extensión de visión: automático*. A la izquierda gráfico de contornos y a la derecha gráfico de superficie. -----	73
Figura 3.17: Densidad de flujo solar en la zona focal, posicionando la ventana de cuarzo de 21.368 cm, a 16 cm respecto al spot. Número de Bins: X: 20 y Y: 20. Extensión de visión: automático. A la izquierda gráfico de contornos y a la derecha gráfico de superficie. -----	73
Figura 3.18: Pérdidas de calor por conducción, convección y radiación en la muestra de coque. -----	76
Figura 3.19: Ensamble de ventana de cuarzo de 37.87cm con la brida CF16.50 de refrigeración. -----	81
Figura 4.1: Coeficiente de expansión volumétrica. A la izquierda una sustancia con β grande y a la derecha una con β pequeño. -----	87

Figura 4.2: Esquema del elemento de fluido considerado como el más pequeño. -----	89
Figura 4.3: Esquema de flujo másico a través del elemento de fluido. -----	91
Figura 4.4: Esquema de las componentes del esfuerzo de viscosidad que actúan en el elemento de fluido. El sufijo τ_{ij} indica que la componente actúa en la dirección j, desde una dirección i normal a la superficie. -----	93
Figura 4.5: Esquema de componentes de fuerza que actúan en la dirección x del elemento de fluido. -----	93
Figura 4.6: Esquema representativo del movimiento turbulento.-----	104
Figura 4.7: Monitor de residuales en un proceso iterativo realizado en software CFD.-----	108
Figura 4.8: Monitor de flujo másico promedio en un proceso iterativo realizado en software CFD. -----	108
Figura 4.9: Reporte de flujo másico con un desbalance menor al 0.2% realizado FLUENT ANSYS 14.0.-----	109
Figura 4.10: Gráfica de perfil de la magnitud de velocidad en función de la posición en la sección de salida de un codo mezclador.-----	110
Figura 4.11: Gráfica vectorial de velocidades en un codo mezclador.-----	110
Figura 4.12: Gráfica de contornos de la temperatura para un codo mezclador.-----	111
Figura 4.13: A la izquierda corte transversal del reactor preliminar, a la derecha su representación 2D en ANSYS. -----	113
Figura 4.14: Reactor preliminar representado en ANSYS DesignModeler. A la izquierda el dibujo del reactor y a la derecha el modelo del dominio del fluido de trabajo. -----	114
Figura 4.15: Dominio computacional del fluido. -----	114
Figura 4.16: Malla numérica del reactor preliminar. -----	115
Figura 4.17: Malla refinada en el cilindro de salida del reactor. -----	116
Figura 4.18: Corte isométrico del reactor preliminar. Los elementos de malla se presentan completos.-----	116
Figura 4.19. Asignación de nombres a las entradas y salidas del modelo del reactor. -----	117
Figura 4.20: Monitor de residuales del reactor preliminar en su primera simulación. -----	119

Figura 4.21: Monitor de flujo másico promedio a la salida del reactor preliminar en su primera simulación. -----	120
Figura 4.22: Variación de la velocidad promedio en la boquilla de salida con respecto al número de elementos de malla. Análisis de independencia de malla del reactor preliminar. -----	122
Figura 4.23: Render de volumen para las velocidades del gas de trabajo en el reactor preliminar. Vista frontal y vista de lado derecho. Simulación con modelo κ - ϵ , método SIMPLE y TKE: Primer Orden. -----	123
Figura 4.24: Render de volumen para las velocidades del gas de trabajo en el reactor preliminar. Vistas isométricas. Simulación con modelo κ - ϵ , método SIMPLE y TKE: Primer Orden. -----	123
Figura 4.25: Las velocidades más altas se presentan al interior de los tubos inyectoros. -----	124
Figura 4.26: Render de volumen para las velocidades del gas de trabajo en el reactor preliminar. Rango de velocidades de 0 a 2 m/s. Simulación con modelo κ - ϵ , método SIMPLE y TKE: Primer Orden. -----	125
Figura 4.27: Gráfica de contornos del reactor con rango de velocidades local. A la izquierda plano XY que abarca los 3 inyectores frontales y a la derecha plano ZY en la sección transversal del reactor. Simulación con modelo κ - ϵ , método SIMPLE y TKE: Primer Orden. -----	126
Figura 4.28: Gráfica de contornos del reactor con rango de velocidades local. Plano XY que abarca 3 de los pasa-tubbings posicionados en la cavidad. Simulación con modelo κ - ϵ , método SIMPLE y TKE: Primer Orden.-----	126
Figura 4.29: Gráfica de contornos del reactor con rango de velocidades local. Plano XY cerca de la boquilla de salida. Simulación con modelo κ - ϵ , método SIMPLE y TKE: Primer Orden. -----	127
Figura 4.30: Gráfica de contornos del reactor con rango de velocidades local. Plano ZY justo a la mitad del reactor. Simulación con modelo κ - ϵ , método SIMPLE y TKE: Primer Orden. 128	
Figura 4.31: Líneas de corriente con rango de velocidades global dibujadas desde la entrada de vapor 1. Vistas isométricas. Simulación con modelo κ - ϵ , método SIMPLE y TKE: Primer Orden. -----	128
Figura 4.32: Render de volumen para las velocidades del gas de trabajo en el reactor preliminar. A la izquierda simulación con modelo de esfuerzos de Reynolds, método SIMPLE y TKE: Primer Orden. A la derecha simulación con modelo de esfuerzos de Reynolds, método SIMPLE y TKE: Segundo Orden.-----	132

Figura 4.33: Render de volumen para las velocidades del gas de trabajo en el reactor preliminar. De izquierda a derecha: Modelo κ - ϵ , método SIMPLE, TKE: Segundo Orden; Modelo κ - ϵ , método SIMPLER, TKE: Segundo Orden; Modelo de esfuerzos de Reynolds, método SIMPLER, TKE: Segundo Orden. -----	132
Figura 4.34: Reactor optimizado para la gasificación de coque de petróleo, a la izquierda reactor completo y a la derecha un corte transversal. -----	133
Figura 4.35: Reactor optimizado representado en ANSYS DesignModeler. A la izquierda el dibujo del reactor y a la derecha el modelo del dominio del fluido de trabajo. -----	134
Figura 4.36: Dominio computacional del fluido. -----	134
Figura 4.37: Malla numérica del reactor optimizado.-----	135
Figura 4.38: Corte isométrico del reactor preliminar. Los elementos de malla se presentan completos. -----	136
Figura 4.39: Asignación de nombres a las entradas y salidas del modelo del reactor. -----	136
Figura 4.40: Monitor de residuales del reactor optimizado en su primera simulación. -----	137
Figura 4.41: Monitor de flujo másico promedio a la salida del reactor optimizado en su primera simulación. -----	137
Figura 4.42: Variación de la velocidad promedio en la boquilla de salida con respecto al número de elementos de malla. Análisis de independencia de malla del reactor optimizado. -----	139
Figura 4.43: Render de volumen para las velocidades del gas de trabajo en el reactor optimizado. Vista frontal y vista isométrica. Simulación con modelo κ - ϵ , método SIMPLE y TKE: Primer Orden. -----	140
Figura 4.44: Las velocidades más altas se presentan al interior de los tubos inyectores. -----	141
Figura 4.45: Render de volumen para las velocidades del gas de trabajo en el reactor optimizado. Rango de velocidades de 0 a 1 m/s. Simulación con modelo κ - ϵ , método SIMPLE y TKE: Primer Orden. -----	142
Figura 4.46: Gráfica de contornos del reactor optimizado con rango de velocidades local. Plano ZX a la mitad del modelo. Simulación con modelo κ - ϵ , método SIMPLE y TKE: Primer Orden. -----	142
Figura 4.47: Gráfica de contornos del reactor optimizado con rango de velocidades local. Plano XY a la mitad del modelo. Simulación con modelo κ - ϵ , método SIMPLE y TKE: Primer Orden. -----	143

Figura 4.48: Comportamiento del fluido al atravesar la muestra. Render de volumen para las velocidades del gas de trabajo en el reactor optimizado. Rango de velocidades de 0 a 4.133 m/s. Simulación con modelo κ - ϵ , método SIMPLE y TKE: Primer Orden. -----	143
Figura 4.49: Remolinos de flujo generados al rodear la muestra de coque al interior del reactor. Gráfica de líneas de corriente para las velocidades del gas de trabajo en el reactor optimizado. Rango de velocidades de 0 a 4.133 m/s. Simulación con modelo κ - ϵ , método SIMPLE y TKE: Primer Orden. -----	144
Figura 4.50: Gráfica de líneas de corriente para las velocidades del gas de trabajo en el reactor optimizado. De izquierda a derecha, vista frontal y dos vistas isométricas. Rango de velocidades de 0 a 4.133 m/s. Simulación con modelo κ - ϵ , método SIMPLE y TKE: Primer Orden. -----	145
Figura 4.51: Comportamiento del fluido al atravesar la muestra de coque en el reactor optimizado. A la izquierda render de volumen para las velocidades del gas de trabajo, a la derecha gráfica de líneas de corriente para las mismas. Rango de velocidades de 0 a 4.442 m/s. Simulación con modelo de esfuerzos de Reynolds, método SIMPLEC y TKE: Segundo Orden.-----	147
Figura 5.1: Esquema de unión de dos bridas CF y junta metálica de cobre de alta conductividad al centro. -----	149
Figura 5.2: Conexión de Brida KF con abrazadera. -----	150
Figura 5.3: Diferentes tipos de pasa muros eléctricos. De izquierda a derecha, para voltaje bajo, voltaje medio y corriente media.-----	151
Figura 5.4: Transductor de presión COLE-PARMER. -----	152
Figura 5.5: Bridas CF10 para la refrigeración de la ventana. -----	154
Figura 5.6: Ángulo de 45° entre las bridas-----	154
Figura 5.7: Elementos del ensamble de brida y tubing de cobre. -----	155
Figura 5.8: Ensamble completo de bridas CF10 de refrigeración y tubing de cobre.-----	155
Figura 5.9: Componentes del ensamble de ventana. De izquierda a derecha, Ventana de cuarzo, junta de vitón y brida CF10.-----	156
Figura 5.10: Vistas isométricas del ensamble completo de ventana de cuarzo y brida CF10.-	156
Figura 5.11: Vistas isométricas de la brida de acople.-----	157
Figura 5.12: Inyector de gas Argón de acero inoxidable. -----	158

Figura 5.13: Ensamble de brida de acople con los tres inyectores de gas argón. -----	158
Figura 5.14: Componentes del ensamble frontal. -----	159
Figura 5.15: Ensamble frontal completo. De izquierda a derecha, vista frontal, vista posterior y dos vistas isométricas.-----	159
Figura 5.16: Cavity del reactor. -----	160
Figura 5.17: Cavity del reactor con bridas CF16.50 y juntas metálicas. -----	160
Figura 5.18: Pasa-tubbing. -----	161
Figura 5.19: Distribución de pasa-tubbings en la cavity del reactor. -----	161
Figura 5.20: Soporte, porta muestras y pastilla de coque ensamblados a la cavity.-----	162
Figura 5.21: Brida CF2.75. -----	162
Figura 5.22: Ensamble de bridas CF2.75 en la cavity del reactor. -----	163
Figura 5.23: Brida CF1.33. -----	164
Figura 5.24: Ensamble de bridas CF1.33 en la cavity del reactor. -----	164
Figura 5.25: Ensamble central completo. -----	165
Figura 5.26: Brida posterior CF16.50. -----	166
Figura 5.27: Brida KF25. -----	166
Figura 5.28: Brida KF16. -----	167
Figura 5.29: Ensamble posterior completo. -----	167
Figura 5.30: Vistas principales del reactor preliminar. -----	168
Figura 5.31: Vistas isométricas del reactor preliminar. -----	169
Figura 5.32: Vistas de sección del reactor preliminar. -----	169
Figura 5.33: Cortes isométricos del reactor preliminar.-----	170
Figura 5.34: Bridas CF16.50 para la refrigeración de la ventana.-----	172
Figura 5.35: Ensamble de bridas CF16.50 de refrigeración con tubing de cobre.-----	172

Figura 5.36: Componentes del ensamble de ventana. De izquierda a derecha, Ventana de cuarzo, junta de vitón y brida CF16.50. -----	173
Figura 5.37: Vistas isométricas del ensamble completo de ventana de cuarzo y brida CF16.50. -----	173
Figura 5.38: Ensamble frontal completo.-----	174
Figura 5.39: Cavidad del reactor con bridas CF16.50. -----	175
Figura 5.40: Posicionamiento de pasa-tubbings en la cavidad del reactor modificada. -----	175
Figura 5.41: Pasa-tubbing con inyección de gases a un ángulo de 60° con respecto a la normal. A la izquierda vista frontal y a la derecha vista isométrica. -----	176
Figura 5.42: Pasa-tubbings modificados con ángulo de inyección de 60° ensamblados con la cavidad del reactor. -----	176
Figura 5.43: Ensamble de bridas CF2.75 y CF1.33 con cavidad del reactor. Vista frontal y dos vistas isométricas. -----	177
Figura 5.44: Aislante de baja densidad dividido en dos secciones, cono y cavidad. -----	178
Figura 5.45: Ángulo de apertura de 46.45° para el cono. -----	179
Figura 5.46: Reducción de volumen útil al interior de la cavidad por medio del aislante. -----	179
Figura 5.47: Ensamble de muestra de coque y crisol de alúmina de alta pureza. -----	180
Figura 5.48: Ensamble central completo. De izquierda a derecha, vista frontal, vista posterior y dos vistas isométricas.-----	180
Figura 5.49: Cortes transversales del ensamble central completo.-----	181
Figura 5.50: Brida CF16.50 posterior para el reactor optimizado. -----	182
Figura 5.51: Ensamble posterior completo. -----	182
Figura 5.52: Vistas principales del reactor optimizado.-----	183
Figura 5.53: Vistas isométricas del reactor optimizado. -----	184
Figura 5.54: Vistas de sección del reactor optimizado. -----	184
Figura 5.55: Cortes isométricos del reactor optimizado. -----	185

Figura 5.56: Corte isométrico de reactor optimizado que muestra los canales para las bridas KF25 y KF16. -----185

Figura 5.57: Corte isométrico de reactor optimizado que muestra los canales para las bridas CF1.33 y CF2.75. -----186

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1.1: Zonas de alto recurso solar en México (IIE, 2010).----- 16

Tabla 1.2: Costos proyectados a largo plazo en la producción de hidrógeno (€/ton de H₂) (Galli & Stefanoni, 1997).----- 27

Tabla 2.1: Comparación entre los diseños de reactores más significantes para la gasificación de materiales carbonáceos. *Conversión de material a gas.----- 53

Tabla 3.1: Parámetros del concentrador utilizados en el software SolTrace. ----- 65

Tabla 3.2: Densidad de flujo solar en la zona focal para cada prueba realizada. ----- 66

Tabla 3.3: Diferentes distribuciones de densidad de flujo en la zona focal utilizando una ventana de cuarzo de 21.368 cm. Número de Bins: X: 150 y Y: 150. Extensión de visión: 0.13². -- 74

Tabla 3.4: Diferentes distribuciones de densidad de flujo en la ventana de cuarzo de 21.368 cm. Número de Bins: X: 150 y Y: 150. Extensión de visión: 0.35².----- 75

Tabla 3.5: Temperaturas estimadas en la zona focal para las diferentes distancias de posicionamiento de la ventana de cuarzo de 21.368 cm. Número de Bins: X: 150 y Y: 150. Extensión de visión: 0.13².----- 79

Tabla 3.6: Temperaturas aproximadas en la ventana de cuarzo de 21.368 cm para sus diferentes distancias de posicionamiento. Número de Bins: X: 150 y Y: 150. Extensión de visión: 0.35². ----- 80

Tabla 3.7: Diferentes distribuciones de densidad de flujo en la zona focal utilizando una ventana de cuarzo de 37.87 cm. Número de Bins: X: 150 y Y: 150. Extensión de visión: 0.1².----- 82

Tabla 3.8: Diferentes distribuciones de densidad de flujo en la ventana de cuarzo de 37.87 cm. Número de Bins: X: 150 y Y: 150. Extensión de visión: 0.37².----- 82

Tabla 3.9: Temperaturas estimadas en la zona focal para las diferentes distancias de posicionamiento de la ventana de cuarzo de 37.87 cm. Número de Bins: X: 150 y Y: 150. Extensión de visión: 0.1². ----- 83

Tabla 3.10: Temperaturas aproximadas en la ventana de cuarzo de 37.87 cm para sus diferentes distancias de posicionamiento. Número de Bins: X: 150 y Y: 150. Extensión de visión: 0.37 ² . -----	83
Tabla 3.11: Comparación de parámetros entre ambas ventanas, posicionándolas a 18 cm de la zona focal. -----	84
Tabla 4.1: Modelos de turbulencia RANS. -----	105
Tabla 4.2: Resultados de la primera simulación del modelo. -----	120
Tabla 4.3: Resultados del estudio de independencia de malla del reactor preliminar. -----	121
Tabla 4.4: Resultados de simulación para el modelo de reactor preliminar con una malla de 3 463 849 elementos. -----	122
Tabla 4.5: Simulaciones del reactor preliminar con diferentes parámetros de configuración. -	130
Tabla 4.6: Resultados de la primera simulación del modelo del reactor optimizado. -----	138
Tabla 4.7: Resultados del estudio de independencia de malla del reactor optimizado. -----	139
Tabla 4.8: Resultados de simulación para el modelo de reactor optimizado con una malla de 1 951 875 elementos. -----	140
Tabla 4.9: Simulaciones del reactor optimizado con diferentes parámetros de configuración. -	146
Tabla 5.1: Especificaciones de las bridas CF (Rubí-Delgado, 2014). -----	150
Tabla 5.2: Especificaciones de las bridas KF o QF (Rubí-Delgado, 2014). -----	151
Tabla 5.3: Tipos de termopares en el mercado. -----	152
Tabla 3.11: Comparación de parámetros entre ambas ventanas, posicionándolas a 18 cm de la zona focal. -----	188

SÍNTESIS

La creciente demanda energética provocada por el rápido incremento poblacional, ha llevado a un agotamiento de las reservas de combustibles fósiles, además de un gran impacto ambiental, ocasionado por las altas emisiones de CO₂ generadas en los procesos de transformación que tienen lugar en el sector industrial. La energía solar se postula como una alternativa con gran potencial para mantener la disponibilidad energética en un plano a futuro, reduciendo en gran nivel las altas emisiones de CO₂.

Dentro de las tecnologías de concentración solar, las cuales aprovechan la energía solar para transformarla en otro tipo de energía, los reactores solares utilizan la radiación concentrada transformándola en energía térmica, la cual se usa después para llevar a cabo una reacción química endotérmica. A este proceso se le denomina “termoquímico solar”. Un reactor solar es un receptor diseñado para operar a altas temperaturas, minimizando las pérdidas de calor y favoreciendo el intercambio térmico y másico entre las especies que participan en la reacción.

En esta tesis se realiza una propuesta de diseño de un reactor solar destinado a la gasificación, por vapor de agua, de coque de petróleo. El coque de petróleo es un producto residual con un alto contenido de carbono, resultante del proceso de pirólisis de las fracciones pesadas que se obtienen en la refinación del petróleo. Una característica del coque que permite considerarlo como una alternativa de mediano y largo plazo para la generación de electricidad o de vectores energéticos como el hidrógeno, es su poder calorífico equivalente al 80% del de un residual líquido, como el combustóleo. Además, al ser combinado con agua mediante la reacción endotérmica de “gasificación solar”, se produce un gas de síntesis con un valor energético mucho mayor. Este trabajo es una propuesta de optimización para un reactor preliminar diseñado en el Instituto de Energías Renovables (IER) de la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM) y que forma parte de una tesis doctoral en desarrollo.

Se realizó una extensa revisión bibliográfica sobre los reactores solares destinados a la gasificación de materiales carbonáceos. En base a esta revisión, se realizan diversas modificaciones en el diseño del reactor, y se proponen dos estudios: El primero consiste en un análisis de distribución de radiación en la zona focal y en la ventana de cuarzo del reactor. En este análisis se realizan diversas simulaciones para conocer la densidad de flujo solar en la zona focal, en donde se coloca la muestra de coque, y fuera de la zona focal, en donde se posiciona la ventana de cuarzo que permite el paso de la radiación al interior del reactor. Con los datos resultantes, se determina la distancia de posicionamiento de la ventana a la cual se obtiene una potencia o flujo con el que la muestra pueda alcanzar las temperaturas de reacción

necesarias. Además, mediante estos datos es posible determinar las temperaturas máximas y promedio a las que se expone la ventana, para así poder evitar que éstas sobrepasen los límites a los que el material puede llegar sin deformarse o quebrarse. En el segundo estudio se determina la mecánica de los fluidos de arrastre en el interior del reactor. Para esto se llevan a cabo simulaciones, mediante Dinámica de Fluidos Computacional, en ausencia de radiación y a un determinado flujo másico, obteniendo así la magnitud de los vectores de velocidad producidos dentro del reactor. Para comprender el funcionamiento del modelo y del software, se describen algunas de las propiedades termofísicas de los fluidos, las ecuaciones que rigen el fenómeno a estudiar, se realiza una explicación general de los métodos de solución numérica y una breve definición del concepto y modelado del fenómeno de turbulencia. Posteriormente se realiza el análisis de flujo en el diseño preliminar y se propone una optimización del mismo.

La descripción detallada de las piezas del reactor preliminar, junto con las del diseño óptimo, resultante de los estudios antes mencionados, se realiza al final. Además, se lleva a cabo una breve explicación de algunos dispositivos y accesorios utilizados, y la selección de los materiales adecuados para su construcción.

CAPÍTULO 1

1 INTRODUCCIÓN

En este capítulo se realiza una introducción al tema de trabajo y se presenta el panorama energético actual en México y en el mundo. Además, se explican los conceptos generales sobre la importancia de una generación de energía limpia, el recurso solar y las tecnologías utilizadas para su aprovechamiento, haciendo énfasis en la generación de combustibles solares. Finalmente se plantean los objetivos de la tesis.

1.1 Marco conceptual

1.1.1 Importancia de las energías renovables en el mundo

En la actualidad el 80% de la energía primaria consumida en el mundo le corresponde a los combustibles fósiles, de los cuales se ha estimado que las reservas existentes podrían soportar la demanda por 200 años más, lo anterior en el caso ideal de que se mantuviera uniforme el consumo actual. Sin embargo se prevé un aumento del consumo energético del 40% para el año 2035 (IEA, 2013).

Aunado a esto el apresurado crecimiento poblacional ha generado una demanda energética proporcional a éste, debido al aumento de la actividad industrial, el transporte y demás servicios que una persona necesita para vivir. Aproximadamente, la población mundial actual consume hidrocarburos fósiles que la tierra tardó 5 millones de años en producir, para cubrir sus de necesidades por lo menos un año (Alexander, 2012). Esto lleva a un agotamiento exponencial de las reservas de hidrocarburos, provocando un incremento excesivo en los costos, y a la necesidad de reducir el efecto ambiental de los gases de efecto invernadero emitidos en el procesamiento de estos recursos.

Según estudios recientes de la Agencia Internacional de Energía (IEA, 2014), las emisiones de CO₂, las cuales se reportan que son solo producto de la combustión de recursos fósiles, han aumentado de 15 633 Mt (millones de toneladas) de CO₂ en 1973,

hasta 31 734 Mt de CO₂ para el 2012 (fig.1.1). Esto es un incremento de aproximadamente el doble en poco menos de 40 años, lo que nos da un panorama sobre el descontrolado daño ambiental en el presente.

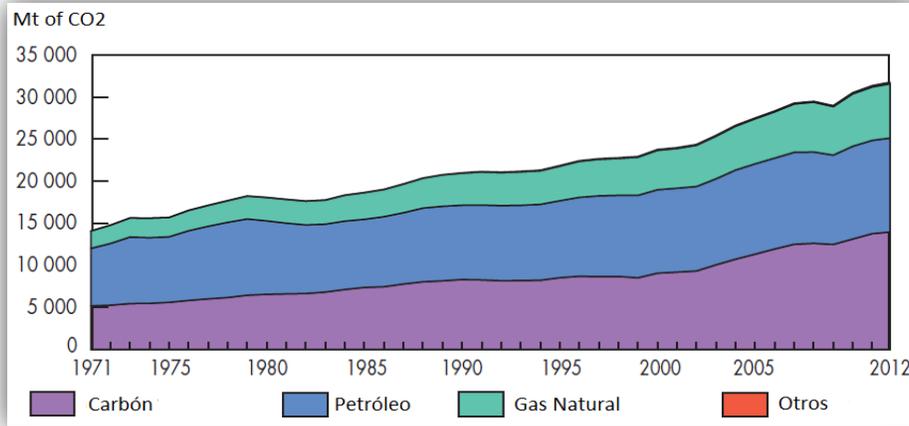


Figura 1.1: Emisiones de CO2 por combustibles desde 1971 al 2012. "Otros" hace referencia a desechos industriales u otros desechos municipales no renovables (IEA, 2014).

De igual manera el consumo energético en Mtoe (Equivalente a millones de toneladas de petróleo), aproximadamente se ha doblado en el mismo periodo de 1973-2012 (fig.1.2), por lo que podría esperarse que para el año 2050 el consumo sea mucho mayor debido al rápido incremento poblacional. Generando un agotamiento casi total de las reservas fósiles.

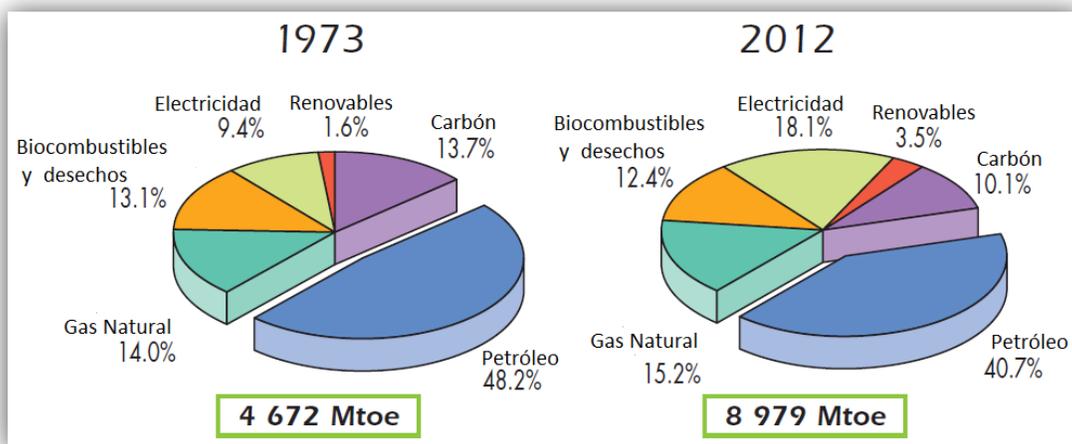


Figura 1.2: Consumo global total en Mtoe (Equivalente a millones de toneladas de petróleo) de 1973 a 2012. En Renovables se incluyen las energías Solar, Eólica, Geotérmica, Hidráulica, etc. (IEA, 2014).

La situación de crisis a nivel mundial generada por la demanda energética, el agotamiento de las reservas fósiles, y el acentuado cambio climático resultante de las altas emisiones de CO₂, hacen primordial la búsqueda de nuevas alternativas de generación de energía que puedan enfrentar el declive energético sin contaminar más el planeta. En este sentido, la energía solar se postula como una de estas alternativas altamente capaz de mantener una disponibilidad energética, reduciendo las emisiones de CO₂.

1.1.2 Energía Solar

En 90 minutos, golpean a la tierra la suficiente cantidad de rayos solares como para abastecer la demanda energética del planeta entero por aproximadamente un año (IEA, 2011). A pesar de esto, existen numerosos inconvenientes para convertir a la radiación solar en energía eléctrica, ya que esta es muy difusa (aproximadamente 1kW/m²), intermitente y requiere condiciones climáticas adecuadas. Por estas razones, en la mezcla de los diferentes tipos de energía producidos en el mundo, la energía solar representa solo una pequeña fracción por el momento. Sin embargo, su eficiencia aumenta y su precio disminuye, como consecuencia del trabajo de investigación y desarrollo en sus diversas áreas. Además, la preocupación por la situación de crisis a nivel global mencionada en el apartado anterior, hace de la energía solar una propuesta prometedora de solución.

Según la forma en que un sistema aprovecha la energía solar, y la convierte en otra forma de energía, se tiene la siguiente clasificación:

- Sistemas fotovoltaicos. Convierten la energía solar a electricidad.
- Sistemas fototérmicos. Pueden ser concentradores solares o colectores sin concentración. Éstos convierten la energía solar en calor.
- Sistemas químicos solares. Utilizan la energía solar para llevar a cabo reacciones químicas.

1.1.3 Energía de concentración solar térmica

La energía de concentración solar térmica, en inglés Concentrating Solar Thermal Power (CSP), también llamada de generación termosolar de potencia, es una de las tecnologías de energías renovables que utiliza la energía solar concentrada para generar algún otro tipo de energía, como mecánica o eléctrica. Esta tecnología requiere de cielos despejados y una buena calidad de recurso solar, la cual a nivel global está repartida de manera no equitativa, siendo abundante en diferentes zonas como el sur de Estados Unidos, México, el norte de África, Asia central, el sur de Europa, Australia y algunas partes de China e India (fig.1.3). Se espera una gran participación de esta

tecnología en el conjunto de suministros energéticos del mundo para mediados de este siglo.

Los cielos despejados que esta tecnología requiere, son encontrados básicamente en regiones semiáridas y calurosas. La concentración solar utiliza la **Radiación Normal Directa o DNI**, por sus siglas en inglés (Direct Normal Insolation). Esta componente de la radiación es, la energía recibida sobre una superficie perpendicular a los rayos del sol. La figura 1.3 muestra datos basados en el DLR-ISIS del Centro Alemán Aeroespacial (Deutsches Zentrum für Luft und Raumfahrt e.V.), para la radiación normal directa global que recibe el planeta en un año.

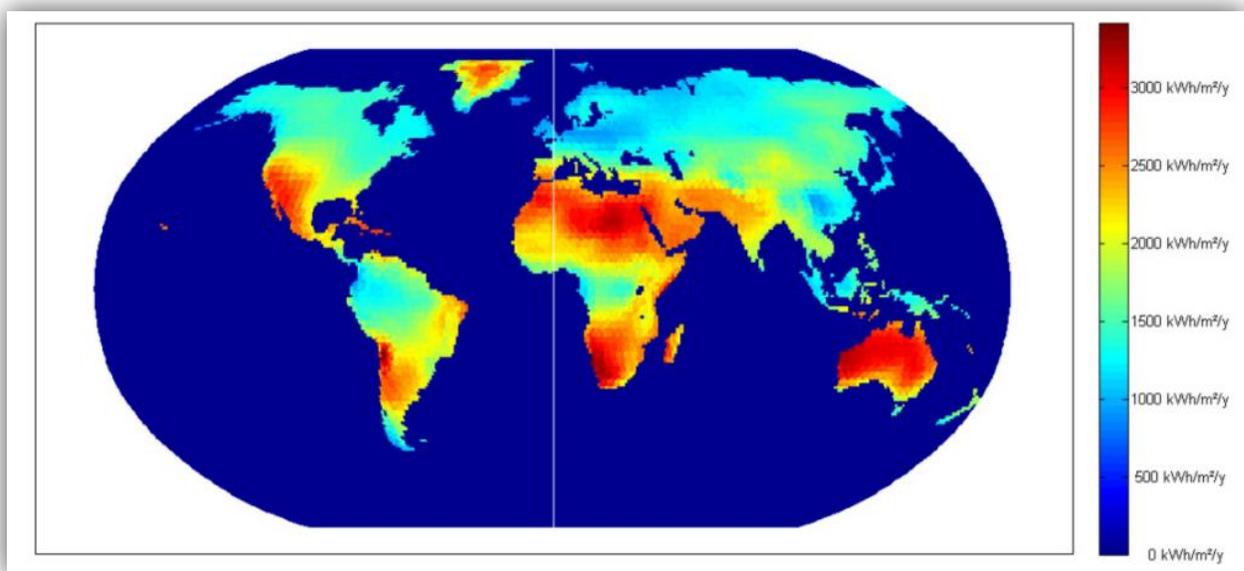


Figura 1.3: Insulación normal directa global. Datos basados en DLR-ISIS del Centro Alemán Aeroespacial (Breyer & Knies, 2009).

1.1.4 Sistemas de Concentración Solar

Un sistema de concentración solar consiste en una superficie reflectora que captura la radiación solar entrante y la concentra, generalmente por medio de espejos con geometría parabólica, en un receptor/reactor con una pequeña área de apertura para después transformarla en otra forma de energía. Este receptor/reactor es un intercambiador de calor altamente absorbente que emula lo más cercanamente posible el desempeño de un cuerpo negro radiativo, por lo que un receptor ideal tendría pérdidas convectivas y conductivas despreciables. Un **cuerpo negro radiativo** se define como un emisor y absorbente perfecto de la radiación (Cengel & Ghajar, 2011).

Dentro de las opciones más utilizadas para sistemas CSP en la actualidad, a escala piloto y comercial, existen cinco que resultan necesarias detallar, éstos se muestran en la figura 1.4 y son los siguientes:

-Concentradores Cilindro Parabólicos (Parabolic-through collectors, PTCs), También denominados de canal parabólico. Los PTCs se conforman por espejos con geometría parabólica que concentran los rayos solares en largas tuberías colectoras ubicadas en su zona focal y que forman un canal. Trabajan adecuadamente entre el rango de 150 y 400°C, aunque la reciente investigación de nuevos fluidos térmicos proyecta una temperatura de operación de 500°C (Romero & Gonzáles-Aguilar, 2013).

Al concentrar la radiación al fluido dentro del canal receptor, este se calienta, transformando así la radiación solar en energía térmica. Comúnmente se utiliza aceite sintético como fluido de transferencia, ya que a estas temperaturas el agua genera presiones muy altas en las tuberías y uniones. El aceite más utilizado es VP-1, el cual alcanza temperaturas un poco más altas de los 395°C. Otros métodos utilizados son el uso de sales fundidas o incluso generación directa de vapor, haciendo uso de los materiales de cambio de fase, por ejemplo.

El rango de temperatura de operación y la buena eficiencia solar-térmica, hace posible integrar un sistema de canal parabólico a una planta con ciclo Rankine para producir electricidad, por lo que los CCP representan la tecnología más madura y encabezan la mayoría de todos los proyectos. Por mencionar algunos están la NSO (Nevada Solar One) con 75 MWe ya instalados en los Estados Unidos, el Proyecto de Ibersol en Puertollano, España, y el Shams One en Abu Dhabi con 100 MWe activos (Romero & Gonzáles Aguilar, 2013).

-Reflectores lineales Fresnel (Linear Fresnel Reflector, LFR). Utilizan un arreglo de espejos ligeramente curvados que se mueven independientemente pero reflejan los rayos solares de manera colectiva en un receptor elevado, largo y fijo, en el cual se genera vapor saturado de manera directa. Sin embargo el ángulo de incidencia y el factor coseno provocan un alto impacto en la eficiencia óptica del sistema, siendo ésta menor que en el canal parabólico y por lo tanto se manejan menores temperaturas, dentro del rango de 150 y 350°C. Debido a esto los LFRs han sido utilizados principalmente para generar vapor saturado directamente en el receptor, y usados como complemento en plantas de ciclo combinado con integración solar (ISCCs) o en ciclos Rankine regenerativos. Los costos de inversión son bajos pero la eficiencia anual permanece por debajo del 10% (IEA, 2009).

La tecnología de los reflectores Fresnel está en una etapa joven con respecto a las demás, al referirse a una producción eléctrica de nivel industrial. Sin embargo es

necesario mencionar que se lleva a cabo una rápida labor de investigación que prevé temperatura de operación por arriba de los 400°C (Platzer, 2009) y se espera poder trabajar con vapor sobrecalentado mejorando la eficiencia hasta un 18.1% (Kearney, 2010).

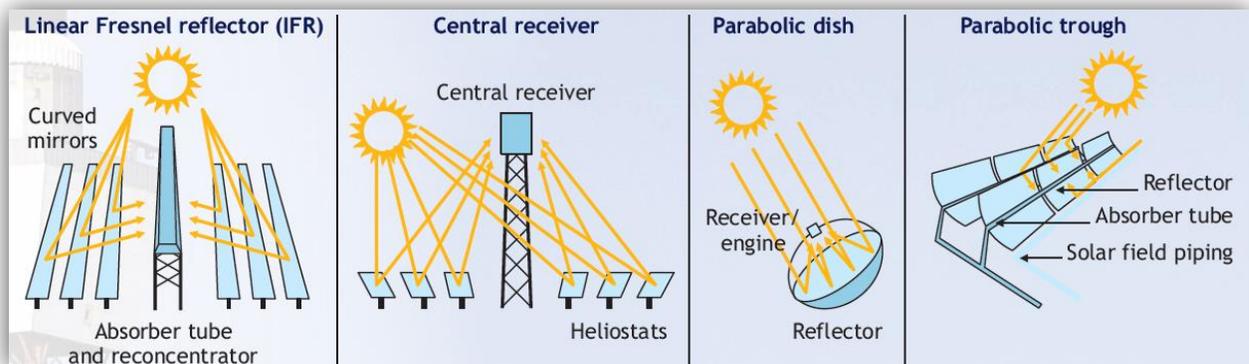


Figura 1.4: Sistemas de concentración solar más utilizados. (CSP Global Outlook, 2009).

-Discos parabólicos (Dish/engine systems, DE). El sistema de disco o plato parabólico concentra los rayos solares en un punto focal que se mueve al mismo tiempo que el disco rastrea al sol, proporcionando así la eficiencia óptica más alta en capacidades mucho más pequeñas (generalmente decenas de kW). Esta tecnología CSP tiene ventaja sobre las otras, ya que no requiere de agua como refrigerante, sin embargo es menos compatible con la opción de almacenamiento térmico, a diferencia de las otras. Una producción en masa podría llevar a los discos parabólicos a competir con los otros sistemas de concentración.

-Sistemas de torre o de receptor central (Central receiver systems, CRS). Estos sistemas rastrean y concentran los rayos del sol en un receptor posicionado en la cima de una torre fija, en el cual la energía se transfiere al fluido térmico, haciendo este útil en algún ciclo termodinámico. De esta forma se pueden obtener temperaturas y eficiencias más altas que en los sistemas lineales, ya que el flujo solar que incide en el receptor va de los 300 a los 1000 kW/m² y genera temperaturas de operación en el rango de 500 hasta poco más de los 1000°C. Los CRS pueden generar directamente vapor saturado o vapor sobrecalentado, incluso pueden utilizar sales fundidas, aire u otros medios que actúen como fluido de transferencia.

Los dispositivos colectores en estos sistemas son denominados **helióstatos** (fig. 1.5) y consisten en un conjunto de espejos con su sistema de control local, cuya tarea

es concentrar individualmente y de manera continua, por medio de dos ejes de rastreo (acimutal y elevación), la radiación solar hacia el receptor/reactor. Los heliostatos deben ser posicionados lo más cerca posible de la torre receptora para evitar pérdidas por ángulo de incidencia y coseno. Por esta razón los lugares cercanos al Ecuador son ideales para aprovechar el uso de tierra y reducir la altura de la torre receptora.

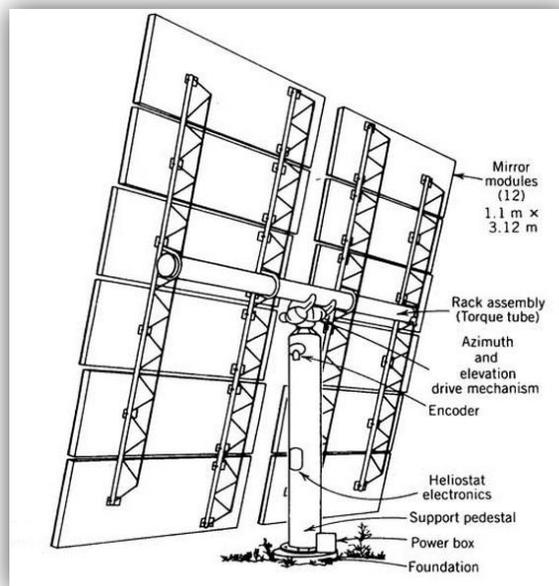


Figura 1.5: Parte trasera de un heliostato usado en la planta piloto Solar One en Barstow, California. (Southern California Edison Co.).

Una gran ventaja de un sistema de torre central es su capacidad de ser integrado a una planta de combustibles fósiles para una operación híbrida, operando en adición con un sistema de almacenamiento térmico, alrededor de 4500 horas/año a su capacidad nominal (Kolb, 1998).

Las plantas piloto que obtuvieron una extensa experiencia pre comercial y que sirven de referencia para futuros proyectos debido a los resultados obtenidos, fueron algunos proyectos en España desarrollados por la Plataforma Solar de Almería (PSA), y en Estados Unidos las plantas con sistema de almacenamiento térmico por sales fundidas, Solar One (Radosevich & Skinrood, 1989) y Solar Two (Pacheco et al., 2002), terminando su operación en 1988 y 1999 respectivamente, y con una capacidad de 10 MWe cada una. Esta tecnología permite pensar en plantas termoquímicas de gran escala, con capacidades superiores a los 50 MW y producciones masivas de hidrógeno al año.

-Hornos solares (Solar furnaces). Los hornos solares son sistemas de muy alta concentración (con factores de concentración de entre 5 000 y 15 000) y pequeña capacidad (hasta 50 kW térmicos) (Estrada et al., 2011). Estos hornos son espacios pensados para realizar trabajos de investigación. Algunos son de mayor capacidad y poseen tamaños más grandes que pueden ser considerados plantas piloto, como el horno solar de Odeillo, Francia, con 1 MW de capacidad.

Comúnmente están constituidos por un heliostato plano, cuya tarea es rastrear al sol y dirigir los rayos a un concentrador parabólico fijo dentro del edificio, posicionando sobre la zona focal de este último, diferentes dispositivos de prueba, como un receptor o reactor (figura 1.6).

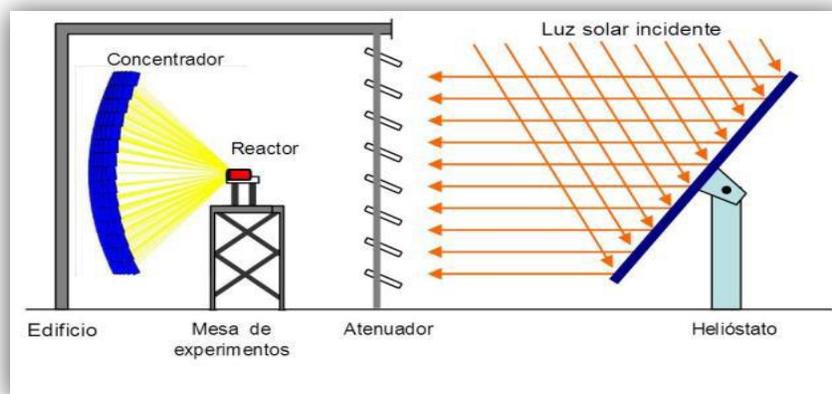


Figura 1.6: Componentes de un Horno Solar (Riveros - Rosas, 2008).

La capacidad de cada tecnología mencionada anteriormente para concentrar la energía solar, se expresa en términos de su razón de concentración de flujo \tilde{c} (Steinfeld & Meier, 2004):

$$\tilde{c} = Q_{solar} / I \cdot A \quad (kW/m^2) \quad (1.1)$$

En donde:

- A = Área objetivo del plano focal.
- I = Rayo de insolación normal incidente.
- Q_{solar} = Entrada de potencia solar al objetivo.

Esta razón tiene como unidades los “soles”, los cuales tienen el valor de 1 kW/m², que es la radiación nominal que incide en la tierra. Es decir, si un sistema concentra

500 soles, significa que está concentrado 500 veces la radiación nominal. Entre más alta es la concentración, menores son las pérdidas generadas en el receptor.

1.2 Generación termosolar de potencia

Las diversas tecnologías CSP de alta temperatura pueden utilizarse para la transformación de la energía solar en eléctrica. En el caso de una planta solar, la energía es transferida a un fluido térmico que tiene una temperatura de salida lo suficientemente alta para alimentar a una turbina y así producir electricidad. En la figura 1.7 se muestra un diagrama simplificado de una planta con tecnología CSP.

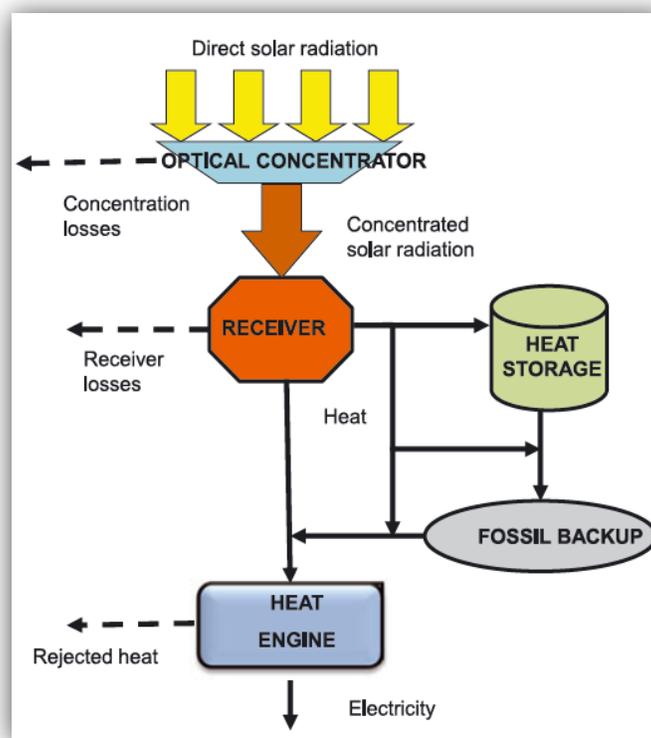


Figura 1.7: Diagrama simplificado de una planta con tecnología CSP (Romero & Gonzáles Aguilar, 2013).

Dos características que incrementa el valor de una planta CSP y la hacen postularse como una tecnología de gran potencial, es el almacenamiento térmico y el poder utilizar combustible como respaldo, ya que este almacenamiento puede cubrir la alta demanda eléctrica en horas donde no se dispone completamente del sol, logrando así, con ayuda del combustible, una generación continua a lo largo del día, desplazando a las altamente contaminantes plantas consumidoras de recursos fósiles. La capacidad de almacenar energía térmica a altas temperaturas puede llevar a

opciones económicamente competitivas de diseño ya que solo es necesario maximizar la parte solar en el sistema. En la figura 1.8 se muestra una gráfica de la operación continua de una planta CSP con combustible de respaldo en un día completo. Se puede observar que la demanda eléctrica se cubre desde las 5 hasta las 19 horas del día únicamente por métodos solares. Además se almacena gran cantidad de energía durante este periodo, la cual es utilizada posteriormente por un aproximado de 4 horas más. En éste punto es donde entra en juego el combustible de respaldo, el cual mantendrá la operación de la planta hasta que se vuelva a disponer del recurso solar.

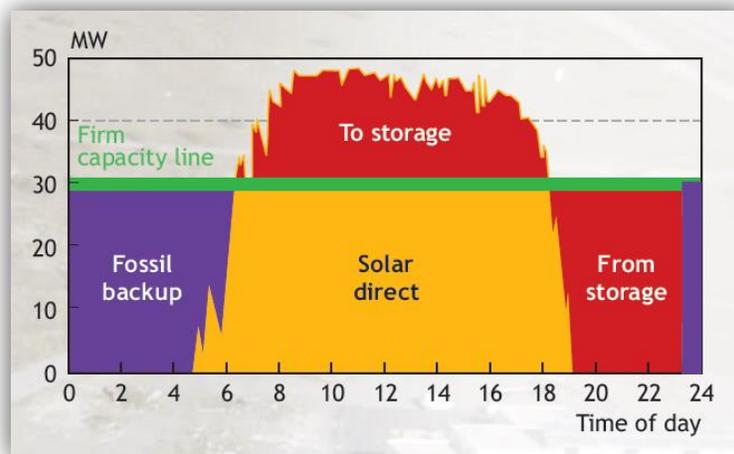


Figura 1.8: Operación continua en un día de una planta CSP con almacenamiento térmico y combustible de respaldo (Geyer, SolarPACES Annual Report 2007).

La adición de un combustible fósil barato de respaldo, es una manera de evitar costos de inversión extras en el campo solar para mantener continua la producción a su máxima capacidad, incluso en periodos de invierno. Esta característica le da a la tecnología de concentración solar térmica una gran ventaja sobre las otras tecnologías de energías renovables (por ejemplo turbinas de viento), ya que éstas no pueden garantizar esta continuidad.

Dos plantas pioneras del almacenamiento térmico son las llamadas Andasol - I y Andasol - II ubicadas en Guadix, España, cada una con una potencia nominal de 50 MWe y un campo solar muy grande con espejos que cubren 510 120 m² de superficie. De la misma forma ambas tienen integrado un sistema de almacenamiento térmico por sales fundidas de 1010 MW_{th}, haciendo posible que la planta trabaje, en horas de indisposición solar, a su máxima capacidad por 7.5 horas extras (Relloso & Delgado, 2009).

Una de las demostraciones más grandes en donde se puso a prueba un sistema de almacenamiento térmico, en este caso por sales de nitrato fundidas, y se tuvieron resultados que demuestran el gran potencial de los sistemas CSP, fue el proyecto **Solar Two** ubicado en Barstow, California (Pacheco et al., 2002).

Este proyecto consta de un sistema de torre central, al cual se le integran dos tanques de acero inoxidable, uno denominado tanque “frío” a 290°C y otro nombrado “caliente” a temperaturas por arriba de los 500 °C. Las sales a 290°C del tanque “frío” son bombeadas a través de tuberías hasta un intercambiador de calor, llamado receptor, en lo más alto de la torre. Un conjunto de helióstatos (espejos) concentran los rayos solares en este receptor, incrementando la temperatura de las sales hasta 565°C, estas vuelven a nivel de suelo y se almacenan a esa temperatura en el tanque “caliente”. Para generar electricidad, las sales son bombeadas desde el tanque “caliente” hacia un generador de vapor para crear vapor sobrecalentado a alta presión y así mover a un turbogenerador Rankine, después éstas regresan al tanque “frío”. De esta manera se logra producción eléctrica durante el día y la noche. La figura 1.9 muestra un esquema del funcionamiento de la planta, la cual obtuvo eficiencias en el receptor del 88%, eficiencias del sistema de almacenamiento del 97% y eficiencias en la turbina Rankine del 34%.

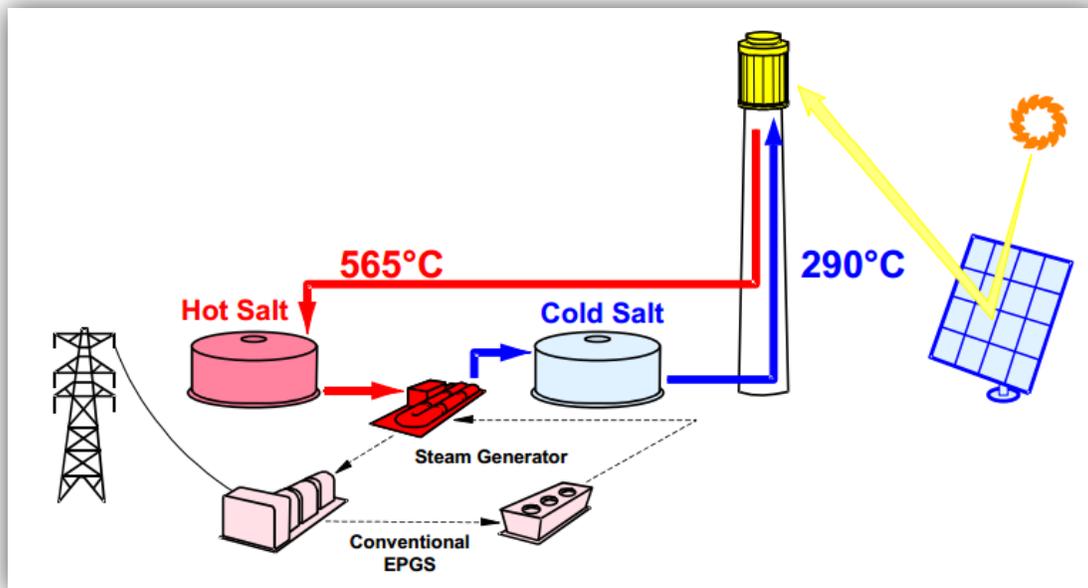


Figura 1.9: Esquema del proyecto Solar Two (Pacheco et al., 2002).

Los sistemas de almacenamiento térmico por sales fundidas son la opción más utilizada hasta ahora en las plantas CSP, piloto y comerciales, en España y Estados

Unidos. Sin embargo existe otra opción en desarrollo y que es ideal para aplicaciones en plantas con generación de vapor directo, este es el uso de materiales que cambian de fase (phase change media, PCM)(Laing *et al*, 2009), ya que permiten que el vapor sobrecalentado requerido para alimentar la turbina de vapor sea generado directamente, sin la necesidad de utilizar aceite sintético o sales fundidas como fluido térmico receptor, lo cual disminuye los riesgos operacionales y ambientales que el aceite o las sales conllevan. Esto a su vez incrementa la eficiencia del sistema, ya que se remueve un intercambiador de calor intermedio, y disminuye los costos de generación eléctrica.

A pesar del uso de combustibles fósiles en un arreglo híbrido, se ha evaluado la emisión de CO₂ de una planta conformada solamente con CSP en 17 g/kWh, y la diferencia es muy grande en comparación a los 776 g/kWh generados por una planta de carbón y los 398 g/kWh generados por una planta de gas natural con ciclo combinado (IEA, 2009). Un mega watt instalado de energía solar térmica de concentración evita anualmente 688 toneladas de CO₂ comparado con una planta convencional de ciclo combinado. Siendo más específicos, un metro cuadrado de espejo en el campo solar primario produce 400 kWh de electricidad por año, evitando la emisión de 12 toneladas de CO₂, comparado con una planta convencional carbón/vapor y contribuye al ahorro de 2.5 toneladas de combustibles fósiles durante los 25 años de vida útil de operación. La energía invertida para los materiales del sistema CSP se recupera en menos de 1 año, y la mayoría de los materiales del campo solar y estructuras pueden ser reciclados y usados nuevamente para futuras plantas (Romero & González-Aguilar, 2013). También es necesario mencionar, que es el mismo uso de combustibles por lo que una planta CSP o ISCC (Integrated Solar Combined Cycled), no puede ser calificada como una planta “cero-emisora”.

La combinación de diferentes factores, como la necesidad de cubrir una demanda energética, la estabilidad proporcionada en la red eléctrica y por consiguiente la generación de empleos coloca a la tecnología CSP en una muy buena posición en el portafolio de las tecnologías renovables. Un claro ejemplo de la futura globalización de dicha tecnología es que la Agencia Internacional de Energía (IEA) se muestra sensible ante la energía solar térmica considerando los futuros escenarios decadentes de carbón previstos para el año 2050 (IEA, 2011).

Debido a las limitantes económicas de la tecnología disponible hasta ahora, el límite de radiación solar de una zona apta para implementar una planta CSP está fijado a un valor de DNI de por lo menos 2000 kWh/m²/año. Sin embargo proyectos futuros podrán ser construidos en zonas que tengan DNI de por lo menos 1800 kWh/m²/año a medida que incremente la rentabilidad de las plantas (Breyer & Knies, 2009).

1.2.1 Impacto de la tecnología termosolar de concentración a nivel mundial

Hoy en día la tecnología CSP está regresando al mercado, ya que después de la construcción de 354 MWe de plantas comerciales en California durante 1984-1991, no hubo más crecimiento. Fue hasta el año 2006 cuando se reportaron las construcciones de una planta de 11 MW en España y otra de 64 MW en Nevada. Entre los años 2007 y 2009, importantes innovaciones en la tecnología CSP se llevaron a cabo, ya que se construyeron los primeros sistemas solares de torre central, las primeras plantas comerciales con capacidades multihorarias, así como también las primeras plantas de reflector lineal Fresnel. Estados Unidos y España representaron el 90% de producción en el mercado. De igual manera Argelia, Egipto y Marruecos ya integraban sistemas CSP a sus plantas de ciclo combinado. Por su parte Australia, China, India, Irán, Italia, México, Israel y algunos países de Sudáfrica finalizaban o ya consideraban proyectos referentes a esta tecnología (fig.1.10) (IEA, 2009). España con 2400 MW ya conectados a la red tomó la delantera en desarrollos comerciales para el año 2013, siguiéndole Estados Unidos con planes para el mismo año de 4500 MW.

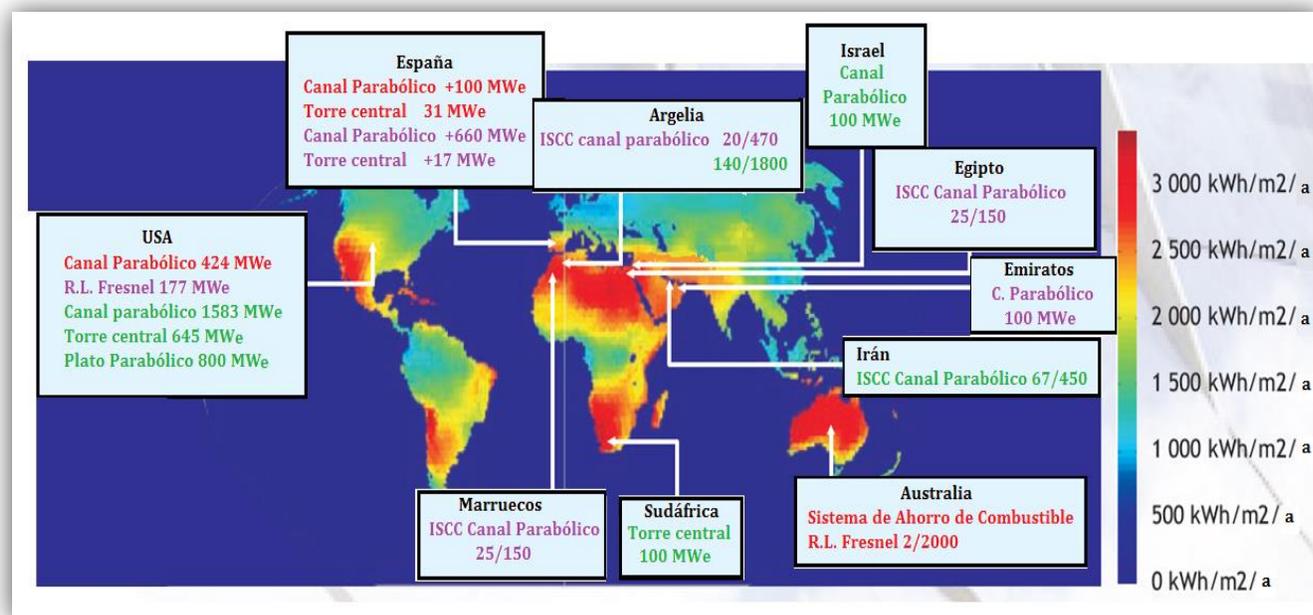


Figura 1.10: Implementación de la tecnología CSP en el mundo en el año 2009.

Leyenda: **Sistemas Existentes**; **Sistemas en construcción**; **Sistemas anunciados**. ISCC significa Plantas de Ciclo Combinado con Integración Solar (Integrated Solar Combined Cycle). xx/yy: xx indica la capacidad solar, y yy indica la capacidad total de la planta. (Breyer & Knies con información de IEA, 2009).

1.3 Situación energética actual en México

En el año 2013, en México se igualó el nivel de consumo nacional de energía, por primera vez, con su nivel de producción. Esto debido a una disminución del 0.4 % al año en su producción, y un incremento del 2.3 % del consumo, a partir del 2005 (fig. 1.11) (SENER, 2014).

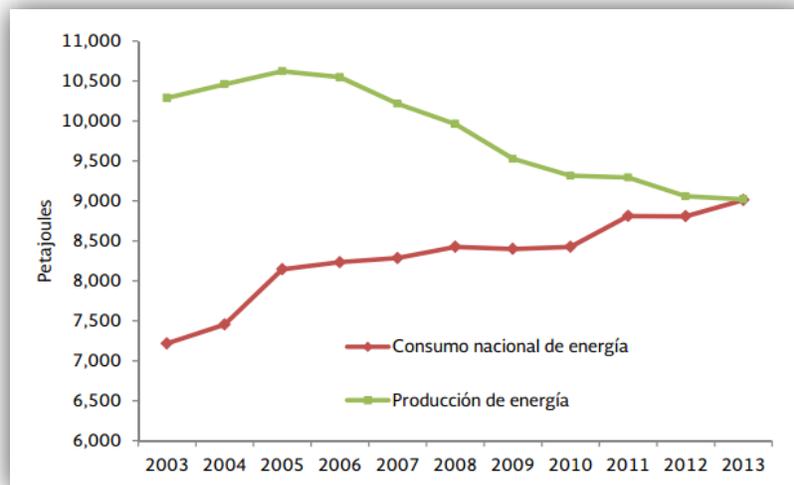


Figura 1.11: Evolución de la producción y el consumo nacional energético (SENER, 2014).

El sector energético en México representa un gran eslabón en su economía. Esta última está estrechamente relacionada con el consumo de los recursos fósiles, ya que le sirven como fuente de ingresos para la inversión en desarrollo social y económico. Sin embargo, para asegurar una futura seguridad energética y al mismo tiempo evitar los altos índices de gases de invernadero que degradan al ecosistema, algunas organizaciones gubernamentales o del sector privado han impulsado el uso de métodos renovables para la producción energética. A pesar de realizarse estas acciones, la producción nacional energética actual está encabezada por los combustibles fósiles, principalmente por el petróleo y el gas natural. La producción total de México en el 2013 fue de 9 020.21 PJ, 0.43% más bajo que en el 2012. De igual manera hubo disminuciones del 2.03% en la producción de petróleo y del 12.23% para la producción hidroeléctrica. Como puede observarse en la figura 1.12, las energías renovables representaron un 7% del total de energía producida en México en el año 2013. Específicamente, la energía solar conformó solamente un 0.8 % a pesar del alto potencial que presenta el país para implementar tecnología solar.

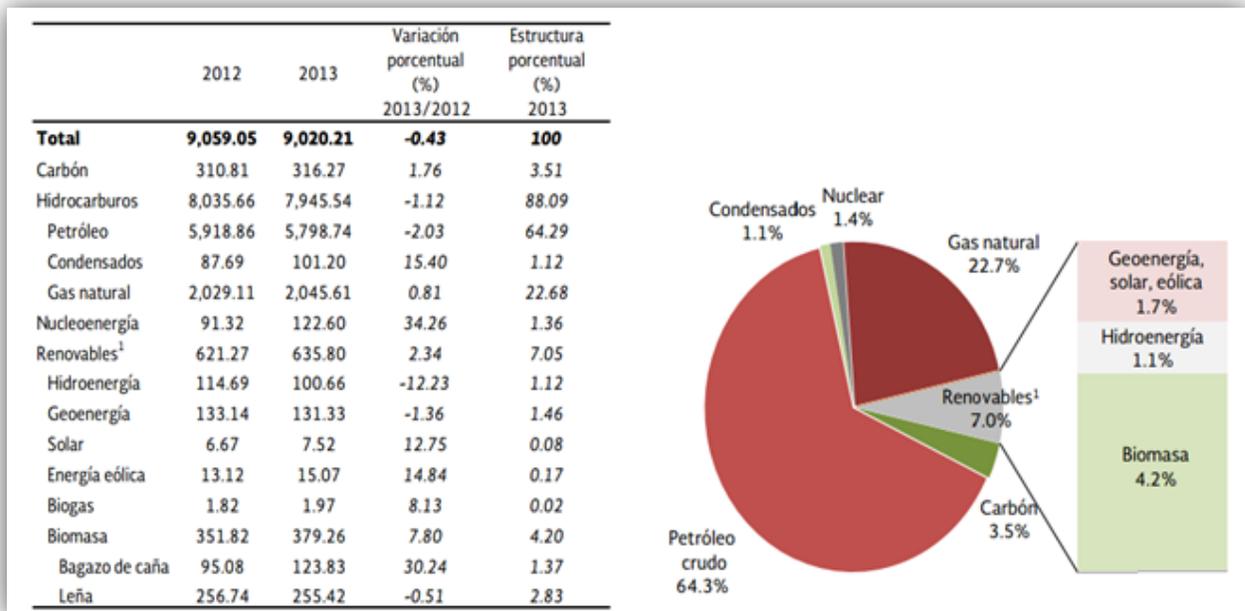


Figura 1.12: Producción energética primaria en México en Petajoules (PJ). A la izquierda comparación entre 2012 y 2013, a la derecha gráfica de estructura porcentual para el año 2013 (SENER, 2014).

En adición a los resultados desfavorables para las energías renovables mostrados por los estudios de producción energética, resulta importante mencionar que en la Estrategia Nacional de Energía 2013 – 2027 (SENER, 2013), llevada a cabo por la secretaría de energía, la posición de las energías renovables continúa adversa. Esto se debe a que los nuevos métodos de obtención del gas natural, han reducido sus costos, por lo que para el 2027, éste representará un 72 % de la producción energética total del país.

La tecnología solar en México es relativamente nueva, en particular los proyectos solares fotovoltaicos, iniciaron en el 2011 con un proyecto en Aguascalientes de 3.8 MW, y otros dos desarrollados por CFE en el 2012, uno en Baja California Sur, de 1 MW, y el otro en Baja California, de 5 MW. Posteriormente se interconectaron un total de 1 681 contratos a la red, por lo que en el transcurso del 2011 al 2012, el Balance Nacional de Energía registró un incremento de la tecnología del 46%, con 52.6 MW instalados. Por otro lado, en lo que respecta a la energía termosolar o de concentración, en México aún no hay centrales con operación exclusiva de esta tecnología de aprovechamiento solar. Sin embargo existe en el estado de Sonora el proyecto Agua Prieta II, desarrollado por CFE, el cual es un sistema híbrido de ciclo combinado (ISCC) de 477 MWe con un campo solar integrado por canales parabólicos dando una potencia adicional de 14 MWe (SENER, 2013).

Para tener una idea de las zonas con alto potencial para el desarrollo de la tecnología de concentración solar en México, se realizó un análisis destinado a la implementación del proyecto SOLHYCO (Solar Hybrid Power and Cogeneration Plants) en México. Este proyecto fue llevado a cabo por un consorcio internacional formado por países Europeos y del Mediterráneo. Este tiene como principal objetivo desarrollar un sistema híbrido de micro turbina (100 kW) altamente eficiente para la generación de potencia y calor, en donde la fuente principal de energía sea la radiación solar concentrada, y como respaldo una entrada de combustible fósil o biocombustible (IIE, 2010). Los resultados arrojados por el análisis se muestran en la tabla 1.1:

Tabla 1.1: Zonas de alto recurso solar en México (IIE, 2010).

Zona	Estado	Área (km ²)	% Terr. Nacional	Precipitación (mm / año)	DNI promedio kWh/ m ² - día
Noroeste	Baja California	69,921	3.5	<250	7.2
	Baja California Sur	73,475	3.7	<200	
	Sonora	182,052	9.3	250<x<600	
Norte	Chihuahua	244,900	12.5	100<x<200	7
	Coahuila	150,000	7.6	<400	
Norte - Central	Zacatecas	73,300	3.7	320<x<910	6.9
	San Luis Potosí	63,100	3.2	400<x<600	

Como se muestra en la tabla 1.1, las zonas más adecuadas para la implementación de la tecnología CSP, son las zonas Noroeste, Norte y Norte – Central, ya que presentan baja precipitación y un alto porcentaje de días claros a lo largo del año. De igual manera presentan un DNI promedio por arriba de los 2500 kW/m²/año, una cantidad mayor a los 2000 kW/m²/año, que es valor límite recomendado para la implementación de sistemas CSP, como se mencionó con anterioridad.

Estos resultados, que no deben ser ignorados, nos demuestran el gran potencial del país para la integración de los métodos solares de concentración al sector energético, contribuyendo en un futuro de manera significativa a la producción de energía eléctrica y a la generación limpia de calor para las numerosas necesidades industriales. Además los estudios resaltan la buena postura de México a nivel global, por sus condiciones geográficas, para la implementación de la tecnología.

1.4 Laboratorio Nacional de Concentración y Química Solar

Con el fin de impulsar el desarrollo de una industria nacional de tecnologías de concentración solar, se creó el Laboratorio Nacional de Concentración y Química Solar (LACyQS). Este proyecto se compone por una red de grupos de investigación que cumplen diversas tareas, como la generación de conocimiento científico y tecnológico, así como la formación de recursos humanos de alto nivel en el área.

El laboratorio se divide en 3 sub-proyectos:

-Planta Solar para el Tratamiento Fotocatalítico de Aguas Residuales (PSTFAR).

Este tiene como objetivo implementar tecnología para el tratamiento de aguas residuales por medio de fotocatalisis solar heterogénea. Se plantea principalmente para la solución del agua contaminada generada por los sectores Agrícola, Industrial, Turístico y Energético. La pequeña planta (fig. 1.13) está formada por 100 m² de colectores solares y cuenta con una capacidad de 800 litros de tratamiento.



Figura 1.13: PSTFAR ubicado en el IER- UNAM, Temixco, Morelos.

-Campo de Pruebas de Helióstatos (CPH). Mostrado en la figura 1.14, este campo está ubicado en Hermosillo, Sonora, y está destinado a la investigación y desarrollo tecnológico para optimizar y mejorar el rendimiento óptico y mecánico de los helióstatos, principalmente a aquellos aplicados en sistemas de concentración de torre central. También sirve como instalación de ensayo y laboratorio para aplicaciones de concentración sobre superficies de aproximadamente 6 m². Finalmente, mediante la demostración del sistema de generación de alrededor de 500 kWe, se busca dar sustento al desarrollo de una industria nacional mediante evaluaciones y mejoras continuas.



Figura 1.14: Campo de Pruebas de Helióstatos (CPH) ubicado en Hermosillo, Sonora.

-Horno Solar de Alto Flujo Radiativo (HoSIER). Este sistema de concentración, inaugurado en Marzo del 2011, ubicado en Temixco, Morelos, y auspiciado por el Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (Conacyt) y la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), es el primer horno de alto flujo radiativo en México. Este horno, diseñado para la investigación básica, aplicada y el desarrollo tecnológico, hace uso de flujos solares altamente concentrados.

El HoSIER está destinado a diseñar, probar y producir nuevos materiales, así como sintetizar o degradar compuestos. De la misma manera, se busca evaluar las propiedades de diferentes fluidos de trabajo y dar sustento a la producción de combustibles de bajo impacto ambiental (hidrógeno), llevando a cabo el desarrollo de nuevos dispositivos aplicados a procesos termoquímicos, como receptores o *reactores solares*. De esta manera, se busca dar servicio a universidades, institutos de investigación y diferentes ramas de la industria.

El diseño considera un error óptico global de menos de 3 mrad logrando una potencia total de aproximadamente 30 kW, en condiciones óptimas, con una concentración pico de 12 000 soles, sin embargo al realizar las primeras campañas experimentales, se obtuvieron valores más elevados.



Figura 1.15: Horno Solar de Alto Flujo Radiativo (HoSIER) ubicado en IER - UNAM, Temixco, Morelos.

El HoSIER, mostrado en la figura 1.15, está compuesto por diferentes elementos, estos son:

- *Helióstato H81*. Creado por el Instituto Nacional de Astrofísica, Óptica y Electrónica (INAOE). Es un dispositivo con superficie móvil que rastrea y refleja los rayos del sol hacia el concentrador, por medio de dos ejes de movimiento. El helióstato (fig. 1.16), está formado por 30 espejos planos de segunda superficie de 6 mm de espesor separados en dos grupos, el primero con 20 espejos con dimensiones de 1.8 x 1.3 m y el segundo formado por los 10 espejos restantes con dimensiones de 1.8 x 1.9 m. La configuración total del helióstato es de 81 m² (Estrada et al., 2011).



Figura 1.16: Helióstato H81 del HoSIER compuesto por 30 facetas.

- *Concentrador*. La configuración óptica del concentrador consiste en el arreglo de 409 espejos con apertura geométrica hexagonal y cada uno con una superficie esférica. Estos espejos están organizados en 5 grupos con diferentes distancias focales, y colocados en una misma estructura, también esférica (fig.1.17). Cada grupo de espejos está orientado y posicionado a cierta distancia focal, para cumplir su objetivo de reflejar la radiación solar incidente en un mismo punto o mancha solar de aproximadamente 10 cm. Como se mencionó anteriormente, se diseñó para tener una máxima concentración de 12 000 soles, sin embargo en campañas experimentales llevadas a cabo en la segunda etapa del proyecto, se obtuvieron concentraciones superiores a los 18 000 soles, alcanzando temperaturas superiores a los 3 000°C. De esta forma, el HoSIER se posiciona por encima de muchos otros hornos en el mundo.

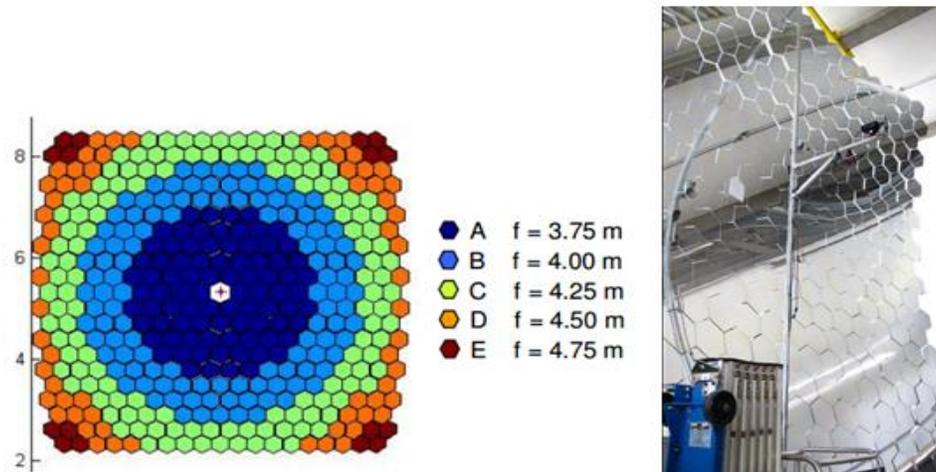


Figura 1.17: Distancias focales para cada grupo de facetas del concentrador del HoSIER (Riveros-Rosas et al, 2011). A la derecha una foto del mismo.

- *Mesa experimental.* La mesa está posicionada a 3.68 m del concentrador y es en donde se posicionan los receptores/reactores para su experimentación (fig.1.18). De igual manera ésta tiene una movilidad con precisión de una décima de milímetro en cualquiera de sus tres direcciones.
- *Atenuador.* Éste tiene la función de regular la radiación reflejada por el helióstato, controlando así la potencia total concentrada por el HoSIER. El atenuador es controlado por un programa que automatiza su apertura. En la figura 1.18 se puede observar el atenuador al fondo.

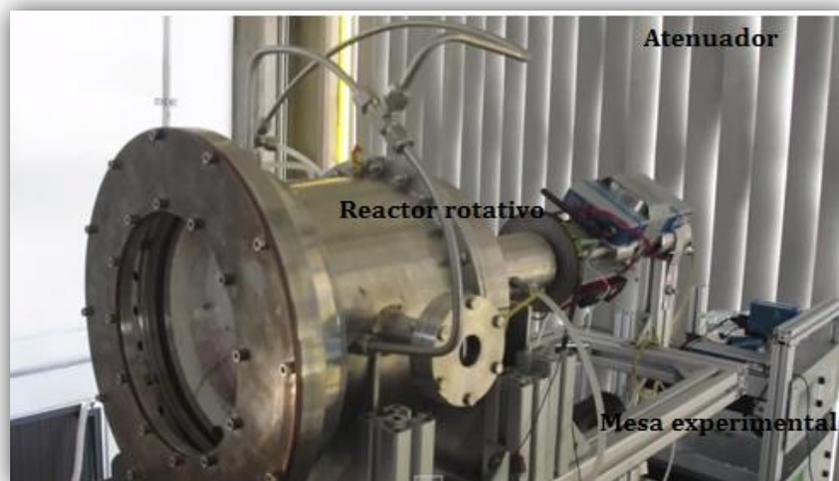


Figura 1.18: Ensamble sobre la mesa experimental del reactor rotativo de 10 kW del IER, UNAM.

- -Sistema de control SCADA. El sistema de Supervisión, Control y Adquisición de Datos permite el control de todos los componentes del HoSIER, desde el Helióstatos hasta la toma de datos de los sensores posicionados en los dispositivos de experimentación.

1.5 Energía solar en la producción de combustibles solares

La principal finalidad de un sistema CSP es el aprovechamiento intensivo del recurso solar, las formas de aprovechar el recurso es mediante la producción de los denominados “vectores energéticos modernos”, por un lado la generación eléctrica por técnicas fotovoltaicas o termosolares, éstas últimas se explicaron detalladamente en el apartado anterior, y por otra parte la producción de combustibles solares, utilizando la energía limpia del sol como fuente energética en su producción.

El hidrógeno, cuyas características se mencionan en la figura 1.19, es considerado un combustible portador de energía con mucho potencial en un plano futuro. Puede ser almacenado por tiempos prolongados y llevado a zonas donde no se cuenta con mucha capacidad solar, también puede ser quemado para generar calor y con este electricidad, o producirla directamente mediante celdas de combustible o baterías. Primordialmente, evita las emisiones de gases contaminantes generados en la combustión de hidrocarburos fósiles para las aplicaciones industriales en la actualidad.

Hoy en día, las técnicas de obtención de hidrógeno más utilizadas en la actualidad son mediante el reformado de gas natural (48%), o por medio de procesos de oxidación parcial de carbón (18%) o hidrocarburos (30%). Un método reciente y avanzado para producirlo es la electrólisis del agua pura con un 4% (fig.1.19) (Koumi & Njomo, 2012).

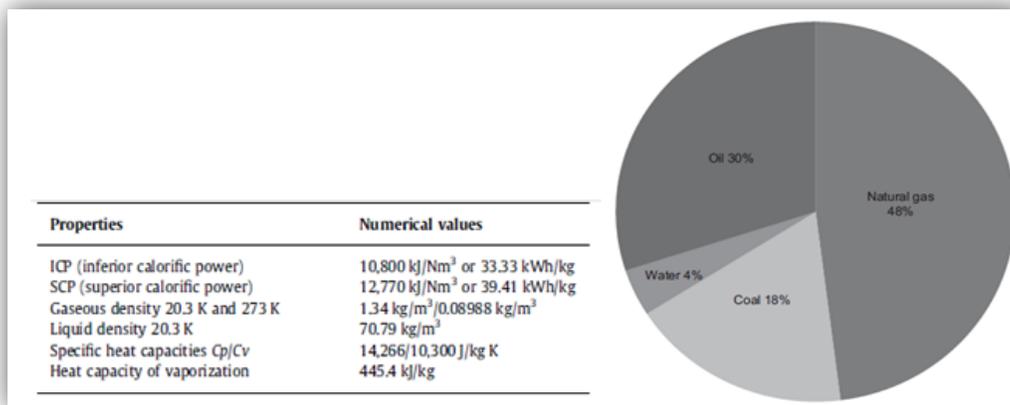
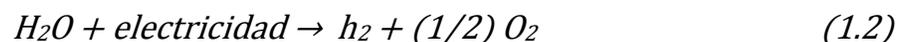


Figura 1.19: A la izquierda las características del hidrógeno. A la derecha la distribución de los modos de producción de hidrógeno (Koumi & Njomo, 2012).

Estos métodos además de utilizar recursos fósiles como materia prima, también los utilizan para generar la energía necesaria en los procesos. Esto contribuye a la crisis energética antes mencionada en vez de atribuir algún beneficio. Por ejemplo, en el proceso de reformado por vapor del gas natural se producen 9 kg de CO₂ por cada kg de hidrógeno generado (Praxair, 2009). Es este el motivo por el cual dentro de las energías renovables, la energía solar se propone como la mejor manera de generación de hidrógeno, por ser la más abundante y limpia.

Después de numerosas investigaciones alrededor del mundo, se han identificado diferentes maneras para producir hidrógeno solar. Estos procesos se agrupan en tres grupos:

- Fotoquímicos: En esta tecnología se utiliza la luz solar para generar la hidrólisis del agua y así obtener el hidrógeno. Puede ser mediante procesos fotobiológicos o foto electroquímicos. Los primeros se basan en la capacidad de algunos organismos, como las algas o cianobacterias, de cumplir la función de un catalizador en la reacción de agua con diferentes enzimas (hidrogenasa o nitrogenasa) y la luz solar, para producir hidrógeno. El proceso foto electroquímico, por su parte, consiste en sumergir celdas foto electroquímicas (PEC) en agua o en un electrolito para después iluminarlas con luz solar, separando así las componentes del agua.
- Electroquímicos. Este proceso de igual manera tiene la finalidad de separar los elementos que conforman el agua pero mediante energía eléctrica generada de manera externa al sistema, por ejemplo por una batería. Se utiliza dos electrodos, llamados ánodo y cátodo, y se sumergen en un electrolito para facilitar la transferencia de iones entre estos y así transformar la energía eléctrica del sistema en energía química (hidrógeno). La reacción general es la siguiente:



Éste es el método más maduro y utilizado en la industria, sin embargo no es muy rentable en la parte de adición de energía eléctrica, a menos que ésta venga de fuentes renovables. Un ejemplo es la unidad PHOEBUS (Photovoltaik, Elektrolyseur, Brennstoffzelle Und Systemtechnik) de carácter demostrativo instalada en el Forschungszentrum, Jülich, que consiste en la producción de hidrógeno mediante campos voltaicos de 43 kW (Meurer, 1999).

- Termoquímicos. Estos métodos consisten en concentrar la radiación solar mediante un sistema CSP, como sistemas de torre central u hornos solares,

para después capturarla con receptores o reactores apropiados. Esta radiación se utiliza como fuente de energía para llevar a cabo una reacción química endotérmica a altas temperaturas. (Steinfeld & Meier, 2004) proponen diferentes rutas termoquímicas para la producción de hidrógeno solar (fig. 1.20), las cuales se muestran en el siguiente esquema:

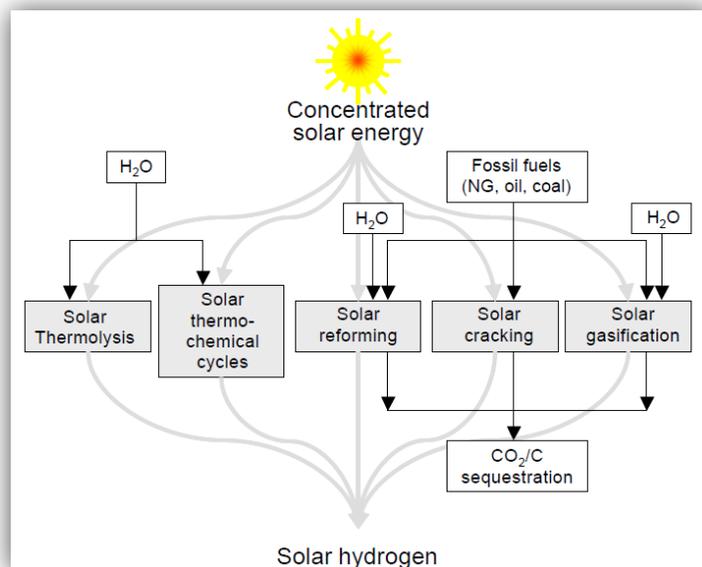


Figura 1.20: Rutas para la producción de hidrógeno solar (Steinfeld & Meier, 2004).

1.5.1 Métodos termoquímicos solares de producción de hidrógeno

De entre los métodos termoquímicos solares de producción, la termólisis directa del agua y los ciclos termoquímicos se llevan a cabo en total ausencia de hidrocarburos. Sin embargo para el craqueo, el reformado y la gasificación, mostrados en la figura 1.20, se utilizan recursos fósiles pero en bajas proporciones. Los métodos son los siguientes:

-Termólisis directa del agua. Es la disociación o termólisis del agua mediante un solo paso, agregando calor a muy altas temperaturas de por arriba de 2500K. La necesidad de esta fuente alta de energía hace que el proceso sea poco rentable, por la baja eficiencia resultante, sin mencionar la ausencia de una técnica efectiva para poder separar el H_2 y O_2 evitando una recombinación o la generación de una mezcla explosiva.

-Ciclos termoquímicos para la termólisis del agua. A diferencia de la termólisis directa, los ciclos permiten la disociación del agua en diferentes etapas, sin la necesidad de requerir a temperaturas tan altas. Debido a que el O₂ y el H₂ se generan en etapas independientes, se evitan los riesgos que implican el manejo de ambos para su separación. Un ejemplo se muestra en la figura 1.21.

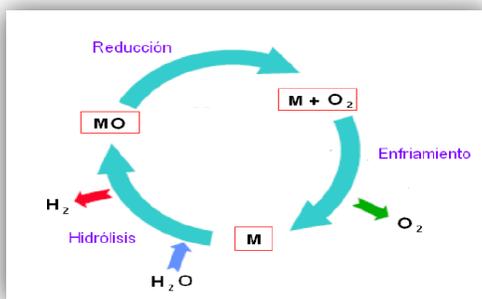


Figura 1.21: Ciclo termoquímico de dos etapas (Alonso, 2014).

Los óxidos metálicos son muy utilizados en los ciclos termoquímicos, comúnmente en reacciones de oxidación y reducción. Mediante estos óxidos, la generación de hidrógeno se lleva a cabo en dos etapas (Steinfeld & Meier, 2004):

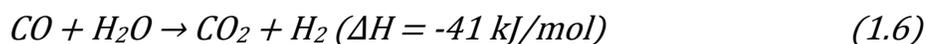


En donde M es el metal y M_xO_y se refiere a su correspondiente óxido. La primera etapa (ec.1.3), representa la etapa de reducción, la cual se produce mediante la adición de energía solar. La segunda etapa, representada en la ecuación 1.4, indica el proceso exotérmico de la hidrólisis del metal para formar hidrógeno. Estas reacciones generalmente se llevan a cabo dentro de reactores solares, de los cuales se hablará detalladamente en el siguiente capítulo.

-Craqueo solar de hidrocarburos. También llamado descomposición térmica. Consiste en la separación o ruptura de las moléculas de un hidrocarburo, generalmente gas natural, para obtener otras más pequeñas, en este caso Hidrógeno y Carbono sólido, mediante la adición de energía solar concentrada. Este proceso genera emisiones económicas de CO₂ con respecto a otros métodos de producción, de aproximadamente 14 kg de CO₂ por cada kg de H₂. Además se presenta una gran facilidad para capturar, manejar y transportar el carbono sólido. El método fue propuesto por (Matovich, 1978), el cual desarrolló un reactor que permitía la disociación de metano (CH₄) en fracción de segundos a temperaturas de 2100K.

-Reformado y gasificación solar por vapor de hidrocarburos. Son procesos semejantes para la lenta formación de un gas de síntesis mediante la reacción de un hidrocarburo con vapor de agua, el cual se lleva a cabo a presiones moderadas, en el rango de los 25 bares y a altas temperaturas de más de 700°C, generadas por un sistema CSP.

Para ejemplificar el proceso, se presentan las etapas para el reformado del metano. Al gas de síntesis generado en la etapa de reformado (ec.1.5), se le somete a una reacción de desplazamiento, agregando H₂O, para así obtener un producto en el cual sus moléculas puedan ser fácilmente capturadas posteriormente (ec.1.6) (Koumi & Njomo, 2012).



Estos métodos generan emisiones económicas de CO₂. Comúnmente, para el reformado se utiliza como materia prima hidrocarburos ligeros, como gas natural, metano o incluso naftalina, a diferencia de la gasificación, para la cual se utiliza carbón u otros hidrocarburos pesados como el coque.

Un resumen de los métodos termoquímicos de obtención de hidrógeno a partir combustibles fósiles se muestra en la figura 1.22.

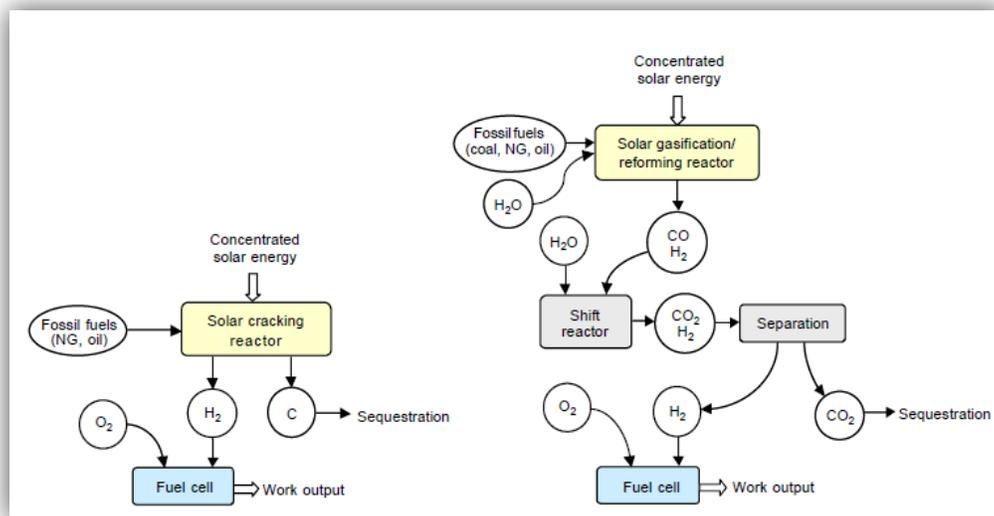


Figura 1.22: Rutas termoquímicas solares para la producción de H₂ utilizando combustibles fósiles. A la izquierda el craqueo solar y a la derecha el reformado y gasificación solar (Steinfeld & Meier, 2004).

-Gasificación de la biomasa. Se denomina biomasa a toda la materia orgánica que se forma en un proceso biológico de origen animal o vegetal, y que puede ser utilizable como energía. Este método consiste en gasificar la biomasa, la cual es renovable, abundante y fácil de utilizar. Permitiendo así valorizar los residuos de estos materiales y almacenar al mismo tiempo la energía.

Gasificar biomasa es una forma confiable de producir hidrógeno, ya que su emisión neta de CO₂, de aproximadamente 6 moléculas, es casi nula debido a que es la misma cantidad en la atmósfera que utilizan las plantas para realizar su fotosíntesis.

Para tener una mejor idea de la rentabilidad de cada proceso termoquímico, es necesario saber el potencial de trabajo útil de cada proceso y también conocer su perfil económico. Al potencial de trabajo útil se le denomina *eficiencia o rendimiento*, y puede ser definida como la razón del trabajo de salida realizado por la celda de combustible, a la energía térmica total de entrada, esta última compuesta por la energía solar y la energía calorífica del combustible fósil (High Heating Value, HHV) (ec.1.7), dado el caso de ser utilizado.

$$\eta = \frac{W_{C.C.}}{Q_{solar} + HHV_{reactivo}} \quad (1.7)$$

Una gráfica comparativa de la eficiencia exérgica para cada método se muestra en la figura 1.23, seguida por la tabla 1.2, la cual refleja los costos a largo plazo en la producción de hidrógeno, para plantas comerciales piloto actualmente en operación y otros métodos renovables futuros.

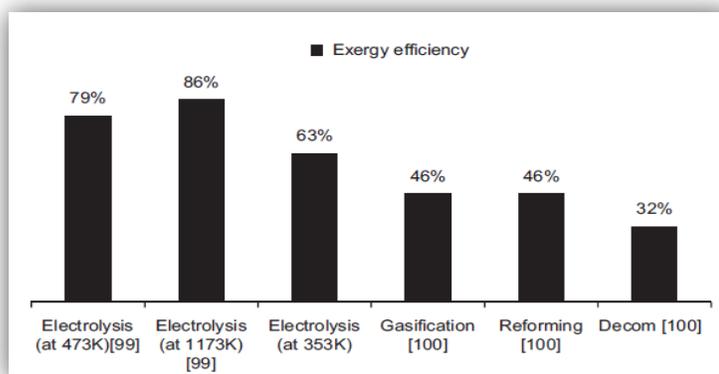


Figura 1.23: Comparación exérgica de los procesos termoquímicos de producción de hidrógeno (Koumi & Njomo, 2012).

Tabla 1.2: Costos proyectados a largo plazo en la producción de hidrógeno (€/ton de H₂) (Galli & Stefanoni, 1997).

Current process designs and small scale pilot plants	Cost (€/ton of H₂)
Solar hybrid sulphur cycle	1900
Solar sulphur-iodine cycle	2000
Solar metal/metal oxide cycle	3500
Solar high temperature electrolysis	4667
Solar methane cracking	1767
Solar methane steam reforming	1633
Other future renewable options	Cost (€/ton of H₂)
Biomass gasification	1067
Alkaline electrolysis using photovoltaic power	6667
Alkaline electrolysis using solar thermal power	2667
Alkaline electrolysis using wind power	2333

De acuerdo a la tabla, se puede observar que el único método que puede volverse competitivamente económico es el reformado por vapor, seguido por el craqueo. Sin embargo los costos de ambos dependen de la disponibilidad y precios de los recursos fósiles, sin mencionar que es un proceso de “transición” para dejar su alta dependencia.

A pesar de que las técnicas por electrólisis tienen un porcentaje exergético más alto, el precio del hidrógeno producido por estas será grande en comparación con el generado por otros métodos más maduros, aunque considerando el beneficio ambiental y lo que esto conlleva, los costos pueden tornarse a favor. Aún se requiere un amplio trabajo de investigación para llevar estas técnicas a una etapa madura.

1.5.2 Reactores químicos solares

Los reactores químicos solares son los dispositivos en donde se realizan las reacciones químicas mencionadas anteriormente. Estos reactores aprovechan la radiación concentrada para poder llevar a cabo la reacción. En el capítulo 2 se explicarán a detalle estos dispositivos.

1.6 Conclusiones del capítulo

Al día de hoy los primeros proyectos ya concluidos y conectados a la red están encabezados por tecnologías de canal parabólico. De la misma forma los colectores Fresnel y sistemas CRSs comienzan a implementarse comercialmente, demostrando su potencial a futuro, principalmente en la reducción de costos.

El panorama prometedor prevé la implementación de tecnologías con doble generación, como los sistemas de almacenamiento por sales fundidas o la generación

directa de vapor, así como también acelera la búsqueda de nuevas innovaciones. Por este motivo organizaciones como la Agencia Internacional de Energía (IEA) o la Asociación de la Industria Europea ESTELA han llevado a cabo grandes estudios de corto y largo plazo en los que prevén ahorros del 30% en la producción y reducciones en los costos de manufactura, alcanzando para el 2025 niveles competitivos con las fuentes convencionales de generación de energía.

Por otro lado la producción de hidrógeno por técnicas solares propone una alternativa renovable, limpia y con la finalidad de reducir las altas emisiones hasta ahora generadas en el procesamiento de los combustibles fósiles. De entre las rutas de producción de hidrógeno, los procesos termoquímicos, en particular los que utilizan recursos fósiles, se proyectan como la mejor opción a corto plazo. A pesar de ser considerados métodos de “transición”, las ventajas son muy marcadas. Los combustibles solares se postulan para ser la mejor solución en un futuro escaso de hidrocarburos.

Con el escenario ahora mostrado, surge un amplio panorama de oportunidades para aquellas regiones con alto potencial solar, en el camino hacia una futura economía de hidrógeno solar en donde la producción de este no será solo para el consumo interno, sino también para el mercado de exportación.

1.7 Objetivos del estudio.

El objetivo general de esta tesis es generar una propuesta de modelado y diseño de un reactor solar termoquímico para la gasificación de coque de petróleo mexicano.

Los objetivos particulares del estudio son:

- Determinar el flujo de calor incidente en la zona focal del reactor mediante una herramienta de simulación óptica.
- Simulación en software especializado para determinar la mecánica de los fluidos de arrastre, en ausencia de radiación, en el interior del reactor.
- Re-diseñar los diversos componentes mecánicos de un modelo preliminar de reactor, mediante un programa de diseño asistido por computadora.

1.7.1 Estructura general del trabajo

En el presente capítulo se ha presentado el panorama energético mundial, a la tecnología de concentración solar, los diferentes sistemas de concentración, y las formas de aprovechamiento del recurso solar para una producción de combustibles solares.

En el capítulo 2 se realiza un extenso estudio sobre el estado del arte de los reactores solares para entender, a partir de experiencias previas, el diseño y funcionamiento de un reactor solar. De esta manera, se obtienen herramientas para realizar una propuesta de optimización de un reactor preliminar.

En el capítulo 3, se parte del modelo preliminar y se desarrolla un análisis de distribución de la radiación, con el fin de determinar un adecuado posicionamiento de la ventana de cuarzo para la propuesta de optimización, que permita el paso del mayor flujo radiativo posible al interior del reactor.

El capítulo 4 se enfoca principalmente en el estudio de la mecánica de los fluidos de arrastre en el interior del reactor. Se realizan simulaciones mediante la Dinámica de Fluidos Computacional (CFD, de su acrónimo anglosajón *Computational Fluid Dynamics*), para determinar los campos de flujo en el reactor preliminar, y para comprobar las ventajas que presenta una apertura de campana y la adición de material aislante en la propuesta de optimización.

El capítulo 5 se dedica a la descripción de las piezas del reactor preliminar y del reactor optimizado. También se proponen los materiales de construcción y los dispositivos que se utilizarán una vez construido el reactor.

CAPÍTULO 2

2 REACTORES SOLARES

En este capítulo se presentan los fundamentos que llevaron a la elección del coque como materia prima objeto de este estudio, así como también se explica el proceso de gasificación. Además se realiza un análisis del estado del arte de los reactores solares, haciendo énfasis en aquellos destinados a la gasificación de materiales carbonáceos. Esto debido a que para llevar a cabo el diseño de un prototipo de reactor, es fundamental extraer información y recopilar la valiosa experiencia de otros autores en la misma línea de investigación. El estudio del estado del arte nos permite eliminar ciertos errores previos de diseño y principalmente realizar una selección de las características más adecuadas para el proceso requerido, en este caso el de la gasificación.

2.1 Coque de petróleo

El capítulo anterior deja clara la necesidad de implementar nuevas formas de generación de energía mediante procesos limpios, que puedan contrarrestar el exceso de gases contaminantes liberados a la atmósfera. Sin embargo, también es necesario remarcar la gran importancia de los combustibles fósiles en el suministro energético mundial. Además, estos representan un eslabón importante en la economía de México, por lo que es necesario también, centrar esfuerzos en la mejora de los procesos de la industria petrolera y en el aprovechamiento de los desechos generados por esta.

El **coque de petróleo** es un producto residual de alto contenido de carbono, resultante del proceso de pirolisis de las fracciones pesadas que se obtienen en la refinación del petróleo. Es similar al carbón mineral, bajo en cenizas, pero con una alta concentración de azufre. Una buena ventaja del coque es que posee un poder calorífico equivalente al 80% del de un residual líquido, como el combustóleo. Además, al ser combinado con agua mediante una reacción endotérmica, se genera un gas de síntesis con un valor energético mucho mayor. Esto permite considerar al coque de petróleo, entre otros combustibles, como una alternativa de mediano y largo plazo para la generación de electricidad, así como de vectores energéticos como el hidrógeno.

En México se produce coque de bajo valor comercial, llamado “de combustión”. Para el año 2006, se produjeron 4 473 toneladas de coque al día en las refinerías de Madero y Cadereyta ubicadas en Tamaulipas y Nuevo León, respectivamente. PEMEX estima que para el 2016 se habrá incrementado el número a 29 726 toneladas de coque al día, esto como consecuencia del procesamiento de mayores volúmenes de crudos pesados en las refinerías. Esta cantidad es equivalente a la producción actual de coque en el estado de Texas (Fernández, 2008). Lo cual nos da un panorama de la gran cantidad de coque que se estará produciendo a mediano plazo. Aunado a esto, la figura 2.1 presenta un comparativo de los diferentes precios de los combustibles susceptibles a ser gasificados para el periodo 2006-2035, en el que puede apreciarse que el coque presentará precios muy bajos, a diferencia del combustóleo, que para el 2032 estará alcanzando el precio del gas natural.

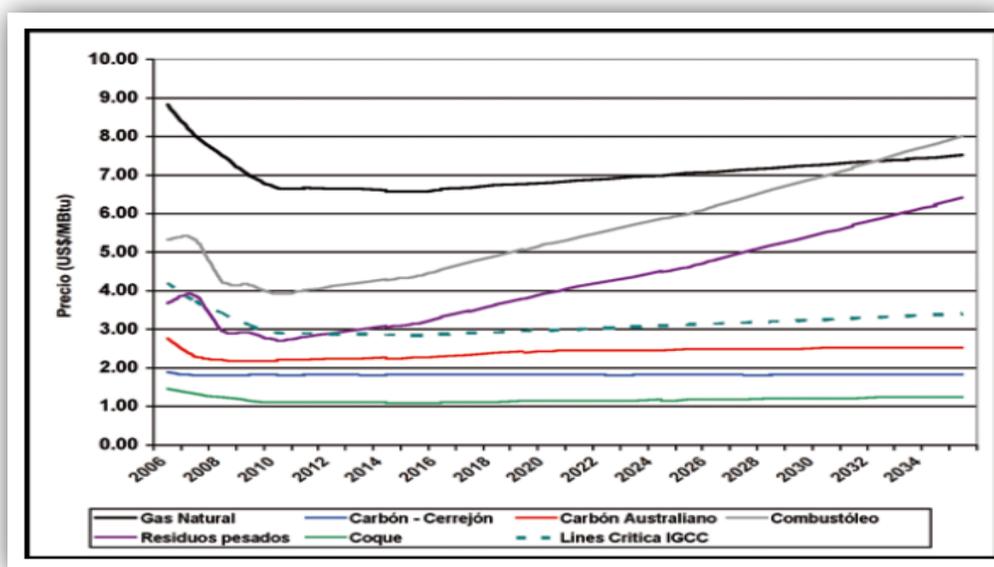


Figura 2.1: Precios de los combustibles susceptibles a ser gasificados por unidad de energía en el periodo 2006-2035 (Fernández et al., 2007).

Sin embargo, a pesar del buen escenario presentado a mediano plazo, el coque presenta la gran desventaja de no ser muy viable en su quema en sistemas convencionales, como generadores de vapor, ya que no es nada rentable retirar las emisiones de azufre generadas. Por lo que resulta necesario implementar tecnologías que puedan eliminar las emisiones indeseables, antes o durante el proceso de combustión, y también que puedan elevar su valor energético sin la necesidad de utilizar la misma materia prima como fuente de energía en el proceso.

La gasificación solar por vapor del coque es un método limpio capaz de resolver el problema de emisiones de gases no deseadas, y de aumentar el poder calorífico del coque a disposición. Además de que el coque de combustión producido en el país es un perfecto candidato para el método.

2.1.1 Elección del coque de petróleo

Para la primera campaña experimental de la propuesta del reactor solar que se diseñará en esta tesis, se utilizarán muestras distintas de coque producidas por tres refinerías de PEMEX; la de Ciudad Madero, Tamaulipas; la de Cadereyta, Nuevo León; y la de Minatitlán, Veracruz. En estas refinerías se generan cantidades considerables de coque que tienen diferentes destinos. La refinería de Ciudad Madero destina 750 mTA (miles de toneladas anuales) de coque para la generación de potencia eléctrica de la red de Tamuín, San Luis Potosí. Por otro lado, 850 mTA de coque de la refinería de Cadereyta son destinados a CEMEX, y finalmente 1000 mTA producidos por la refinería veracruzana son dirigidos a la cementera CEMEX-APASCO (PEMEX, 2013). Esto nos da una idea de la cantidad de coque que podría elevar su valor energético mediante el proceso de gasificación solar, volviéndose una propuesta además de benefactora para el ambiente, atractiva para el sector industrial.

2.2 Gasificación

La **gasificación** es una combustión incompleta que puede separarse en 4 pasos:

-Secado. Mediante el cual se retira completamente la humedad del material y puede ser realizado en un horno a 150°C.

-Pirolisis. Alcanzando una temperatura de aproximadamente 1400°C, se produce una descomposición química de la materia orgánica en ausencia de un agente oxidante. Este proceso se ha utilizado en gran escala para generar coque de petróleo destinado a la industria metalúrgica.

-Gasificación reactiva. La gasificación reactiva es una reacción química producida por la mezcla heterogénea de carbón sólido y un agente reactante, puede ser con vapor de agua (para una gasificación por vapor) o con CO₂ (para una gasificación seca), produciendo H₂ y CO (gas de síntesis). Esta reacción se produce con temperaturas superiores a los 700°C, y entre mayor sea la temperatura, el proceso de gasificación es más eficiente.

-Combustión. Es el proceso de oxidación rápida del material en presencia de un agente oxidante.

Es importante mencionar que en el proceso de *gasificación de coque de petróleo*, no se presentan los pasos de secado y combustión, ya que el coque contiene muy poca humedad y en la reacción química participan bajos niveles de oxígeno.

Como se mencionó en el capítulo anterior, la **gasificación solar por vapor** de un hidrocarburo, consiste en la generación de H_2 y CO , denominado “gas de síntesis”, producido por la reacción de un hidrocarburo con vapor de agua a altas temperaturas (ec. 1.5 y 1.6 del capítulo 1), generadas por la radiación solar. La gasificación empieza a los $700^\circ C$, sin embargo, es a partir de los $1\ 027^\circ C$ que la reacción se considera más limpia y eficiente. Este método genera pocas emisiones de CO_2 . También, el gas de síntesis resultante es limpio y posee un mayor contenido energético, ya que la energía de la materia prima incrementa un 33% solo por la adición de la energía solar (Alonso, 2014).

2.3 Reactores solares

Como se mencionó en el capítulo uno, uno de los elementos más importantes de un sistema de concentración solar es el receptor/reactor. El cual es un intercambiador de calor altamente absorbente que recibe la radiación concentrada transformándola en energía térmica, la cual se utiliza después para llevar a cabo una reacción química. Debido a que el proceso se lleva a cabo a temperaturas muy altas, este receptor/reactor debe emular lo más cercanamente posible el desempeño de un cuerpo negro radiativo, esto quiere decir que las pérdidas por radiación, convección y conducción deben ser mínimas. Finalmente, adentro del reactor se encuentra un fluido térmico con una temperatura de salida tan alta como para alimentar un turbogenerador.

Ya que esta energía térmica proveniente del sol es utilizada para llevar a cabo una reacción química endotérmica, a este proceso se le denomina “termoquímico solar”. Para realizar estos procesos con altas velocidades en sus reacciones químicas y por lo tanto de manera más eficiente, es necesario mantener la temperatura de operación a temperaturas altas. Para llevar a cabo los procesos termoquímicos mencionados, se utilizan los denominados “reactores solares”, que son receptores diseñados para operar a altas temperaturas, minimizando las pérdidas de calor y favoreciendo el intercambio térmico y másico entre las especies que participan en la reacción.

El diseño de un reactor/receptor es una tarea compleja, debido a que intervienen un gran número de factores, por ejemplo la temperatura o presión máxima de operación, el ciclo termodinámico que será utilizado, la forma de irradiar, la manera en que se inyectan los gases, el posicionamiento de la materia prima, el tamaño de la muestra de ésta y la elección de los materiales. Este conjunto de parámetros definen

completamente la eficiencia de la conversión de energía del sistema, por lo tanto es necesario llevar a cabo un estudio extenso de estos. Por ejemplo, la tecnología tubular permite temperaturas de 1000°C o presiones altas de 120 bares, pero no ambas. Sin embargo receptores directamente irradiados permiten incluso temperaturas más altas, pero presiones por debajo de los 15 bares (Romero & Gonzáles-Aguilar, 2013).

2.3.1 Clasificación general

Una de las formas de clasificación de los reactores o receptores solares es de acuerdo a como la radiación llega a ellos, es decir, a la forma en que el calor se integra a la cámara de reacción, así estos pueden ser *directamente o indirectamente irradiados* (Diver, 1986). A continuación se explica esta clasificación, haciendo énfasis a los reactores de partículas irradiados directamente, ya que en este particular grupo se encuentran aquellos destinados a la gasificación de materiales carbonáceos, como lo es el coque de petróleo.

-Reactores indirectamente irradiados.

En este tipo de reactor se utiliza un material de pared para absorber la radiación concentrada y así transferir el calor a los reactivos por medio de conducción, convección y/o radiación. Por lo tanto estos reactores están definidos principalmente por su superficie o mecanismo de intercambio de calor radiativo/convectivo. Una gran ventaja es que, a diferencia de los reactores irradiados directamente, no es necesaria una ventana de alta transmisividad, por consiguiente sus costos son menores. Sin embargo, estos reactores poseen la gran desventaja de presentar una transferencia de calor menor, debido a que la transmisión de calor depende completamente de las características del material absorbedor, como de su máxima temperatura de operación, su conductividad térmica, su absorptividad radiativa y su resistencia a gradientes o choques térmicos. Además, si se generan altos gradientes térmicos en estos reactores, el material absorbedor puede sufrir estreses térmicos que pueden degradarlo, por lo tanto no son adecuados para aplicaciones que requieran muy altas temperaturas. Los reactores indirectamente irradiados pueden ser tubulares, de doble cámara y de micro canales (Alonso, 2014).

- *Reactores tubulares.* Este tipo de reactores se basan en una cavidad opaca en donde por medio de una apertura, se introduce la energía solar, irradiando así una serie de tubos que contienen un fluido térmico en su interior, esto aumenta su energía por medio de una transferencia de calor. Estos reactores empezaron a utilizarse principalmente para el tratamiento de combustibles, por ejemplo para el reformado o disociación de metano (fig.2.2) y para la conversión de biomasa.

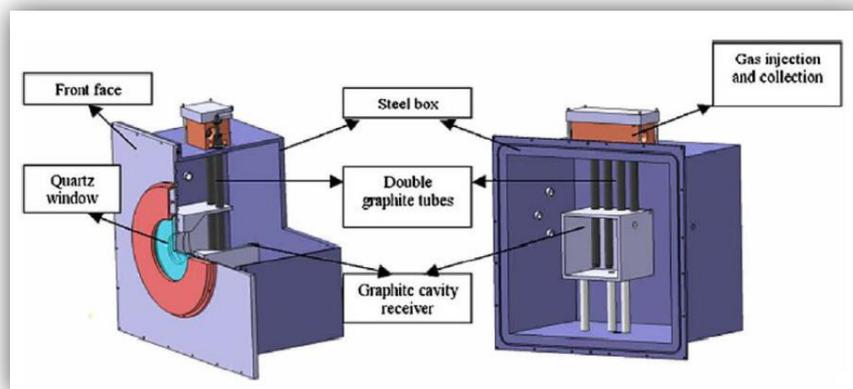


Figura 2.2: Reactor tubular para la disociación de metano (Rodat et al., 2009).

- Reactores de doble cámara.* Estos reactores se propusieron por primera vez en el Paul Scherrer Institute (PSI) en Suiza por el año 2003. Este método indirecto consiste en la implementación de dos cámaras superpuestas una sobre la otra, la cámara superior tiene la función de agente absorbedor, y la inferior de llevar a cabo la reacción. Ambas cámaras son divididas por una placa emisora, generalmente cubierta con carburo de silicio, por sus excelentes propiedades térmicas. Una gran ventaja de este arreglo, es que la ventana queda completamente aislada de la cámara de reacción, evitando así el depósito indeseado de partículas en la superficie de la ventana, afectando su transmisividad. La figura 2.3 muestra el reactor de doble cámara para la gasificación de materiales y residuos carbonosos propuesto por Wieckert et al. (Wieckert et al., 2009).

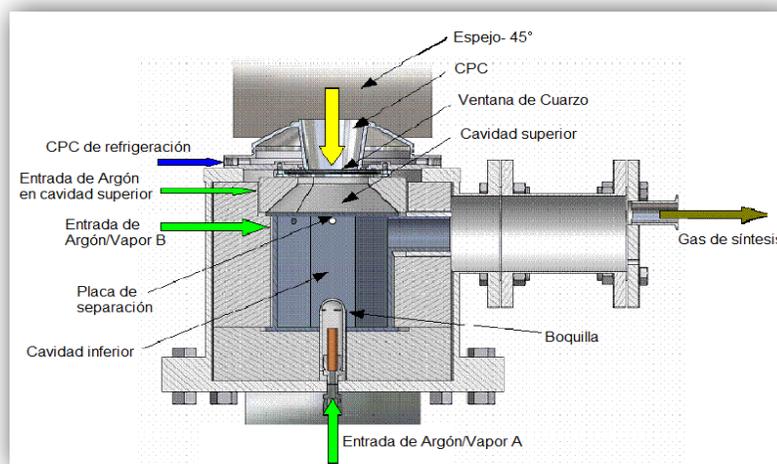


Figura 2.3: Reactor de doble cámara para la gasificación de materiales y residuos carbonosos (Wieckert et al., 2009).

- *Reactores de microcanales.* Estos reactores surgieron por la necesidad de mejora de los reactores tubulares, buscando un mejor aprovechamiento de la transferencia de calor. Los microtubos poseen diámetros de entre 20 y 1000 μm , esto genera una buena relación superficie-volumen que mejora la eficiencia del proceso. Estos reactores se utilizan en reacciones catalíticas, como por ejemplo en la conversión de hidrocarburos a altas temperaturas.

-Reactores directamente irradiados.

Usan fluidos o flujos de partículas capaces de absorber eficientemente el flujo concentrado. Estas partículas están directamente expuestas a la radiación solar, lo cual provee más eficientemente la energía al sitio de reacción. Son utilizados para numerosas aplicaciones, y pueden ser abiertos a la intemperie o sellados mediante una ventana de alta transmisividad, esta última para evitar cualquier filtración a la atmósfera de la reacción llevada a cabo en su interior. Debido a que la absorción de la radiación ocurre directamente en la superficie de los reactivos, se logran temperaturas más altas que aquellas obtenidas por un reactor indirectamente irradiado. Además, para aplicaciones químicas son excelentes, por ejemplo para la producción de hidrógeno mediante el proceso de gasificación. Estos reactores han sido ampliamente estudiados a escala de laboratorio y los hay volumétricos o de partículas (Alonso & Romero, 2015).

- *Reactores volumétricos.* Están formados por una estructura metálica o cerámica con una matriz volumétrica, la cual recibe la radiación y calienta el aire que pasa por el interior de la misma. Estos reactores surgieron en Estados Unidos desde los años 70, como una alternativa de los métodos de absorción indirecta y para aplicaciones termoeléctricas. Las aplicaciones químicas de estos reactores tuvieron un gran impacto en el reformado, por vapor o por CO_2 , de metano. Estos desplazaron a los reactores tubulares, bajo la idea de que la pared opaca de estos últimos debía eliminarse, manteniendo solamente la estructura catalítica, la cual sería irradiada de manera directa.

Un ejemplo de este tipo de reactor, fue el propuesto por el proyecto europeo SOLREF, en el cual se desarrolló un prototipo para el reformado de metano (Steinfeld A. , 2005). Este reactor (fig.2.4), con una potencia entre el rango de 300-500kW, fue diseñado con una ventana de cuarzo cóncava para permitir el paso de la radiación solar. A esta ventana se le agregó un CPC para reconcentrar la radiación antes de que esta entrara al reactor. La estructura volumétrica estuvo conformada por un material cerámico poroso, con una cobertura de rodio. Finalmente se obtuvieron temperaturas de hasta 850°C.

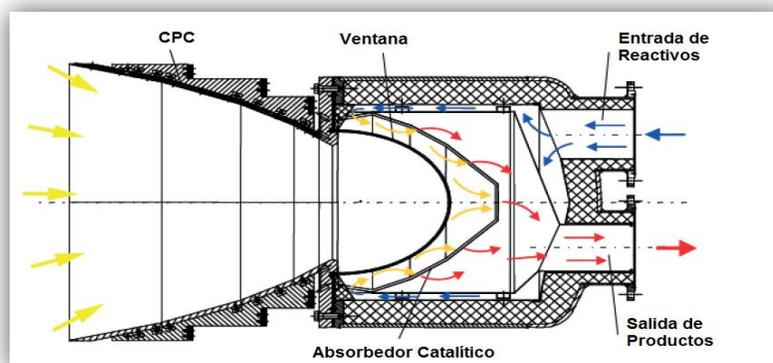


Figura 2.4: Reactor solar volumétrico para el reformado solar de metano del proyecto SOLREF, (Steinfeld A., 2005).

- Reactores de partículas.* En estos reactores, la absorción de la radiación es llevada a cabo directamente por las partículas, y estas a su vez son los reactivos de la reacción química a llevar a cabo. El pionero en desarrollar estos reactores fue el Laboratorio Nacional de Sandia, en donde (Martin & Vitko, 1982) realizaron pruebas en pequeñas rocas y arena, para demostrar su capacidad de absorción de calor, teniendo resultados satisfactorios. Posteriormente, mediante experimentación se logró alcanzar temperaturas aún más altas, formándose el primer prototipo de partícula central receptora (Solid Particle Central Receiver, SPCR) (fig.2.5), formado por una cortina con partículas de 100-1000 μ m y para el cual se demostraron temperaturas un poco más altas de los 1000°C.

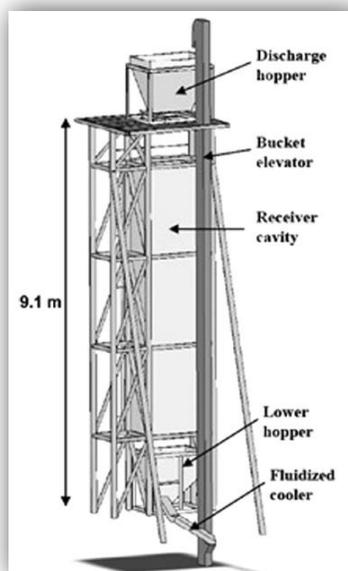


Figura 2.5: Prototipo de SPCR desarrollado en el Laboratorio Nacional de Sandia.

La configuración de las partículas en estos reactores puede realizarse de forma diferente, de acuerdo al tiempo de residencia necesario, a la existencia de un fluido que las transporte y la manera en que este hace contacto con las partículas. (Villermaux, 1979), clasifica a estos reactores en: de flujo de arrastre, de lecho fluidizado y de lecho fijo.

- Reactores de flujo de arrastre. Estos reactores consideran un ciclón de arrastre que introduce los reactivos y extrae los productos de la reacción de manera sencilla y continua dentro del reactor. Además cuenta con algunas ventajas asociadas a los receptores volumétricos, como la buena absorción de la radiación. Un ejemplo se muestra en la figura 2.6, el cual es un reactor propuesto por (Meier et al., 1994), y diseñado para llevar a cabo reacciones de descomposición térmica, como la reducción de óxidos metálicos. En este reactor se introducían por la parte trasera los reactivos en forma de polvo, empujados por aire. En el interior se concentraban las partículas, quedando directamente expuestas a la radiación solar. Además, el reactor no poseía ventana, por lo que para mantener las partículas adentro de la cavidad del reactor, éstas se inyectaban en dirección radial. Finalmente los productos se extraían por medio de un tubo colocado en el eje axial, refrigerado con agua.

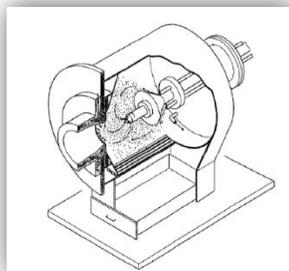


Figura 2.6: Reactor solar para la reducción de óxidos metálicos (Meier et al., 1996).

- Reactores de lecho fluidizado. Estos reactores, en comparación con los de flujo de arrastre, mejoran el contacto entre el gas y el sólido, así como también el tiempo de residencia de las partículas en la zona de reacción del reactor. Esto representa una gran ventaja para aquellas aplicaciones donde se lleven a cabo reacciones químicas lentas. Frecuentemente se utilizan reactores de este tipo a escala de laboratorio, destinados a aplicaciones solares. En la figura 2.7 se muestra un reactor de lecho fluidizado propuesto por (Flamant, 1980), para calentar refractarios entre los 600 y 1300°C y para la descarbonatación de calcita a 850°C.

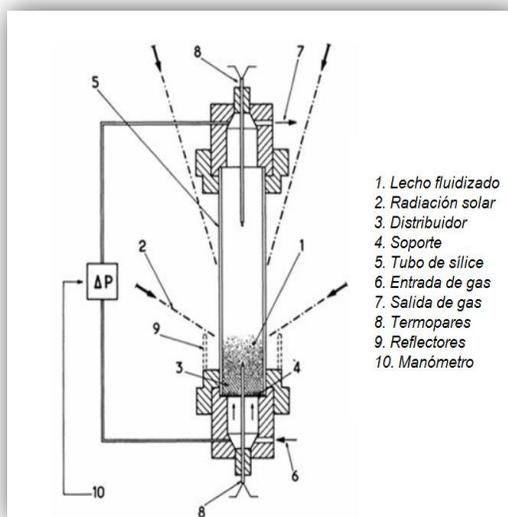


Figura 2.7: Reactor de lecho fluidizado irradiado directamente (Flamant, 1980).

- Reactores de lecho fijo. Estos reactores son muy utilizados a nivel laboratorio por su sencilla operación. En ellos, la muestra sólida o pulverizada se coloca de manera compactada en un soporte, y se expone directamente a la radiación solar. Este concepto puede ser fijo, móvil o rotativo. Los reactores rotativos favorecen la transferencia de masa y calor, sin embargo su diseño y construcción es muy compleja y costosa, por lo que para la realización de reactores preliminares en una campaña experimental, se utilizan reactores de lecho fijo. En la figura 2.8 se presenta una fotografía del reactor rotativo para la reducción de óxidos metálicos del IER-UNAM.



Figura 2.8: Reactor rotativo para la reducción de óxidos metálicos. Campaña experimental realizada en el HoSIER – UNAM.

2.4 Estado del arte en reactores solares para la gasificación térmica de materiales carbonáceos

Como ya se mencionó, la gasificación de materiales carbonáceos es un proceso termoquímico que, mediante oxidación parcial a altas temperaturas, transforma el material sólido en combustible gaseoso de alta calidad (gas de síntesis). Este proceso y la pirolisis, asociados con energía solar, han sido los procesos termodinámicos más estudiados durante los últimos 30 años.

Estas reacciones termoquímicas endotérmicas requieren calor, el cual es suministrado en diversos pasos exotérmicos. En la actualidad, la energía necesaria para llevar a cabo la reacción generalmente proviene de la quema de hidrocarburos. Esto no hace el proceso rentable, ya que además de quemar la materia prima, gran parte del capital de una planta de gasificación es invertido en el transporte de ésta, sin mencionar el impacto ambiental generado. Debido a esto, la energía solar como fuente de entrada de calor presenta muchas ventajas.

Diversos trabajos relacionados con reactores de gasificación solar para generación de potencia, hidrógeno o metanol han sido reportados, principalmente como experimentos de laboratorio. A continuación se presentan cronológicamente los diseños propuestos más significantes:

Greg et al., proponen un reactor solar de cama compactada irradiado directamente, para la gasificación de carbón, carbón activado, coque de petróleo y una mezcla de carbón y biomasa. Se utilizó un horno solar con una potencia máxima de 23 kW para realizar las pruebas. La carcasa del reactor se construyó de acero inoxidable y con un diámetro interior de 30 cm, protegiendo la capa aislante de 2.5 cm compuesta por ladrillo refractario para reducir las pérdidas y al mismo tiempo proteger el acero de sobrecalentamientos. Se propuso un reactor en forma de L, para aprovechar la gravedad en el suministro de la materia prima. También, se utilizó una ventana de vidrio de silicio de 20 cm de diámetro, y justo después de esta, se colocaron dos boquillas para la inyección de vapor y CO₂. La figura 2.9 muestra un esquema del reactor (Greg et al., 1980).

En este proceso de experimentación se reportaron muchas pérdidas, debidas a la reflectividad de la ventana y a que la apertura de esta era mucho más pequeña que la zona focal del concentrador. Además, la producción de gas incrementó proporcionalmente a la potencia solar suministrada, sin embargo, al utilizar agua como agente gasificante, la composición del gas de síntesis y su valor calorífico fueron casi independientes de la potencia solar.

Finalmente, las eficiencias de conversión de energía estuvieron dentro del rango de 19 a 48% con potencias desde 4-23 kW para todos los experimentos de gasificación de

carbón. Para la gasificación del carbón activado, se obtuvo una eficiencia máxima de conversión de 34% utilizando una potencia solar de 17kW. De igual manera, la gasificación del coque presentó un gas con la misma composición que la del carbón activado, pero con una eficiencia de conversión más baja, 23% a 19.5 kW.

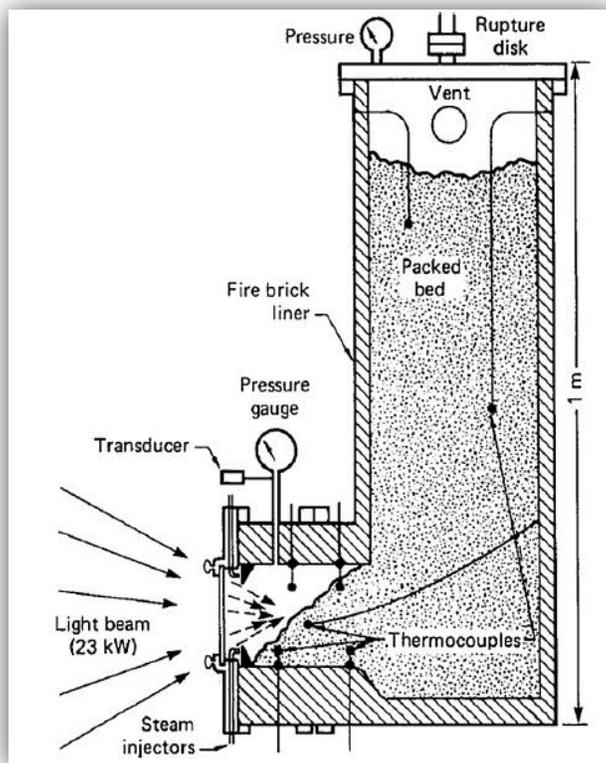


Figura 2.9: Reactor de cama compactada en forma de L irradiado directamente (Greg et al., 1980).

Posteriormente a este estudio, Taylor et al., presentaron otro reactor de lecho fijo directamente irradiado, para la gasificación de carbón vegetal de coco, madera de pino y papel de revista. Para este reactor se utilizó la potencia de un horno solar de 2 kW. De igual manera, se utilizó una ventana de Silicio y una superficie interna aislada en donde se introduce el material por medio de un pistón. Debajo de la ventana se posicionaron dos entradas en donde se atomiza CO_2 o agua de manera directa a la superficie del combustible para generar el vapor. Un esquema de este reactor se presenta en la figura 2.10 (Taylor et al., 1983).

La eficiencia de conversión de energía máxima alcanzada en este reactor, para el caso de gasificación por vapor de carbón vegetal de coco, fue aproximadamente del 30% con una potencia solar de 1.2 kW. Además, los autores realizaron la misma experimentación en un reactor de lecho fluidizado para comparar los resultados, se

utilizó CO_2 como agente gasificante y se obtuvo una eficiencia máxima mucho menor, del 10% para una potencia solar de 1kW. Este pobre desempeño fue el resultado de una gran pérdida de calor en la superficie superior al lecho fluidizado, en adición a las pérdidas por conducción del reflector de cerámica blanca y el sistema metálico para la inyección del gas.

La gasificación se realizó después utilizando CO_2 como agente gasificante, obteniendo una eficiencia de 35% a una potencia solar de 0.67 kW para el reactor de lecho fijo.

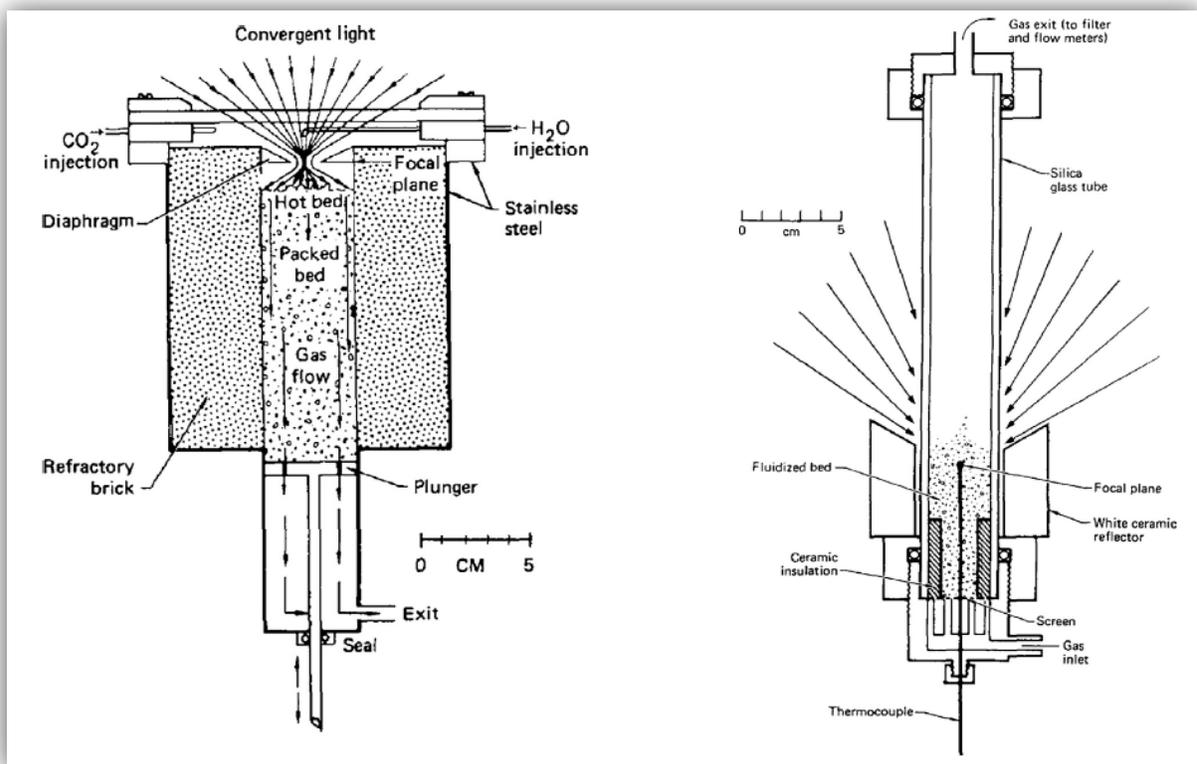


Figura 2.10: Reactor solar propuesto por (Taylor et al., 1983). A la izquierda reactor de lecho fijo directamente irradiado y a la derecha un reactor de lecho fluidizado utilizado para la comparación de resultados.

Murray y Fletcher utilizaron tres reactores para examinar la gasificación por vapor de celulosa. El primer reactor, irradiado directamente, consistió en un reactor de cuarzo de 41.6 cm de largo, el cual se llena de alúmina pura tubular no catalítica y con un tubo catalizador pulverizado de platino-alúmina, y se somete a una temperatura dentro del rango de 1050 y 1450 K. El receptor era un cuerpo negro bien aislado con una apertura de 5 cm, por la cual se admitía una potencia solar de aproximadamente 6 kW. Además, este reactor de cuarzo se dividió en tres secciones: un lecho fijo en su parte inferior,

una región de lecho fluidizado a la mitad y la parte superior estuvo compuesta por la sección desacople del reactor (fig.2.11) (Murray & Fletcher, 1994).

Para las otras pruebas se utilizaron otro tipo de reactores, uno construido por acero dulce, con un diámetro interno de 5.1cm, para trabajar a temperaturas de 1500 K, y el último fue construido por acero inoxidable tipo 304, con un diámetro interior de 4.88 cm y 1.2 m de largo, destinado a operar a temperaturas de 1600 K. Los tres reactores utilizaron como fuente de energía un horno solar de 4.2 m auspiciado por la Universidad de Minnesota. Finalmente, los resultados de la concentración de cada gas de los tres reactores se compararon con los obtenidos por un modelo de equilibrio termodinámico. Estos valores de concentración del gas se alcanzaron únicamente en presencia de un catalizador y a temperaturas de operación por arriba de los 1100 K para CO, 1400 K para H₂ y 1050 K para CO₂.

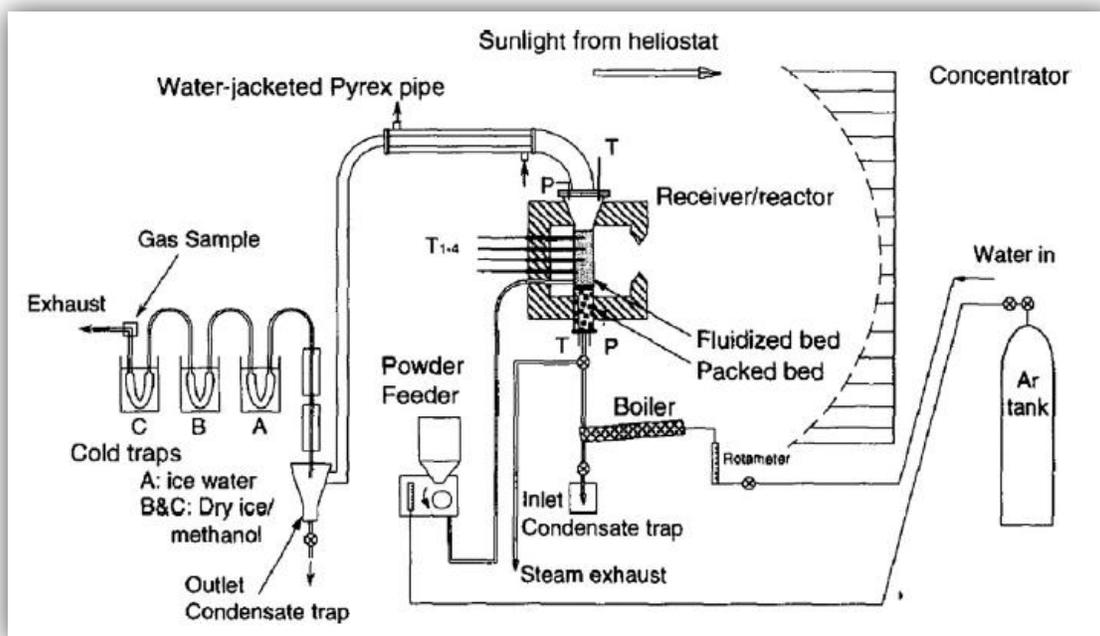


Figura 2.11: Reactor directamente irradiado utilizando cama compactada y lecho fluidizado al mismo tiempo (Murray & Fletcher, 1994).

Flechsengar y Sasse reportaron un reactor de lecho fijo, irradiado directamente, para gasificar petróleo alemán y carbón utilizando argón para tener una atmósfera controlada. Se utilizó una ventana de cuarzo posicionada en la parte superior del reactor para dejar pasar la radiación proveniente de un simulador solar, de hasta 1950 kW/m², permitiendo temperaturas de gasificación por encima de los 1273 K. También comprobaron que al agregar vapor de agua al petróleo mejoraba el rendimiento del hidrógeno y de la cantidad de gas producido (Flechsengar & Sasse, 1995).

Para la obtención de gas de síntesis, de igual manera Müller et al., estudiaron la cinética de reacción de la gasificación por vapor de carbón, utilizando un reactor de lecho fluidizado. Este reactor fue construido con un tubo de cuarzo de 25 mm de diámetro exterior, un grosor de 1.5 mm, y una altura de 25 cm. El gas de síntesis se obtuvo por arriba de los 1400 K, además el poder calorífico de este gas fue 34% más elevado que el de la materia prima original (Müller et al., 2003).

Adinberg et al., utilizaron un reactor para lograr la pirolisis de partículas de celulosa, calentándolas en un medio de sales fundidas a temperaturas de 1073-1188 K, por radiación directa. El reactor se construyó con un receptor central esférico (alberca) y un arreglo de tubos verticales conectados al mismo por ambos lados, tanto al receptor como a los tubos, se le introducen las sales para que el sistema funcione simultáneamente como una cámara de reacción y almacenamiento térmico. La principal tarea de estos tubos es absorber la radiación solar incidente. El reactor se colocó en una cavidad aislada, con aperturas para permitir el paso de la radiación solar (fig.2.12). Las sales carbonatadas de sodio y potasio elevaron el rango de calentamiento de las partículas hasta 100 K/s (Adinberg et al., 2004).

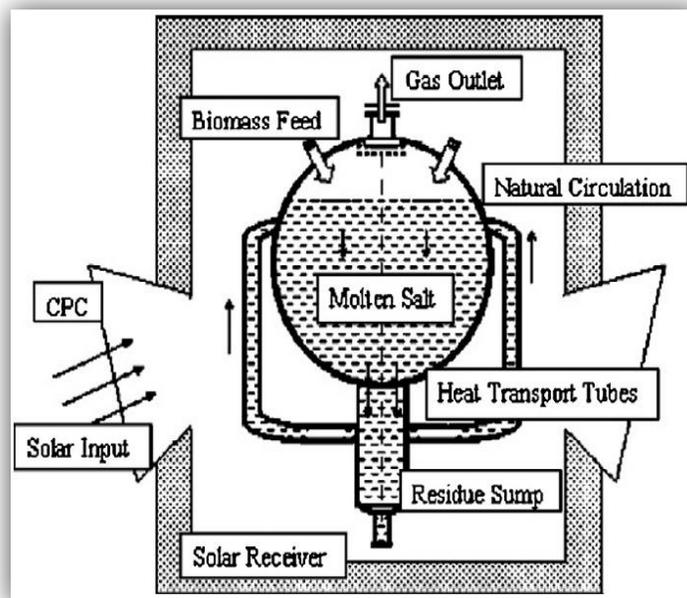


Figura 2.12: Reactor irradiado directamente para la pirolisis de partículas de celulosa en alberca de sales fundidas (Adinberg et al., 2004).

Al alcanzar una temperatura de 1123 K, se logró una eficiencia de conversión de biomasa a gas de aproximadamente 94%, a diferencia de la obtenida en ausencia de

sales, de tan solo un 72%. Además, la composición del gas final fue más rico en hidrógeno para el caso en el que se usaron las sales fundidas.

Por otro lado, von Zedtwitz y Steinfeld, presentaron otro reactor irradiado directamente, que consistía en un tubo de cuarzo que contenía un lecho fijo o un lecho fluidizado de partículas de carbón para su gasificación por vapor. Para este reactor se utilizó un simulador solar del Instituto de Tecnología de la Federación Suiza, el cual proporciona intensa radiación térmica en el espectro visible e infrarrojo, emulando a los sistemas de alta concentración solar (von Zedtwitz & Steinfeld, 2005). Esta fuente de luz produce una potencia solar continua de 75 kW, con densidades de flujo pico por arriba de los 4 250 kW/m². Ambos arreglos, con lecho fluidizado o lecho fijo, presentaron un producto conformado por una mezcla equimolar de H₂ y CO (gas de síntesis) al alcanzar temperaturas superiores a los 1450 K, la única diferencia, fue que para el arreglo con lecho fluidizado, la temperatura se alcanzó rápidamente, en comparación con el de lecho fijo.

El proyecto SYNPET (Hydrogen Production by Steam Gasification of Petcoke), en el cual colaboran las organizaciones Petróleos de Venezuela, la Eidgenössische Technische Hochschule (Colegio Técnico Federal) en Zúrich y el Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas (CIEMAT) de España, tuvo como finalidad la producción de hidrógeno mediante la gasificación solar de coque de petróleo, enfocada a un diseño preliminar de una planta de gasificación solar de 50 MW, ubicada en Venezuela. Para una de las primeras etapas del proyecto, (Z'Graggen et al., 2006) presentaron un reactor de 5 kW irradiado directamente, conformado por un flujo continuo de vapor de agua en forma de vórtice, cargado por partículas de coque de petróleo. Este vórtice tuvo la tarea de aumentar el tiempo en que las partículas se mantienen en la zona de reacción, pudiendo así obtener una mayor conversión del combustible. Una apertura en forma de cono fue utilizada, compuesta por espuma cerámica aislante de Al₂O₃-ZrO₂. Por otro lado, se posicionó la ventana de cuarzo a una distancia donde la intensidad de la radiación fuera 10 veces menor que en la zona focal, previniendo de igual manera el depósito de partículas. Esta ventana se refrigeró por medio de aceite, para mantener una temperatura continua en el rango de 393 a 453 K. De igual manera mediante cuatro boquillas, se inyectó un flujo tangencial de argón justo después de la ventana, para mantenerla limpia y contribuir al enfriamiento (fig.2.13). Este reactor se probó en el horno solar del Paul Scherrer Institute (PSI) ubicado en Suiza, y con un rango de potencia de 3.3 a 6.6 kW, se alcanzaron temperaturas de 1296–1818 K, y eficiencias de conversión desde 4.8% hasta 8.6%.

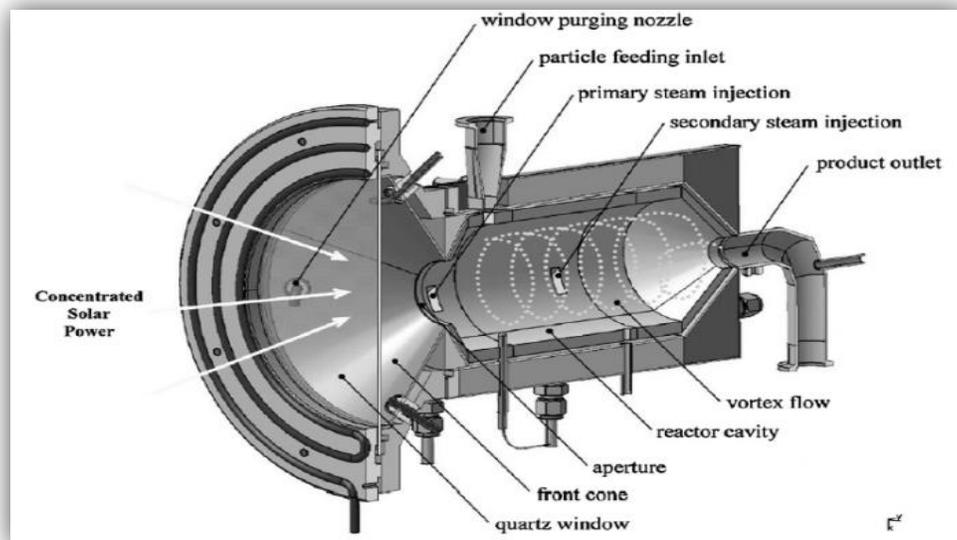


Figura 2.13: Reactor solar con flujo de vapor en forma de vórtice cargado de partículas de coque de petróleo propuesto por (Z'Graggen, 2006).

Kodama et al., propusieron un reactor innovador para la gasificación por CO_2 de coque de carbón, éste fue un reactor de lecho fluidizado con una circulación interna. El reactor estuvo compuesto por un tubo exterior de acero inoxidable bien aislado, una ventana de cuarzo posicionada en la parte superior y para lograr la circulación, se introdujo al interior de la cavidad un tubo guía de menor diámetro y longitud. Debido a la reducción del diámetro del tubo guía, al momento de inyectar el lecho fluidizado, se genera un flujo con mayor velocidad dentro de este, el cual recircula a través de las secciones anulares y vuelve al mismo punto (Kodama et al., 2008). De esta forma se logra una temperatura homogénea en el interior del reactor. La eficiencia máxima lograda por este reactor fue de 12% con una potencia solar de 0.9 kW. En la figura 2.14, se muestra un esquema del reactor.

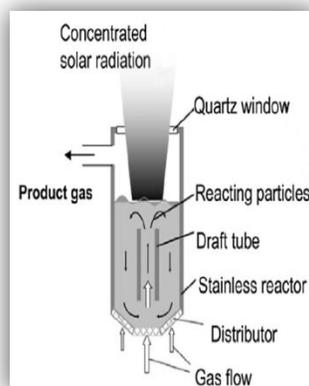


Figura 2.14: Esquema del concepto del reactor de lecho fluidizado con circulación interna (Kodama et al., 2008).

Dentro del campo de los *reactores irradiados indirectamente*, también se ha realizado mucho trabajo de investigación, Piatkowsky y Steinfeld presentaron un reactor de lecho fijo irradiado indirectamente para la gasificación por vapor de carbón de haya (Piatkowsky & Steinfeld, 2008). Este prototipo de 5 kW fue diseñado con dos cavidades colocadas una encima de la otra, la superior con la tarea de absorber, y la segunda para llevar a cabo la reacción, separadas por una placa emisora de grafito recubierto con Carburo de Silicio. En la cavidad superior se colocó una pequeña ventana de cuarzo, y la cavidad inferior, contuvo al lecho fijo con el carbón, posicionando debajo de ésta, con una boquilla para inyectar vapor de agua. Este arreglo separado entre las cavidades, se propuso para evitar el contacto de la ventana con la reacción del material. El reactor tuvo una apertura de 6.5 cm de diámetro, y una carcasa cilíndrica de 16 cm de alto y 14.3 cm de diámetro. En la parte superior del reactor, se colocó un CPC (Concentrador Parabólico Compuesto), para incrementar el flujo solar incidente. El reactor se puede observar en la figura 2.15.

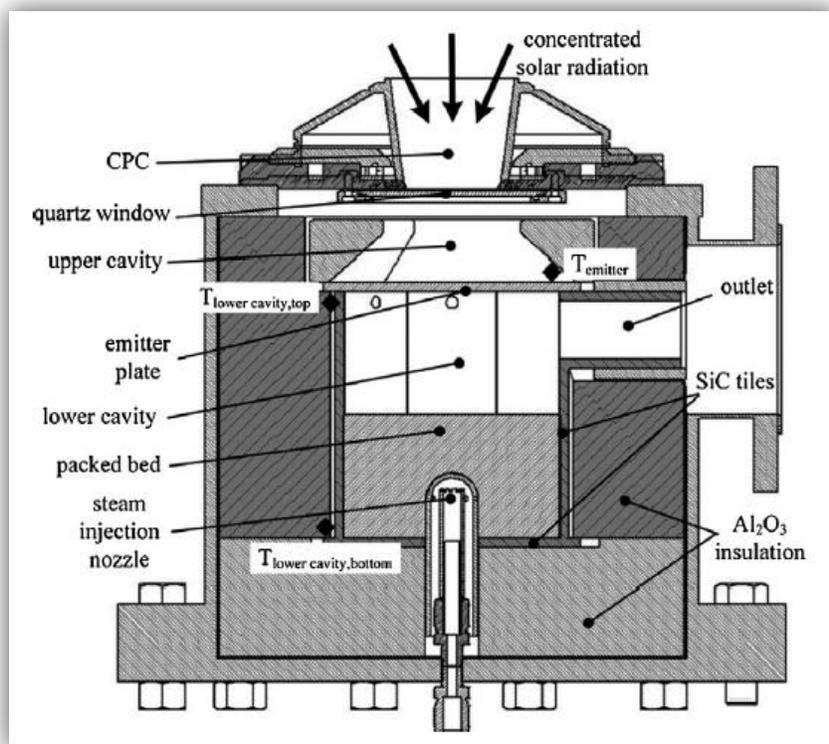


Figura 2.15: Reactor irradiado indirectamente compuesto por dos cavidades separadas por una placa emisora (Piatkowski & Steinfeld, 2008).

La prueba se realizó con concentraciones de flujo superiores a los 2600 soles, obteniendo temperaturas en el lecho fijo de 1440 K. Se concluyó la importancia del grosor de la cama compactada para una mejor eficiencia de la reacción, por lo que

posteriormente (Piatkowski et al., 2009), realizaron pruebas de gasificación por vapor para diferentes materiales, obteniendo eficiencias de conversión de 15.9% a 1490K y 8 kW para aguas residuales, 17.3% a 1470K y 7 kW para polvo de neumáticos, 15.9% a 1423K y 7 kW para desperdicios sólidos, 23.3% a 1470K y 6 kW para el carbón de Sudáfrica y finalmente un 29% a 1490K y 6 kW para el carbón de haya.

Cabe mencionar que el **Carburo de Silicio (SiC)**, debido a sus altos valores de absorptividad, área superficial, porosidad, además de su alto punto de fusión y excelentes propiedades termodinámicas, presenta efectividad y grandes ventajas en aplicaciones de concentración solar.

Melchior et al., usaron un reactor con flujo de arrastre irradiado indirectamente y cargado con partículas de carbón vegetal de haya, para su gasificación por vapor. El reactor fue cilíndrico y de 3 kW, con 5 cm de diámetro y una cavidad compuesta por 10% en peso $\text{YO}_2\text{-ZrO}_2$ estabilizado con un aislamiento de alúmina (Al_2O_3). Al interior de esta cavidad, se introdujo un tubo concéntrico absorbente de Carburo de Silicio (SiC), de 2.5 cm de diámetro, en el cual se introduce el carbón vegetal. De igual manera, se colocó un CPC en la parte superior del reactor para aumentar el flujo solar. En la figura 2.16 puede apreciarse un esquema de este reactor (Melchior et al., 2009).

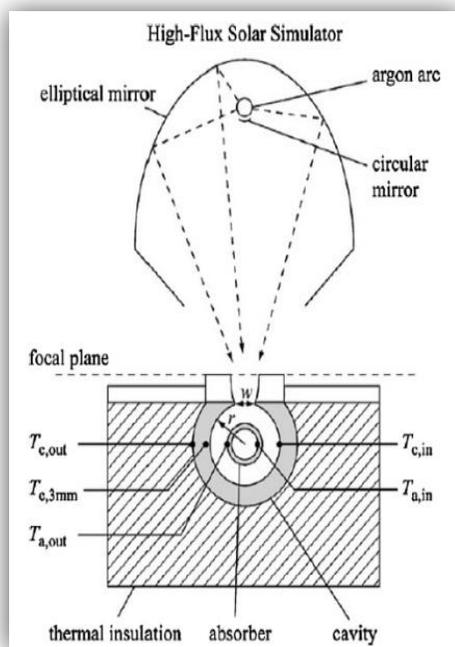


Figura 2.16: Esquema de reactor solar indirectamente irradiado con flujo de arrastre y CPC en la parte superior (Melchior et al., 2009).

Este reactor tan solo permitió una eficiencia máxima de 1.53% para una potencia solar entre el rango de 0.76 y 1.98 kW, con temperaturas de 1074-1523 K. Sin embargo, a partir de estos resultados, se rediseñó el reactor para una potencia de 100 kW y 1 MW, alcanzando eficiencias máximas teóricas de 39% y 50% respectivamente.

Otro reactor de lecho fluidizado irradiado directamente, fue construido por Kodama et al. Este reactor fue construido para la gasificación, por medio de CO_2 , de coque de carbón usando un simulador solar de arco de Xenón con una potencia de 6 kW. En esta experimentación se descubrió la importancia que tiene el tamaño de la partícula de la muestra para la eficiencia de conversión energética. Para una partícula pequeña, de 300 a 500 μm , se obtuvo una eficiencia del 8%, para una muestra de tamaño mediano, 500 a 710 μm , se obtuvo la mayor eficiencia de conversión energética, de 14%. Finalmente, para una partícula grande, 710 a 1000 μm , se pudo alcanzar una eficiencia del 12%. Para la partícula óptima, la de tamaño mediano, se utilizó una potencia solar de 1.1 kW, teniendo una temperatura de 1573.15 K.

El rango de conversión del coque fue disminuyendo a mayor tiempo de operación, debido a la formación de ceniza al interior del reactor, al depósito de partículas en la ventana y por el decreciente tamaño de la muestra de coque, al irse gasificando. La figura 2.17 muestra el reactor antes mencionado (Kodama et al., 2010).

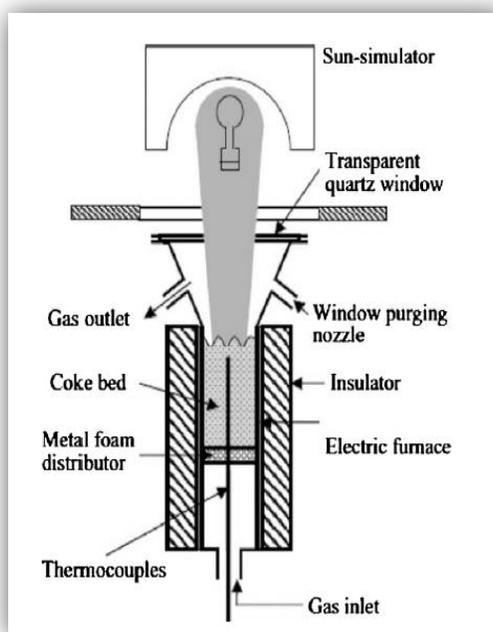


Figura 2.17: Reactor de lecho fluidizado irradiado directamente por un simulador solar, para la gasificación por CO_2 de coque de carbón (Kodama et al., 2010).

Un reactor más irradiado indirectamente y con flujo de arrastre fue presentado por Lichty et al., el cual consistió en una cavidad cilíndrica de 18 cm de diámetro y en su interior cinco tubos absorbedores de 35.56 cm de largo, 2.54 cm de diámetro exterior y 1.905 cm de diámetro interior cada uno, hechos de alúmina (Al_2O_3) o aleación de Ni. El reactor fue destinado a la gasificación seca (CO_2) de biomasa (forraje de maíz y sorgo), y fue instalado y probado en el Laboratorio Nacional de Energías Renovables (NREL). Se utilizó una ventana para el paso de los rayos solares, adicionada con una placa refrigerante (Lichty et al., 2010). El reactor puede apreciarse en la figura 2.18.

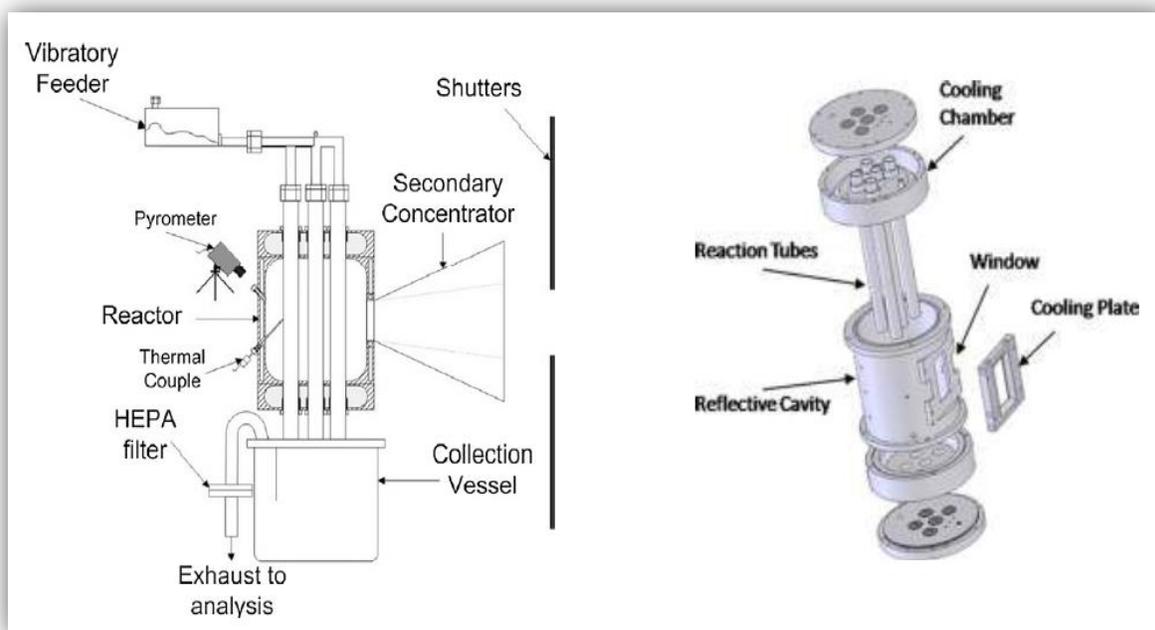


Figura 2.18: Reactor irradiado indirectamente con flujo de arrastre y tubos absorbedores. A la izquierda esquema del reactor y a la derecha una vista isométrica del mismo (Lichty et al., 2010).

La temperatura máxima obtenida en el tubo central fue de 1660.15 K para una potencia solar de 7.5 kW, de igual manera se obtuvieron temperaturas máximas de 319 K en los muros de la cavidad del reactor. Finalmente se obtuvo una eficiencia promedio de conversión de carbón del 58.4%, 62.8% a aproximadamente 1273K y 2.8 kW para el forraje de maíz y 53.9% a 1423K y 3.6 kW para el sorgo.

Un método de gasificación en **agua supercrítica** fue considerado por diversos autores, entre ellos Chen et al., propusieron un reactor de 6 kW para la gasificación de biomasa (glucosa, harina de maíz y espigas de trigo) en agua supercrítica (Chen et al., 2010). El agua supercrítica (374°C, 221 atm) posee una baja tensión superficial, una alta difusividad, baja viscosidad y alta densidad, lo cual favorece la gasificación por

vapor de la materia prima. A diferencia del reactor tubular propuesto por (Lichty et al., 2010), en este se implementa un único tubo de 18 m de largo, hecho de acero inoxidable SS 316 en forma de serpentín, por el cual circula primero el agua supercrítica, y a la mitad del trayecto, se inyecta la biomasa en forma de lecho fluidizado a una alta presión. Este tubo fue diseñado para soportar temperaturas de hasta 927 K y presiones de 30 MPa. El reactor se muestra en la figura 2.19. En este reactor se logró una gasificación completa, y se obtuvo una fracción de H₂ y CO₂ en los rangos de 41.4-43.1% y 49.5%-52.7% respectivamente.

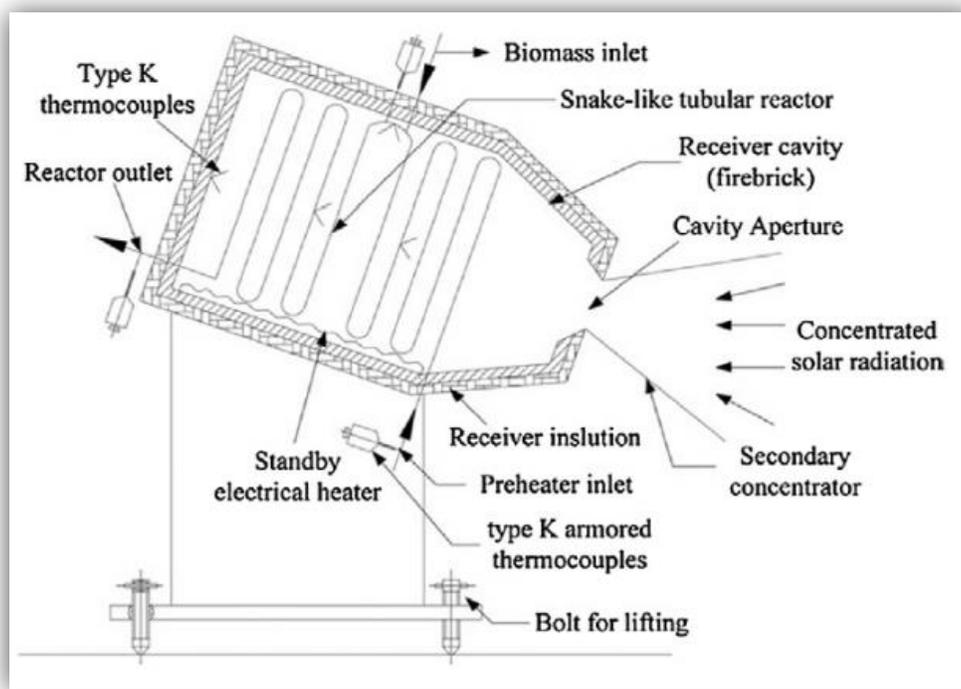


Figura 2.19: Reactor tubular en forma de serpentín irradiado indirectamente, diseñado por (Chen et al., 2010) para la gasificación por vapor de biomasa en agua supercrítica.

Recientemente, (Kruesi et al., 2014) propusieron un reactor tubular irradiado indirectamente para la gasificación por vapor de bagazo de caña de azúcar mediante un modelo eléctrico. El tubo que conforma el reactor, está dividido en dos secciones, en la sección superior se introduce el bagazo de caña combinado con agua en forma de lecho fluidizado, esta sección es libre de obstáculos y está destinada a llevar a cabo una rápida pirólisis. En la parte inferior del reactor, se coloca un lecho fijo de la materia prima, en donde se lleva a cabo una lenta pero más eficiente reacción (fig.2.20). En este reactor se obtuvieron eficiencias de conversión de carbón entre el rango de 65-84%.

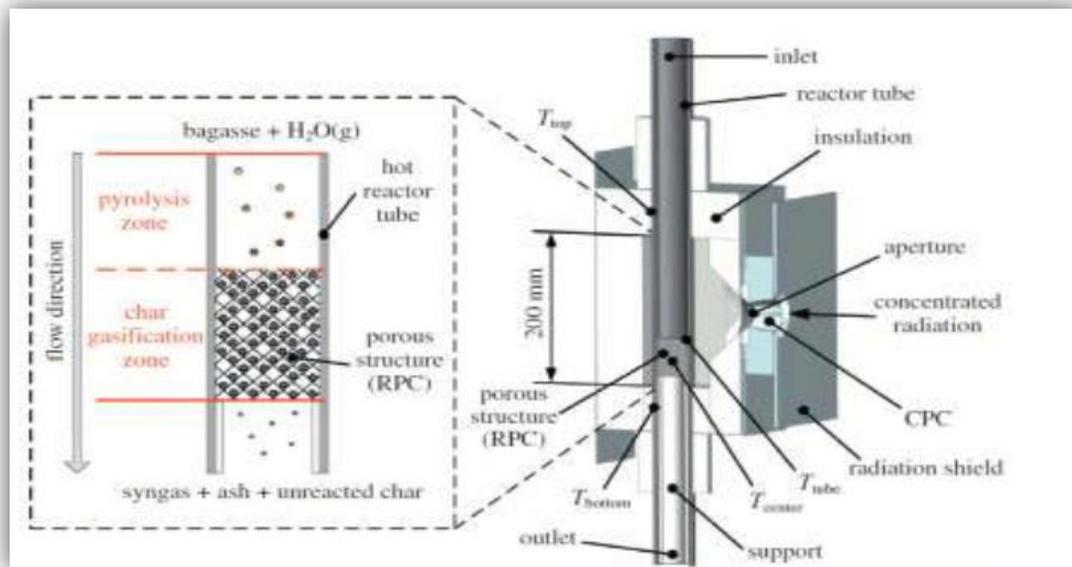


Figura 2.20: Reactor tubular con sección superior de lecho fluidizado y sección inferior de lecho fijo (Kruesi et al., 2014).

En la tabla 2.1 se presenta cronológicamente una comparativa de los reactores para la gasificación de materiales carbonáceos antes abordados. En la tabla se presentan los modos en los que llega la radiación al reactor, el tipo de reactor, su agente gasificador, la materia prima que el reactor utiliza, la temperatura a la cual se lleva a cabo la gasificación, la potencia solar y la eficiencia de conversión energética.

Tabla 2.1: Comparación entre los diseños de reactores más significantes para la gasificación de materiales carbonáceos. *Conversión de material a gas.

Referencia	Modo de Irradiar	Tipo de Reactor	Agente Gasificador	Materia Prima	Temperatura de gasificación (K)	Potencia Solar (kW)	Eficiencia de Conversión de Energía (%)
(Greg et al., 1980)	Directa	Lecho fijo	Vapor de Agua	Carbón		4-23	19-48
			Vapor de Agua	Carbón Activado		17	34
			Vapor de Agua	Coque de Petróleo		19.5	23
(Taylor et al., 1983)	Directa	Lecho fijo	Vapor de Agua	Carbón Vegetal de Coco		1.2	30
			CO2	Carbón Vegetal de Coco		0.67	35
		Lecho Fluidizado	CO2	Carbón Vegetal de Coco		1	10
(Murray & Fletcher, 1994)	Directa	Lecho Fluidizado y Lecho fijo	Vapor de Agua	Celulosa	1050 -1450	~ 6	
(Flechsengar & Sasse, 1995)	Directa	Lecho fijo	Vapor de Agua	Petróleo Alemán	> 1273		
				Carbón	> 1273		
(Müller et al., 2003)	Directa	Lecho Fluidizado	Vapor de Agua	Carbón	> 1400		
(Adinberg et al., 2004)	Directa	Alberca de sales fundidas	Sales fundidas de Na y K	Partículas de Celulosa	1123		94% *
(von Zedtwitz & Steinfeld, 2005)	Directa	Lecho fijo	Vapor de Agua	Carbón	>1450		
		Lecho Fluidizado	Vapor de Agua	Carbón	>1450		
(Z'Graggen et al., 2006)	Directa	Flujo en Vórtice	Vapor de Agua	Coque de Petróleo	1296–1818 K	3.3-6.6	4.8-8.6
(Kodama et al., 2008)	Directa	Lecho Fluidizado con circulación interna	CO2	Coque de Carbón		0.9	12
(Piatkowski et al., 2009)	Indirecta	Lecho fijo	Vapor de Agua	Aguas Residuales	1490	8	15.9
				Polvo de neumáticos	1470	7	17.3
				Desperdicios sólidos	1423	7	15.9
				Carbón de Sudáfrica	1470	6	23.3
				Carbón de haya	1490	6	29
(Melchior et al., 2009)	Indirecta	Flujo de arrastre	Vapor de Agua	Carbón de haya	1074-1523	0.76-1.98	1.53
		(Rediseño teórico)				100	39
		(Rediseño teórico)				1000	50
(Kodama et al., 2010)	Directa	Lecho Fluidizado	CO2	Coque de Carbón (tamaño 500-700µm)	1573.2	1	14
(Lichty et al., 2010)	Indirecta	Flujo de arrastre	CO2	Forraje de Maíz	~1273	2.8	62.8*
				Sorgo	~1423	3.6	53.9*
(Chen et al., 2010)	Indirecta	Lecho Fluidizado a alta presión	Agua supercrítica	Glucosa, harina de maíz, espigas de trigo		6 (nominal)	41.4-80*
(Kruesi et al., 2014)	Indirecta	Lecho fluidizado y Lecho fijo	Vapor de Agua	Bagazo de caña de azúcar			65-84*

2.5 Propuesta preliminar del reactor solar para la gasificación térmica por vapor de coque de petróleo mexicano

Recuperando información del estado del arte sobre los reactores solares para la gasificación por vapor, y suponiendo algunos parámetros en base a la misma literatura, como la temperatura aproximada del proceso, ritmo de calentamiento y tiempo de residencia de la partícula, debido a la necesidad de la balanza termogravimétrica para conocer estas características, se propuso un primer diseño preliminar. Este diseño tiene como finalidad un pronto desarrollo, para ir conociendo los retos tecnológicos que se presentan al momento de realizar la gasificación. Posteriormente, con la experiencia obtenida, se pretende cambiar u optimizar el diseño.

En base a la revisión bibliográfica llevada a cabo anteriormente y haciendo referencia a la manera de alimentar e irradiar el reactor, podemos definir el uso de un lecho fijo en forma de pastilla por tres razones, la primera es debido a que las eficiencias de conversión de energía presentadas por los diferentes tipos de reactores oscilan por debajo del 30%, por lo que se pueden esperar eficiencias similares mediante un método más sencillo. Además, el lecho fijo prolonga el tiempo de residencia de la muestra, aunque limita la cantidad del material procesado. La tercera razón y la más importante, es por la forma en que se recibe el coque mexicano de la refinería. Este se recibe en formas de esferoides con diámetros entre 15 y 45 mm, con una alta porosidad y dureza (fig.2.21a).

Para un mejor manejo del material y un sencillo montaje en un porta muestra, se pulveriza el coque mediante un molino automático de discos vibratorios de ágata marca Rocklabs modelo estándar, para formar un polvo fino con partículas de aproximadamente 106 μm (fig.2.21b). Finalmente, este polvo se comprime en forma de pastillas mediante una prensa pastilladora automática de 40 ton marca INSMART, la cual genera las pastillas con un diámetro de 40 mm y una altura de 16mm (fig.2.21c).



Figura 2.21: Muestra de coque de petróleo. a) Esferoides con diámetros entre 15 y 45mm como se obtienen de la refinería. b) Coque pulverizado con molino de discos vibratorios con tamaños de partículas de 106 μm . c) Pastillas de 40 mm de diámetro y 16 mm de altura.

Alonso & Romero afirman que los métodos de radiación directa aprovechan la radiación incidente de una manera más eficiente que los reactores irradiados indirectamente. Debido a que el reactor será sometido a temperaturas muy altas ($>1027^{\circ}\text{C}$), se propone un método de radiación directa (Alonso & Romero, 2015). Para esto se utilizará una ventana de cuarzo posicionada a una distancia considerable de la muestra, evitando así la formación de un depósito de partículas que afecten la propiedad transmisiva de la ventana, y también de esta forma prevenir la degradación de la misma por los altos gradientes térmicos generados en la reacción. La ventana será refrigerada para evitar su sobrecalentamiento y por ende su degradación (Z'Graggen, 2006).

Para el método de gasificación se ha determinado que la gasificación seca (por CO_2), se utiliza para materiales carbonosos, ricos en H_2 u otros compuestos, en donde el CO_2 cumple la función de descomponer el material y extraer el hidrógeno presente. Sin embargo, el coque que se va a utilizar no tiene volátiles con H_2 , por lo que se requiere el H_2O para obtener el hidrógeno, y por esto es necesaria una gasificación por vapor.

Es muy importante considerar las pérdidas por transferencia de calor para el diseño del reactor. La cavidad del reactor debe simular un cuerpo negro, por lo que las dimensiones deben ser adecuadas, además la temperatura en el interior del reactor puede ser muy homogénea debido a la reflexiones internas de la radiación incidente y emitidas por las paredes de la cavidad cilíndrica. También es necesario utilizar un aislamiento para reducir las pérdidas conductivas. Las pérdidas convectivas, por otro lado, se verán eliminadas con la inclusión de la ventana de cuarzo.

En base a estas consideraciones, se propuso el reactor mostrado en la figura 2.22, el cual será explicado a detalle en el capítulo 5.

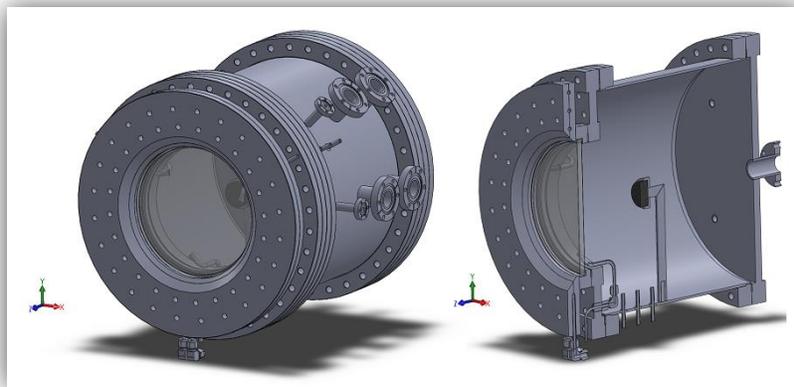


Figura 2.22: Reactor preliminar para la gasificación de coque de petróleo del IER- UNAM, a la izquierda reactor completo y a la derecha un corte transversal.

Como se mencionó anteriormente, el diseño de un reactor es una tarea compleja, por lo que en este trabajo se pretende aportar parte del conocimiento necesario para realizar una propuesta de optimización. La distancia necesaria para colocar la ventana, evitando los problemas antes mencionados, así como su tamaño adecuado, será analizada en el capítulo 3 mediante un estudio de distribución de la radiación. Posteriormente en el capítulo 4, se realizará una simulación de flujo másico, para observar el comportamiento de los gases en el reactor preliminar, y también, para comprobar si una apertura de campana, evita el estancamiento de los fluidos que actúan en el interior del reactor, ya que se reduce el volumen activo, en el cual se llevará a cabo la reacción.

2.6 Conclusiones del capítulo

La producción de coque en México prevé un incremento consecuente del procesamiento de mayores cantidades de crudo pesado en las refinerías, además una disminución de su precio dentro del periodo 2006-2035. Esto presenta un buen panorama para la implementación de la tecnología de gasificación. La gasificación solar por vapor del coque es un método limpio capaz de resolver los problemas que presenta una gasificación convencional, y de aumentar el poder calorífico del coque a disposición. Además de que el carbón de combustión producido en el país es un perfecto candidato para el método.

El estudio de las características energéticas del gas de síntesis producido por la gasificación solar del coque, permitirá definir qué tipo de coque de entre las muestras de cada refinería, es el adecuado para producir un gas de síntesis con las mejores propiedades energéticas, para después ser utilizado como combustible solar o en otros procesos industriales.

Después de revisar los avances más importantes realizados hasta la fecha sobre los reactores solares de gasificación de materiales con alto contenido de carbón, podemos concluir que los estudios solo se han realizado a escala de laboratorio, y particularmente la mayoría con CO₂ o vapor de agua, solo una minoría ha incursionado en la aplicación de sales fundidas o agua supercrítica. Las eficiencias de los reactores aún son bajas y sus capacidades son de apenas unos pocos kilowatts. Los reactores a escala industrial han sido propuestos, pero no han sido construidos debido a la complejidad que estos representan, por lo que es necesario más trabajo de investigación en el campo.

La revisión bibliográfica nos ha permitido iniciar el proceso para la creación y optimización de un reactor solar que genere un gas de síntesis con características óptimas para la gasificación solar por vapor del coque de petróleo. El modelo preliminar

optimizado tiene como objetivo una pronta construcción, que pueda demostrar el principio al sector industrial, y con esto demostrar las grandes ventajas que la tecnología presenta. La propuesta de optimización se lleva a cabo mediante un estudio de distribución de la radiación en el capítulo 3, y un análisis de flujo másico en el capítulo 4. El capítulo 5 muestra las características mecánicas del reactor preliminar, y de la propuesta de mejora.

CAPÍTULO 3

3 ANÁLISIS DE DISTRIBUCIÓN DE RADIACIÓN

3.1 Introducción

Como se ha mencionado, este trabajo es una propuesta de optimización para un reactor preliminar diseñado en el Instituto de Energías Renovables (IER) de la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM) y que forma parte de una tesis doctoral en desarrollo. Esta propuesta es de un reactor solar cilíndrico destinado a la gasificación térmica con vapor de agua del coque de petróleo mexicano (fig.3.1). En él las partículas de coque son directamente irradiadas con energía solar concentrada. En el capítulo 5 se realiza una descripción detallada de las piezas y componentes del reactor preliminar y del reactor optimizado.

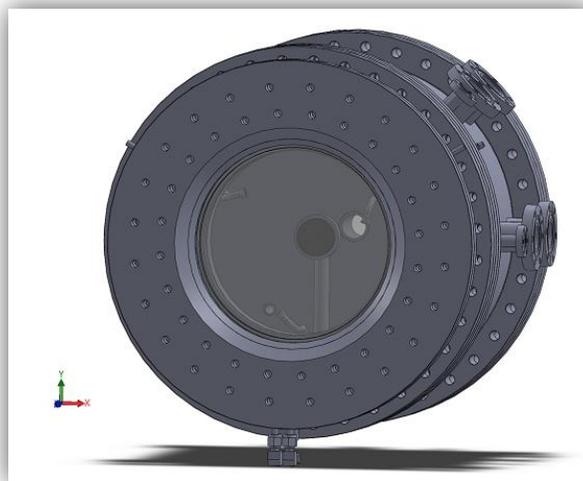


Figura 3.1: Reactor preliminar para la gasificación de coque de petróleo del IER- UNAM.

En este capítulo se detalla el primer estudio realizado al reactor para la propuesta del modelo óptimo. Este primer estudio es un análisis de distribución de la radiación en zonas específicas del reactor mediante un software especializado de trazado de rayos

(SolTrace). Los datos obtenidos se utilizarán para determinar las temperaturas a las que estas zonas son sometidas.

El análisis de distribución de radiación consiste en realizar simulaciones cuyo objetivo principal es determinar la densidad de flujo solar en la zona focal y en otras zonas del reactor. En la zona focal, estará colocada la muestra de coque, y fuera de la zona focal estará la ventana de cuarzo que permite el paso de la radiación al interior del reactor. Con los datos resultantes, es posible determinar la distancia de posicionamiento de la ventana, y con esto tener una potencia o flujo con el que la muestra pueda alcanzar las temperaturas de reacción necesarias. Además, mediante estos datos es posible determinar las temperaturas máximas y promedio a las que se expone la ventana, para así poder evitar que éstas sobrepasen los límites a los que el material puede llegar sin deformarse o quebrarse. Una vez obtenidos los resultados para el reactor preliminar y su propuesta de optimización se llevará a cabo una comparación.

3.2 Radiación térmica

La radiación, a diferencia de los otros dos mecanismos de transferencia de calor (conducción y convección), no requiere la presencia de un medio material para llevarse a cabo. Además, la transferencia de energía por radiación es la más rápida y no sufre atenuación en el vacío.

En el espectro electromagnético, el tipo de radiación que resulta pertinente para la transferencia de calor es la **radiación térmica**, ésta se emite como resultado de las transiciones energéticas de las moléculas, átomos y electrones de una sustancia. Éste tipo de radiación es emitida de forma continua por toda la materia cuya temperatura está por arriba del cero absoluto (Cengel & Ghajar, 2011).

3.2.1 Absortividad, reflectividad y transmisividad

Antes de explicar el análisis, es necesario definir tres parámetros muy importantes al momento de hablar de radiación incidente en un material. Cuando la radiación golpea la superficie de un material, parte de ella se refleja, parte se absorbe y la parte restante, si es que la hay, es transmitida a través de este. Por lo tanto se dice que hay:

- Absortividad (α): Cuando la fracción de irradiación es absorbida por la superficie.
- Reflectividad (ρ): Cuando la fracción de irradiación es reflejada por la superficie.
- Transmisividad (τ): Cuando la fracción de irradiación se transmite a través de la superficie.

En la figura 3.2 se muestran los efectos de la radiación incidente:

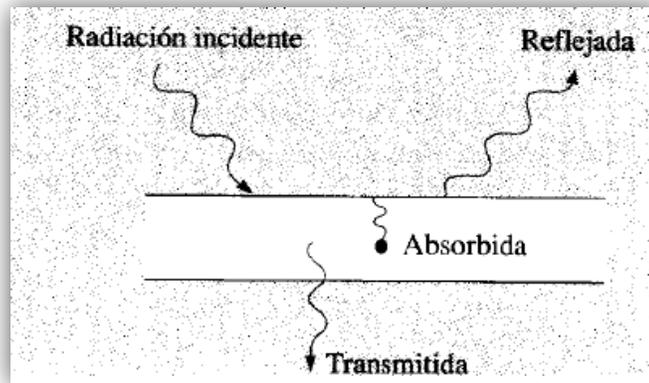


Figura 3.2: Absorción, reflexión y transmisión de la radiación incidente en un material semitransparente (Holman, 1998).

La primera ley de la termodinámica nos indica que la suma de la radiación absorbida, reflejada y transmitida, es igual a la **radiación incidente** (ec.3.1).

$$G_{abs} + G_{ref} + G_{tr} = G \quad (3.1)$$

Si dividimos cada término de la ecuación entre G , obtenemos una ecuación que involucra a los tres parámetros recién mencionados, esta es:

$$\alpha + \rho + \tau = 1 \quad (3.2)$$

Esta ecuación generaliza las propiedades ópticas de los materiales, sin embargo, tenemos diferentes tipos de estos, como por ejemplo un *cuerpo negro*, considerado el absorbedor perfecto, tiene $\rho=0$ y $\tau=0$, por lo que la ecuación 3.2 se reduce a $\alpha=1$. También hay superficies *opacas*, con $\tau=0$, reduciendo la ecuación 3.2 a $\alpha + \rho = 1$, y finalmente los *gases de reflectancia* poseen una $\rho=0$, dando como resultado $\alpha + \tau = 1$ de la misma ecuación.

3.3 Descripción del código SolTrace

SolTrace es una herramienta de simulación diseñada para modelar sistemas ópticos usados en aplicaciones de concentración solar de potencia CSP (Concentrating Solar

Power). El código fue escrito por primera vez a principios del 2003 por el Laboratorio Nacional de Energías Renovables (NREL por sus siglas en inglés).

El diseño de un sistema de concentración solar es una tarea compleja que requiere de una gran cantidad de recursos. Generalmente, debido a la alta complejidad del diseño y al ser necesaria una optimización de todos los parámetros del sistema, resulta impráctico construir físicamente y probar gran cantidad de prototipos al momento de desarrollarlos. Como solución a este problema, en la actualidad se utilizan códigos computacionales para modelar estos sistemas y predecir el comportamiento óptico general.

3.3.1 Metodología del código SolTrace

Para llevar a cabo el modelado del sistema óptico, Soltrace utiliza la metodología Monte-Carlo para el trazado de rayos. Este método es una técnica numérica para calcular probabilidades y otras cantidades relacionadas, utilizando secuencias de números aleatorios.

Un número específico de rayos son trazados aleatoriamente desde el sol, al cual se le da una configuración de forma y dirección dentro del software, y pasan a través del sistema encontrándose con diversas interacciones ópticas. El código SolTrace tiene una gran ventaja por sobre otros, ya que replica las interacciones reales de fotones y así provee resultados precisos para sistemas complejos que no pueden ser modelados de otra forma. Sin embargo, se presentan tiempos más largos de procesamiento. La precisión incrementa con el número de rayos trazados, es decir, una mayor cantidad de estos significa mejor precisión, pero mayor tiempo de cómputo para el procesado. Cabe mencionar que el número de trazos requeridos son también función del resultado deseado.

El sistema óptico se organiza en “etapas” bajo un sistema de coordenadas global. Cada etapa se define como una sección geométrica óptica que, una vez que el rayo la abandona, no regresará a ésta en lo que queda de su trayectoria en el sistema. Un sistema completo se compone por una o más etapas. Las etapas a su vez, están compuestas de “elementos”, los cuales se definen mediante una superficie, un tipo de interacción óptica, una forma de apertura y un conjunto de propiedades ópticas. La posición y la orientación de cada elemento se referencian al sistema de coordenadas propio de cada etapa. Estas etapas pueden ser de dos tipos: ópticas y virtuales, la etapa óptica es la que actúa físicamente con los rayos, mientras que la etapa virtual no lo hace. Ésta última es útil para determinar la posición y dirección de los rayos, de igual manera permite conocer la potencia o flujo en diversas posiciones del camino óptico sin afectar físicamente la trayectoria del rayo. Por lo tanto, los elementos virtuales no

tienen propiedades ópticas ya que no interactúan con los rayos. En la figura 3.3 se puede observar un ejemplo de sistema multi-etapa, éste es el Horno Solar de Alto Flujo Radiativo del Laboratorio Nacional de Energías Renovables (NREL). Se puede apreciar el sistema de coordenadas global (color negro), de cada etapa (color rojo) y de los elementos (color azul). El sistema se conforma por tres etapas, la primera le corresponde al helióstato, la segunda etapa es el concentrador primario de 25 espejos hexagonales reflectivos de curvatura esférica. Por último, se encuentra la etapa de la muestra, punto en donde se intersectan todos los rayos reflejados por cada espejo del concentrador.

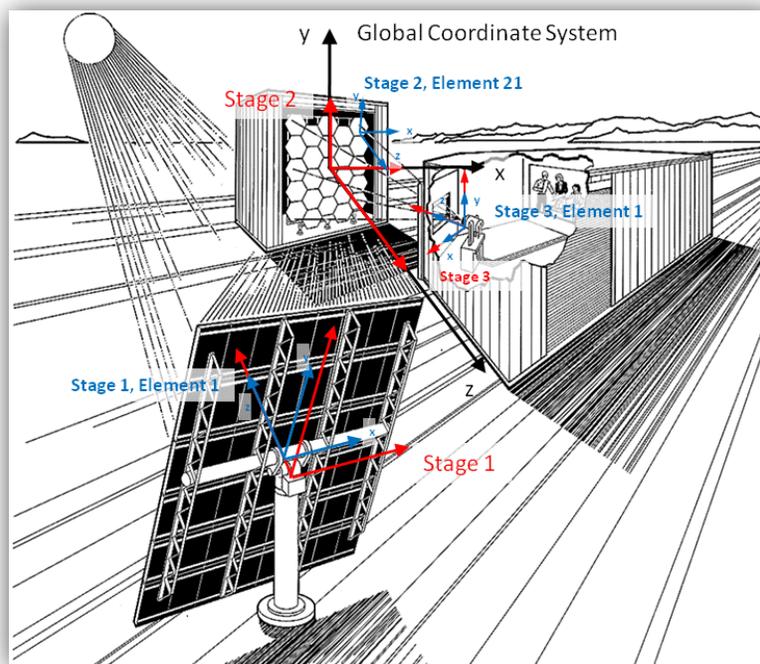


Figura 3.3: Dibujo del Horno solar de alto flujo radiativo del Laboratorio Nacional de Energías Renovables (NREL) mostrando la definición de etapa y elemento (Wendelin, Dobos, & Lewandowski, 2013).

3.4 Modelado del sistema

Con el fin de obtener las características ópticas adecuadas en el diseño del reactor, se utilizó como modelo teórico la técnica de trazado de rayos implementada en el código SolTrace, descrito anteriormente.

En este software, se considera un arreglo de las componentes ópticas de cada etapa del HoSIER (helióstato, concentrador y zona focal), es decir, están definidas las coordenadas de la ubicación individual de cada espejo (x_i, y_i, z_i), sus correspondientes normales (x_N, y_N, z_N) y sus respectivos parámetros de reflexividad, transmisividad, y

error óptico. Estos datos se tomaron del estudio de parámetros de diseño y campañas experimentales del HoSIER (Estrada et al., 2011).

De igual manera se considera en el software una forma solar Gaussiana (fig.3.4), configurada para emular la intensidad y el ángulo con el que la radiación solar incide en Temixco, Morelos (Riveros-Rosas, 2008).

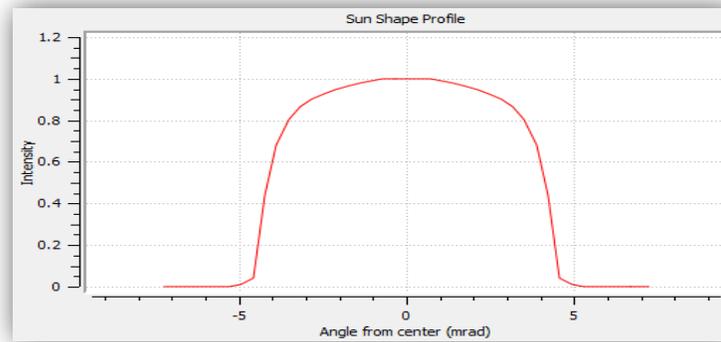


Figura 3.4: Perfil solar de Temixco, Morelos, configurado en SolTrace.

Al modelo se le agregaron 2 elementos o etapas más que corresponden al reactor preliminar, estos son: una ventana de cuarzo, y una brida CF10 (fig.3.5), destinada a la refrigeración de la ventana. Es necesario contemplarla debido a que los bordes de la brida bloquean un pequeño porcentaje del área por la que incide el flujo solar a través de la ventana. Como ejemplo, en el caso del reactor preliminar, la ventana de cuarzo tiene un diámetro de 21.368 cm, y el diámetro interior de la brida refrigerante es de 21.165 cm, por lo que es evidente que la brida bloquea 2.03 mm del área total de la ventana.



Figura 3.5: Arreglo de brida refrigerante con ventada de cuarzo. De izquierda a derecha, vista frontal, vista posterior y dos vistas isométricas.

El arreglo del HoSIER utilizado en el programa, está compuesto por el helióstato, el concentrador y un punto objetivo en donde se encuentra la zona focal del sistema. Sin embargo, una manera de ahorrar tiempo de cómputo en la simulación y además de evitar errores en el proceso de cálculo del software, fue eliminando el helióstato de la configuración, transfiriendo el error global y reflectancia de éste al error de specularidad del concentrador final. Esta configuración se muestra en la figura 3.6.

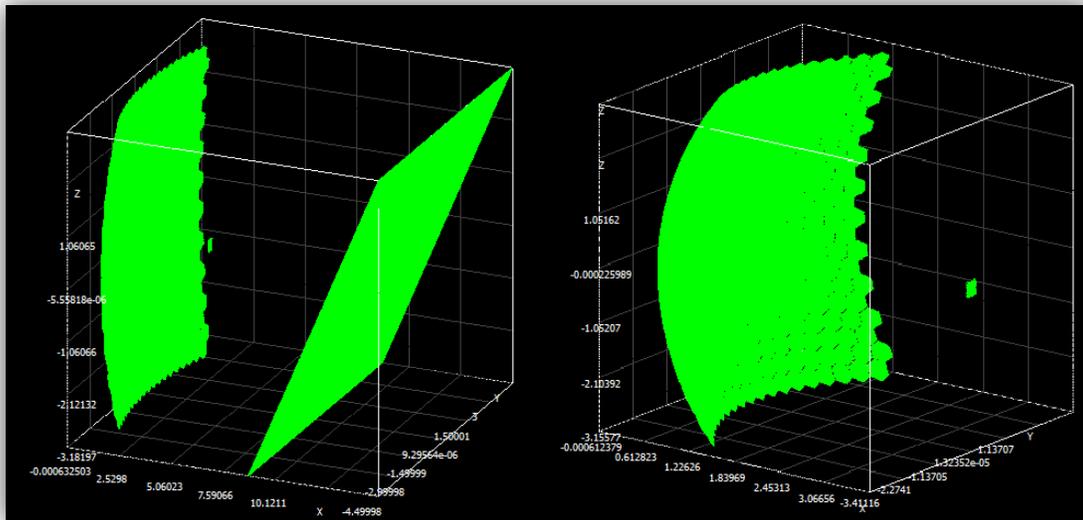


Figura 3.6: A la izquierda configuración con helióstato y a la derecha configuración sin helióstato del arreglo del HoSIER en SolTrace.

El error óptico global del concentrador está conformado por su error de pendiente y de specularidad. Definidos por la siguiente ecuación:

$$\sigma_{\text{óptico}} = (4\sigma_{\text{pendiente}}^2 + \sigma_{\text{especularidad}}^2)^{1/2} \quad (3.3)$$

Para poder eliminar el helióstato del arreglo final, es necesario conocer el error global óptico del helióstato y del concentrador individualmente. Podemos obtener el error óptico del helióstato utilizando la ecuación 3.3, y conociendo que, $\sigma_{\text{pendiente}} = 1.6$ mrad y $\sigma_{\text{especularidad}} = 0.7$ mrad, se obtiene un error óptico de 3.276 mrad. De la misma forma para el concentrador, sustituyendo los valores de $\sigma_{\text{pendiente}} = 1.1$ mrad y $\sigma_{\text{especularidad}} = 0.5$ mrad, obtenemos su error óptico equivalente a 2.256 mrad. Estos errores se suman, dando un error de 5.5316 mrad, y se le asignan al error de specularidad del concentrador final mediante la misma ecuación. El error de pendiente no cambia el error óptico global, ya que éste es considerado en los cálculos anteriores, por lo tanto se le dio un valor de 0 para la configuración final. Por el hecho de que aún

no hay trabajos realizados al respecto, los valores antes mencionados se estiman basándose en las propiedades de los espejos del helióstato y en las especificaciones brindadas por el fabricante de los espejos del concentrador. Si se hiciera un estudio con más detalle para conocer estos parámetros, se tendrían que medir las propiedades de especularidad de cada espejo, y después del conjunto.

La reflectividad (ρ) del concentrador final es la resultante de la multiplicación de la reflectividad de los espejos del mismo y la del helióstato, con valores de 0.96 y 0.7 respectivamente. De igual manera, estos valores son aproximaciones basadas en las especificaciones de los fabricantes, por lo que para conocer los valores específicos, sería necesaria una evaluación de la reflectividad de cada espejo, tanto del helióstato, como del concentrador.

Para el caso de la transmisividad (τ), se utiliza un valor aproximado de 0.02. Este valor es intuitivo y considera una situación en la que los espejos que conforman el helióstato y el concentrador del HoSIER no están en un estado óptimo, debido a factores comunes que afectan la integridad de éstos, como puede ser el polvo o el desgaste natural del recubrimiento reflejante del espejo.

Esta modificación del error óptico, la reflectividad, la transmisividad y algunos otros parámetros que describen al concentrador final y que se agregan al software, se muestran en la tabla 3.1.

Tabla 3.1: Parámetros del concentrador utilizados en el software SolTrace.

Concentrador Primario Final	
Reflectividad	0.672
Transmisividad	0.02
Error de pendiente	0.0001 mrad
Error de especularidad	5.5316 mrad
Tipo de error	Gaussiano

3.5 Estudio de Independencia de rayos

Antes de realizar la simulación con SolTrace para poder determinar los parámetros del reactor preliminar, es necesario desarrollar un análisis previo para conocer el número de rayos tales que generen resultados correctos. Por lo tanto, este análisis tiene como objetivo determinar a partir de qué número de rayos, los resultados no presentan variaciones considerables, permitiendo que las simulaciones posteriores presenten resultados confiables.

Para este análisis, se consideró dentro del software la forma solar Gaussiana configurada para emular el perfil solar en Temixco, Morelos, mencionada anteriormente. También se utilizó la configuración del HoSIER sin helióstato para economizar el tiempo de cálculo computacional, y no se tomaron en cuenta ni la ventana ni la brida refrigerante.

Una vez definidas las condiciones antes mencionadas, se realizan pruebas desde un número de rayos definido, y en el momento en que los flujos presentan variaciones porcentuales mínimas, se puede determinar el número adecuado de rayos para realizar todas las simulaciones posteriores. Las pruebas se inician desde una cantidad de 10 mil hasta 4 millones de rayos, y se comparan las variaciones de los resultados tomando en cuenta la densidad de flujo solar en la zona focal, obteniendo así el flujo promedio, el flujo pico y la potencia total de los rayos graficados. Los resultados se muestran en la tabla 3.2.

Tabla 3.2: Densidad de flujo solar en la zona focal para cada prueba realizada.

Número de rayos a evaluar	Densidad de Flujo Promedio (W/m ²)	Densidad de Flujo Pico (W/m ²)	Porcentaje de variación de Flujo Pico (%)
10 000	1.2587 x 10 ⁶	3.9998 x 10 ⁷	---
25 000	1.2630 x 10 ⁶	1.7705 x 10 ⁷	55.74
50 000	1.2688 x 10 ⁶	1.2343 x 10 ⁷	30.29
75 000	1.2618 x 10 ⁶	1.3517 x 10 ⁷	9.51
100 000	1.2602 x 10 ⁶	1.1480 x 10 ⁷	15.07
250 000	1.2621 x 10 ⁶	7.9385 x 10 ⁶	30.84
500 000	1.2635 x 10 ⁶	7.1556 x 10 ⁶	9.86
750 000	1.2628 x 10 ⁶	7.2416 x 10 ⁶	1.20
1 000 000	1.2640 x 10 ⁶	6.5398 x 10 ⁶	9.69
1 500 000	1.2622 x 10 ⁶	6.8313 x 10 ⁶	4.46
2 000 000	1.2622 x 10 ⁶	6.4693 x 10 ⁶	5.30
2 500 000	1.2615 x 10 ⁶	6.3217 x 10 ⁶	2.28
3 000 000	1.2608 x 10 ⁶	6.1954 x 10 ⁶	1.99
3 500 000	1.2616 x 10 ⁶	6.3715 x 10 ⁶	2.84
4 000 000	1.2623 x 10 ⁶	6.0497 x 10 ⁶	5.05
Potencia de rayos trazados:	24.67 kW		

Como puede apreciarse en la tabla anterior, las variaciones de los valores de la densidad de flujo son menos acentuadas para el flujo promedio que para el flujo pico, por lo que éstos últimos facilitan la elección del número adecuado de rayos solares. Además, se presenta una variación porcentual del flujo solar pico, en donde puede apreciarse que a partir de 1 millón de rayos, el porcentaje de variación es menor al 10%. Esta variación porcentual se considera adecuada para el análisis. En la figura 3.7,

se presenta la gráfica de los valores de densidad de flujo pico en función del número de rayos, mostrando de manera clara las variaciones en sus resultados.

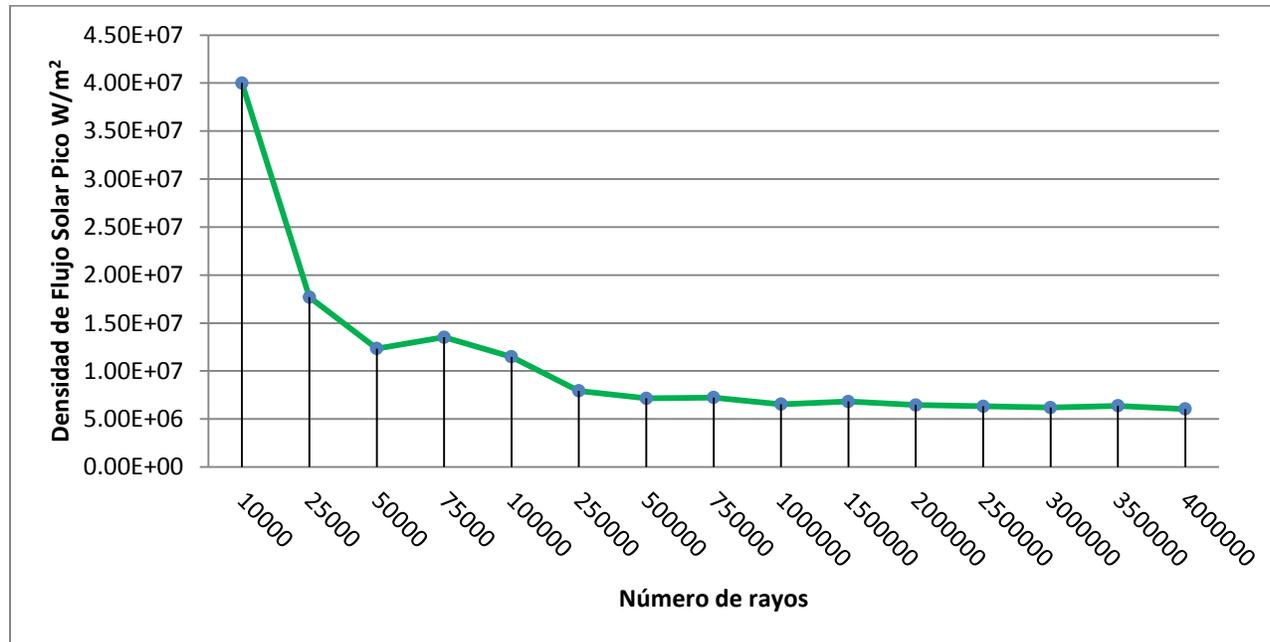


Figura 3.7: Gráfica de la densidad de flujo solar pico en función del número de rayos.

Se puede observar que no se presentan variaciones considerables para el número de rayos dentro del rango de 1-4 millones, por lo que a partir de 1 millón de rayos, las simulaciones pueden considerarse confiables. Como conclusión a este análisis, dentro del rango denominado confiable, se ha elegido la cantidad de 3 millones de rayos para realizar las pruebas posteriores.

3.6 Pruebas de distancia entre ventana y muestra para el reactor preliminar.

Ya que se conoce el número de rayos adecuado para el análisis, se puede proceder a realizar la primera simulación para el reactor preliminar. Para esta simulación se utilizó el arreglo del HoSIER sin helióstato, y además se implementaron las dos etapas propuestas, correspondientes a la ventana de cuarzo y a la brida CF10 de refrigeración.

-Ventana de cuarzo.

La ventana de cuarzo preliminar tiene un diámetro de 21.268 cm, un grosor de 9.53 mm y esta sujeta por una brida CF10 de acero inoxidable. Ambas componentes, dibujadas mediante un programa de diseño asistido por computadora, se muestran en la figura 3.8. Además, la ventana cumple con la función de dejar pasar el flujo solar a

través de ella, permitiendo un ambiente controlado en el reactor. Esta ventana va ensamblada en la parte frontal del reactor.

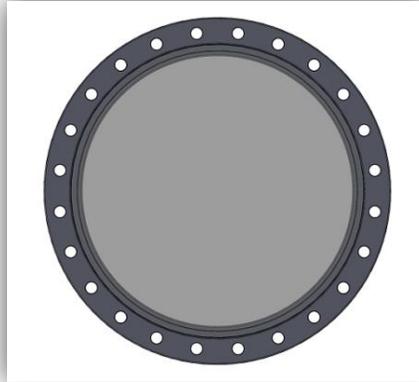


Figura 3.8: Ventana de Cuarzo sujeta por una brida CF10.

La ventana está compuesta por cuarzo óptico, el cual posee dos grandes ventajas. La primera es su alta transmisividad (τ) en todo el espectro solar (0.25 a 3 μm), una gráfica de ésta se muestra en la figura 3.9. La segunda ventaja es su resistencia a temperaturas altas, ya que el cuarzo óptico comienza su degradación aproximadamente a los 900°C (Alonso, 2014).

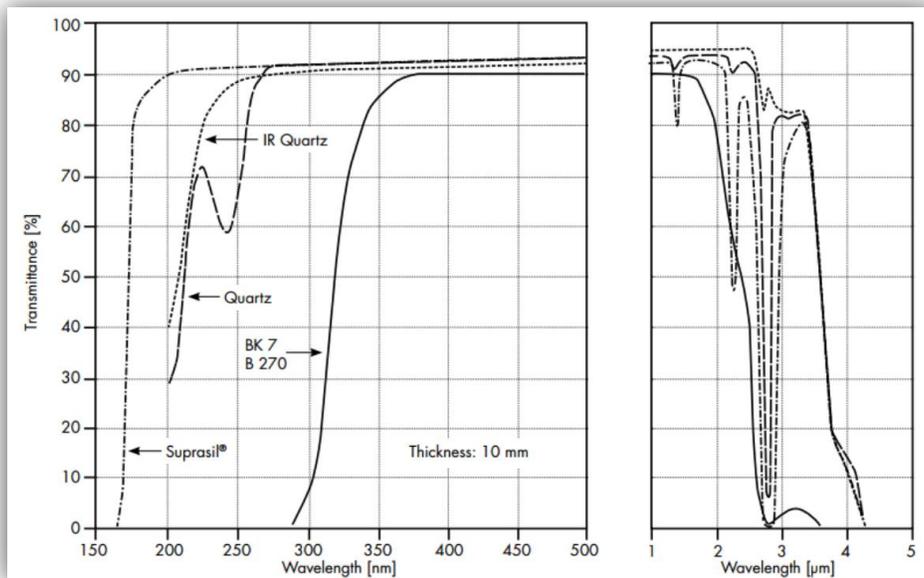


Figura 3.9: Transmisividad del cuarzo óptico en el rango del espectro solar (Newport Corporation (NASDAQ: NEWP)).

Debido a limitaciones del software en el apartado de dibujo, pues este no permite modelar sólidos, para ingresar la ventana de cuarzo fue necesaria la elaboración de dos interfases para definir sus propiedades ópticas. La primera interfase, denominada “aire-cuarzo”, considera que los rayos del sol provenientes del concentrador, ingresan de la superficie del aire al cuarzo óptico de la ventana. La segunda interfase, posicionada 9.53 mm después de la primera, indica que los rayos viajan a través del cuarzo óptico de la ventana, y salen nuevamente al aire, por lo que se denominó “cuarzo-aire”. Como resultado de esto, ambas interfases tendrán propiedades ópticas distintas, la primera interfase considera las propiedades del aire, y la segunda las del cuarzo óptico. En la figura 3.10 se ejemplifica esta configuración.

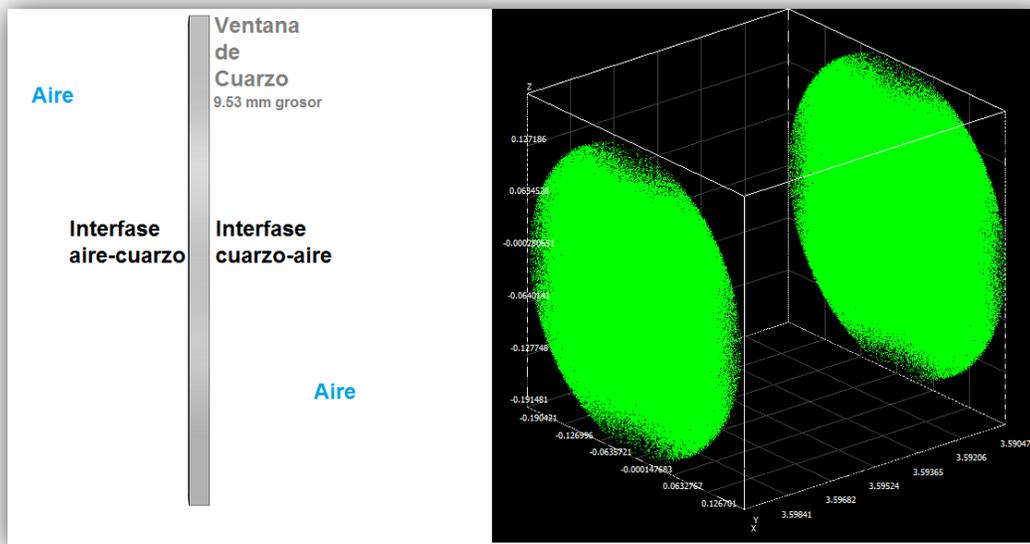


Figura 3.10: Representación de interfases ópticas. A la izquierda esquema de la ventana vista lateralmente, y a la derecha representación en SolTrace.

Como se mencionó, para la interfase aire-cuarzo, se utiliza una transmisividad (τ) de 0.87 y reflectividad (ρ) de 0.02 correspondientes al aire, con errores de pendiente y especularidad de 0. Y para la interfase cuarzo-aire, se definen las propiedades ópticas del cuarzo, utilizando un valor de reflectividad de 0.02 y una transmisividad de 0.9 debido a características comerciales (Kurt J. Lesker Company). Este valor significativo de 0.9 también puede observarse en la curva de transmisividad mostrada en la figura 3.9. De la misma manera, para esta última interfase se consideraron errores de pendiente y especularidad de 0.4 y 0.2 respectivamente, en base a las especificaciones técnicas del fabricante.

-Brida CF10 de refrigeración.

La brida se posiciona frente a la ventana de cuarzo, es de acero inoxidable y tiene un diámetro exterior e interior de 39.37 y 21.17 cm respectivamente. Su principal función es enfriar por medio de conducción a la ventana continuamente, utilizando agua como fluido refrigerante, y así evitar choques térmicos que provoquen la degradación de la misma. El dibujo de la brida se muestra en la figura 3.11. Como se mencionó, es adecuado considerar esta brida en el arreglo del software ya que bloquea un pequeño porcentaje del área de la ventana, y además, ésta también recibe un poco de la radiación solar.

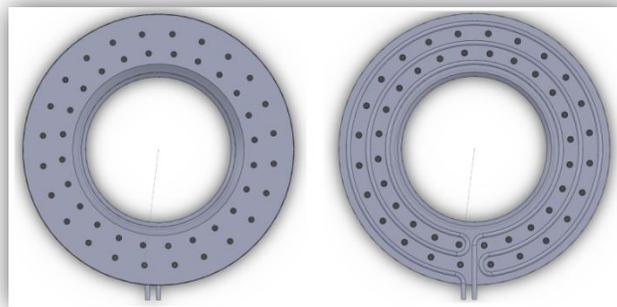


Figura 3.11: Brida CF10 para la refrigeración de la ventana.

Para ingresar la brida al software se tuvieron que determinar las propiedades ópticas de la brida, para esto se le asigna una reflectividad y transmisividad de 0, teniendo así ésta un comportamiento de bloqueo del flujo solar. Además, se utilizó un tipo de apertura anular (fig.3.12) y se consideró $R1=0.1058$ m, este valor hace referencia al radio interior de la brida. Por otro lado, para $R2$, como su única tarea es la de bloquear los rayos solares, se utilizó un valor de 2 m, con el fin de evitar completamente el paso de los mismos. Por lo tanto no es necesario ingresar el diámetro exterior de la brida.

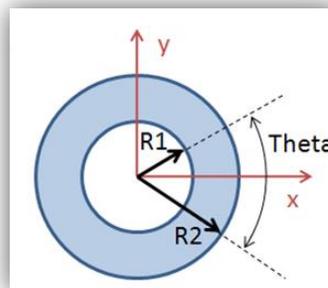


Figura 3.12: Configuración anular para la brida CF10 en SolTrace.

Finalmente, la brida CF10 de refrigeración se ensambla frente a la brida CF10 que sostiene a la ventana de cuarzo, quedando este arreglo posicionado entre el concentrador y su zona focal. El arreglo final de la ventana y la brida se puede apreciar en la figura 3.13.

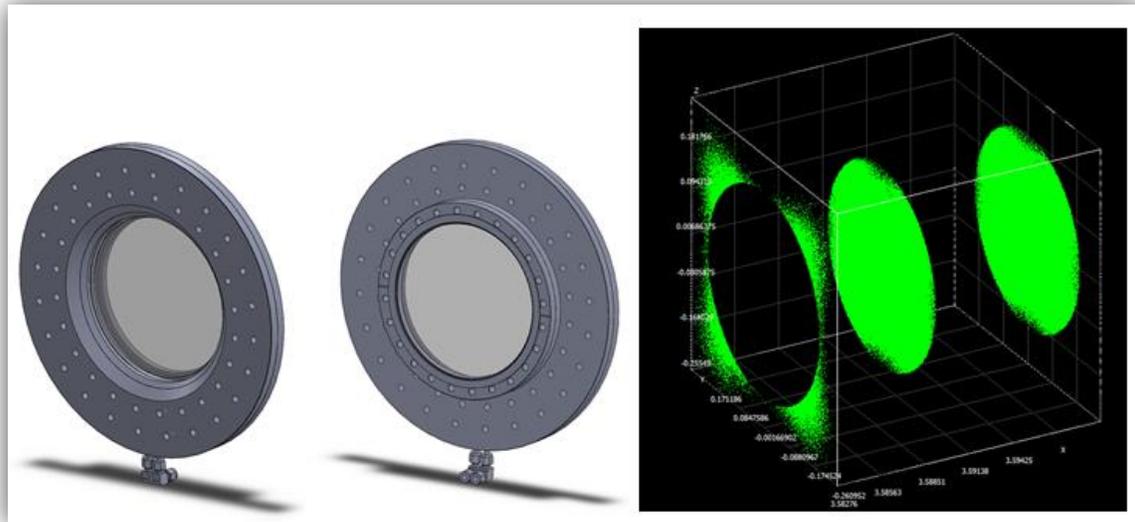


Figura 3.13: Ensamble de ventana de cuarzo con la brida CF10 de refrigeración. A la izquierda 2 vistas isométricas del dibujo y a la derecha representación del ensamble en SolTrace.

-Simulaciones de distancias.

Con la unión de la ventana de cuarzo y la brida de refrigeración, se pretende conocer, a base de simulaciones, la posición entre el ensamble y la zona focal del concentrador para la cual se genere una potencia adecuada en la zona focal, capaz de mantener las temperaturas deseadas. En la zona focal, que es donde se colocará la muestra de coque a transformar, se necesita alcanzar por lo mínimo temperaturas de gasificación superiores a los 1027°C, para que la reacción sea eficiente. La ventana de cuarzo, absorbe una cierta cantidad de radiación, ya que ésta no tiene una transmisividad del 100%. Debido a esto es necesario posicionar el ensamble a una distancia para la cual la ventana no alcance temperaturas que excedan sus límites de deformación (por arriba de los 900°C) (Alonso, 2014).

Para determinar la posición ideal se llevaron a cabo varias simulaciones, en las cuales se posiciona el ensamble de la ventana y la brida a diferentes distancias del punto focal. Estas pruebas se hicieron para 8, 10, 12, 14, 16, 18, 20, 22, 24, 25 y 26 cm de distancia entre el arreglo y el spot (fig.3.14). De igual manera, se utilizaron 3 millones de rayos, como había quedado definido en el estudio previo de “independencia de rayos”.

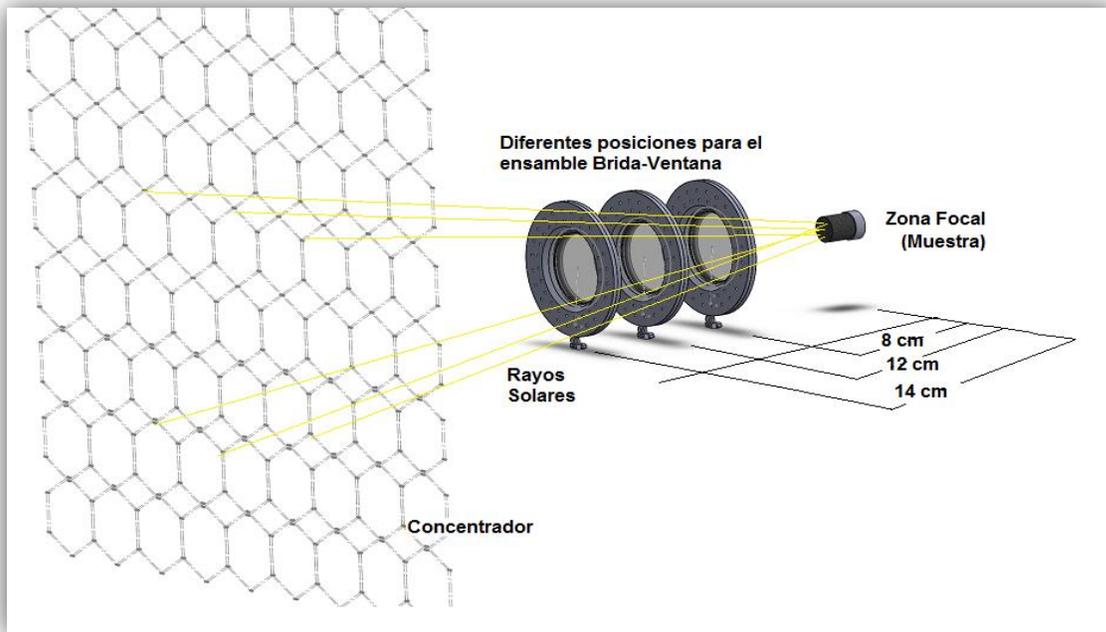


Figura 3.14: Esquema de las diferentes posiciones de la brida y la ventana con respecto a la zona focal.

La figura 3.15 ejemplifica cómo el software realiza la simulación. Los rayos del sol representados con un color amarillo, chocan con el concentrador y después atraviesan el ensamble de brida y ventana. Cabe mencionar que los rayos se vuelven rojos ya que detectan un obstáculo, en este caso el ensamble, entre el concentrador y la zona focal. Al momento de que los rayos inciden en el ensamble, se capturan diferentes datos, entre ellos la densidad de flujo solar, para la cual el software realiza un gráfico de contorno y uno de superficie (fig.3.16). Lo mismo se genera cuando los rayos llegan al spot (fig.3.17).

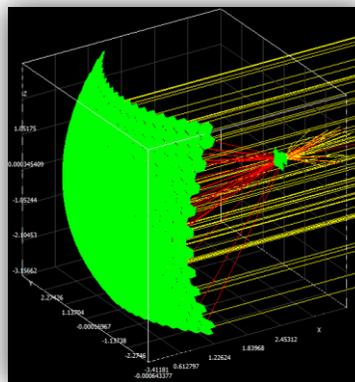


Figura 3.15: Funcionamiento del HoSIER simulado en SolTrace.

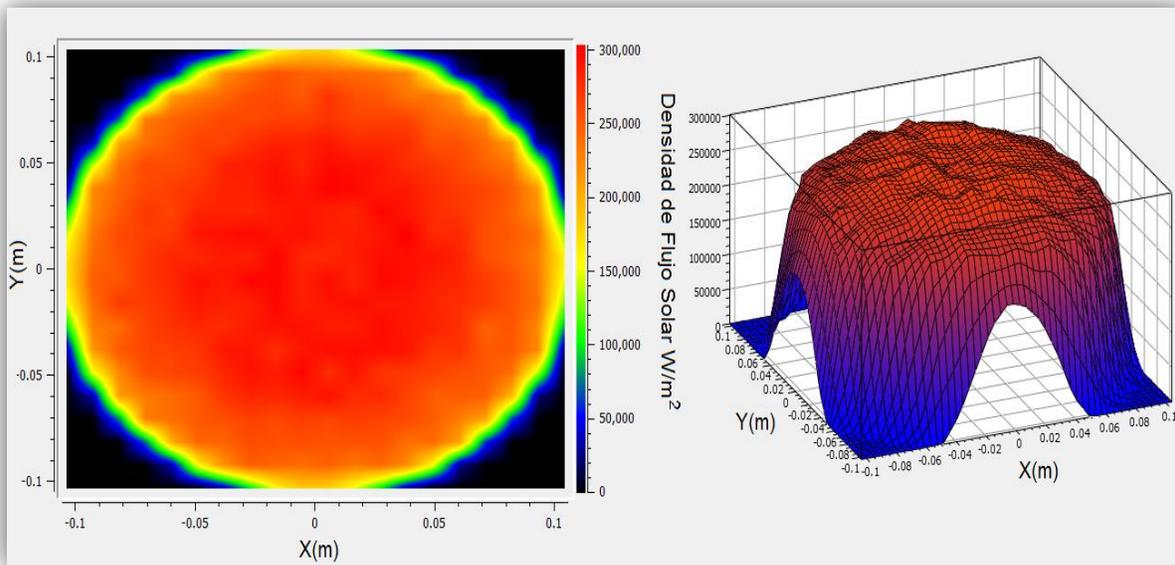


Figura 3.16: Densidad de flujo solar en la pared frontal de la ventana de cuarzo de 21.368 cm, posicionada a 16 cm de la zona focal. Número de Bins: X: 20 y Y: 20. Extensión de visión: automático*. A la izquierda gráfico de contornos y a la derecha gráfico de superficie.

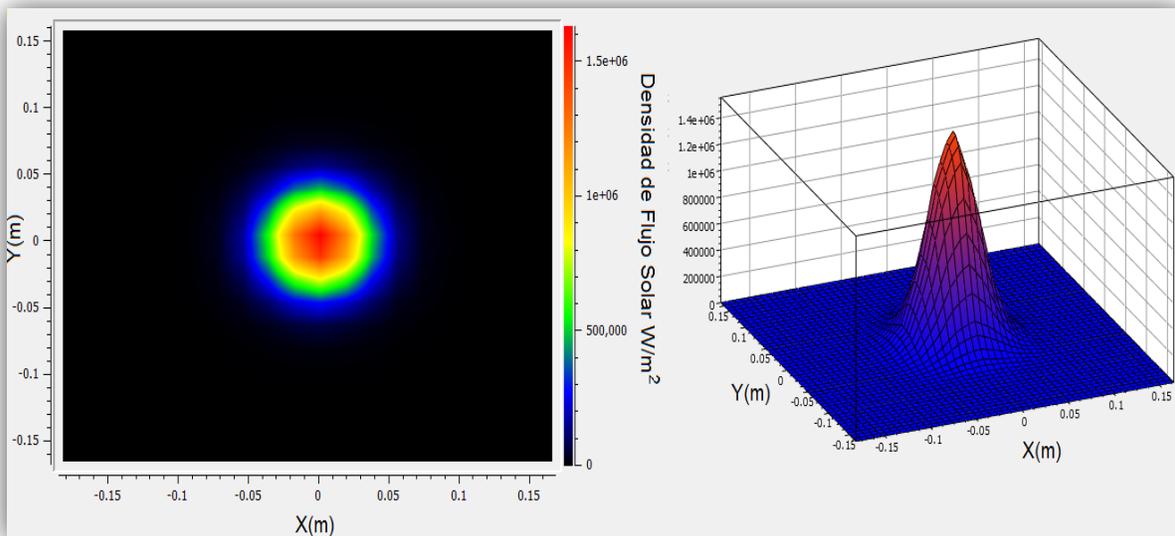


Figura 3.17: Densidad de flujo solar en la zona focal, posicionando la ventana de cuarzo de 21.368 cm, a 16 cm respecto al spot. Número de Bins: X: 20 y Y: 20. Extensión de visión: automático. A la izquierda gráfico de contornos y a la derecha gráfico de superficie.

*A los gráficos de las figuras 3.16 y 3.17 se les pueden dar diferentes configuraciones. Una es mediante el número de Bins, entre más grande sea este parámetro, los gráficos se mostrarán menos suavizados, pero más apegados a la

realidad. De igual manera se puede cambiar la extensión de visión (view extent), modificando así la malla de trabajo para tener un mejor aprovechamiento de la radiación de los rayos trazados.

Como puede apreciarse, las distribuciones de flujo no son homogéneas, ya que al centro de la ventana y del spot se tienen flujos pico muy por arriba de los flujos que se presentan a los alrededores. Esto puede apreciarse en los gráficos mediante un color rojo para la densidad de flujo más alta, y un color azul para la más baja, por lo que se debe tener cuidado en las consideraciones finales. Además, existe otro riesgo que es necesario mencionar y que no es posible conocer mediante la simulación en SolTrace. Éste es el riesgo de la radiación emitida por la muestra al llevar a cabo el proceso de gasificación, por lo que entre más cerca esté la ventana de la muestra, más se calentará.

La simulación nos brindó diferentes resultados de densidad de flujo pico y promedio, así como la potencia total generada por los rayos trazados para la zona focal y para la ventana, los cuales se muestran en la tabla 3.3 y la tabla 3.4, respectivamente. Debe tomarse en cuenta que todas las simulaciones realizadas consideran una apertura del atenuador del 100% y para cada una se considera una extensión de malla apropiada. Además, se realiza una simulación extra, correspondiente a la posición del arreglo brida-ventana que se encuentra en el dibujo del reactor preliminar antes presentado.

Tabla 3.3: Diferentes distribuciones de densidad de flujo en la zona focal utilizando una ventana de cuarzo de 21.368 cm. Número de Bins: X: 150 y Y: 150. Extensión de visión: 0.13².

Distancia (cm)	Densidad de flujo pico (W/m ²)	Incertidumbre de flujo pico (%)	Densidad de flujo promedio (W/m ²)	Potencia total (kW)
Sin Ventana	5.7782 x 10 ⁶	+/- 3.53	641 779	25.671
8	3.6114 x 10 ⁶	+/- 3.44	197 969	13.382
10	3.0978 x 10 ⁶	+/- 3.71	165 710	11.202
12	2.5489 x 10 ⁶	+/- 4.09	134 527	9.094
14	2.2482 x 10 ⁶	+/- 4.36	108 621	7.343
16	1.9200 x 10 ⁶	+/- 4.71	88 523.1	5.984
18	1.7505 x 10 ⁶	+/- 4.94	73 298.5	4.954
20	1.3568 x 10 ⁶	+/- 5.61	61 455.3	4.154
22	1.2252 x 10 ⁶	+/- 5.90	51 995.8	3.514
24	1.0709 x 10 ⁶	+/- 6.31	44 775.1	3.026
25	1.0029 x 10 ⁶	+/- 6.52	41 592.6	2.811
26	985 851	+/- 6.58	38 700.9	2.616
Distancia en dibujo de Reactor Preliminar:				
11.712	2.8113 x 10 ⁶	+/- 3.90	138 770	9.380

Tabla 3.4: Diferentes distribuciones de densidad de flujo en la ventana de cuarzo de 21.368 cm. Número de Bins: X: 150 y Y: 150. Extensión de visión: 0.35².

Distancia (cm)	Densidad de flujo pico (W/m ²)	Incertidumbre de flujo pico (%)	Densidad de flujo promedio (W/m ²)	Potencia total (kW)
8	1.2840 x 10 ⁶	+/- 2.14	38 666.10	18.946
10	819 459	+/- 2.68	32 225.40	15.790
12	577 027	+/- 3.19	26 162.50	12.819
14	436 927	+/- 3.67	21 076	10.327
16	327 368	+/- 4.24	17 144	8.400
18	269 026	+/- 4.68	14 140.80	6.929
20	216 675	+/- 5.21	11 847.60	5.805
22	185 503	+/- 5.63	10 069.80	4.934
24	157 202	+/- 6.12	8 636.08	4.232
25	154 282	+/- 6.18	8 012.11	3.926
26	140 126	+/- 6.48	7 490.94	3.671
Distancia en dibujo de Reactor Preliminar:				
11.712	598 886	+/- 3.14	26 990.6	13.225

Se puede observar en los datos, que conforme más distancia exista entre la ventana de cuarzo y la zona focal, los valores de densidad de flujo, tanto pico como promedio, van disminuyendo. Esto significa que, conforme nos alejamos de la zona focal, la concentración de los rayos solares es menor, debido a un mayor bloqueo de la radiación por la brida, generando entonces densidades de flujo y temperaturas menores. De igual manera la potencia total disminuye, tanto para la zona focal, como para la ventana, conforme se aleje la ventana de cuarzo del spot.

Otro análisis que nos permitió tener una idea más clara de los resultados capturados, y poder seleccionar la posición adecuada, fue conocer un aproximado de las temperaturas máximas mediante la realización de un balance de energía. Es decir, por medio de las densidades de flujo obtenidas en las simulaciones, se pudieron estimar las temperaturas máximas que se presentan en las etapas sujetas a estudio.

-Balance energético para la obtención de las temperaturas.

Como se mencionó anteriormente, uno de los objetivos del estudio de la distribución de la radiación, es conocer las temperaturas a las que se somete la zona focal y la ventana de cuarzo. Con esto es posible determinar a qué posición de la ventana se puede tener una radiación en la zona focal, capaz de llevar a cabo la gasificación de la muestra, y sin superar los límites de temperatura que dicha ventana puede alcanzar.

Para conocer las temperaturas se realiza el balance energético que parte de la ecuación general de conservación de energía para un volumen de control, y que se presenta en la ecuación 3.4.

$$\dot{E}_{in} + \dot{E}_g = \dot{E}_{out} + \dot{E}_{st} \quad (3.4)$$

En donde \dot{E}_{in} es la energía que entra al volumen de control, \dot{E}_{out} es la energía que sale del mismo, \dot{E}_g representa la generación de energía y \dot{E}_{st} la energía almacenada por el sistema. \dot{E}_{in} , también puede definirse como la razón a la cual una superficie absorbe radiación. Ésta puede determinarse a partir de la siguiente ecuación:

$$\dot{E}_{in} = \alpha A \dot{G} \quad (3.5)$$

En donde \dot{G} es la radiación incidente sobre la superficie, A es el área superficial y α es la absorptividad de la superficie. La *absortividad* es la fracción de la energía de radiación que incide sobre una superficie y que es absorbida por ésta. Por otro lado, el término de generación de energía \dot{E}_g se define por la ecuación 3.6, en donde \dot{q} representa la generación de energía por unidad de volumen $dx dy dz$.

$$\dot{E}_g = \dot{q} dx dy dz \quad (3.6)$$

La energía que sale del sistema \dot{E}_{out} , se puede representar mediante sus pérdidas de calor por conducción, convección y radiación (ec.3.7) (fig. 3.18).

$$\dot{E}_{out} = \dot{Q}_k + \dot{Q}_c + \dot{Q}_r \quad (3.7)$$

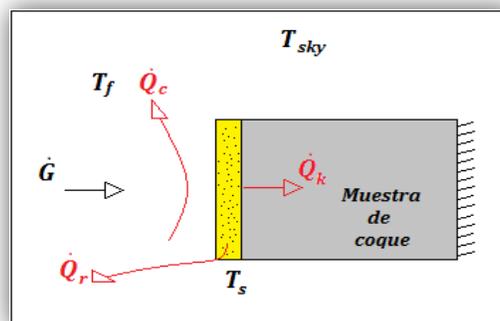


Figura 3.18: Pérdidas de calor por conducción, convección y radiación en la muestra de coque.

Las pérdidas de calor por **conducción** \dot{Q}_k están relacionadas con las interacciones de las partículas de un sólido, como consecuencia de las vibraciones moleculares, o de un fluido, por medio de colisiones y por la difusión de las moléculas durante su movimiento aleatorio. Estas pérdidas se describen como se muestra en la ecuación 3.8, la cual es denominada ley de Fourier de la conducción del calor, en honor de J. Fourier quien la presentó por primera vez en 1822.

$$\dot{Q}_k = -kA \frac{dT}{dx} \quad (W) \quad (3.8)$$

En donde k es la conductividad térmica del material (W/m·K) y $\frac{dT}{dx}$ es el gradiente de temperatura en la dirección normal al área A . El signo negativo garantiza que la transferencia de calor sea una cantidad positiva.

Las pérdidas que se presentan por la transferencia de energía entre una superficie sólida y un fluido en movimiento, son denominadas pérdidas por **convección** \dot{Q}_c . La rapidez de transferencia de calor por convección es proporcional a la diferencia de temperatura. Por lo tanto, estas pérdidas se pueden expresar como:

$$\dot{Q}_c = hA(T_s - T_f) \quad (W) \quad (3.9)$$

Donde h es el coeficiente de transferencia de calor por convección (W/m² · K), A es el área de la superficie en donde tiene lugar la transferencia de calor por convección, T_s se refiere a la temperatura de la superficie en K y T_f es la temperatura del fluido suficientemente alejado de esta superficie, también en K. Cabe mencionar que el valor de h no es una propiedad del fluido, sino un parámetro que se determina experimentalmente y que depende de todas las variables involucradas en la convección, como por ejemplo la velocidad o la naturaleza del fluido.

En la ecuación 3.10 se presenta la definición de las pérdidas ocasionadas por la emisión de ondas electromagnéticas, o pérdidas por **radiación** \dot{Q}_r . Éstas surgen como resultado de los cambios en las configuraciones electrónicas de los átomos o moléculas de la materia.

$$\dot{Q}_r = \varepsilon A \sigma F_{1 \rightarrow 2} (T_s^4 - T_{sky}^4) \quad (W) \quad (3.10)$$

En esta ecuación, ε es la emisividad de la superficie, cuyo valor se encuentra entre el intervalo de 0 a 1, en donde el valor de 1 corresponde al comportamiento de un cuerpo negro. A , es el área superficial, σ es la constante de Stefan-Boltzmann y tiene un valor de 5.670×10^{-8} W/m² · K⁴. El término $F_{1 \rightarrow 2}$ se denomina factor de forma, y se define como la fracción de energía total emitida por una superficie 1 y que es

interceptada por una superficie 2, este factor depende de la geometría y orientación de las superficies. Finalmente T_s es la temperatura de la superficie y T_{sky} es la temperatura efectiva del cielo o del ambiente, ambas en K. Ésta última se genera por la emisión y absorción de radiación de las moléculas y partículas suspendidas en la atmósfera.

Si la temperatura del sistema cambia con el tiempo, entonces debe haber un almacenamiento o una pérdida de energía. Esta razón de almacenamiento se expresa en la ecuación 3.11.

$$\dot{E}_{st} = \dot{q}_{stored} = \dot{m}c_p \frac{dT}{dt} \quad (3.11)$$

Para el volumen de control de interés, no se considera generación ni almacenamiento de energía, por lo tanto la ecuación de conservación de energía (ec.3.4) queda expresada como:

$$\dot{E}_{in} = \dot{E}_{out} \quad (3.12)$$

Además, como se mostró anteriormente en la figura 3.18, para este balance energético no se considera toda la pastilla de coque, por lo tanto el área superficial efectiva de la muestra se reduce aproximadamente a la capa coloreada en amarillo representada en la misma figura. Por lo tanto las pérdidas conductivas \dot{Q}_k se consideran nulas. Por otro lado, debido a que el objetivo de este análisis es determinar las máximas temperaturas posibles en la zona focal y en la ventana, también se puede simplificar el balance anulando las pérdidas convectivas \dot{Q}_c . Finalmente, tomando las ecuaciones 3.5 y 3.10, el balance energético del sistema (ec.3.12) queda representado como:

$$\alpha A \dot{G} = \varepsilon A \sigma F_{1 \rightarrow 2} (T_s^4 - T_{sky}^4) \quad (3.13)$$

Eliminando el área superficial A de los dos términos, y considerando una emisión completa de energía del concentrador a la muestra, es decir $F_{1 \rightarrow 2} = 1$, la ecuación 3.13 puede reducirse a:

$$\alpha \dot{G} = \varepsilon \sigma (T_s^4 - T_{sky}^4) \quad (3.14)$$

De la ecuación 3.14 podemos despejar T_s para obtener las temperaturas deseadas. El despeje se muestra en la ecuación 3.15.

$$T_s = \sqrt[4]{\frac{\alpha \cdot \dot{G}}{\varepsilon \cdot \sigma} + T_{sky}^4} \quad (K) \quad (3.15)$$

Una vez realizado el despeje, se puede proceder al cálculo de las temperaturas para las etapas deseadas:

- *Zona focal.* Por motivos de falta de datos y de trabajos realizados con respecto a la caracterización del coque de petróleo, éste se consideró como un cuerpo negro, es decir, con una absorptividad α y una emisividad ε con valor de 1. Como se mencionó en el primer capítulo, un **cuerpo negro** se define como un emisor y absorbedor perfecto de la radiación (Cengel & Ghajar, 2011), es decir que absorbe toda la radiación de manera uniforme y asimismo la emite de la misma manera en todas las direcciones. Considerando la muestra de coque como un cuerpo negro ideal, se estima que las pérdidas convectivas y conductivas sean despreciables, por lo que los resultados que se obtuvieron nos dan una idea de las temperaturas máximas ideales a las que se somete la muestra, para cada una de las posiciones en las que se colocó la ventana de cuarzo.

Con estos valores para la absorptividad α y emisividad ε , para una temperatura efectiva del cielo de 25°C, y utilizando para \dot{G} los valores de densidad de flujo obtenidos en la tabla 3.3, se procede a realizar el cálculo de las temperaturas sustituyendo los valores en la ecuación 3.15. Los resultados se presentan en la tabla 3.5:

Tabla 3.5: Temperaturas estimadas en la zona focal para las diferentes distancias de posicionamiento de la ventana de cuarzo de 21.368 cm. Número de Bins: X: 150 y Y: 150. Extensión de visión: 0.13².

Distancia (cm)	Temperatura de flujo pico (K)	Temperatura de flujo promedio (K)
Sin Ventana	3 177.323	1 834.537
8	2 825.120	1 367.726
10	2 718.842	1 308.382
12	2 589.466	1 242.132
14	2 509.491	1 177.686
16	2 412.437	1 119.222
18	2 357.335	1 067.922
20	2 211.926	1 022.193
22	2 156.246	980.681
24	2 084.898	945.027
25	2 050.992	927.943
26	2 042.238	911.558
Distancia en dibujo de Reactor Preliminar:		
11.712	2653.683	1251.78

- o Ventana de cuarzo. Para obtener las temperaturas aproximadas a las que se somete la ventana se partió de los datos obtenidos por el fabricante, mencionados anteriormente. Estos señalan una transmisividad $\tau=0.9$ y una reflectividad $\rho=0.02$ (Kurt J. Lesker Company). Estos valores los podemos sustituir en la ecuación 3.2, y así obtener el valor de la absorptividad $\alpha = 0.08$. De igual manera, se encontró por medio de la literatura un valor de emisividad ε para el cuarzo de 0.93 (Cengel & Ghajar, 2011).

Para la misma temperatura efectiva del cielo de 25°C, utilizando los valores de \dot{G} de la tabla 3.4, y las propiedades ópticas antes mencionadas, podemos calcular las temperaturas sustituyendo de igual manera de la ecuación 3.15. Los resultados se encuentran en la tabla 3.6:

Tabla 3.6: Temperaturas aproximadas en la ventana de cuarzo de 21.368 cm para sus diferentes distancias de posicionamiento. Número de Bins: X: 150 y Y: 150. Extensión de visión: 0.35².

Distancia (cm)	Temperatura de flujo pico (K)	Temperatura de flujo promedio (K)
8	1 182.597	507.936
10	1 057.610	488.171
12	969.462	467.077
14	904.992	446.870
16	842.808	429.129
18	803.131	413.926
20	761.706	401.075
22	733.416	390.189
24	704.546	380.694
25	701.358	376.330
26	685.249	372.565
Distancia en dibujo de Reactor Preliminar:		
11.712	978.436	470.129

En base a estos resultados, se ha decidido establecer una potencia de diseño de 10 kW, que pueda mantener los rangos de temperatura deseados para llevar a cabo la reacción de gasificación, pero principalmente, que la ventana esté lo suficientemente lejos de la zona focal para evitar su fractura. Es necesario recordar que esta potencia de 10 kW es considerando un atenuador abierto al 100%.

Como puede observarse en la tabla 3.3, esa potencia se genera posicionando la ventana entre los 10 y 12 cm, sin embargo las temperaturas pico obtenidas para la

ventana, son muy altas, alcanzando los límites soportados por el cuarzo, sin mencionar la radiación infrarroja generada por la muestra, que aumenta aún más la temperatura de la ventana.

3.7 Pruebas de distancia entre ventana y muestra para el reactor optimizado.

La experiencia previa y el estado del arte en los reactores para la gasificación, ha llevado a la necesidad de alejar la ventana a una distancia mayor a los 17 cm, para así evitar la generación de puntos calientes debido a la absorción de radiación infrarroja emitida por la muestra y que causan la degradación del cuarzo. De igual manera, la gasificación del coque de petróleo genera partículas que pueden depositarse en la ventana de cuarzo, opacándola y reduciendo su propiedad de transmisividad.

Por lo tanto, una primera modificación al reactor preliminar, es la sustitución de la ventana de cuarzo óptico previamente utilizada de 21.368cm sujeta por una brida CF10", por una más grande de 37.87cm sujeta por una brida CF16.50" (fig.3.19). Se consideran dos bridas nuevamente, una destinada a la refrigeración de la ventana, para evitar la generación de los puntos calientes, y la otra, la CF16.50", con la tarea de sujetarla. Los diámetros son escalados de la primera ventana, a la nueva, quedando la brida CF16.50" de refrigeración con un diámetro interior de 37.667 cm. Finalmente, tanto las bridas como la ventana conservan las mismas propiedades ópticas.

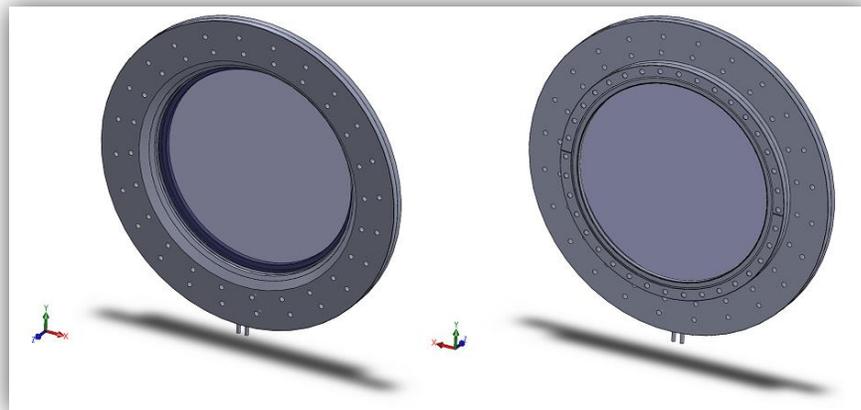


Figura 3.19: Ensemble de ventana de cuarzo de 37.87cm con la brida CF16.50 de refrigeración.

Se realizó el procedimiento ya conocido para determinar el cambio en las densidades de flujo solar y por ende de las temperaturas para la zona focal y para la ventana de cuarzo. La simulación se realizó en la misma configuración del HoSIER y se utilizaron los 3 millones de rayos establecidos por el estudio de independencia. Los

resultados arrojados para un atenuador abierto al 100%, pueden observarse en la tabla 3.7 para la zona focal y en la tabla 3.8 para la ventana:

Tabla 3.7: Diferentes distribuciones de densidad de flujo en la zona focal utilizando una ventana de cuarzo de 37.87 cm. Número de Bins: X: 150 y Y: 150. Extensión de visión: 0.1².

Distancia (cm)	Densidad de flujo pico (W/m ²)	Incertidumbre de flujo pico (%)	Densidad de flujo promedio (W/m ²)	Potencia total (kW)
Sin Ventana	5.7782 x 10 ⁶	+/- 3.53	641 779	25.671
8	4.2060 x 10 ⁶	+/- 4.14	443 449	17.738
10	4.0336 x 10 ⁶	+/- 4.23	431 447	17.258
12	4.1174 x 10 ⁶	+/- 4.19	410 828	16.433
14	3.8960 x 10 ⁶	+/- 4.30	380 797	15.232
16	3.7577 x 10 ⁶	+/- 4.38	343 973	13.759
18	3.3822 x 10 ⁶	+/- 4.62	305 025	12.201
20	3.0590 x 10 ⁶	+/- 4.86	268 032	10.721
22	2.8198 x 10 ⁶	+/- 5.06	235 147	9.406
24	2.5106 x 10 ⁶	+/- 5.36	206 390	8.256
25	2.4515 x 10 ⁶	+/- 5.42	194 194	7.768
26	2.3147 x 10 ⁶	+/- 5.58	181 997	7.280

Tabla 3.8: Diferentes distribuciones de densidad de flujo en la ventana de cuarzo de 37.87 cm. Número de Bins: X: 150 y Y: 150. Extensión de visión: 0.37².

Distancia (cm)	Densidad de flujo pico (W/m ²)	Incertidumbre de flujo pico (%)	Densidad de flujo promedio (W/m ²)	Potencia total (kW)
8	1.2672 x 10 ⁶	+/- 2.04	46 176.5	25.286
10	810 355	+/- 2.55	44 874.5	24.573
12	570 437	+/- 3.04	42 646.3	23.353
14	420 562	+/- 3.54	39 437.6	21.596
16	335 139	+/- 3.97	35 535.4	19.459
18	266 655	+/- 4.45	31 486.1	17.242
20	213 872	+/- 4.96	27 563.7	15.094
22	184 980	+/- 5.34	24 149.7	13.224
24	160 185	+/- 5.74	21 171.3	11.593
25	160 165	+/- 5.74	19 925	10.911
26	143 916	+/- 6.05	18 727.2	10.255

Utilizando el balance de energía anterior, podemos determinar las temperaturas para la zona focal y para la ventana, sustituyendo los valores ya conocidos para cada

una en la ecuación 3.15. Los resultados se muestran en la tabla 3.9 y la tabla 3.10, para la zona focal y la ventana respectivamente:

Tabla 3.9: Temperaturas estimadas en la zona focal para las diferentes distancias de posicionamiento de la ventana de cuarzo de 37.87 cm. Número de Bins: X: 150 y Y: 150. Extensión de visión: 0.1².

Distancia (cm)	Temperatura de flujo pico (K)	Temperatura de flujo promedio (K)
Sin Ventana	3 177.323	1 834.537
8	2 934.831	1 672.726
10	2 904.287	1 661.303
12	2 919.254	1 641.110
14	2 879.198	1 610.294
16	2 853.302	1 569.917
18	2 779.191	1 523.518
20	2 710.285	1 475.137
22	2 655.682	1 427.729
24	2 579.693	1 382.012
25	2 564.778	1 361.173
26	2 527.836	1 339.329

Tabla 3.10: Temperaturas aproximadas en la ventana de cuarzo de 37.87 cm para sus diferentes distancias de posicionamiento. Número de Bins: X: 150 y Y: 150. Extensión de visión: 0.37².

Distancia (cm)	Temperatura de flujo pico (K)	Temperatura de flujo promedio (K)
8	1 178.725	528.403
10	1 054.679	525.023
12	966.707	519.084
14	896.499	510.155
16	847.689	498.622
18	801.390	485.743
20	759.289	472.207
22	732.912	459.397
24	707.759	447.274
25	707.738	441.895
26	689.673	436.534

3.8 Conclusiones del capítulo

Mediante la implementación de la ventana de cuarzo con diámetro de 37.87 cm, se puede cumplir el objetivo de posicionar la ventana más allá de los 17 cm, evitando todo riesgo que afecte la integridad de la ventana, además se obtienen las potencias deseadas.

Finalmente se decidió una ventana de cuarzo de 37.87 cm de diámetro, sujeta por una brida CF16.50, posicionada a 18 centímetros de la zona focal. De esta manera se obtiene una potencia en la zona focal de 12 kW y temperaturas máximas aproximadas para la ventana de 800 K, considerando una apertura del atenuador del 100%.

Los resultados se presentan en la tabla 3.11, la cual compara los distintos valores obtenidos posicionando la ventana, de 21.368 y 37.87 cm, a 18 cm de la zona focal.

Tabla 3.11: Comparación de parámetros entre ambas ventanas, posicionándolas a 18 cm de la zona focal.

Diámetro de ventana (cm) :	Densidad de flujo pico en zona focal (W/m²)	Temperatura de flujo pico en zona focal (K)	Densidad de flujo pico en ventana (W/m²)	Temperatura de flujo pico en ventana (K)	Potencia en zona focal (kW)
21.368	1.7505 x 10 ⁶	2 357.335	269 026	803.131	4.95
37.87	3.3822 x 10 ⁶	2 779.191	266 655	801.390	12.201

CAPÍTULO 4

4 SIMULACIÓN DE FLUJO MÁSIKO

4.1 Introducción

En el proceso de gasificación llevado a cabo dentro de la cavidad del reactor, participan diferentes fluidos que interactúan entre sí, en la reacción y antes de que ésta suceda. Cada fluido se comporta de manera diferente en su dirección y en su velocidad. Debido a que este movimiento determina el correcto funcionamiento del reactor a diseñar, resulta necesario profundizar el conocimiento del recorrido de estos fluidos, así como los campos de velocidad generados por los mismos.

Este capítulo tiene como objetivo determinar la mecánica de los fluidos de arrastre en el interior del reactor. Para esto se llevan a cabo simulaciones en ausencia de radiación y a un determinado flujo másico, obteniendo así la magnitud de los vectores de velocidad producidos dentro del reactor. El capítulo comienza con una descripción de las propiedades termofísicas de los fluidos, las ecuaciones que rigen el fenómeno a estudiar, una explicación general de los métodos de solución numérica, una breve explicación del concepto y modelado del fenómeno de turbulencia y una descripción de la dinámica de fluidos computacional. Posteriormente se realiza el análisis de flujo en el diseño preliminar y se propone una optimización del mismo. Las simulaciones del análisis se llevan a cabo mediante el software de dinámica de fluidos computacional FLUENT contenido dentro del paquete de ANSYS 14.0.

4.2 Propiedades termofísicas de los fluidos

Los fluidos poseen propiedades que les son inherentes, éstas afectan su cantidad de movimiento, transferencia de calor y almacenamiento térmico. Dichas propiedades varían de acuerdo al estado en que se encuentra un material o sustancia, por ejemplo a una determinada temperatura o presión, sin embargo no alteran su composición química. La densidad, la conductividad térmica, la viscosidad dinámica, el calor específico, la expansión térmica y la tensión superficial, entre otras, son ejemplos de

las propiedades mencionadas. A continuación se describen las propiedades que influyen en el análisis de flujo que se llevará a cabo:

-Densidad.

La densidad para un fluido, es una propiedad cuyo significado no es preciso, debido a que las moléculas se encuentran a distancias mucho mayores que su diámetro molecular, y además se mueven libremente, por lo que el número de moléculas en el interior de un determinado volumen cambia continuamente. Sin embargo, si observamos a la materia como un medio homogéneo y continuo, existe un volumen límite δv_0 , por debajo del cual las variaciones moleculares pueden ser importantes y por encima del cual las variaciones macroscópicas también lo pueden ser. Por lo tanto la densidad de un fluido se puede representar como:

$$\rho = \lim_{\delta v \rightarrow \delta v_0} \delta m / \delta v \quad (\text{Kg}/\text{m}^3) \quad (4.1)$$

En donde δv_0 tiene un valor de 10^{-9} mm^3 para cualquier líquido o gas a una presión atmosférica. Cabe mencionar que la densidad depende la presión y de la temperatura. Para el caso de los líquidos o sólidos, la variación de su densidad con la presión suele ser despreciable, debido a su característica incompresible. Por otro lado, para el caso de los gases, su densidad es proporcional a la presión e inversamente proporcional a la temperatura. El recíproco de la densidad se denomina **volumen específico** v .

-Coeficiente de compresibilidad y de expansión volumétrica.

Como se mencionó anteriormente, la densidad de un fluido depende de la temperatura y de la presión, es decir, los fluidos se expanden cuando se despresurizan o se calientan, y se contraen cuando se enfrían o se someten a presión. Sin embargo este cambio no es el mismo para todo tipo de fluidos, por lo que las propiedades que definen esta razón de cambio son el módulo de elasticidad de volumen κ (también llamado coeficiente de compresibilidad) y el coeficiente de expansión volumétrica β .

El **coeficiente de compresibilidad** se define por la ecuación 4.2, y es el cambio en la presión que corresponde a un cambio relativo en el volumen o la densidad del fluido, a una temperatura constante.

$$\kappa = -v \left(\frac{\delta P}{\delta v} \right)_T = \rho \left(\frac{\delta P}{\delta \rho} \right)_T \quad (\text{Pa}) \quad (4.2)$$

Un valor grande de κ significa que se requiere un cambio también grande en la presión para causar un pequeño cambio relativo en el volumen, es decir, un fluido con un valor de κ grande, es en esencia incompresible. De esta manera se puede decir que una sustancia verdaderamente incompresible, tiene un valor de κ infinito. El inverso del coeficiente de compresibilidad, se le llama **compresibilidad isotérmica** α .

La densidad de un fluido depende en mayor medida de la temperatura que de la presión, y esto genera diferentes fenómenos que se observan en la naturaleza, como las corrientes oceánicas, el ascenso del aire caliente, entre otros. La propiedad que cuantifica estos fenómenos es el **coeficiente de expansión volumétrica** β , se define por la ecuación 4.3, y es la medida de cambio en la densidad de un fluido con la temperatura a presión constante.

$$\beta = \frac{1}{v} \left(\frac{\delta v}{\delta T} \right)_P = - \frac{1}{\rho} \left(\frac{\delta \rho}{\delta T} \right)_P \quad (1/K) \quad (4.3)$$

Un valor grande de β en un fluido, quiere decir que el fluido tendrá un cambio considerable de su densidad con la temperatura. Esto se ejemplifica en la figura 4.1.

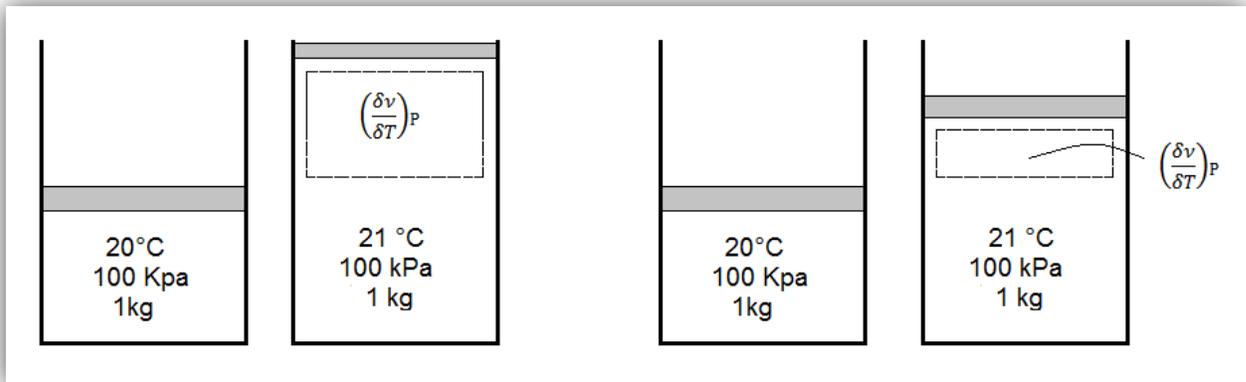


Figura 4.1: Coeficiente de expansión volumétrica. A la izquierda una sustancia con β grande y a la derecha una con β pequeño.

-Viscosidad.

Cuando un fluido entra en contacto con un sólido o con otro fluido, y éstos se mueven uno con respecto del otro, se genera una fuerza de fricción con dirección opuesta al movimiento en la superficie de contacto. Esta fricción depende de las propiedades internas del fluido, por ejemplo es muy fácil moverse en el aire, pero no en

el agua y mucho menos en el aceite. La viscosidad se define como la medida de resistencia interna de un fluido al movimiento o a la fluidez.

Aquellos fluidos en los que la razón de deformación es proporcional al esfuerzo cortante, se denominan *fluidos newtonianos*, en honor a Sir Isaac Newton por ser el primero en demostrarlo. La mayoría de los fluidos comunes como el aire, agua ya aceites, pertenecen a este grupo. Este esfuerzo cortante se representa por la ecuación 4.4.

$$\tau = \mu \, du/dy \quad (N/m^2) \quad (4.4)$$

En donde du/dy es la razón de deformación de un elemento de fluido, que equivale al gradiente de velocidad. La constante de proporcionalidad μ es denominada coeficiente de viscosidad o **viscosidad dinámica** (o **absoluta**) del fluido, y su unidad es el $kg/m \cdot s$. Generalmente también se emplea el término de **viscosidad cinemática** a la razón de la viscosidad dinámica a la densidad (ec.4.5).

$$\nu = \mu / \rho \quad (m^2/s) \quad (4.5)$$

La viscosidad es también una medida de la resistencia a la deformación de un fluido, y depende de la temperatura y de la presión. Los líquidos presentan viscosidades dinámica y cinemática independientes de la presión, debido a su carácter incompresible, lo mismo ocurre para la viscosidad dinámica en un gas, sin embargo su viscosidad cinemática se ve afectada, ya que la densidad de un gas es proporcional a su presión. Por otro lado, la viscosidad de un líquido decrece cuando se incrementa la temperatura, en tanto que para un gas su viscosidad aumenta en el mismo caso.

4.3 Ecuaciones gobernantes del flujo

Las ecuaciones que gobiernan el flujo en un fluido (ecuaciones de balance) representan los conocidos enunciados de las leyes de conservación de la física, estos son:

- La masa de un fluido debe conservarse. –*Principio de conservación de la masa*–
- La razón de cambio del momento lineal equivale a la suma de fuerzas en una partícula de fluido (Segunda ley de Newton). –*Principio de conservación de la cantidad de movimiento*–

- La razón de cambio de energía es equivalente a la suma de la razón de adición de calor y la razón de trabajo realizado por una partícula de fluido (Primera ley de la termodinámica). – *Principio de conservación de energía*-*

* En el estudio que se lleva a cabo no se considera el principio de conservación de energía, ya que se enfoca al conocimiento del campo de flujo del fluido en ausencia de radiación. Por lo tanto, las ecuaciones de conservación de masa y de cantidad de movimiento gobiernan el fluido a analizar.

4.3.1 Principio de conservación de la masa

Este principio parte del hecho obvio de que la masa permanece constante durante un proceso. En la mecánica de fluidos, esta relación de conservación de la masa para un volumen diferencial de control suele llamarse *ecuación de continuidad*. Este principio se utiliza de manera implícita en un sistema cerrado, ya que la masa del sistema permanece constante durante el proceso. Sin embargo, para un volumen de control, la masa puede cruzar las fronteras, y por esto, se debe considerar la razón de masa que entra y la que sale del sistema.

Desde el punto de vista de que el fluido es un continuo, es decir, si se describe el comportamiento del mismo como macroscópico y se ignora la estructura y el movimiento de sus moléculas, podemos describir el comportamiento del fluido en términos de sus propiedades macroscópicas, como su velocidad, presión o temperatura, con sus correspondientes derivadas de espacio y tiempo. De esta manera, se considera una partícula o punto de fluido como el posible elemento de fluido más pequeño, el cual no es influenciado por otras moléculas individuales de menor tamaño. En la figura 4.2 se representa el pequeño elemento de fluido con sus respectivos lados δx , δy y δz , y su centro en la posición (x, y, z) .

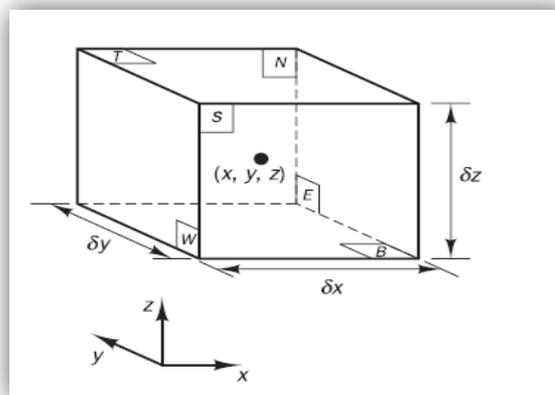


Figura 4.2: Esquema del elemento de fluido considerado como el más pequeño.

Las propiedades del fluido son funciones de espacio y tiempo, por lo que se escriben $\rho(x, y, z, t)$, $p(x, y, z, t)$, $T(x, y, z, t)$ y $\bar{v}(x, y, z, t)$, para la densidad, presión temperatura y velocidad respectivamente. Sin embargo, para evitar un exceso de notación se puede considerar implícitamente la dependencia de espacio tiempo. Por ejemplo, la velocidad en el centro (x, y, z) del elemento de fluido para un tiempo t se puede escribir solo como \bar{v} , y la derivada parcial en x de la densidad ρ en (x, y, z) y un tiempo t , puede escribirse como $\partial\rho/\partial x$. Además, las propiedades del fluido en cada cara pueden ser expresadas en función de la distancia de la cara al centro, por ejemplo, la velocidad en la cara W o E, las cuales están a una distancia $\frac{1}{2} \delta x$ con respecto al centro, puede denotarse como:

$$\bar{v} - \frac{\partial\bar{v}}{\partial x} \frac{1}{2} \delta x \quad Y \quad \bar{v} + \frac{\partial\bar{v}}{\partial x} \frac{1}{2} \delta x \quad (4.6)$$

Una vez definido el elemento de fluido, podemos expresar su balance de masa, el cual está definido por la igualdad entre la razón del incremento de masa en el elemento de fluido, y la razón neta de flujo másico que entra al mismo elemento. La razón del incremento de masa está definida por la ecuación 4.7.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \delta x \delta y \delta z) = \frac{\partial \rho}{\partial t} \delta x \delta y \delta z \quad (4.7)$$

La razón neta de flujo másico a través del elemento está dada por el producto de la densidad, el área y la velocidad normal a la superficie de la cara. Conociendo que el tensor de velocidad se denota por $\bar{v} = (v, \nu, \omega)$, la razón neta de flujo másico en el elemento queda definida como:

$$\begin{aligned} & \left(\rho v - \frac{\partial(\rho v)}{\partial x} \frac{1}{2} \delta x \right) \delta y \delta z - \left(\rho v + \frac{\partial(\rho v)}{\partial x} \frac{1}{2} \delta x \right) \delta y \delta z \\ & + \left(\rho \nu - \frac{\partial(\rho \nu)}{\partial y} \frac{1}{2} \delta y \right) \delta x \delta z - \left(\rho \nu + \frac{\partial(\rho \nu)}{\partial y} \frac{1}{2} \delta y \right) \delta x \delta z \\ & + \left(\rho \omega - \frac{\partial(\rho \omega)}{\partial z} \frac{1}{2} \delta z \right) \delta x \delta y - \left(\rho \omega + \frac{\partial(\rho \omega)}{\partial z} \frac{1}{2} \delta z \right) \delta x \delta y \end{aligned} \quad (4.8)$$

Esta razón se muestra en la figura 4.3, y se puede decir que el flujo que entra produce un incremento de masa y adquiere un signo positivo. Por otro lado los flujos

que dejan el elemento representan una disminución de la masa, adquiriendo un signo negativo.

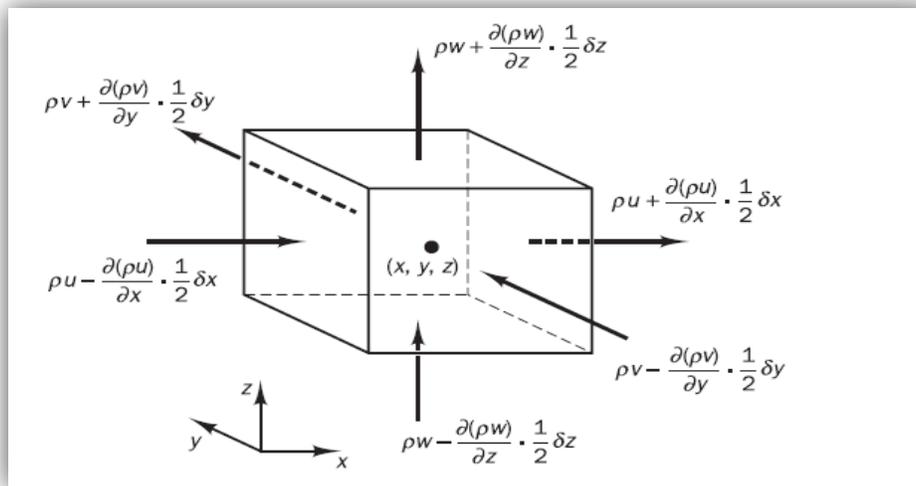


Figura 4.3: Esquema de flujo másico a través del elemento de fluido.

Igualando la ecuación 4.7 y 4.8, reacomodando todos los términos en el lado izquierdo de la ecuación y dividiendo la expresión entre el volumen del elemento $\delta x \delta y \delta z$, la ecuación de conservación de la masa queda presentada como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0 \quad (4.9)$$

Una forma más compacta de escribir la ecuación de conservación de masa se presenta en la ecuación 4.10, en donde ∇ es el operador gradiente u *operador nabla*, el cual es un operador vectorial que se define en coordenadas cartesianas por la ecuación 4.11.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{u}) = 0 \quad (4.10)$$

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) = \mathbf{i} \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{j} \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{k} \frac{\partial}{\partial z} \quad (4.11)$$

La ecuación 4.10 representa la ecuación de conservación de la masa para un fluido compresible en estado transitorio. El primer término indica la razón de cambio de la densidad en el tiempo, el segundo término describe el flujo másico neto a través de las fronteras del elemento, y también se le conoce como *término convectivo*. La misma ecuación, pero ahora para un fluido incompresible entonces se expresa en la ecuación 4.12, en donde la densidad es constante.

$$\boxed{\nabla \cdot \vec{v} = 0} \quad (4.12)$$

4.3.2 Principio de conservación de la cantidad de movimiento

Como se mencionó al comienzo de este apartado, el principio parte de la segunda ley de Newton, la cual nos dice que la razón de cambio del momento lineal de una partícula de fluido equivale a la suma de las fuerzas que actúan en la partícula. La razón de cambio del momento en una partícula de fluido en sus tres dimensiones (momento en x, y, z) por unidad de volumen se define como:

$$\rho \frac{Dv}{Dt} \quad \rho \frac{Dv}{Dt} \quad \rho \frac{D\omega}{Dt} \quad (4.13)$$

En una partícula de fluido actúan dos tipos de fuerzas:

- *Fuerzas de cuerpo o volumen.* Estas no dependen de la forma o superficie, son de largo alcance y actúan sobre el cuerpo como un todo. La fuerza de gravedad, centrífuga, de Coriolis y electromagnética son ejemplos de este tipo de fuerzas.
- *Fuerzas de superficie o de contacto.* Estas fuerzas son de corto alcance, dependen de la superficie y tienen un origen molecular. Como ejemplo de estas fuerzas tenemos a las fuerzas de fricción o viscosidad (tipo cortante) y las fuerzas de presión.

El elemento de fluido se somete a dos tipos de esfuerzos, la presión p y el esfuerzo cortante producido por la viscosidad τ . Las componentes del esfuerzo producido por la viscosidad en el elemento de fluido se presentan en la figura 4.4.

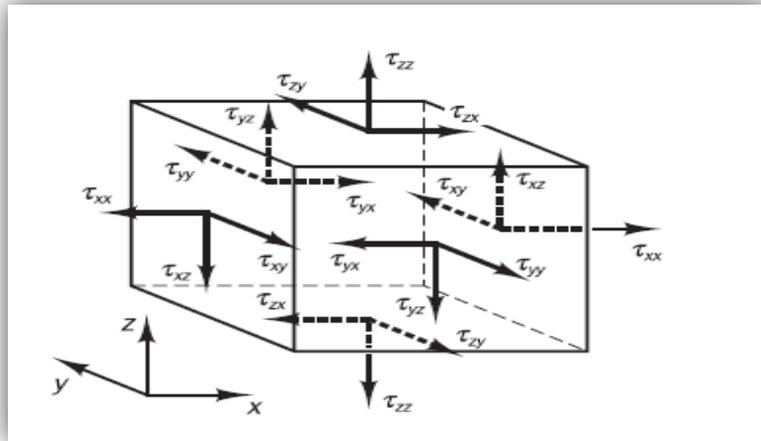


Figura 4.4: Esquema de las componentes del esfuerzo de viscosidad que actúan en el elemento de fluido. El sufijo τ_{ij} indica que la componente actúa en la dirección j , desde una dirección i normal a la superficie.

Podemos considerar primero las componentes en x de las fuerzas producidas por la presión p y las componentes del esfuerzo viscoso τ_{xx} , τ_{yx} y τ_{zx} . La magnitud de dicha fuerza resulta del producto del esfuerzo por el área. Por lo tanto la fuerza neta en la dirección x es la suma de las componentes de fuerza que actúan en esa dirección, en las superficies del elemento de fluido. La figura 4.5 presenta un esquema de las componentes de fuerza que actúan en la dirección x en el elemento. Se utiliza un signo positivo para las fuerzas que actúan en la misma dirección del eje del sistema de coordenadas, y un signo negativo, a aquellas alineadas en la dirección opuesta.

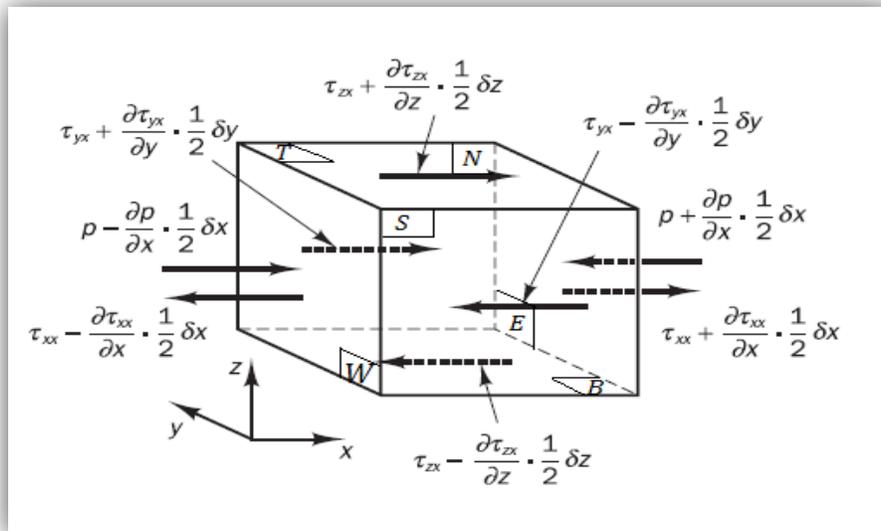


Figura 4.5: Esquema de componentes de fuerza que actúan en la dirección x del elemento de fluido.

Las fuerzas netas para los pares de caras (E, W) , (N, S) y (T, B) , se presentan en las ecuaciones 4.14, 4.15, y 4.16 respectivamente.

$$\left[\left(p - \frac{\partial p}{\partial x} \frac{1}{2} \delta x \right) - \left(\tau_{xx} - \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} \frac{1}{2} \delta x \right) \right] \delta y \delta z + \left[- \left(p - \frac{\partial p}{\partial x} \frac{1}{2} \delta x \right) + \left(\tau_{xx} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} \frac{1}{2} \delta x \right) \right] \delta y \delta z = \left(- \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} \right) \delta x \delta y \delta z \quad (4.14)$$

$$- \left(\tau_{yx} - \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} \frac{1}{2} \delta y \right) \delta x \delta z + \left(\tau_{yx} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} \frac{1}{2} \delta y \right) \delta x \delta z = \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} \delta x \delta y \delta z \quad (4.15)$$

$$- \left(\tau_{zx} - \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \frac{1}{2} \delta z \right) \delta x \delta y + \left(\tau_{zx} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \frac{1}{2} \delta z \right) \delta x \delta y = \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \delta x \delta y \delta z \quad (4.16)$$

Si ahora sumamos las ecuaciones 4.14, 4.15 y 4.16, y las dividimos entre el volumen $\delta x \delta y \delta z$, obtenemos la ecuación 4.17, la cual representa la fuerza total por unidad de volumen para la componente en x del fluido.

$$\frac{\partial(-p+\tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \quad (4.17)$$

Ahora debemos considerar las fuerzas de superficie, de origen molecular, que afectan al elemento de fluido. Éstas pueden representarse definiendo una fuente S_{Mx} de momento en x por unidad de volumen y por unidad de tiempo. Finalmente, siguiendo el mismo procedimiento para las componentes en y y z de la fuerza, las componentes en x , y y z de la ecuación de la cantidad de movimiento para un elemento de fluido en tres dimensiones quedan definidas por las ecuaciones 4.18, 4.19 y 4.20 respectivamente.

$$\text{-Componente en } x \quad \rho \frac{Dv}{Dt} = \frac{\partial(-p+\tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + S_{Mx} \quad (4.18)$$

$$\text{-Componente en } y \quad \rho \frac{Dv}{Dt} = \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial(-p+\tau_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} + S_{My} \quad (4.19)$$

$$\text{-Componente en } z \quad \rho \frac{D\omega}{Dt} = \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial(-p+\tau_{zz})}{\partial z} + S_{Mz} \quad (4.20)$$

4.3.3 Velocidad promedio

La condición de no deslizamiento en las paredes de cualquier superficie, como las de un tubo, hace que la velocidad nunca sea uniforme a lo largo de cualquier sección transversal del mismo. Es decir, la velocidad varía desde cero en las paredes, hasta alcanzar un valor máximo en la línea central del tubo, o en un punto cercano a ésta. La *velocidad promedio* V_{prom} es el valor promedio de V_n a lo largo de toda la sección transversal de un tubo. V_n representa la velocidad del flujo normal a un pequeño elemento de área δA_c por el que fluye un fluido. La velocidad promedio se denota por la ecuación 4.21, en donde A_c es el área de la sección transversal normal a la dirección de flujo.

$$V_{prom} = \frac{1}{A_c} \int V_n dA_c \quad (4.21)$$

4.4 Métodos de solución numérica

La finalidad de este análisis es conocer las distribuciones de los campos de flujo y de velocidad de los gases inyectados al reactor de gasificación, para esto se utilizará un paquete de dinámica de fluidos computacional. Sin embargo, el conocer el funcionamiento del software, no es una tarea que pueda pasarse por alto, ya que depende del conocimiento del método numérico que rige al mismo, el que se realice una correcta simulación y se obtengan resultados confiables.

Para comenzar el estudio numérico, es importante mencionar que las ecuaciones que gobiernan el comportamiento de un fluido descritas anteriormente, no tienen una solución analítica. Esto se debe a que las ecuaciones de conservación de cantidad de movimiento contienen términos parciales que *no son lineales*. Además, al no contar con una ecuación que describa el comportamiento de la presión, los gradientes de ésta son desconocidos. Es por ello que se recurre a metodologías numéricas apropiadas para solucionar estas ecuaciones. Un método numérico es una herramienta útil para obtener una solución aproximada de la solución real.

4.4.1 Métodos de discretización

La solución de una ecuación por métodos numéricos, consiste en la asignación de un conjunto de números, a partir de los cuales, la variable dependiente puede ser construida. El método numérico considera los valores desconocidos de la variable dependiente en un número finito de posiciones, también denominados puntos de malla, por todo el cálculo. De esta manera, se obtienen un conjunto de ecuaciones

algebraicas para todos los valores desconocidos, y al mismo tiempo un algoritmo de solución.

El término de discretización entra en juego cuando se define una malla numérica y se representa la distribución de la variable dependiente en los elementos de ella, ya que se reemplaza la información de la ecuación diferencial por valores discretos. Se dice entonces que la distribución de la variable se ha “discretizado”. Las ecuaciones generadas se derivan de la ecuación diferencial gobernante, por lo tanto expresan la misma información física. Es común utilizar perfiles locales de la variable, esto es, para un segmento dado, se describe la variación de la variable para una región determinada. De esta manera, en un análisis de flujo es común considerar perfiles separados que representan subdominios del cálculo.

Los métodos de discretización pueden ser distintos, ya que la discretización de una ecuación diferencial parcial puede realizarse de muchas formas. Los tres principales métodos son, el de diferencias finitas, elemento finito y volumen finito. Cada método debe generar la misma solución, esto se logra si la malla es muy fina, sin embargo algunos métodos son más efectivos para ciertos tipos de problemas. A continuación se explica cada uno, pero se hace énfasis en el método de volumen finito, ya que éste es el más adecuado para realizar nuestro estudio de flujo, además de que es el método que rige el software empleado.

-Método de diferencias finitas (MDF).

Este método parte de la ecuación de conservación en su forma diferencial. Se define una malla que cubra el dominio de solución, y se reemplazan las derivadas parciales mediante aproximaciones en cada punto (nodo) de la malla, de esta manera se aproxima la ecuación diferencial. La aproximación se hace mediante un truncamiento de las series de Taylor. Como resultado se obtiene una ecuación algebraica de la variable dependiente para cada nodo de la malla, y el valor de la variable en éste y en los nodos vecinos se vuelve incógnita. Este método es el más utilizado cuando se cuenta con una geometría sencilla. Sin embargo, una gran desventaja es que puede no cumplirse la conservación de masa si no se le da un tratamiento especial.

-Método de elemento finito (MEF).

El MEF parte de los fundamentos del cálculo variacional, el cual a grandes rasgos nos dice que resolver cierta ecuación diferencial es equivalente a minimizar una cantidad relacionada con la ecuación, esta cantidad es denominada “funcional”. Por lo

tanto, al minimizar el funcional con respecto a los valores de los puntos de la malla de la variable dependiente, se obtienen como resultado condiciones que generan la discretización de las ecuaciones requeridas. Este método tiene una gran complejidad algebraica, y su aplicación en la solución de flujo de fluidos y transferencia de calor es muy limitada, ya que no existe un principio variacional para todas las ecuaciones diferenciales requeridas.

-Método de volumen finito (MVF).

Este método parte de la forma integral de las ecuaciones de conservación y consiste en subdividir al dominio de la solución en un número finito de volúmenes de control (VC), ordenados consecutivamente y sin traslaparse, mediante una malla. A diferencia del método de diferencias finitas (MDF), la malla en el MVF define las fronteras de los volúmenes de control y no los nodos. Para cada VC se aplican las ecuaciones de conservación, y el valor de la variable se posiciona en un nodo al centro del VC. Posteriormente, utilizando fórmulas de cuadratura, se aproximan las integrales de superficie y de volumen. Finalmente se obtiene una ecuación algebraica para cada volumen de control y un número de valores nodales vecinos (Gargantúa-Sánchez, 2006).

El proceso numérico empleado por este método puede simplificarse en los siguientes pasos:

- *Definir y generar una malla numérica.* En la cual se lleva a cabo una integración de las ecuaciones que gobiernan al fluido para cada volumen de control del dominio de solución.
- *Discretización de las ecuaciones.* Como en el método de diferencias finitas, se realiza un método de aproximación para los términos en la ecuación integrada que representan convección, difusión y fuentes. De esta manera se obtienen un conjunto de ecuaciones algebraicas.
- *Solución de ecuaciones algebraicas mediante iteraciones.*

El método presenta una gran ventaja sobre los otros métodos, sobre todo por el proceso de integración de cada volumen de control. Esta integración considera una conservación de masa, cantidad de movimiento y de energía para cada VC y por ende de todo el dominio de solución. El MVF puede ser utilizado en geometrías simples y complejas, y para mallas uniformes y no-uniformes, debido a que la malla define únicamente las fronteras de los volúmenes de control. Muchos paquetes comerciales de CDF (Dinámica de Fluidos Computacional) utilizan el MVF, y dentro de ellos,

FLUENT, software utilizado para llevar a cabo las simulaciones numéricas de este trabajo.

4.4.2 Convergencia

La solución del sistema de ecuaciones algebraicas que se aproxima a la ecuación gobernante, es “convergente” si la solución aproximada tiende a la solución exacta de las ecuaciones diferenciales parciales para cada variable independiente, conforme el espaciamiento de malla tiende a cero (Gargantúa-Sánchez, 2006).

Es común que en problemas no lineales, se verifique la convergencia mediante numerosos experimentos numéricos, esto es, repetir el cálculo sobre una serie de mallas refinadas. A este análisis se le denomina “*estudio de independencia de malla*”. Lo que este estudio busca es demostrar, que el fenómeno de flujo estudiado no depende de las características de la malla para generar su solución. Dado el caso que el método sea estable, y que las aproximaciones sean consistentes en el método de discretización, entonces puede decirse que la solución si converge a una solución independiente de la malla. Dicho de otra manera, un método numérico es consistente cuando se demuestra que el sistema de ecuaciones algebraicas es equivalente a las ecuaciones gobernantes originales.

Otra característica de convergencia del método numérico, es que éste cumpla con las leyes de conservación. Esto quiere decir que la cantidad de una determinada propiedad que deja un volumen de control, es igual a la cantidad que entra a ese mismo VC, o sea que se conserva.

4.4.3 Ecuación de convección- difusión

En los problemas donde interviene el flujo de un fluido, se deben tomar en cuenta los efectos de la convección. Además, en la naturaleza un fenómeno de convección siempre va acompañado por otro de difusión, debido a esto es necesario utilizar métodos capaces de predecir el comportamiento combinado de convección y difusión.

Cada ecuación diferencial que describe un proceso posee una cantidad física como su variable dependiente, generalmente propiedades específicas, como la cantidad de masa, componentes de velocidad y entalpía específica involucradas en los principios de conservación de masa, cantidad de movimiento y energía, respectivamente. Al denotar la variable dependiente por ϕ , las ecuaciones diferenciales parciales contenidas en las ecuaciones gobernantes se pueden representar por la *ecuación de convección-difusión o ecuación generalizada* (ec.4.22). Esta ecuación permite derivar todas las ecuaciones diferenciales presentes en los principios de conservación y por ende, es fundamental en el método de volumen finito.

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \phi) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) + S \quad (4.22)$$

En donde, el subíndice i representa los tres espacios coordenados, Γ es el coeficiente de difusión y S el término fuente. Además, el primer término a la izquierda de la ecuación es denominado *término transitorio*, el cual representa la rapidez de acumulación de la variable dependiente en el volumen de control. El segundo término indica los cambios por convección, el cual hace referencia al flujo neto de la variable dependiente en el VC. A la derecha de la ecuación se encuentra el término debido a la difusión y el término fuente, respectivamente. En el término fuente se engloban los términos que no se pueden incluir en los anteriores.

El método de volumen finito tiene como finalidad integrar la ecuación generalizada en el volumen de control, sin embargo es necesario conocer los valores de las variables dependientes en cada frontera o cara del VC, para así poder determinar el flujo total y los coeficientes necesarios para la solución. El método para conocer las variables en las caras del volumen de control es muy importante, ya que la convergencia y exactitud de la solución dependen de él. Estos métodos se denominan “de aproximación” y pueden ser de bajo o alto orden. En este estudio se utilizan velocidades de flujo pequeños, por lo que se utilizan esquemas de bajo orden.

4.4.4 Esquemas de aproximación de bajo orden

Un esquema de aproximación de bajo orden relaciona directamente los valores de las caras de los volúmenes de control con los puntos nodales más cercanos, para simplificar su formulación. Éstos utilizan uno o dos puntos nodales para la aproximación. Los esquemas más utilizados son los siguientes:

- Esquema de diferenciación central (Central Differencing Scheme). Este esquema considera un promedio de los dos valores nodales más cercanos a las fronteras del VC. Este esquema es el más adecuado para aproximar los términos difusivos en la ecuación generalizada, sin embargo la aproximación de los términos convectivos es escueta, debido a su incapacidad para identificar la dirección de flujo (Versteeg & Malalasekera, 2007).
- Esquema de diferenciación hacia adelante (Upwind Differencing Scheme). También llamado de celda donante, este método corrige los problemas que presenta el esquema de diferenciación central para identificar la dirección de flujo. Lo que hace es aproximar el valor de la variable en la frontera del volumen de control con el valor nodal inmediato a esta frontera, de acuerdo al sentido de la velocidad. Para el funcionamiento óptimo de este esquema es necesario

emplear una malla muy fina. Además, es adecuado para problemas de convección-difusión, sin embargo si la velocidad del flujo no es paralela a las líneas de malla, se producen resultados erróneos (Montiel-González, 2013.).

- Esquema de diferenciación híbrido (Hybrid Differencing Scheme). Este esquema posee las ventajas del esquema de diferenciación central y del esquema de diferenciación hacia adelante, es decir para convecciones altas emplea las características del primero y para convecciones bajas utiliza las del segundo.
- Esquema exponencial (Exponential Scheme). En este método se consideran las propiedades como constantes y en estado estacionario, basándose en una solución unidimensional. Se generan buenos resultados para problemas unidimensionales, sin embargo se requiere un gran tiempo de cómputo, por lo que para problemas de dos o más dimensiones no es recomendado.
- Esquema de Ley de Potencia (Power Law Scheme). Este esquema fue desarrollado por (Patankar, 1980) y modifica al esquema híbrido con base al esquema exponencial. Tiene mejoras en la convergencia con respecto al esquema exponencial, por lo que es muy conveniente su uso para problemas de convección-difusión.

4.4.5 Métodos de acople Presión-Velocidad

Como se mencionó al inicio del apartado de métodos de solución numérica, las ecuaciones de cantidad de movimiento que gobiernan el flujo de un fluido (ec. 4.18, 4.19 y 4.20), contienen términos inerciales que no son lineales, estos términos podrían resolverse mediante iteraciones a partir de la suposición de un campo de velocidad y de la temperatura, llegando a una convergencia para las componentes de velocidad y temperatura. Sin embargo, los gradientes de presión, que representan las fuerzas que hacen posible el flujo del fluido, también forman parte de la ecuación de conservación de cantidad de movimiento y son desconocidos. Los métodos de solución también tienen como objetivo calcular la variación de presión.

El campo de presión está indirectamente presente en la ecuación de conservación de la masa (ec. 4.9 o 4.10), es decir, si el *gradiente de presión* es correcto, al sustituirse en las ecuaciones de movimiento, el campo de velocidad que resulta debe satisfacer la ecuación de continuidad. Por lo tanto se dice que hay un acople entre ambas ecuaciones. A continuación, se presentan tres métodos comúnmente utilizados:

- Algoritmo SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations). El método semi-implícito para ecuaciones acopladas a la presión, desarrollado por Patankar y Spalding en 1972, es un procedimiento de prueba y error para el

cálculo de la presión en una malla definida. Éste inicia mediante la suposición de un primer campo de presión para discretizar las componentes de velocidad por medio de iteraciones. En un paso posterior se realiza la corrección del campo de presión y de las velocidades obtenidas. Si la solución converge, el algoritmo se detiene, en caso contrario, se supone otro campo de presión para realizar el cálculo. Este método es muy implementado en muchas aplicaciones CFD, debido al conveniente trabajo de cómputo que se requiere para converger, sin embargo la suposición de una presión genera resultados correctos al corregir las componentes de la velocidad, pero no es muy efectiva para la corrección de la presión.

- Algoritmo SIMPLEC (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations Consistent). El método semi-implícito consistente para ecuaciones acopladas con la presión, propuesto por Van Doormaal y Raithby en 1984, varía del algoritmo SIMPLE solo en la forma de manipular las ecuaciones de cantidad de movimiento, debido a que las ecuaciones de corrección de velocidad omiten términos considerados en SIMPLE y que no son significativos. Este método posee grandes ventajas de convergencia para problemas complejos, sin embargo el número de iteraciones pueden ser hasta 30% más que en el método SIMPLE, y su convergencia depende en gran medida de las condiciones del flujo estudiado.
- Algoritmo PISO (Pressure Implicit with Splitting of Operators). El acrónimo PISO significa Presión-Implícita con División de Operadores. Este algoritmo posee un paso de predicción y dos más para la corrección, por este motivo se puede considerar como una extensión del método SIMPLE con una operación extra correctora como mejora. Debido a que la ecuación de corrección de presión se resuelve dos veces, PISO requiere un almacenamiento adicional y por ende mayor esfuerzo de cómputo. A pesar del incremento del esfuerzo computacional, ha demostrado ser muy eficiente y rápido en diversos casos, como por ejemplo en diversos flujos en estado estacionario y en flujos laminares, en donde se reduce en un factor de dos el tiempo de cómputo en comparación con el método SIMPLE.

4.5 Fenómeno de Turbulencia

La gran mayoría de los flujos estudiados en ingeniería son turbulentos, por lo que el especialista en fluidos debe conocer tanto el conocimiento teórico del fenómeno, como las herramientas capaces de representar al mismo, como por ejemplo por medio de la dinámica de fluidos computacional (CFD). Los flujos utilizados en este estudio se

encuentran dentro del régimen turbulento, lo cual nos lleva a explicar el fenómeno de turbulencia. Este fenómeno es un tópico muy complejo, por lo que no se pretende realizar una descripción completa del mismo, sino de mencionar algunos aspectos de ella en aplicaciones de ingeniería.

Para comenzar la descripción de un flujo turbulento, debemos partir por el *número de Reynolds*, cuya fórmula se presenta más adelante y es una medida de la importancia relativa de las fuerzas inerciales (ocasionadas por los efectos convectivos) y las fuerzas viscosas. Se ha observado que flujos con valores por debajo del denominado número de Reynolds Crítico Re_{crit} , poseen comportamiento suave, en el que las capas adyacentes del fluido se deslizan una sobre otra ordenadamente. Si las condiciones iniciales no cambian con el tiempo, el flujo es estacionario y el régimen es denominado **laminar**. A manera que el número de Reynolds aumenta, se desarrolla un estado de movimiento caótico y aleatorio, en el cual la velocidad y la presión cambian continuamente en las diferentes regiones del flujo. El movimiento se vuelve intrínsecamente transitorio, aún cuando se imponen condiciones iniciales constantes. A este régimen se le nombra “**turbulento**”.

La gran mayoría de los flujos en ingeniería son turbulentos, y por ende el estudio del movimiento, sea cual sea su régimen y para aplicaciones generales, se debe considerar como turbulento. El fenómeno de turbulencia en problemas de ingeniería es altamente dependiente de la geometría de los límites sólidos. Cabe mencionar que éste fenómeno ha sido llamado el “mayor problema no resuelto de la física clásica”, debido a su complejidad de descripción.

4.5.1 Propiedades de la turbulencia

La turbulencia es un estado de movimiento del fluido gobernado por las leyes de Newton, de las cuales se derivan las ecuaciones de Navier-Stokes, como consecuencia de la fricción intermolecular (Gargantúa-Sánchez, 2006). Algunas de las propiedades que definen a la turbulencia son:

- Inestabilidad y no linealidad. Al analizar las ecuaciones de Navier-Stokes, se ha determinado a la turbulencia como una inestabilidad de flujo con régimen laminar. Aunado a esto, la no linealidad de las ecuaciones, hace que una solución analítica del estado de transición y del completamente turbulento sea imposible.
- Aspectos estadísticos. La turbulencia es completamente dependiente del tiempo, por lo que contribuye a su complejidad. Además, debido a su carácter aleatorio, se requiere el uso de métodos numéricos estadísticos para su análisis.

- Fenómeno continuo. Las ecuaciones de continuidad y de Navier-Stokes son tridimensionales y dependientes del tiempo, debido a esto, poseen toda la física de un determinado flujo turbulento.
- Alargamiento de vórtices. Es el principal mecanismo de transferencia de energía, y se da desde los remolinos más grandes, hasta los más pequeños. Esta propiedad de alargamiento de vórtices no se presenta en flujos bidimensionales, ya que la vorticidad es por sí misma tridimensional. Por lo tanto, *no hay aproximaciones bidimensionales del todo correctas* para la determinación de los detalles finos del régimen turbulento.
- Escalas de turbulencia y la cascada de energía. El fenómeno de turbulencia es un espectro continuo de escalas, formado por escalas pequeñas y grandes. Éste espectro puede visualizarse en los remolinos, es decir, un remolino puede pensarse como un movimiento arremolinante local, cuya dimensión es la escala de turbulencia local. Por otro lado, cuando la turbulencia decae, la energía cinética se transfiere desde los remolinos más grandes hasta los más pequeños, en los cuales se disipa esa energía como calor, a través de la viscosidad molecular. Este proceso se denomina como **cascada de energía**.
- Alta difusividad. Desde el punto de vista ingenieril, esta propiedad puede ser la más importante, ya que su alta difusividad mejora la transferencia de masa, momento y energía.

4.5.2 Modelado de la turbulencia

Como se mencionó anteriormente, la turbulencia posee propiedades que hacen imposible su solución analítica, como su propiedad inherente de no linealidad o su carácter aleatorio. Por estas razones se han desarrollado modelos matemáticos y conceptos físicos que describan sus leyes de movimiento. A continuación se presentan tres métodos de aproximación en la modelación de turbulencia. Se ordenan según el cálculo de movimientos turbulentos, lo cual quiere decir, que a un menor número de ecuaciones de aproximación, el método es más exacto. Sin embargo el tiempo de cálculo aumenta considerablemente. Se puede decir que los modelos de turbulencia se consideran como aproximaciones y no como leyes científicas.

- Simulación numérica directa (DNS). Es la aproximación más exacta, ya que se resuelven las ecuaciones de Navier-Stokes sin otra aproximación más que las discretizaciones numéricas, cuyos errores pueden estimarse y controlarse. La

simulación debe capturar toda la disipación de energía cinética, ésta ocurre a escala de la viscosidad molecular, por lo tanto la malla debe ser muy fina. La DNS brinda resultados demasiado detallados del flujo, incluso más de los que un ingeniero puede requerir, además es demasiado costosa para emplearse con frecuencia. Por estas razones, la DNS se considera solamente como una herramienta de investigación y no de diseño.

- Simulación de remolinos grandes (LES, Large-Eddy Simulation). Como se mencionó anteriormente, los remolinos grandes dentro de un flujo turbulento, contienen generalmente más energía cinética que los remolinos de escalas más pequeñas (fig. 4.6). Puede decirse que su tamaño y fuerza los hacen los transportes más efectivos de las propiedades conservativas. Una LES le da un mejor tratamiento a los remolinos grandes que a los pequeños. Además, estas simulaciones son tridimensionales, dependientes del tiempo y computacionalmente caras, aunque menos costosas que la DNS. Se puede concluir que una simulación LES es la mejor opción para cuando se estudia un flujo con un número de Reynolds muy alto, o cuando se tiene una geometría muy compleja.

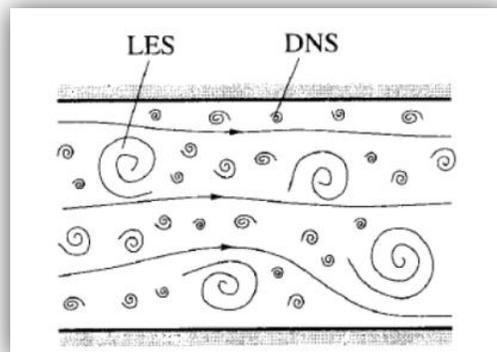


Figura 4.6: Esquema representativo del movimiento turbulento.

- Ecuaciones de Navier-Stokes promediadas de Reynolds (RANS). Propuesta por Reynolds en 1985, es la aproximación que proporciona información acerca de las *propiedades promediadas* en el tiempo de un flujo, es decir, velocidades, presiones o esfuerzos medios. Por lo tanto, RANS es el método de aproximación más utilizado en ingeniería, ya que los anteriores brindan más información de la necesaria cuando se trata de flujos no tan complejos.

En este método, todas las inestabilidades se consideran como parte de la turbulencia y se promedian. Es aquí en donde la no-linealidad de las ecuaciones

de Navier-Stokes da origen a términos que se deben modelar mediante los modelos clásicos de turbulencia, entre los más conocidos son el modelo κ - ϵ y el modelo de Esfuerzos de Reynolds. Finalmente se tiene gran complejidad en la turbulencia, que hace improbable que un modelo RANS funcione para todos los tipos de flujos. Sin embargo, si las aproximaciones de RANS funcionan, no hay razón para utilizar LES o DNS, además los recursos de cómputo requeridos para obtener cálculos precisos son modestos.

Para poder calcular el flujo turbulento con las ecuaciones RANS, es necesario implementar los *modelos de turbulencia*. Los modelos de turbulencia RANS más utilizados se clasifican de acuerdo al número de ecuaciones de transporte adicionales, las cuales se resuelven al mismo tiempo que las ecuaciones de flujo RANS. Éstos se presentan en la tabla 4.1:

Tabla 4.1: Modelos de turbulencia RANS.

No. de ecuaciones de transporte extras.	Nombre
Cero	Modelo de longitud de mezcla
Una	Modelo Spalart - Allmaras
Dos	κ - ϵ
	κ - ω
	Modelo de esfuerzo algebraico
Siete	Modelo de Esfuerzos de Reynolds

En el análisis de flujo de este trabajo, se utilizan solo dos modelos de turbulencia RANS, el método κ - ϵ y el modelo de Esfuerzos de Reynolds, los cuales se describen a continuación:

-Modelo κ - ϵ . Es el modelo más ampliamente usado y validado en la industria. En este modelo se resuelven dos ecuaciones de transporte, una para la energía cinética de turbulencia κ y otra para la razón de disipación de la misma ϵ . Se pueden mencionar algunas ventajas y desventajas del método.

- *Ventajas*
 - Es el método de turbulencia más simple, en el cual solo se requiere ingresar las condiciones iniciales.
 - Tiene un excelente desempeño en numerosos flujos industriales relevantes.
 - Muy bien establecido y ampliamente validado.
- *Desventajas*
 - Desempeño pobre en diversos casos importantes como en algunos flujos libres, flujos con esfuerzos grandes (flujos con remolinos) y también algunos flujos rotativos.

-Modelo de esfuerzo de Reynolds (RSM). Éste es el modelo de turbulencia clásico más complejo, en el cual se resuelven las seis ecuaciones de transporte de esfuerzos de Reynolds a la par de la ecuación de razón de disipación ε .

- *Ventajas*
 - Es el modelo más general de todos los modelos de turbulencia clásicos.
 - Solo se requiere de las condiciones iniciales para realizar el cálculo.
 - Cálculo preciso para las propiedades promedio del flujo, así como también para todos los esfuerzos de Reynolds en flujos simples y complejos.

- *Desventajas*
 - Tiempos de cómputo muy largos (7 ecuaciones).
 - No está tan bien validado como el modelo κ - ε .
 - Su desempeño es igual de pobre que el modelo κ - ε para ciertos flujos libres y con recirculación, debido al modelado de la ecuación de ε .

Como se mencionó con anterioridad, los modelos de turbulencia son aproximaciones, y se deben considerar diferentes criterios para determinar que un modelo sea el adecuado. El modelo debe tener una complejidad mínima, esto se refiere a que con el mínimo número de ecuaciones pueda arrojar resultados suficientemente aceptables y reales. Además, el modelo debe brindar una convergencia estable y la capacidad de aplicarse a una gran variedad de flujos.

4.6 Dinámica de fluidos computacional (CFD)

La dinámica de fluidos computacional es una de las ramas de la mecánica de fluidos que usa métodos numéricos y algoritmos para estudiar y analizar problemas que involucran el flujo de un fluido, transferencia de calor o algún otro fenómeno como una reacción química, mediante una simulación computacional. Es una técnica muy poderosa y abarca un amplio rango de aplicaciones industriales o con fines de investigación. La herramienta CFD proporciona información cualitativa y cuantitativa de la predicción de flujo de un fluido por medio de la solución de las ecuaciones gobernantes utilizando los métodos numéricos mencionados anteriormente.

4.6.1 Metodología

La simulación computacional se compone por tres etapas, la etapa de *preprocesamiento*, que es donde se genera la geometría, el enmallado y se configuran los parámetros de la simulación. Después le sigue la etapa de *procesamiento*, que es donde se resuelven numéricamente las ecuaciones gobernantes del flujo. Finalmente,

en la etapa de *postprocesamiento*, se lleva a cabo una visualización y análisis de los resultados.

En la etapa de *preprocesamiento*, se realiza una modelación geométrica del dominio del fluido del que se obtendrá información. Para esto se utilizan diferentes herramientas CAD, como Solid Works o Autodesk Inventor, que son softwares populares en el mercado para realizar esta modelación. Una vez que se tiene el dominio computacional, se realiza una división espacial por medio de celdas, formando una malla. Las mallas pueden ser regulares, cuando se definen por medio de celdas en forma de triángulos (2D) o en forma de tetraedros (3D), o también pueden ser irregulares, utilizando celdas cuadradas (2D) o en forma de hexaedros (3D). En cada uno de estos volúmenes se llevará a cabo el cálculo de las diferentes propiedades físicas del fluido, como la temperatura, velocidad o presión. Cabe mencionar que a mayor número de elementos, se requiere una mayor capacidad computacional.

Una vez que se divide el dominio en celdas, se procede a realizar la configuración de los parámetros de la simulación, esto es, a establecer los materiales, ingresar las condiciones de frontera, seleccionar el modelo de análisis, el método de acople o de aproximación, etc.

La etapa de *procesamiento* es llevada a cabo por el equipo de cómputo, ya que éste procede a la solución de las ecuaciones por medio de los métodos numéricos elegidos en la etapa previa. Los tiempos de cómputo dependen del número de elementos definidos en el dominio del fluido, así como de la configuración seleccionada para la simulación, y como es evidente, de las especificaciones del equipo.

Para finalizar, en la etapa de *postprocesamiento* se realiza una interpretación de los resultados, se verifica la convergencia y se obtienen conclusiones. Generalmente, se llevan a cabo varias simulaciones extras para tener una mejor aproximación del fenómeno real.

4.6.2 Criterios de convergencia en software CFD

Un *residual* representa una medida de cercanía de una solución intermedia a la solución verdadera en una secuencia de iteración. De esta manera se mide la conservación global de las propiedades del flujo. Por lo tanto es un indicador útil de convergencia iterativa para un determinado problema (Versteeg & Malalasekera, 2007).

No hay un método universal para inducir la convergencia. Basarse en los residuales puede ser útil para una clase de problemas, pero un método engañoso para otros. Por lo tanto es una buena idea examinar los niveles de los residuales, pero también monitorear cantidades relevantes y revisar los balances de masa y energía.

Los tres métodos para revisar convergencia en CFD son:

- Monitoreo de residuales. La convergencia ocurre cuando el criterio de convergencia se alcanza para cada variable. El criterio es que cada residual se reducirá a un valor menor que 10^{-3} , excepto para la energía, para la cual el criterio es 10^{-6} (fig. 4.7).

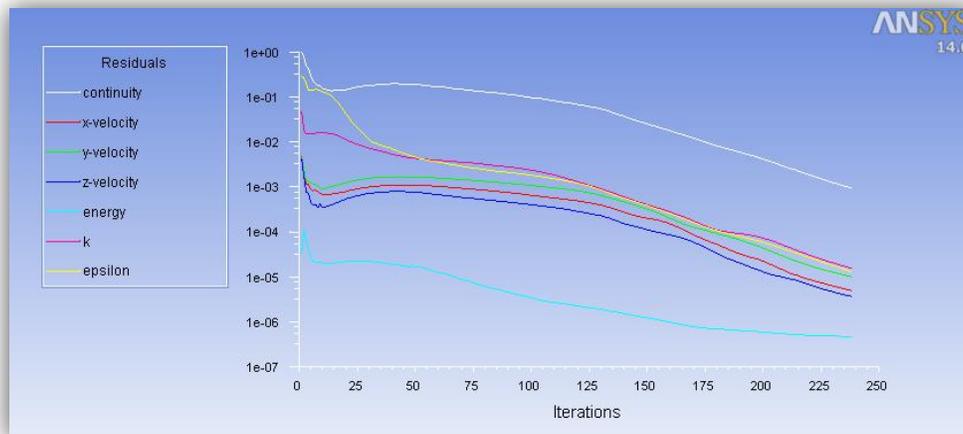


Figura 4.7: Monitor de residuales en un proceso iterativo realizado en software CFD.

- La solución ya no cambia con más iteraciones. En el caso que las residuales no se reduzcan a los valores definidos en el criterio anterior. Se deben monitorear las variables representativas del flujo hasta que las iteraciones no muestren cambios. Esto puede ser considerado como convergencia (fig. 4.8).

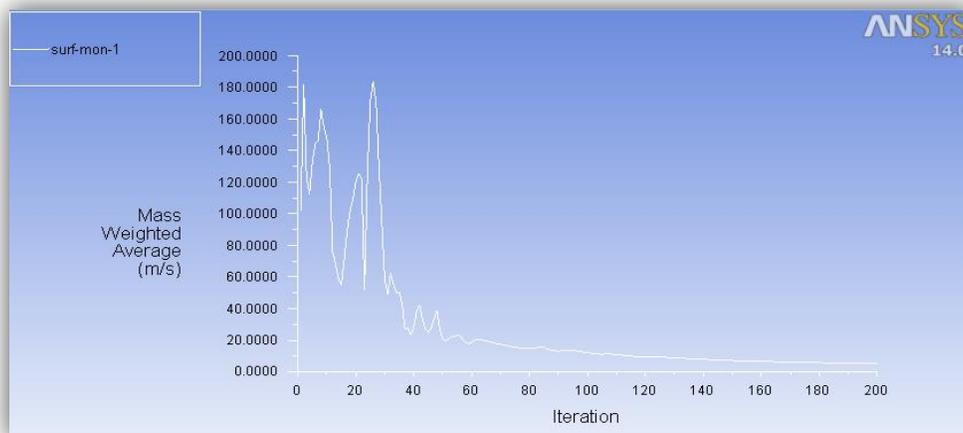


Figura 4.8: Monitor de flujo másico promedio en un proceso iterativo realizado en software CFD.

- La conservación de masa, momento, energía se cumplen. Se debe revisar la masa total, momento, energía y sus balances en “reportes de flujo”. El desbalance neto debe ser menor al 0.2% del flujo neto en el sistema (fig. 4.9).

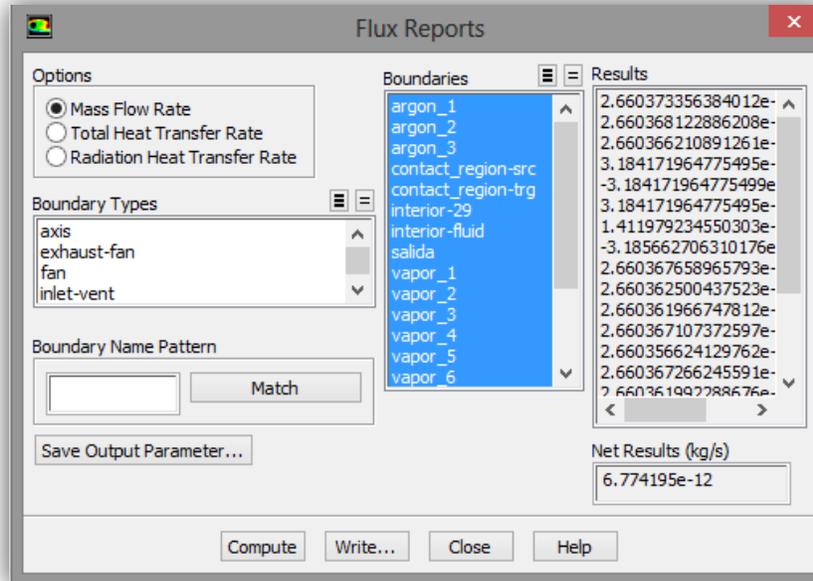


Figura 4.9: Reporte de flujo másico con un desbalance menor al 0.2% realizado FLUENT ANSYS 14.0.

4.6.3 Visualización del flujo

El estudio cuantitativo del movimiento de un fluido requiere de un análisis matemático avanzado, pero también de un adecuado examen visual de las características del flujo. La mente procesa rápidamente una cantidad increíble de información visual, lo cual nos lleva a simular alguna forma de visualización de flujo de los resultados. Tres tipos de gráficas de flujo utilizadas comúnmente son:

- Gráficas de perfiles. Son las más fáciles de entender, ya que indican la variación de una propiedad escalar a lo largo de una dirección deseada en el campo de flujo. Estas gráficas representan cómo una variable x varía en función de una segunda variable y . Generalmente se utilizan para la visualización de perfiles de velocidad, y como ésta es una cantidad vectorial, se grafica la magnitud del vector en función de una distancia en alguna dirección deseada. La figura 4.10 muestra la gráfica de perfil de la magnitud de velocidad en la sección de salida de un codo mezclador en función de la posición.

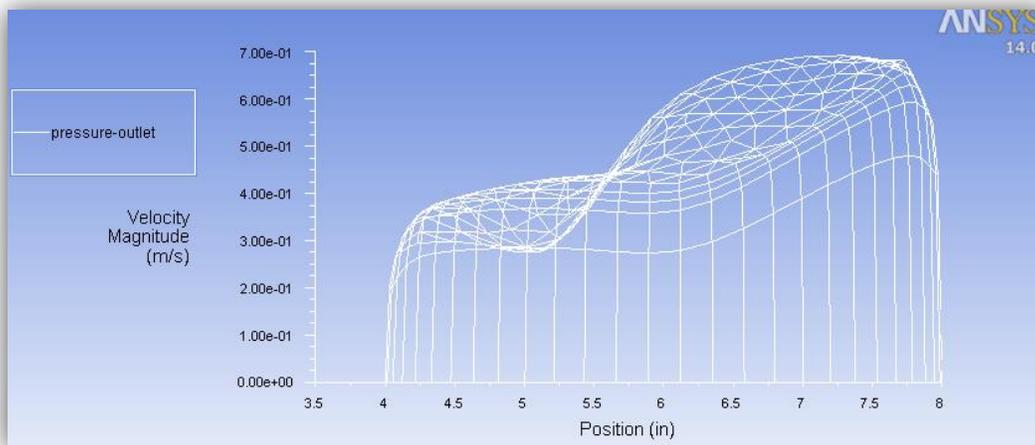


Figura 4.10: Gráfica de perfil de la magnitud de velocidad en función de la posición en la sección de salida de un codo mezclador.

- *Gráfica de vectores.* Una gráfica vectorial consiste en un arreglo de flechas que en su conjunto indican la magnitud y la dirección de un vector en un determinado instante. En la figura 4.11 se muestra la gráfica de los vectores de velocidad para el codo mezclador, en el cual ingresa un fluido a una determinada velocidad por un diámetro mayor, y se mezcla con otro proveniente de un diámetro más pequeño, posicionado a la mitad del codo, a una velocidad más elevada. La gráfica nos proporciona información de la dirección del campo de flujo, y la velocidad promedio que se genera en la mezcla de las diferentes sustancias.

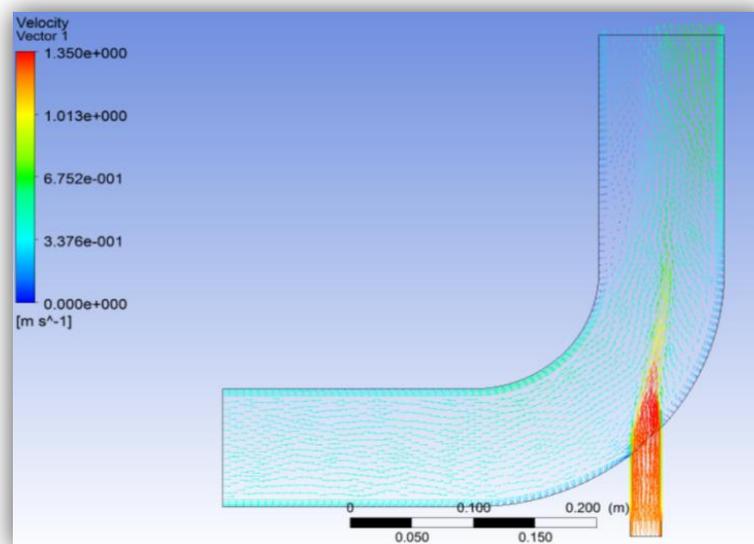


Figura 4.11: Gráfica vectorial de velocidades en un codo mezclador.

- *Gráfica de contornos.* La gráfica de contornos es frecuentemente utilizada por su facilidad para revelar las regiones con altos o bajos valores de la propiedad del flujo estudiado. Estas gráficas, también llamadas gráficas de isocontornos, muestran las curvas de valor constante de una propiedad (escalar o vectorial) en un determinado instante. La figura 4.12 muestra el codo mezclador antes mencionado, pero ahora con una gráfica de contornos para la temperatura, en la cual se observa que el fluido que entra por el diámetro inferior, posee una temperatura mayor que la que ingresa primero en la boquilla de mayor diámetro.

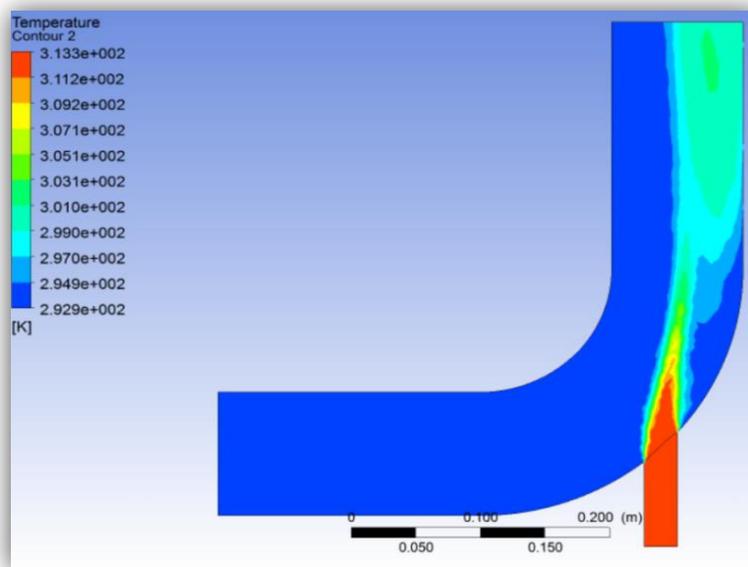


Figura 4.12: Gráfica de contornos de la temperatura para un codo mezclador.

4.6.4 Ventajas y Desventajas

Algunas ventajas y desventajas de utilizar un paquete CFD se mencionan a continuación:

- *Ventajas*
 - Se predicen las propiedades del fluido estudiado con gran detalle.
 - Auxiliar en el diseño y construcción de prototipos evitando los costos elevados de realizar experimentos físicos.
 - Se obtienen visualizaciones y animaciones del proceso en términos de las variaciones del fluido.
 - Hay fenómenos que se pueden conocer a través de una simulación computacional, que no se pueden apreciar de ninguna otra manera.

- *Desventajas*
 - Se requieren usuarios con mucha experiencia y una formación especializada.
 - Son necesarias inversiones iniciales muy grandes, para obtener recursos de hardware y software adecuados.
 - Los tiempos computacionales son demasiado largos en algunos casos.

4.6.5 Conclusiones de la herramienta CDF

Hay muchas dificultades que se deben afrontar antes de obtener una solución correcta, a pesar de la fácil manera de obtener una solución que la herramienta nos presenta, ya que basta con pulsar un botón para obtener un resultado. Sin embargo, de nada sirve obtener una bonita solución con campos de presiones y velocidades, si no se aproxima a la realidad y los resultados plasmados son falsos. Además, se le suele denominar a la dinámica de fluidos computacional como una “caja negra”, debido a que se pueden ingresar parámetros incorrectos, y el usuario puede no saber en dónde se cometió el error, o incluso ni siquiera saber que ha cometido un error. Por estas razones, toda simulación numérica requiere de una validación experimental, y viceversa, de esta manera se garantiza la confiabilidad de los resultados obtenidos. Ya que se valida el modelo con cualquier método, se puede reproducir cualquier escenario y por ende se puede proceder a una construcción final.

4.7 Simulación de flujo másico en el reactor preliminar

Como se mencionó con anterioridad, el estudio CFD objeto de este capítulo se desarrolló mediante el software FLUENT ANSYS 14.0. El análisis de flujo en el reactor preliminar, el cual se mostró anteriormente en las figuras 2.22 y 3.1, se lleva a cabo mediante diferentes pasos que se describen a continuación.

4.7.1 Modelado de la geometría

Para iniciar nuestro análisis CDF, cuyo objetivo es conocer los campos de velocidades del flujo de los fluidos de arrastre dentro del reactor preliminar, es necesario definir el modelo geométrico del dominio del fluido que se va a analizar. Como un primer acercamiento en la representación del dominio, se propone una geometría en 2D, en el cual se representan las 3 entradas de vapor de agua y un inyector de argón en la parte inferior del modelo. Sin embargo debido a las limitantes del modelo en 2D, solo es posible agregar otro conjunto de entradas de manera simétrica, quedando en total 6 entradas de vapor de agua y 2 inyectores de argón. Este arreglo se muestra en la figura 4.13.

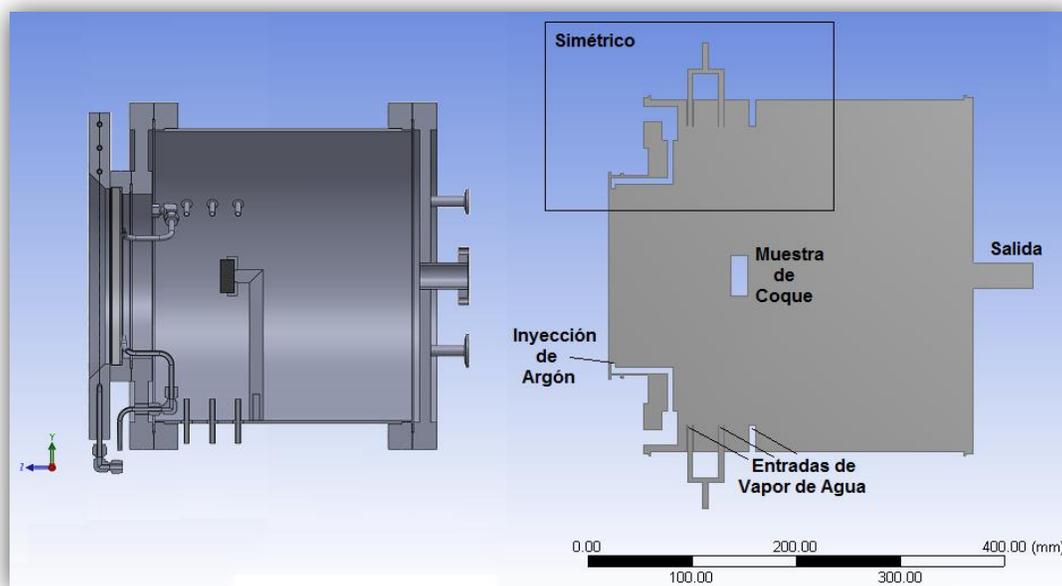


Figura 4.13: A la izquierda corte transversal del reactor preliminar, a la derecha su representación 2D en ANSYS.

En este modelo es imposible representar la geometría real del reactor, en la cual tanto las 9 entradas de vapor, distribuidas en líneas de 3, como los 3 inyectores de gas argón, se posicionan equi-angulamente alrededor de la sección cilíndrica de la cavidad. Entonces, el modelo 2D ignora 3 entradas de vapor de agua y 1 inyector de gas, esto hará que los resultados que puedan obtenerse se alejen completamente de los resultados que se esperan para el modelo real. Además, como se mencionó anteriormente en las propiedades de un flujo turbulento, no hay aproximaciones bidimensionales del todo correctas, ya que la vorticidad de un flujo turbulento es un fenómeno que se presenta en tres dimensiones.

Debido a la complejidad de la geometría real del reactor, se propone un modelo en 3D para el análisis, en el cual se consideran los 3 inyectores de argón y las 9 entradas de vapor de agua. Para lograr esto, se importó el dibujo del reactor preliminar del programa CAD Solidworks, y por medio del software de diseño "DesignModeler" de ANSYS, se definió el dominio del fluido al interior del reactor sobre el cuál se realizarán los cálculos. En la figura 4.14 se muestra la representación del reactor preliminar en ANSYS y la geometría final del dominio del fluido sobre la cual se trabajará.

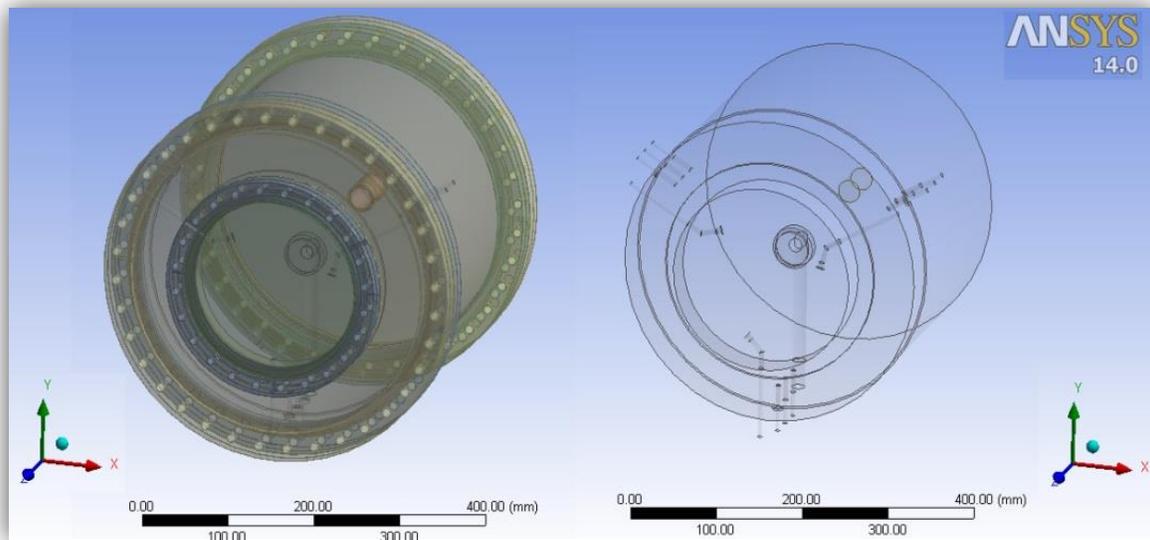


Figura 4.14: Reactor preliminar representado en ANSYS DesignModeler. A la izquierda el dibujo del reactor y a la derecha el modelo del dominio del fluido de trabajo.

La figura 4.15 presenta una mejor visualización del dominio computacional y sus elementos.

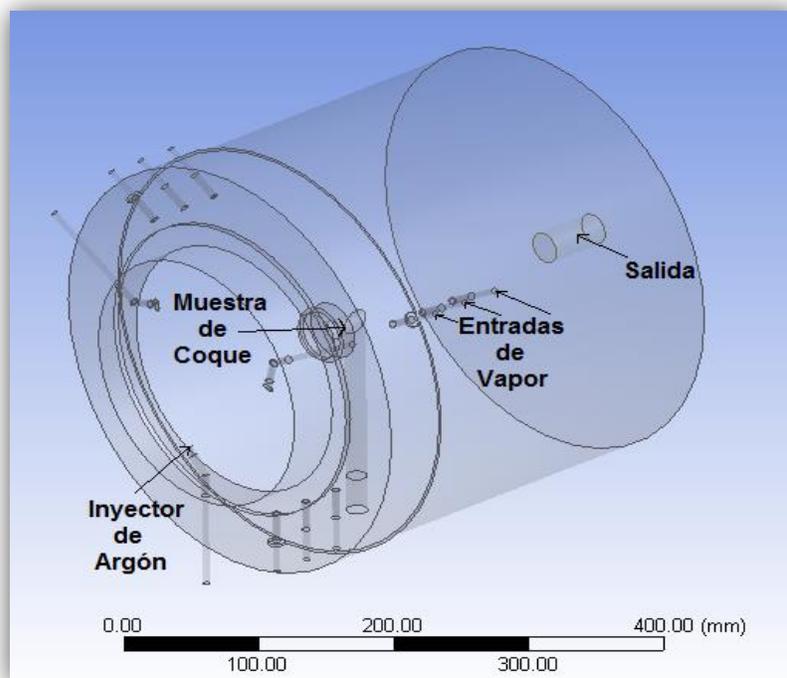


Figura 4.15: Dominio computacional del fluido.

4.7.2 Elaboración de la malla numérica

Una vez que se define el dominio computacional, se procede a la división espacial por medio de celdas, formando una malla. En cada uno de los volúmenes generados, el software realizará el cálculo de las propiedades físicas del fluido, por ejemplo de la velocidad o presión. Además, de manera que se utiliza un modelo 3D, las celdas tendrán forma de tetraedros. Por esta razón, la malla debe ser lo más fina posible para obtener un resultado con mayor precisión. La malla se realiza mediante la herramienta “Meshing” de ANSYS.

En la elaboración del mallado, se consideró un mayor número de elementos en las zonas que más influyen en el movimiento de fluido, por ejemplo en los pasa-tubbings para la entrada de vapor y en los inyectores de gas Argón. De igual manera se refinó la malla en la sección donde se espera un flujo de vórtice o en las zonas de contacto del fluido con las paredes sólidas del reactor. La malla numérica se presenta en la figura 4.16.

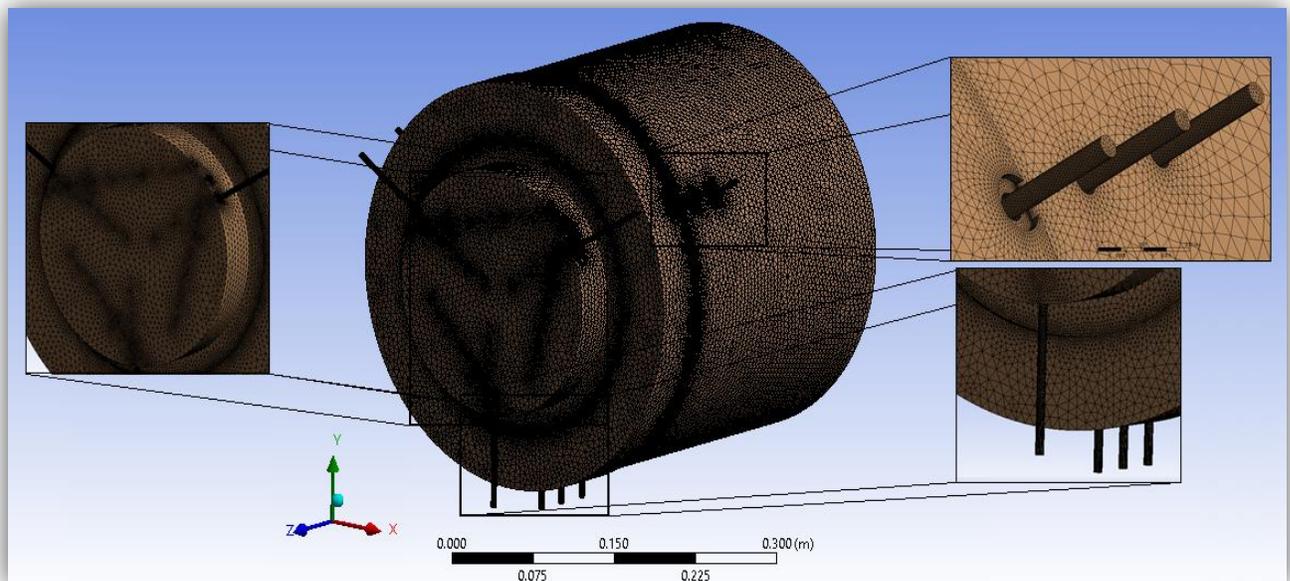


Figura 4.16: Malla numérica del reactor preliminar.

En la figura 4.17, se puede apreciar la malla refinada en el cilindro de salida, y en las zonas próximas a éste. Es aquí donde se esperan velocidades altas, y por ende una mayor turbulencia. Para obtener unos resultados de cálculo precisos, es necesario tener una malla mucho más fina en esta zona. Otra muestra de las zonas refinadas de la malla se aprecia en la figura 4.18. En ésta se muestra un corte isométrico del reactor, en el cual los elementos de malla son presentados completamente. En una de las

pequeñas ilustraciones de ésta figura, puede apreciarse que al considerar el ensamble sólido que sujeta a la pastilla de coque, se genera un espacio vacío en el interior de la malla.

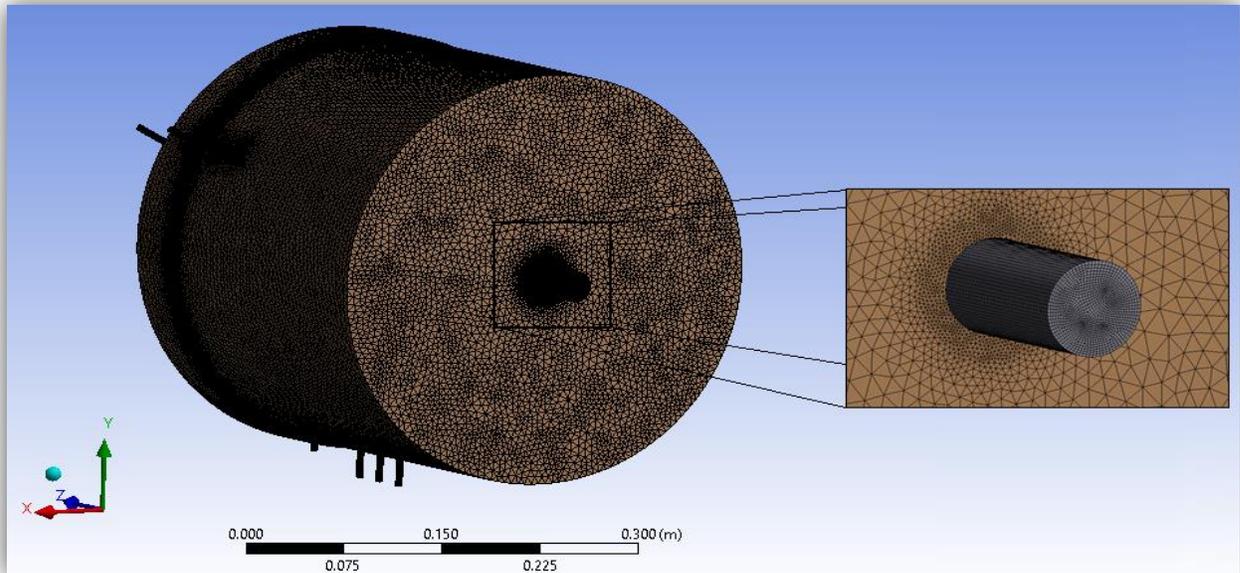


Figura 4.17: Malla refinada en el cilindro de salida del reactor.

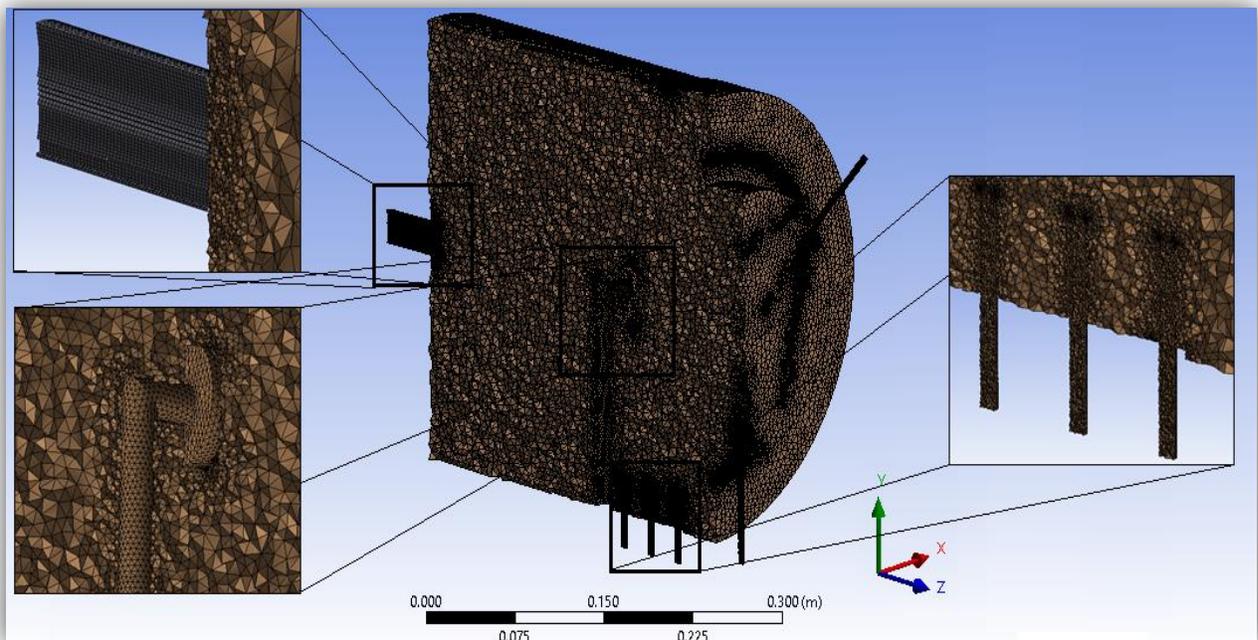


Figura 4.18: Corte isométrico del reactor preliminar. Los elementos de malla se presentan completos.

Finalmente, la primera propuesta de malla se compone por 2 503 854 *elementos* y 516 926 *nodos*.

En esta sección también se definen las entradas y las salidas del modelo dándoles un nombre. Esta asignación de nombres servirá después para configurar los parámetros de las condiciones de frontera en la herramienta “FLUENT” de ANSYS. Los nombres quedan definidos como se muestra en la figura 4.19. Cabe mencionar que todas las demás caras del modelo son consideradas como “muros” una vez que se ingresa a FLUENT.

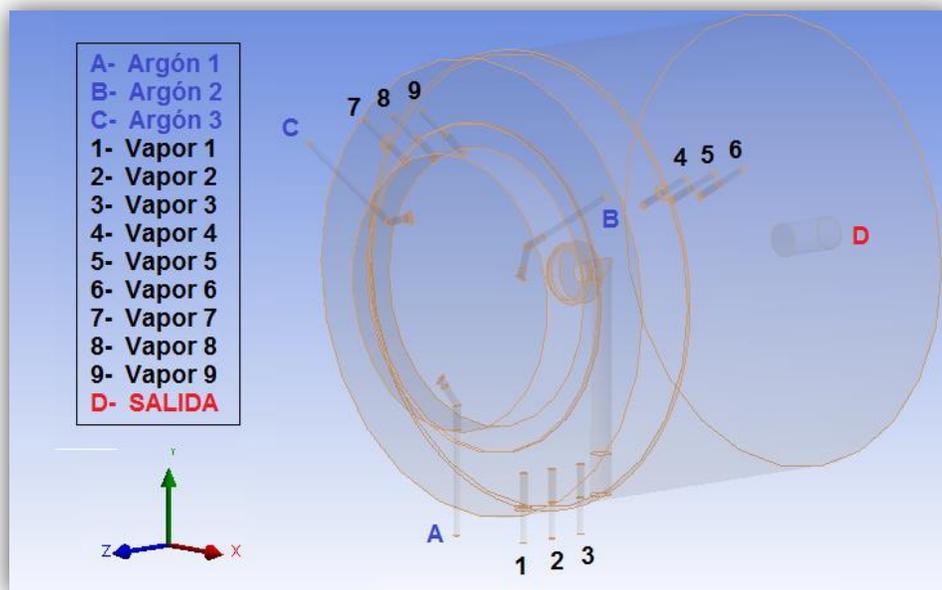


Figura 4.19. Asignación de nombres a las entradas y salidas del modelo del reactor.

4.7.3 Configuración de la simulación

Una vez que se tiene definida la malla de trabajo y se ha definido el lugar donde se posicionan las entradas y salidas del modelo, se procede a realizar la primera aproximación de la solución. Esta primera aproximación se realiza para comprobar que efectivamente se simula una entrada de fluido por diferentes secciones, y una salida del mismo a través del modelo. Para esto se configuran algunos parámetros de la simulación como se describe a continuación:

- El régimen de trabajo se establece como **estacionario**, ya que no se consideran variaciones temporales en los parámetros del fluido.

- El fluido se considera **compresible**, es decir, los efectos de las variaciones de presión sobre la densidad son significativos.
- Debido a la característica inerte que presenta el gas argón, no se lleva a cabo una reacción química entre éste y el vapor de agua, lo cual nos permite seleccionar un único gas de trabajo para la simulación. El gas utilizado será argón, ya que su densidad es mayor a la del vapor de agua. Mediante la base de datos de FLUENT para **materiales**, se obtiene una densidad de 1.6228 kg/m³ y una viscosidad dinámica de 2.125 x 10⁻⁵ Kg/m·s para el argón.
- Como **condición inicial** se considera una inyección de gas de 10 l/min a una presión de 50 psi (344 737.85Pa) para cada entrada del reactor, es decir, tanto para los 3 inyectores cercanos a la ventana, como para las 9 entradas de pasatubbing de la cavidad. Cada boquilla de las 12 entradas posee un diámetro interior de 4.88mm. Conociendo este diámetro, es posible expresar el flujo en términos de velocidad, quedando entonces una velocidad de entrada de 8.9109 m/s. La condición de frontera a la salida del reactor es una presión de 1 atm (101 325Pa).
- A la velocidad de entrada antes mencionada, el fluido presenta un **régimen turbulento**. En efecto, de acuerdo al número de Reynolds expresado en la ecuación 4.23.

$$Re = \frac{\rho \nu D}{\mu} \quad (4.23)$$

En donde ρ es la densidad, ν la velocidad, D el diámetro y μ la viscosidad dinámica del fluido. Sustituyendo los valores conocidos para el argón y conociendo el diámetro de 4.88mm de cada boquilla, se obtiene un número de Reynolds de 3 320.836 para temperatura ambiente, que corresponde a un régimen puramente turbulento.

- El **modelo de turbulencia** utilizado para esta primera aproximación es el κ - ϵ , dentro de los modelos RANS que proporcionan resultados promediados en el tiempo de un flujo, como por ejemplo la velocidad media. El método utiliza dos ecuaciones de transporte y es el más ampliamente usado y validado en la industria por su excelente desempeño. Es importante mencionar que no se activa la ecuación de energía en este modelo, ya que se considera que el sistema está en ausencia de radiación.

- Con el modelo de turbulencia definido, se considera para cada boquilla de entrada una **intensidad de turbulencia** de 1%, porcentaje utilizado en aplicaciones de baja turbulencia (ANSYS, 2011).
- Para la primera simulación se utilizará el **método de acople presión-velocidad SIMPLE** descrito anteriormente en este capítulo, por su conveniente trabajo de cómputo para converger.
- Se utilizará un **esquema de diferenciación** hacia delante de primer orden (*First Order Upwind*) descrito también en este capítulo, para la ecuación de la energía cinética de turbulencia κ (*Turbulent Kinetic Energy, TKE*). Esto debido al buen desempeño del método para identificar la dirección del flujo, aunque exige una malla muy fina para una mejor precisión.

4.7.4 Resultados de la primera aproximación

La primera simulación arrojó resultados satisfactorios con respecto al funcionamiento del modelo, ya que efectivamente, los resultados muestran que un fluido entra y sale del dominio geométrico. Además de converger en la iteración 292, se cumplen los otros métodos de revisión de convergencia. Con respecto a los residuales, el criterio de estos se redujo a un valor menor que 10^{-3} (fig.4.20), además, se utilizó un monitor de superficie para el flujo másico, el cual dejó de mostrar cambios aproximadamente después de las 250 iteraciones (fig.4.21).

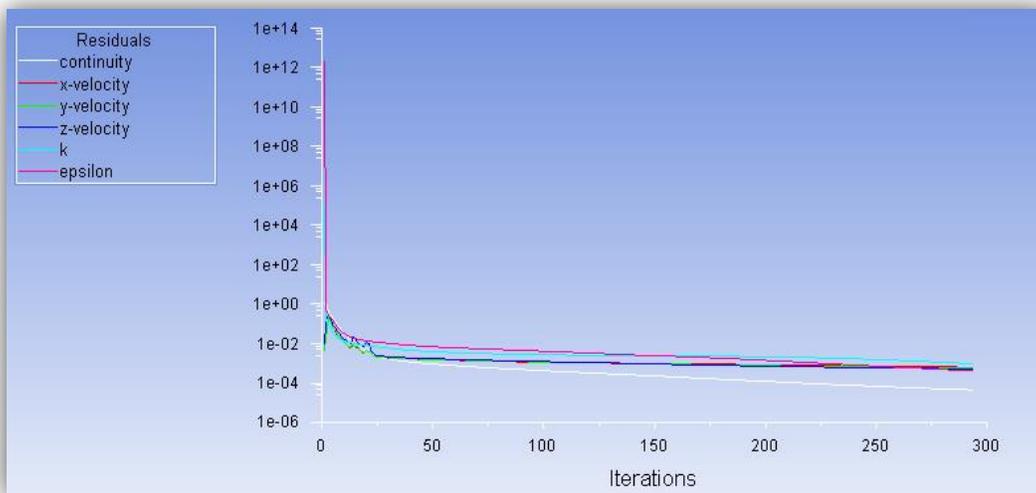


Figura 4.20: Monitor de residuales del reactor preliminar en su primera simulación.

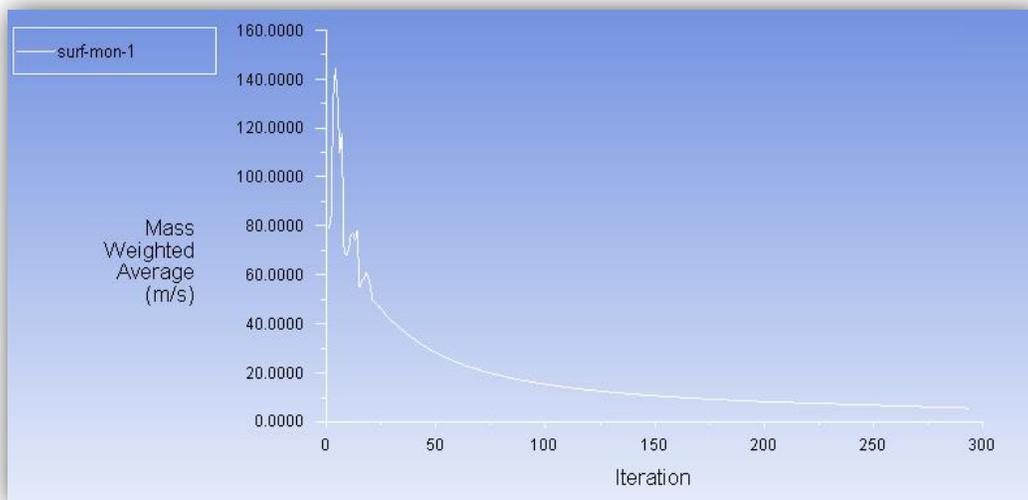


Figura 4.21: Monitor de flujo másico promedio a la salida del reactor preliminar en su primera simulación.

Otra manera de revisar la convergencia y de comprobar que el modelo funciona, es verificando que se cumpla el principio de conservación de la masa y de la cantidad de movimiento. La forma de hacerlo es mediante el reporte de flujo, el cual, para este caso, indica un desbalance neto del sistema mucho menor al 0.2%. Los resultados numéricos de esta primera simulación se presentan en la tabla 4.2.

Tabla 4.2: Resultados de la primera simulación del modelo.

Velocidad Promedio en boquilla de salida (m/s)	4.140
Flujo volumétrico promedio en boquilla de salida (l/min)	129.421
Velocidad pico global (m/s)	16.790
Desbalance de flujo másico promedio (kg/s)	-1.890×10^{-13}
Iteración a la que converge	292
Tiempo aproximado de cómputo	01:46:44

Una vez que se confirma que el modelo funciona, es necesario realizar un análisis de independencia de malla para aproximarse más a una solución real.

4.7.5 Análisis de independencia de malla

Este análisis, semejante al estudio de independencia de rayos realizado en el capítulo 3, tiene la finalidad de demostrar que el comportamiento del fluido estudiado es completamente independiente de la malla numérica, o dicho de otra manera, que el comportamiento real del fluido no depende de una malla imaginaria. Esto se logra haciendo la malla tan fina, que a partir de un número determinado de elementos, los

resultados no varían de manera significativa. De esta forma las simulaciones posteriores presentarán resultados más confiables.

Se realizarán diferentes simulaciones variando el número de elementos de la malla, hasta que los resultados dejen de variar significativamente. La configuración de las simulaciones es la misma que la descrita anteriormente para la primera simulación. Los resultados para 8 variaciones de los elementos de la malla se presentan en la tabla 4.3.

Tabla 4.3: Resultados del estudio de independencia de malla del reactor preliminar.

Simulación	Elementos	Nodos	Opción de Mallado	Velocidad Promedio en boquilla de salida(m/s)	Flujo volumétrico promedio en boquilla de salida (l/min)	Velocidad pico global (m/s)	Desbalance de flujo másico promedio (kg/s)	Iteración a la que converge	Tiempo aproximado de cómputo
1	1 250 497	288 035	Curvatura	4.094871	127.953	16.401	3.615×10^{-12}	278	00:45:28
2	1 929 652	407 140	Curvatura	3.808677	119.016	16.402	-2.034×10^{-13}	187	01:01:08
3	2 503 854	516 926	Curvatura y Proximidad	4.140058	129.421	16.790	-1.890×10^{-13}	292	01:46:44
4	2 649 781	542 648	Curvatura y Proximidad	4.079580	127.484	16.847	7.015×10^{-14}	298	02:00:13
5	2 849 472	577 306	Curvatura y Proximidad	3.815011	119.204	16.674	4.341×10^{-11}	203	01:27:14
6	3 062 862	614 121	Curvatura y Proximidad	3.874400	121.047	16.806	1.281×10^{-12}	200	01:36:11
7	3 463 849	686 038	Curvatura y Proximidad	3.821985	119.423	16.705	-1.579×10^{-11}	199	01:41:19
8	4 292 150	825 213	Curvatura y Proximidad	3.827480	119.579	16.692	-9.209×10^{-12}	199	02:13:17

Como se puede observar en la tabla, existen variaciones en diferentes parámetros, sin embargo, únicamente es necesario un análisis detallado de las variaciones en la velocidad promedio en la boquilla de salida. Estas variaciones pueden apreciarse de manera más clara en la figura 4.22, la cual nos indica que a partir de aproximadamente 3 millones y medio de elementos de malla, los resultados obtenidos para las velocidades no varían de manera significativa.

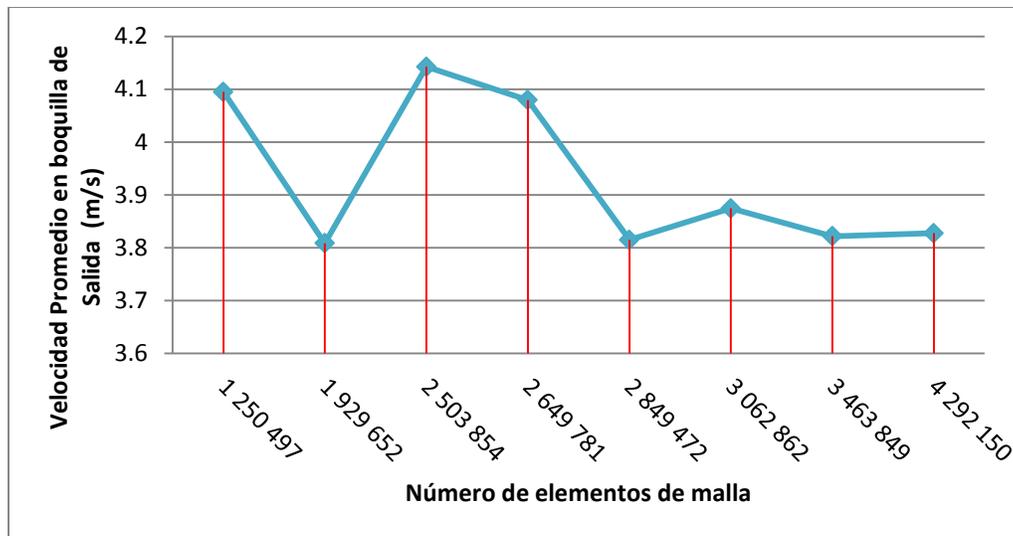


Figura 4.22: Variación de la velocidad promedio en la boquilla de salida con respecto al número de elementos de malla. Análisis de independencia de malla del reactor preliminar.

Como resultado de este estudio, se define al modelo del reactor preliminar con una malla compuesta por 3 463 849 elementos y 686 038 nodos, como aquel que presenta los resultados más aproximados al fenómeno real. Los resultados de la simulación realizada con este modelo se muestran en la tabla 4.4.

Tabla 4.4: Resultados de simulación para el modelo de reactor preliminar con una malla de 3 463 849 elementos.

Velocidad Promedio en boquilla de salida (m/s)	3.822
Flujo volumétrico promedio en boquilla de salida (l/min)	119.423
Velocidad más alta a la salida (m/s)	10.587
Velocidad pico global (m/s)	16.705
Desbalance de flujo másico promedio (kg/s)	-1.579×10^{-11}
Iteración a la que converge	199
Tiempo aproximado de cómputo	01:41:19

4.7.6 Visualización de flujo

Como ya se mencionó, es parte fundamental de este estudio visualizar los campos de flujo generados en la simulación, ya que muestran una aproximación del comportamiento de los gases de arrastre dentro del reactor. La primera simulación del modelo elegido del reactor preliminar, cuyos resultados numéricos se muestran en la tabla 4.4, se representa mediante un gráfico o render de volumen para las velocidades en las figuras 4.23 y 4.24.

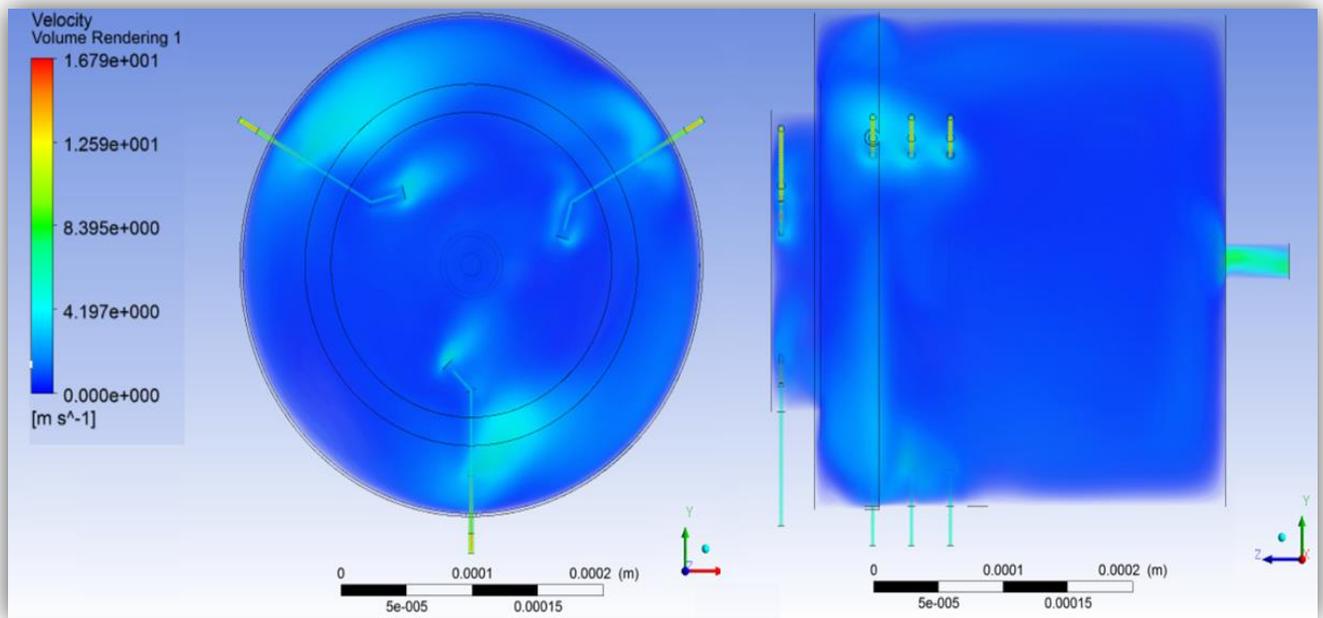


Figura 4.23: Render de volumen para las velocidades del gas de trabajo en el reactor preliminar. Vista frontal y vista de lado derecho. Simulación con modelo κ - ϵ , método SIMPLE y TKE: Primer Orden.

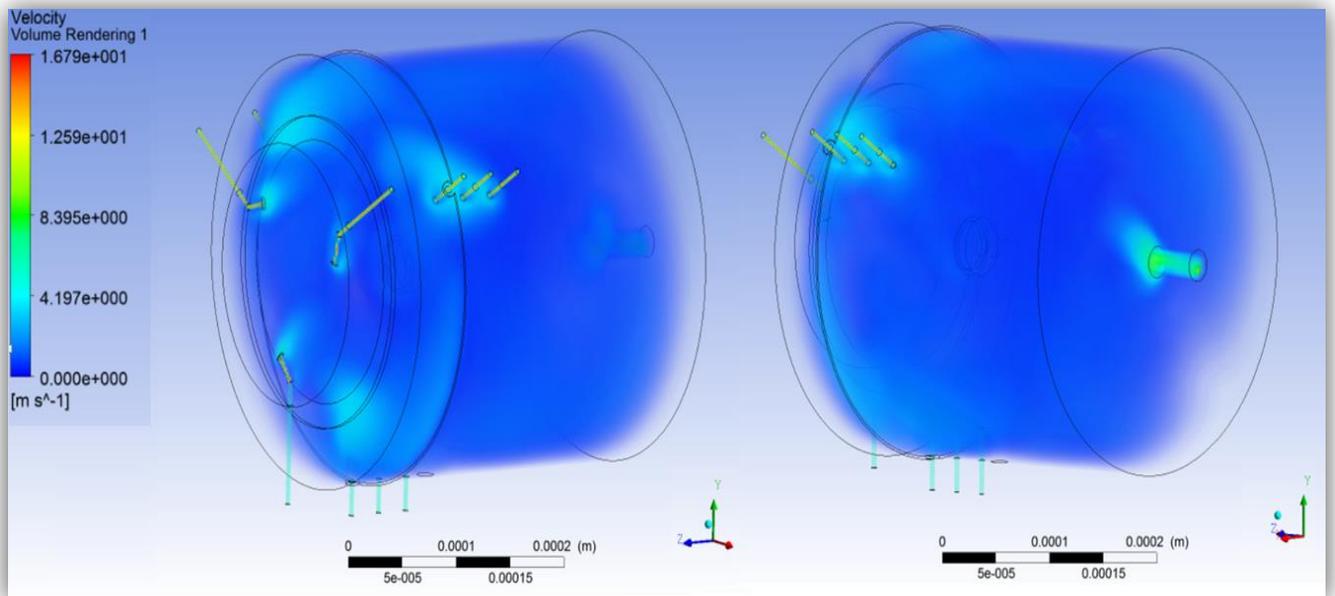


Figura 4.24: Render de volumen para las velocidades del gas de trabajo en el reactor preliminar. Vistas isométricas. Simulación con modelo κ - ϵ , método SIMPLE y TKE: Primer Orden.

En estas figuras se pueden apreciar las velocidades dentro de un rango global, es decir, considerando todo el dominio del fluido. En este rango las velocidades más altas de aproximadamente 16.79 m/s, coloreadas en rojo, se presentan solamente adentro de las tuberías de los tubos inyectoros del gas (fig.4.25). Estas velocidades descienden considerablemente una vez que abandonan la tubería, por lo tanto puede decirse que las velocidades del fluido en las tuberías son mucho mayores a las velocidades que se presentan adentro de la cavidad cilíndrica. Este hecho dificulta la visualización de las variaciones de las velocidades al interior de la cavidad y a la salida de la misma, ya que a estas velocidades les corresponden colores azul claro y azul marino en la paleta de colores del gráfico.

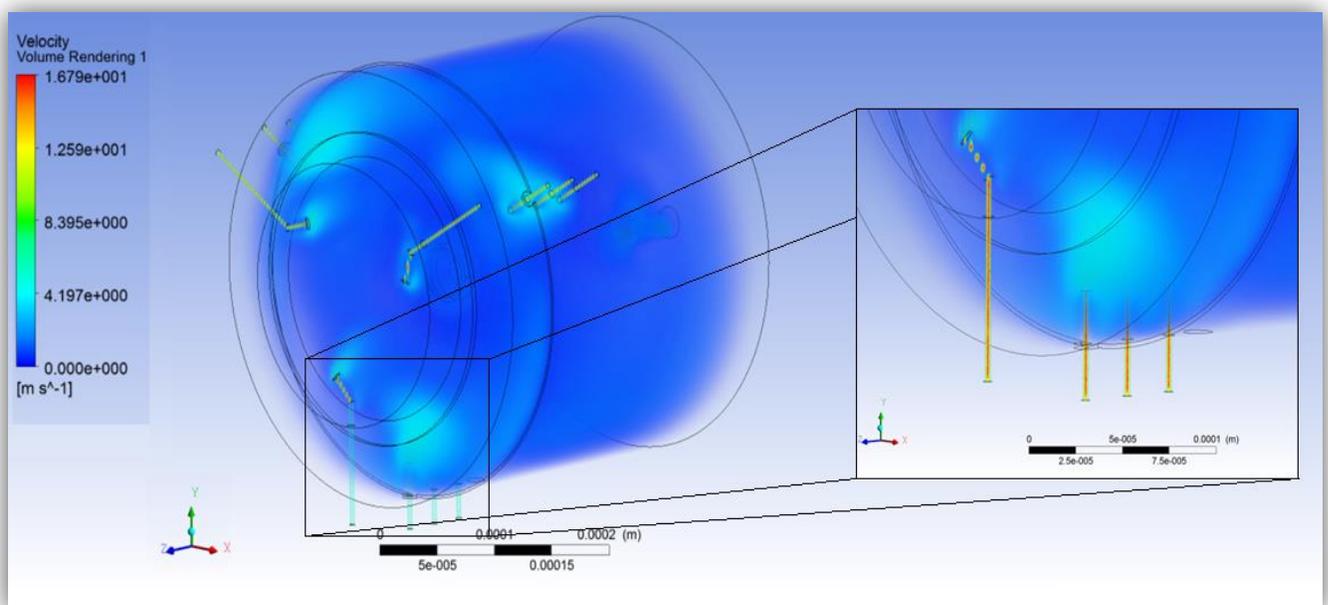


Figura 4.25: Las velocidades más altas se presentan al interior de los tubos inyectoros.

Para tener una mejor visualización del flujo al interior, aprovechando toda la paleta de colores, se pueden realizar diferentes gráficas de contorno para planos colocados en lugares específicos del reactor, en donde se presenten cambios de velocidades importantes. Para conocer estos puntos, se puede modificar el rango de velocidades en el render de volumen mostrado anteriormente, de tal forma que se defina una velocidad predeterminada como máxima, adquiriendo ésta el color rojo en la gráfica. Si definimos una velocidad al interior, por ejemplo de 2 m/s, se podrán apreciar en color rojo todas las velocidades iguales o mayores a 2 m/s. De esta forma se puede tener una idea de los lugares en donde se llevan a cabo gradientes importantes de velocidad. En la figura 4.26 se muestra el render de volumen con el rango de velocidades de 0 a 2 m/s.

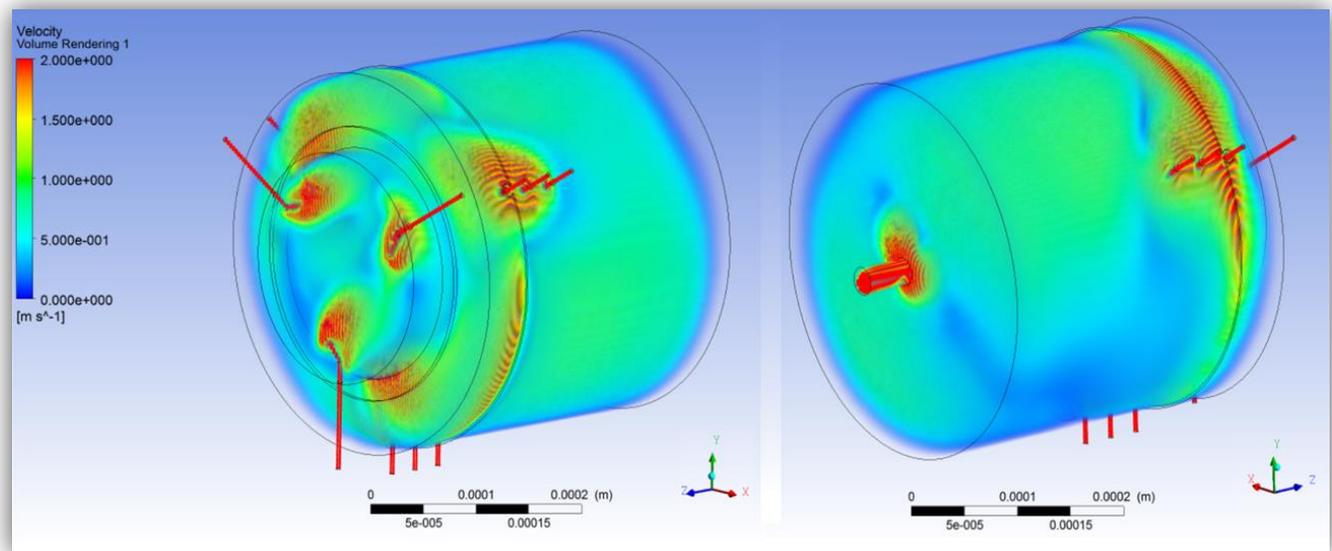


Figura 4.26: Render de volumen para las velocidades del gas de trabajo en el reactor preliminar. Rango de velocidades de 0 a 2 m/s. Simulación con modelo κ - ϵ , método SIMPLE y TKE: Primer Orden.

Como puede comprobarse, las velocidades más altas al interior del modelo se presentan al interior de los inyectores de gas, en las zonas próximas a la salida de los mismos y en cilindro de salida del reactor. Es en estos puntos donde se colocarán planos para tener una mejor visualización del campo de velocidades. En cada plano se realiza una gráfica de contornos con un rango de velocidades local, de esta manera se puede apreciar el campo de velocidades utilizando toda la paleta de colores del gráfico.

En la figura 4.27 se muestran dos gráficas de contornos realizadas en dos planos posicionados justo en los inyectores. El primero se coloca en el plano XY para abarcar los 3 inyectores frontales, y el segundo en un plano ZY que abarca toda la sección transversal del reactor. En estos gráficos se comprueba nuevamente que las velocidades más altas se presentan al interior de las boquillas, pero también que en las zonas próximas a la salida de éstas, el gas presenta velocidades dentro del rango de 6 a 9 m/s. Además, en la segunda imagen de la misma figura se puede apreciar el campo de velocidades a la salida de la boquilla, el cual oscila en el rango de 7 a 11 m/s. Por otro lado se aprecia que en general el comportamiento del gas al interior de la cavidad cilíndrica del reactor es de *estancamiento*, ya que las velocidades que se presentan en mayor cantidad son menores a 1 m/s. Éstas se representan con el color azul marino.

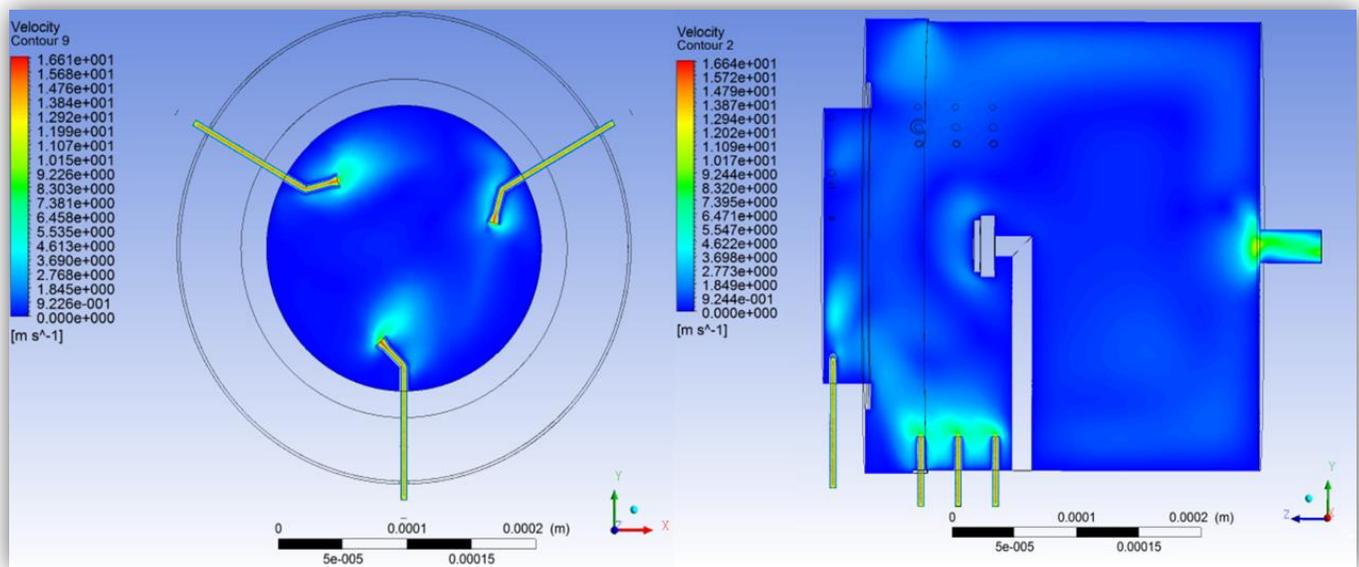


Figura 4.27: Gráfica de contornos del reactor con rango de velocidades local. A la izquierda plano XY que abarca los 3 inyectores frontales y a la derecha plano ZY en la sección transversal del reactor. Simulación con modelo κ - ϵ , método SIMPLE y TKE: Primer Orden.

En la figura 4.28 se pueden apreciar las velocidades del fluido de trabajo en 3 de los pasa-tubbings posicionados equi-angularmente en la sección cilíndrica de la cavidad. Se puede observar nuevamente que las velocidades más altas se presentan al interior de los tubos, y que a la salida de estos la velocidad baja considerablemente.

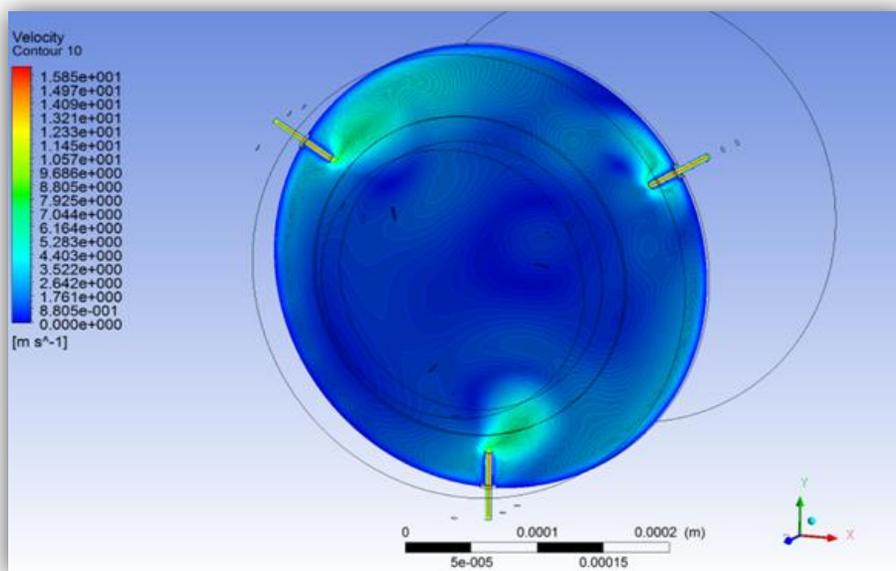


Figura 4.28: Gráfica de contornos del reactor con rango de velocidades local. Plano XY que abarca 3 de los pasa-tubbings posicionados en la cavidad. Simulación con modelo κ - ϵ , método SIMPLE y TKE: Primer Orden.

Si colocamos otro plano XY cerca de la boquilla de salida (fig. 4.29) en la gráfica de contornos se puede apreciar como las velocidades incrementan al aproximarse a ésta, sin embargo alrededor de esta zona, el fluido se presenta estancado nuevamente, con velocidades muy bajas coloreadas en azul marino.

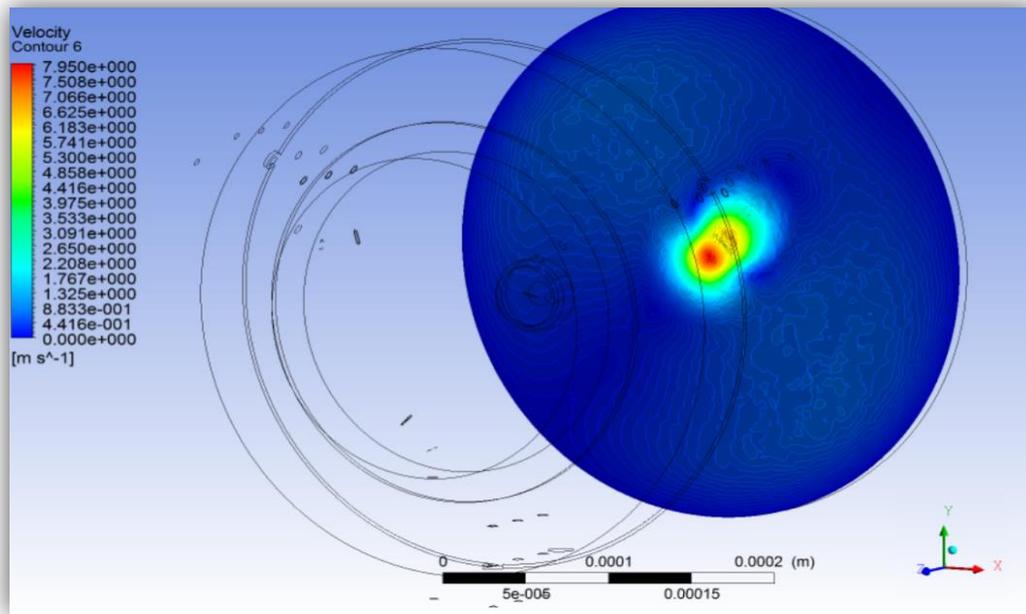


Figura 4.29: Gráfica de contornos del reactor con rango de velocidades local. Plano XY cerca de la boquilla de salida. Simulación con modelo κ - ϵ , método SIMPLE y TKE: Primer Orden.

Para conocer las velocidades en la boquilla de salida, resulta conveniente colocar un plano ZX justo a la mitad del reactor, ya que no toca ninguna boquilla y el rango local permite visualizar el campo de velocidades en la zona deseada. En la figura 4.30 se presenta la gráfica de contorno en el plano antes mencionado, en ésta se muestran las velocidades máximas alcanzadas en la sección de salida del reactor, las cuales son de aproximadamente 10.5 m/s como se había presentado en los resultados numéricos de la tabla 4.4. De nuevo se puede apreciar como el gas permanece con velocidades muy bajas en toda la sección interna del reactor. En la boquilla de salida se puede observar el incremento de la velocidad como resultado de la reducción del diámetro de la tubería por la que fluye el fluido. Además, se presenta claramente la condición de no deslizamiento en esta boquilla, ya que en las paredes se tienen velocidades de 0 m/s, coloreadas en azul, y esta velocidad incrementa al alejarse de ellas alcanzando velocidades de más de 8 m/s, coloreadas en amarillo y rojo.

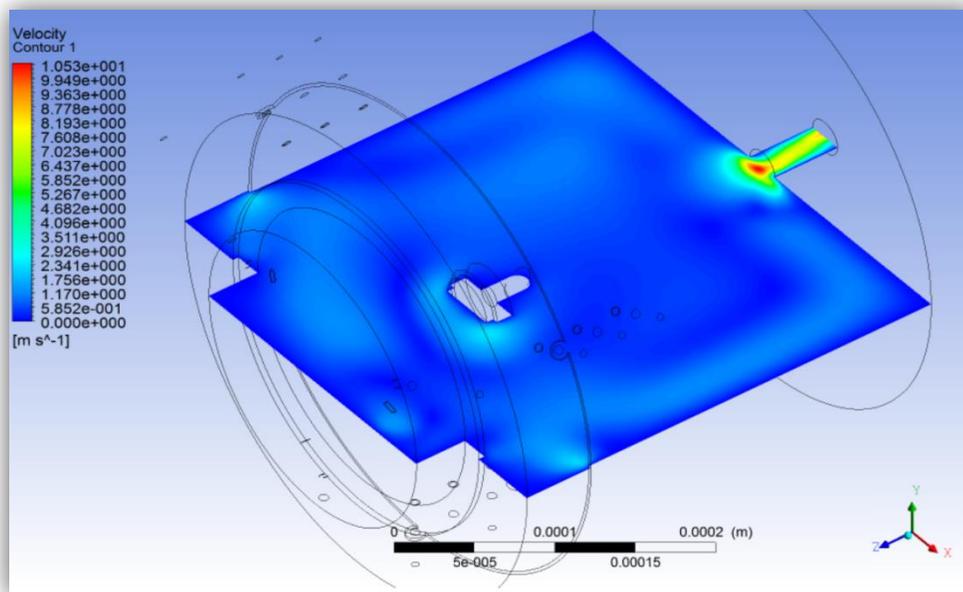


Figura 4.30: Gráfica de contornos del reactor con rango de velocidades local. Plano ZY justo a la mitad del reactor. Simulación con modelo κ - ϵ , método SIMPLE y TKE: Primer Orden.

Otra manera de presentar el flujo de los gases es mediante líneas de corriente (fig. 4.31), estas líneas además de mostrar los gradientes de velocidad mediante colores, comprueban también que efectivamente el fluido que entra al modelo, sale del mismo, descartando así errores de mal funcionamiento de la malla numérica y de algunos parámetros de la configuración de la simulación.

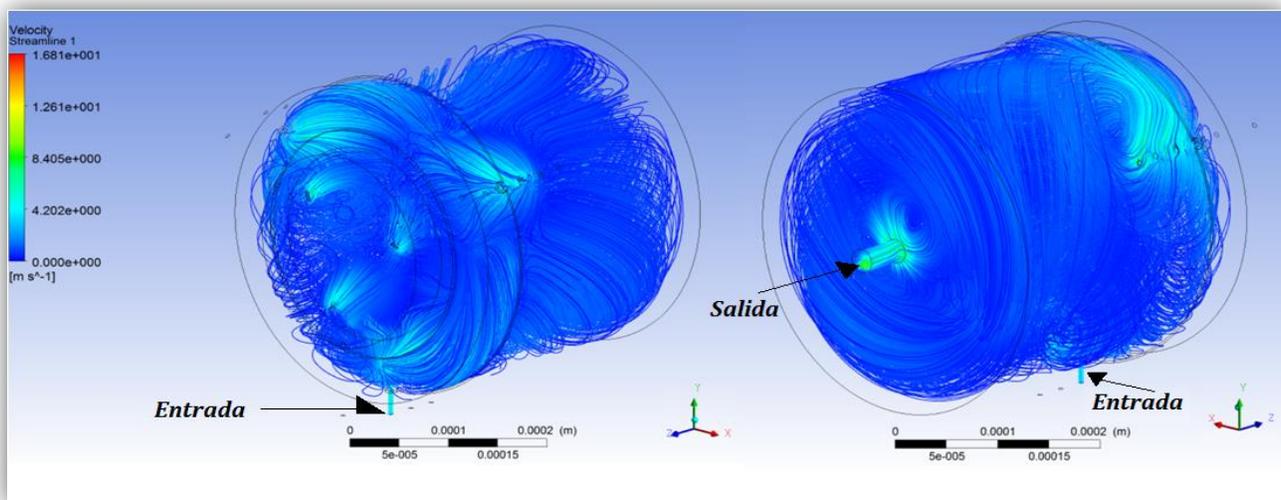


Figura 4.31: Líneas de corriente con rango de velocidades global dibujadas desde la entrada de vapor 1. Vistas isométricas. Simulación con modelo κ - ϵ , método SIMPLE y TKE: Primer Orden.

4.7.7 Validación del modelo

Los modelos realizados en CFD requieren ser validados de alguna forma, ya que como se mencionó con anterioridad, la facilidad que el software presenta para obtener una solución no garantiza que ésta sea correcta. Una validación experimental para garantizar que efectivamente los resultados obtenidos se aproximan a la realidad sería conveniente, sin embargo, debido a las limitaciones que se presentan para llevar a cabo una experimentación, resulta útil realizar varias simulaciones más, cambiando diferentes parámetros en la configuración del cálculo. Los resultados que se obtienen al variar los parámetros, como el modelo de turbulencia o método de acople, nos proporcionarán información para la validación del modelo.

Para el siguiente análisis se usará de nuevo el **modelo de turbulencia $\kappa\text{-}\varepsilon$** por las ventajas que presenta, pero también se implementa el modelo de esfuerzos de Reynolds, ya que la literatura nos dice que tiene una mayor precisión, como consecuencia de las siete ecuaciones de transporte consideradas en el cálculo. Por otro lado, para el **método de acople presión-velocidad**, se utilizarán ahora, además del SIMPLE, los métodos SIMPLEC y PISO en los dos modelos de turbulencia a analizar, por sus mejoras en la convergencia.

Un parámetro más que se varía en este estudio, es el **esquema de aproximación**. Se utilizará un esquema de diferenciación hacia adelante de primer orden y uno de segundo orden para la ecuación de la energía cinética de turbulencia κ (TKE), esto para cada combinación realizada.

En la tabla 4.5 se presentan los resultados numéricos de cada combinación de parámetros en la configuración de la simulación. En ella se pueden apreciar los diferentes valores de velocidad obtenidos en cada cálculo, así como la diferencia porcentual de estas velocidades con respecto a los de la primera aproximación descrita anteriormente (modelo $\kappa\text{-}\varepsilon$, método SIMPLE, TKE: Primer Orden). Otros datos como el tiempo de cómputo o el número de iteración a la que converge la simulación también se presentan en la misma.

Un parámetro importante para analizar, es la velocidad promedio en la boquilla de salida, como puede apreciarse en la misma tabla, las variaciones porcentuales con respecto a la primera simulación son muy bajas, menores del 2%, salvo en la combinación del modelo de esfuerzos de Reynolds con el método SIMPLE y esquema de aproximación de segundo orden, en donde presenta una variación de más del 8%. De igual manera para la simulación que considera un modelo de esfuerzos de Reynolds, método PISO y un esquema de segundo orden, se presenta una variación de más del 12%.

Tabla 4.5: Simulaciones del reactor preliminar con diferentes parámetros de configuración.

Modelo de Turbulencia	Método de acople presión-velocidad	Esquema de diferenciación hacia adelante para ecuación TKE	Velocidad Promedio en boquilla de salida (m/s)	Diferencia porcentual con respecto a la primera simulación (%)	Flujo volumétrico promedio en boquilla de salida (l/min)	Velocidad más alta a la salida (m/s)	Diferencia porcentual con respecto a la primera simulación (%)	Velocidad pico global (m/s)	Desbalance de flujo másico promedio (kg/s)	Iteración a la que converge	Tiempo aproximado de cómputo
κ-ε	SIMPLE	Primer Orden	3.822	--	119.423	10.587	--	16.705	-1.579x10 ⁻¹¹	199	01:41:19
κ-ε	SIMPLE	Segundo Orden	3.793	0.75	118.516	12.962	22.43	16.705	-3.130x10 ⁻¹²	200	01:49:27
κ-ε	SIMPLEC	Primer Orden	3.787	0.92	118.329	10.644	0.54	16.704	3.004x10 ⁻¹²	199	02:13:03
κ-ε	SIMPLEC	Segundo Orden	3.773	1.28	117.891	11.271	6.46	16.706	6.774x10 ⁻¹²	200	02:12:40
κ-ε	PISO	Primer Orden	3.830	0.21	119.673	7.590	28.31	109.907 ①	-4.182x10 ⁻¹¹	671 ②	08:19:12
κ-ε	PISO	Segundo Orden	3.772	1.31	117.860	7.650	27.74	107.720 ①	7.276x10 ⁻¹²	1000 ②	13:02:33
Esfuerzos de Reynolds	SIMPLE	Primer Orden	3.847	0.65	120.204	16.891	59.54	18.766	-5.409x10 ⁻¹¹	204	02:59:27
Esfuerzos de Reynolds	SIMPLE	Segundo Orden	4.155	8.71	129.827	9.053	14.49	17.257	-3.0578x10 ⁻¹⁰	485	06:54:09
Esfuerzos de Reynolds	SIMPLEC	Primer Orden	3.772	1.31	117.860	13.759	29.96	17.233	9.199x10 ⁻¹²	189	03:11:37
Esfuerzos de Reynolds	SIMPLEC	Segundo Orden	3.784	0.99	118.235	14.046	32.67	17.233	-1.257x10 ⁻¹²	188	04:20:52
Esfuerzos de Reynolds	PISO	Primer Orden	4.198x10 ²² ③	--	--	--	--	--	-	416 ④	11:03:33
Esfuerzos de Reynolds	PISO	Segundo Orden	3.358	12.14	104.924	7.460	29.54	171.356 ①	3.579x10 ⁻¹⁰	551 ②	09:40:03

① La velocidad pico global es demasiado alta.

② Se detuvo el cálculo ya que en esta iteración se cumplen los tres métodos de revisión de convergencia.

③ Los principios de conservación no se cumplen.

④ El residual de continuidad crece sin detenerse a partir de la iteración 350. Por esta razón, la solución diverge, ya que no se cumple el criterio de convergencia.

Cabe mencionar que las simulaciones en donde se considera el método de acople presión-velocidad PISO, se presentan diferentes errores. Como puede apreciarse en la tabla anterior, cuando se utiliza este método con un modelo κ - ε , ya sea con un esquema de aproximación de primer o segundo orden, la simulación registra velocidades al interior del modelo de más de 100 m/s, lo cual es improbable según las condiciones de frontera del modelo establecidas en la etapa de configuración.

Por otro lado, cuando el método PISO se utiliza con el modelo de esfuerzos de Reynolds, para el caso en donde se utiliza un esquema de aproximación de primer orden, la velocidad promedio en la boquilla de salida es demasiado alta y se presenta un enorme desbalance de flujo másico neto. Esto quiere decir que los principios de conservación no se cumplen. Utilizando el esquema de segundo orden se presenta el mismo problema de velocidades muy altas al interior del reactor que se presentó utilizando el modelo κ - ε . Por estos problemas y por el exagerado tiempo de cómputo se puede decir que el método de acople PISO no es adecuado para el modelo del reactor elaborado.

El resto de las combinaciones presentan resultados con variaciones mínimas. Como se mencionó, la velocidad promedio en la boquilla de salida, y por ende el flujo volumétrico en la misma, presenta variaciones de menos del 2% en la mayoría de los casos. De igual manera las velocidades más altas registradas en las simulaciones están en el rango de los 16.7 y 18.7 m/s. Finalmente los desbalances de flujo másico cumplen el criterio de uno de los métodos de revisión de convergencia de ser menores del 2%, por lo que los principios de conservación se cumplen.

Con respecto a la visualización de los campos de velocidades, no se presentan cambios considerables, salvo para las dos simulaciones que utilizan el modelo de esfuerzos de Reynolds y el método SIMPLE. En la figura 4.32 se pueden apreciar estas variaciones en la distribución de las velocidades al interior de la cavidad. A pesar de estas distribuciones, las velocidades al interior del reactor y en la salida del mismo presentan variaciones porcentuales mínimas con respecto a la primera simulación del apartado 4.7.6. Para las demás combinaciones, la distribución de campos de velocidades del gas es semejante a las mostradas en la misma primera aproximación del modelo del reactor preliminar. En la figura 4.33 se presentan tres ejemplos de estas simulaciones, la primera utiliza un modelo κ - ε , método SIMPLE y TKE: Segundo Orden; la segunda un modelo κ - ε , método SIMPLEC y TKE: Segundo Orden; finalmente la tercera se generó con un modelo de esfuerzos de Reynolds, método SIMPLEC y TKE: Segundo Orden.

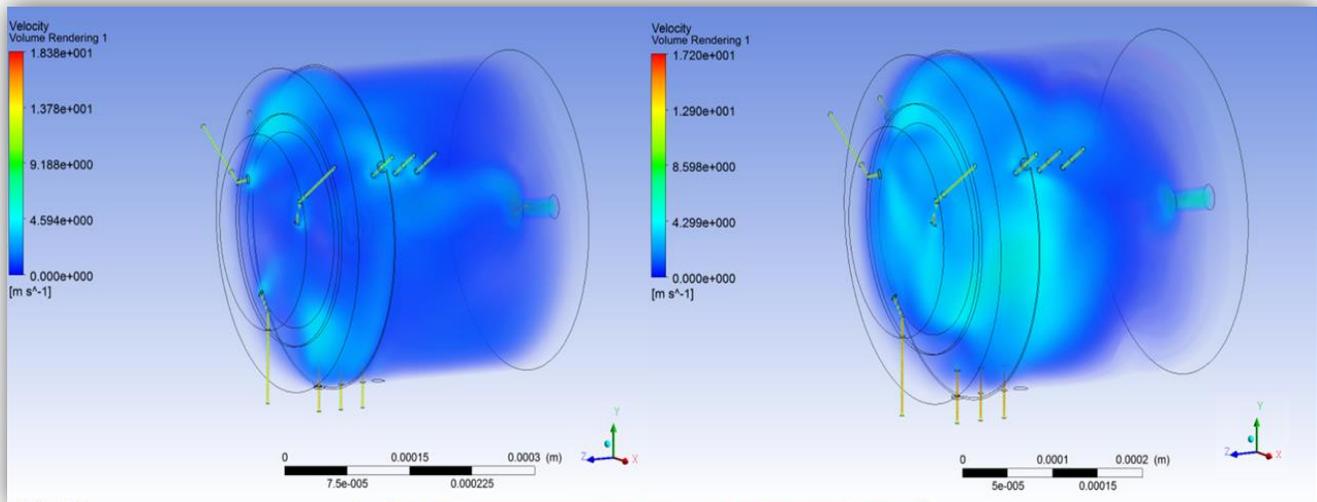


Figura 4.32: Render de volumen para las velocidades del gas de trabajo en el reactor preliminar. A la izquierda simulación con modelo de esfuerzos de Reynolds, método SIMPLE y TKE: Primer Orden. A la derecha simulación con modelo de esfuerzos de Reynolds, método SIMPLE y TKE: Segundo Orden.

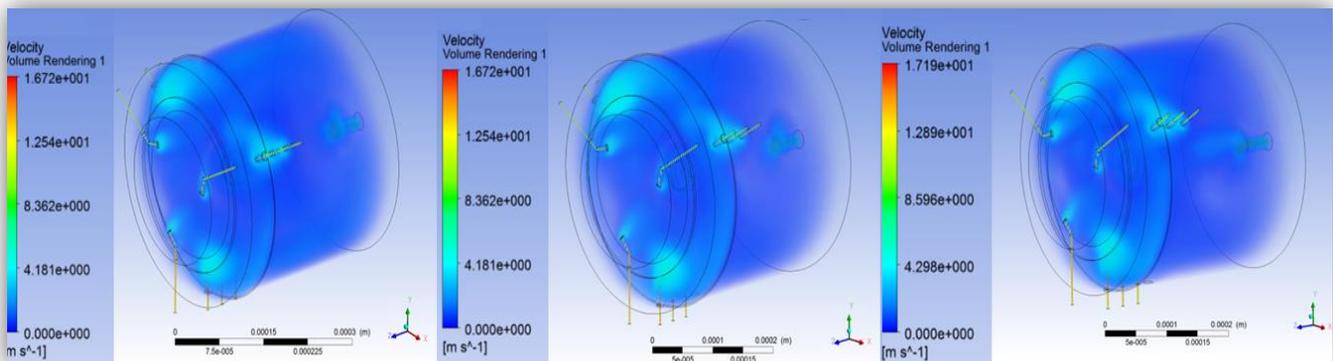


Figura 4.33: Render de volumen para las velocidades del gas de trabajo en el reactor preliminar. De izquierda a derecha: Modelo κ - ϵ , método SIMPLE, TKE: Segundo Orden; Modelo κ - ϵ , método SIMPLC, TKE: Segundo Orden; Modelo de esfuerzos de Reynolds, método SIMPLC, TKE: Segundo Orden.

4.7.8 Conclusiones de la simulación del reactor preliminar

El modelo desarrollado en este apartado del reactor preliminar nos brinda información importante para realizar una propuesta de mejora. Como se describió anteriormente, el reactor utiliza 3 inyectores de argón. Este gas cumple la función de purgar el oxígeno, generando un ambiente controlado al momento de realizar la reacción química de gasificación. Los otros 9 pasa-tubbings posicionados equiangularmente en la sección cilíndrica de la cavidad, se utilizan para inyectar el vapor de

agua que la reacción necesita. El modelo preliminar considera estas 12 entradas para tener una mejor distribución de los gases por todo el reactor, sin embargo, como puede comprobarse en la simulación, a pesar de inyectarse gas por cada una de estas entradas a una velocidad y presión razonables, los campos de velocidad al interior del reactor muestran velocidades inferiores a 1 m/s en la mayoría del dominio del fluido. Esto quiere decir que el fluido se estanca en gran parte del volumen interno del reactor, dificultando la salida del mismo. Para evitar este estancamiento tendrían que inyectarse los gases a una velocidad mucho mayor en cada inyector, produciendo así gastos considerables de gas y la compleja necesidad de mantener presiones elevadas en cada una de las entradas.

Una solución que se propone es la implementación de una apertura de cono y una reducción del espacio efectivo adentro de la cavidad cilíndrica, de esta manera se producirá un mejor flujo de los gases hacia la salida del reactor.

4.8 Simulación de flujo másico en el reactor optimizado

La geometría propuesta se realiza con un material aislante de baja densidad, que también tiene la capacidad de proteger a la carcasa de acero de alcanzar temperaturas muy altas. Además, debido a la reducción de espacio por donde fluirán los gases, se pueden eliminar los 3 inyectores de argón, y se consideran solamente 3 entradas con pasa-tubbing, en las cuales se inyectará al mismo tiempo argón y vapor de agua mezclados. Estas modificaciones se muestran en la figura 4.34 y se describen a detalle en el apartado 5.3 del capítulo 5. Como se hizo con el reactor preliminar, la simulación se describe mediante los pasos que se presentan a continuación.

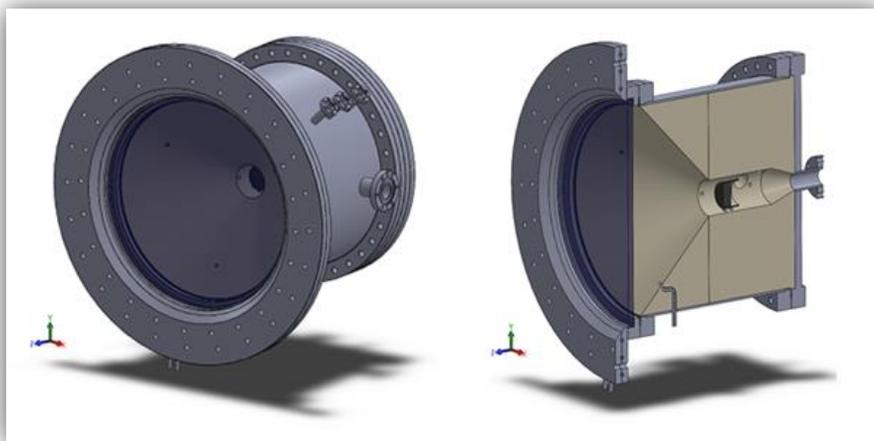


Figura 4.34: Reactor optimizado para la gasificación de coque de petróleo, a la izquierda reactor completo y a la derecha un corte transversal.

4.8.1 Modelado de la geometría

Como se hizo con el modelo anterior, en esta etapa se define el modelo geométrico del dominio del fluido. Debido a la complejidad de la geometría, se propone nuevamente un modelo 3D en donde se consideran solo 3 pasa-tubbings, a través de los cuales se inyecta una mezcla de vapor de agua y argón. Se importa el dibujo del reactor optimizado desde el programa CAD Solidworks al DesignModeler de ANSYS, y se define el dominio del fluido sobre el cual se va a trabajar. La geometría del modelo importado y el dominio del fluido se muestran en la figura 4.35.

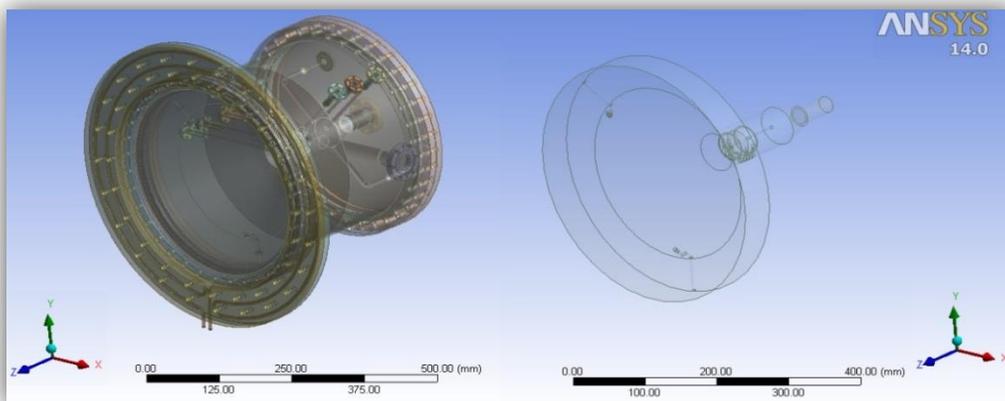


Figura 4.35: Reactor optimizado representado en ANSYS DesignModeler. A la izquierda el dibujo del reactor y a la derecha el modelo del dominio del fluido de trabajo.

Una mejor visualización del dominio del fluido se presenta en la figura 4.36, en donde se puede apreciar la reducción del volumen interno por medio de la capa de aislante y la implementación de solo 3 entradas de gases.

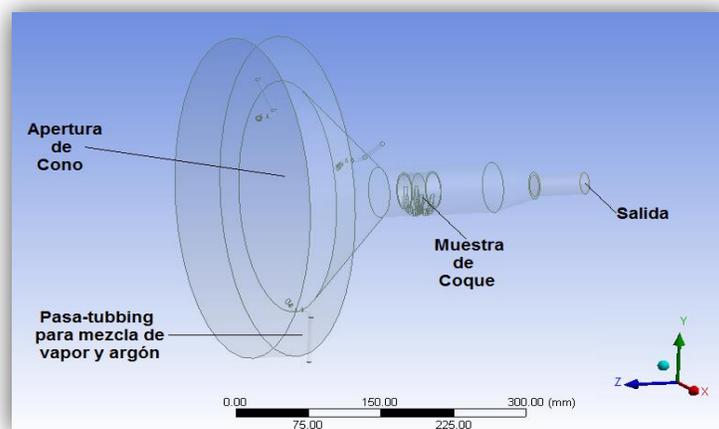


Figura 4.36: Dominio computacional del fluido.

4.8.2 Elaboración de la malla numérica

Una vez más, mediante la herramienta “Meshing” de ANSYS, se genera la malla numérica sobre la cual se realiza el cálculo. Esta malla se hace lo más fina posible, considerando un mayor número de elementos en las intersecciones y zonas donde puede influir más el movimiento del fluido. La malla resultante se presenta en la figura 4.37.

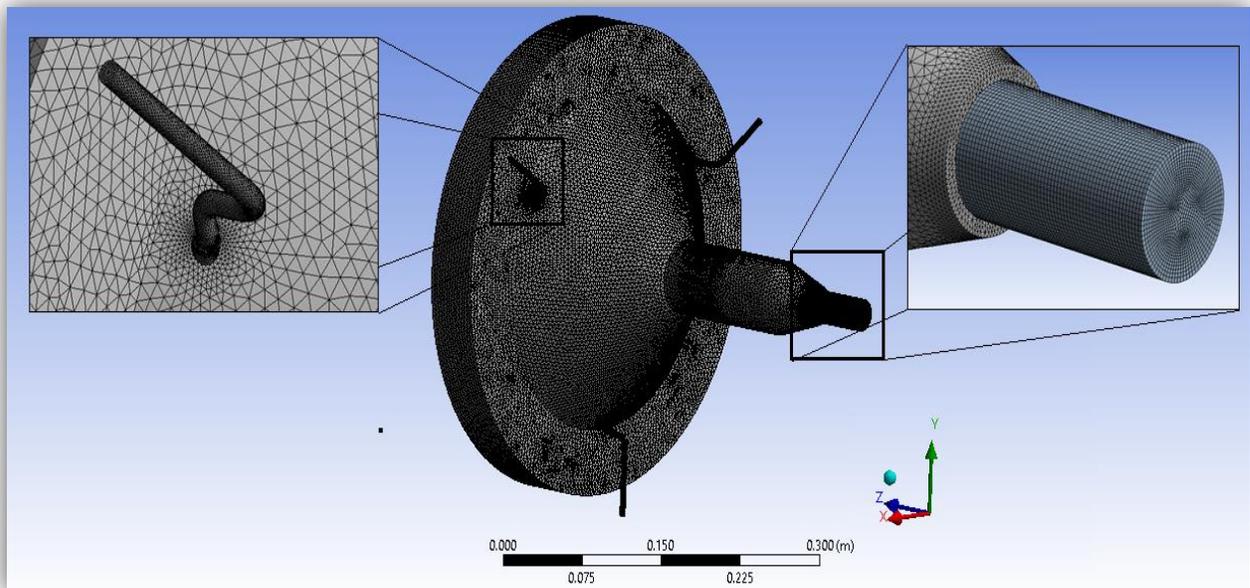


Figura 4.37: Malla numérica del reactor optimizado.

En la figura 4.18 se puede observar mejor como se refina la malla en el cilindro de salida, en las zonas cercanas al mismo y en el interior de los pasa-tubbings. Por otro lado, en la pequeña imagen de la derecha en la misma figura, se observa la representación de la pastilla de coque en el interior del reactor. El hueco que se ve se genera al sustraer la pastilla del dominio de fluido, ya que al ser sólida, no debe considerarse para el cálculo.

Las zonas que se refinan en la malla representan los lugares en los que se esperan velocidades altas, y por lo mismo una mayor turbulencia. Realizar este tratamiento a la malla tiene la finalidad de obtener resultados más precisos en el cálculo.

La primera propuesta de malla generada para el reactor optimizado consta de 1 390 267 elementos y 335 591 nodos.

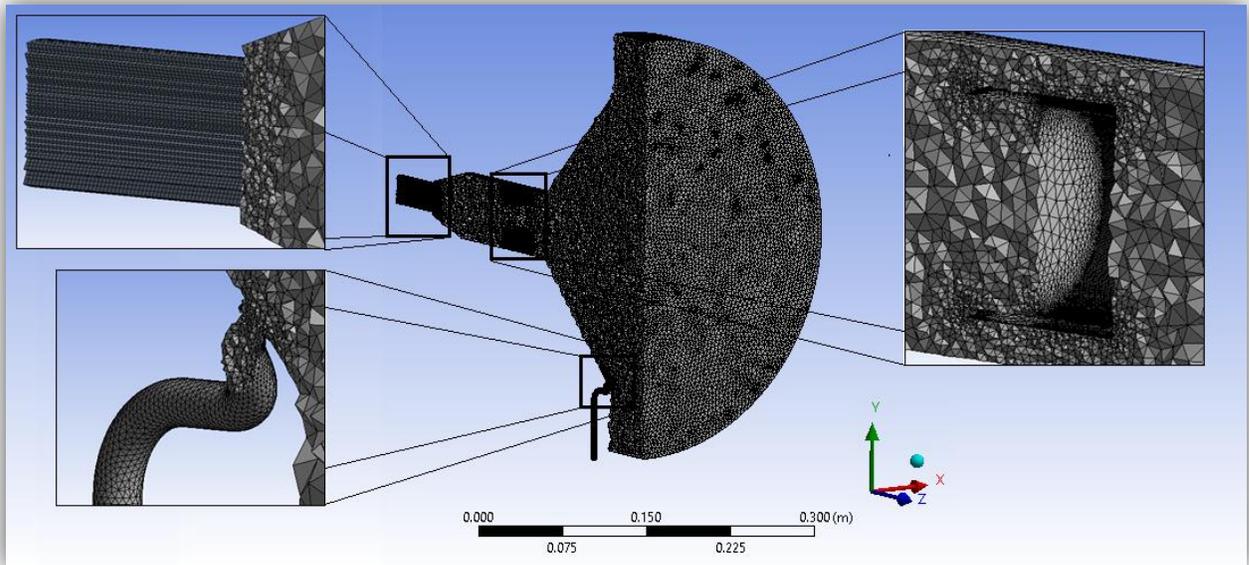


Figura 4.38: Corte isométrico del reactor preliminar. Los elementos de malla se presentan completos.

Como se mencionó anteriormente, para este modelo solo se consideran 3 entradas y una salida. En esta sección se les asigna un nombre para después poder configurar los parámetros de la simulación en FLUENT. Los nombres asignados se muestran en la figura 4.39. Nuevamente, todas las caras a las que no se le asigna un nombre son consideradas paredes o muros en el modelo.

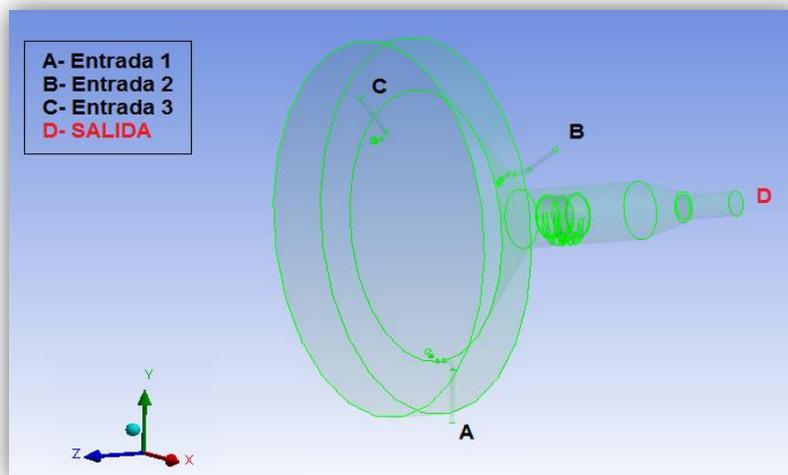


Figura 4.39: Asignación de nombres a las entradas y salidas del modelo del reactor.

4.8.3 Configuración de la simulación

Ahora se procede a realizar la primera aproximación de la solución. Es necesario recordar que esta primera aproximación se realiza para comprobar que efectivamente se simula una entrada y salida del fluido a través del modelo. La configuración de la simulación es la misma que se utilizó para el modelo del reactor preliminar en la sección 4.7.3.

4.8.4 Resultados de la primera aproximación

Con la primera simulación se comprueba que el modelo funciona. Ya que los métodos de revisión de convergencia se cumplen, es decir, las residuales cumplen el criterio de reducirse a valores menores que 10^{-3} (fig. 4.40), y el monitor de superficie para el flujo másico no registra cambios después de las 200 iteraciones (fig. 4.41). Además de cumplirse estas condiciones, la solución converge en la iteración 292.

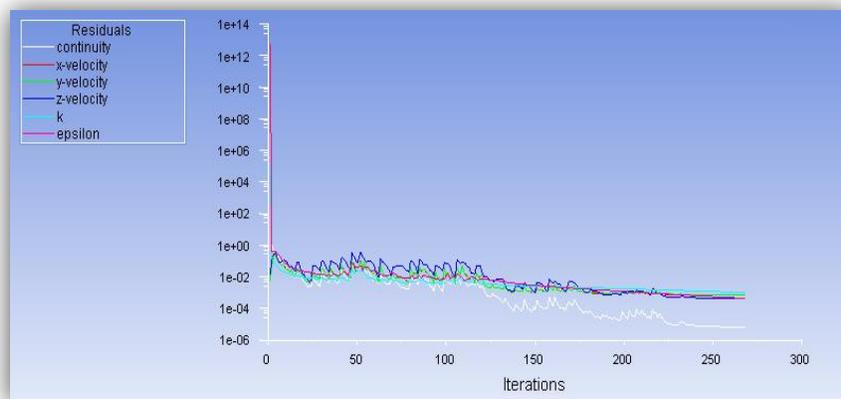


Figura 4.40: Monitor de residuales del reactor optimizado en su primera simulación.

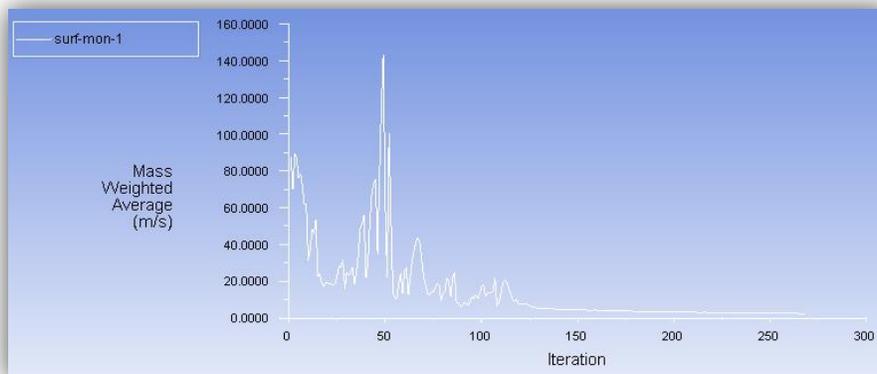


Figura 4.41: Monitor de flujo másico promedio a la salida del reactor optimizado en su primera simulación.

Para comprobar que los principios de conservación de masa y cantidad de movimiento sean correctos, se recurre al reporte de flujo, el cual cumple con el criterio del tercer método de revisión de convergencia. Éste nos dice que la simulación debe tener un desbalance neto del sistema menor al 0.2%. Los resultados numéricos se presentan en la tabla 4.6.

Tabla 4.6: Resultados de la primera simulación del modelo del reactor optimizado.

Velocidad Promedio en boquilla de salida (m/s)	1.509
Flujo volumétrico promedio en boquilla de salida (l/min)	47.150
Velocidad pico global (m/s)	16.823
Desbalance de flujo másico promedio (kg/s)	-5.846×10^{-13}
Iteración a la que converge	265
Tiempo aproximado de cómputo	00:47:21

Después de tener una primera simulación satisfactoria, es necesario realizar un análisis de independencia de malla para aproximarse más a la solución real.

4.8.5 Análisis de independencia de malla

Como ya se dijo anteriormente, la finalidad de este análisis es de demostrar que el comportamiento del fluido es independiente de la malla numérica, es decir, que el comportamiento real del fluido no depende de una malla imaginaria.

Diferentes simulaciones se realizan, variando el número de elementos de la malla hasta que los resultados dejen de variar significativamente. La configuración de las simulaciones es la misma que la descrita anteriormente para la primera simulación. Los resultados de 9 variaciones de los elementos de la malla se presentan en la tabla 4.7 de la siguiente página.

En esta tabla nuevamente se presentan los diferentes parámetros de cada simulación, sin embargo, se hace énfasis en las variaciones de la velocidad promedio en la boquilla de salida. Una forma de visualizar claramente las variaciones se presenta mediante la figura 4.42, en la cual se puede observar que a partir de aproximadamente 1 millón 900 mil elementos de malla, los resultados de las simulaciones para las velocidades ya no varían de manera significativa.

Tabla 4.7: Resultados del estudio de independencia de malla del reactor optimizado.

Simulación	Elementos	Nodos	Opción de Mallado	Velocidad Promedio en boquilla de salida(m/s)	Flujo volumétrico promedio en boquilla de salida (l/min)	Velocidad pico global (m/s)	Desbalance de flujo másico promedio (kg/s)	Iteración a la que converge	Tiempo aproximado de cómputo.
1	845 063	238 261	Curvatura y Proximidad	1.02611	31.813	16.8800	-7.243x10 ⁻¹³	239	00:20:09
2	890 379	246 671	Curvatura y Proximidad	1.71180	53.072	16.5864	5.162x10 ⁻¹⁵	330	00:33:02
3	912 638	250 608	Curvatura y Proximidad	1.75899	54.535	16.8323	-1.261x10 ⁻¹³	329	00:38:03
4	1 047 691	275 464	Curvatura y Proximidad	1.34738	41.774	16.6802	1.823x10 ⁻¹³	267	00:35:22
5	1 390 267	335 591	Curvatura y Proximidad	1.50898	46.784	16.8233	-5.846x10 ⁻¹³	265	00:47:21
6	1 601 205	372 066	Curvatura y Proximidad	1.68840	52.347	16.7762	1.013x10 ⁻¹¹	256	00:55:59
7	1 951 875	432 939	Curvatura y Proximidad	1.26330	39.167	16.5017	9.764x10 ⁻¹³	239	01:04:07
8	2 523 641	531 975	Curvatura y Proximidad	1.26178	39.120	16.8511	4.829x10 ⁻¹³	225	01:23:57
9	3 526 922	704 450	Curvatura y Proximidad	1.2414	38.488	16.4879	-7.731x10 ⁻¹²	202	01:54:57

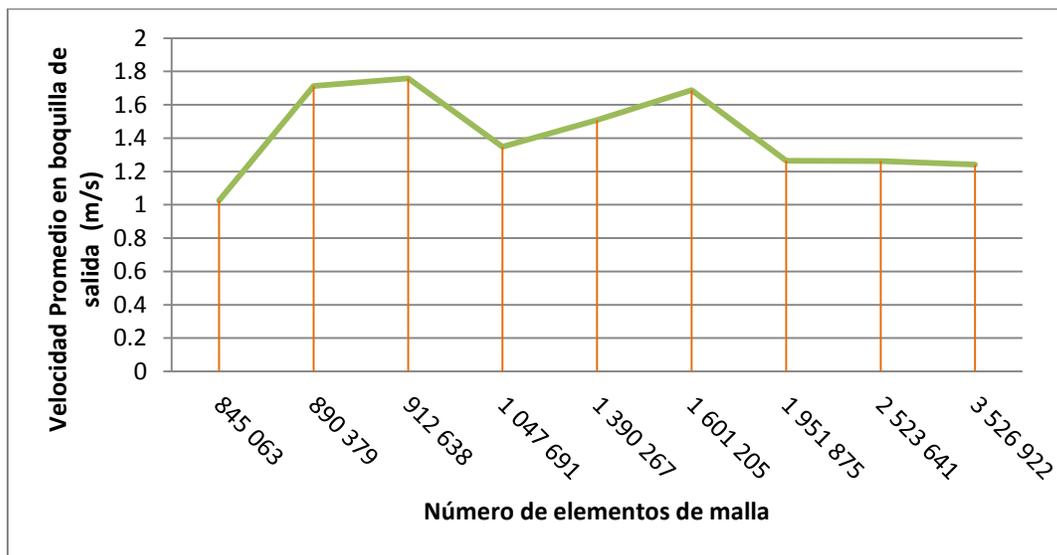


Figura 4.42: Variación de la velocidad promedio en la boquilla de salida con respecto al número de elementos de malla. Análisis de independencia de malla del reactor optimizado.

Finalmente, después de analizar los resultados obtenidos en cada una de las simulaciones, se determina que el modelo con una malla de 1 951 875 elementos y 432 939 nodos es el más apto para representar al fenómeno real, ya que si se considera un mayor número de elementos no se obtendrá variación alguna de los resultados. Los resultados numéricos se presentan en la tabla 4.8.

Tabla 4.8: Resultados de simulación para el modelo de reactor optimizado con una malla de 1 951 875 elementos.

Velocidad Promedio en boquilla de salida (m/s)	1.263
Flujo volumétrico promedio en boquilla de salida (l/min)	39.464
Velocidad más alta a la salida (m/s)	4.133
Velocidad pico global (m/s)	16.502
Desbalance de flujo másico promedio (kg/s)	9.763×10^{-13}
Iteración a la que converge	239
Tiempo aproximado de cómputo	01:04:07

4.8.6 Visualización de flujo

El primer resultado de la simulación se visualiza mediante un render de volumen para las velocidades, y se presenta en la figura 4.43. En ella se aprecia como entra el gas de trabajo por cada uno de los tres pasa-tubbings y se aloja en la sección cónica. Después se dirige a la salida, pasando por el nuevo volumen generado por la implementación de la capa de aislante al interior de la cavidad. Finalmente rodea la muestra de coque y sale a través de la sección cilíndrica de la brida CF2.75.

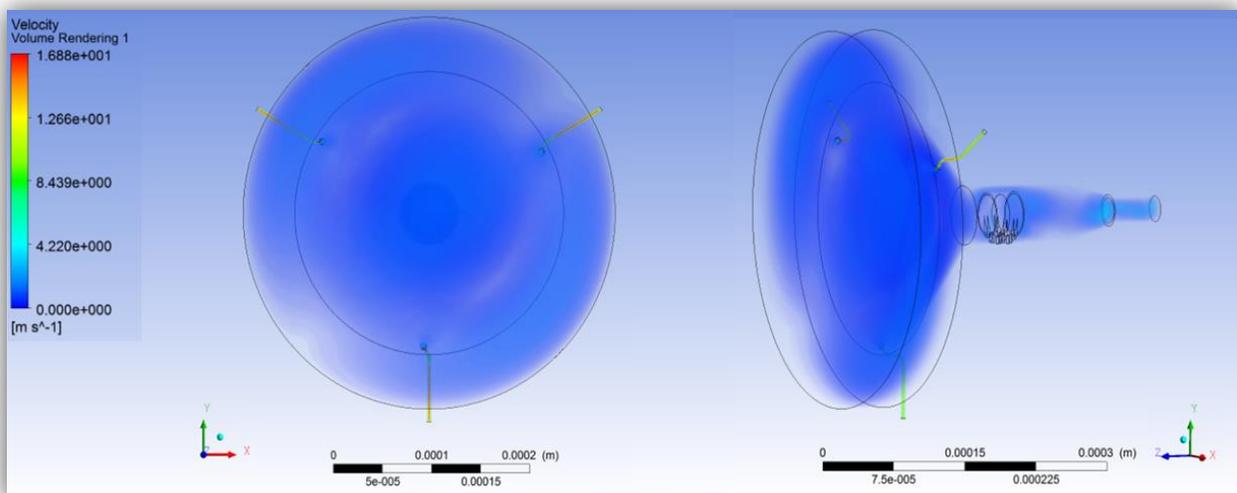


Figura 4.43: Render de volumen para las velocidades del gas de trabajo en el reactor optimizado. Vista frontal y vista isométrica. Simulación con modelo κ - ϵ , método SIMPLE y TKE: Primer Orden.

El render anterior presenta las velocidades en un rango global. Esto dificulta la visualización de las velocidades en distintas zonas del modelo, ya que, debido a que las velocidades al interior de los pasa-tubbings son mucho más altas que las del resto del modelo, no es posible identificar las velocidades más bajas mediante una clara variación de colores. Las velocidades más altas al interior de los pasa-tubbings son de aproximadamente 16.502 m/s y descienden considerablemente al entrar a la sección cónica del reactor (fig. 4.44).

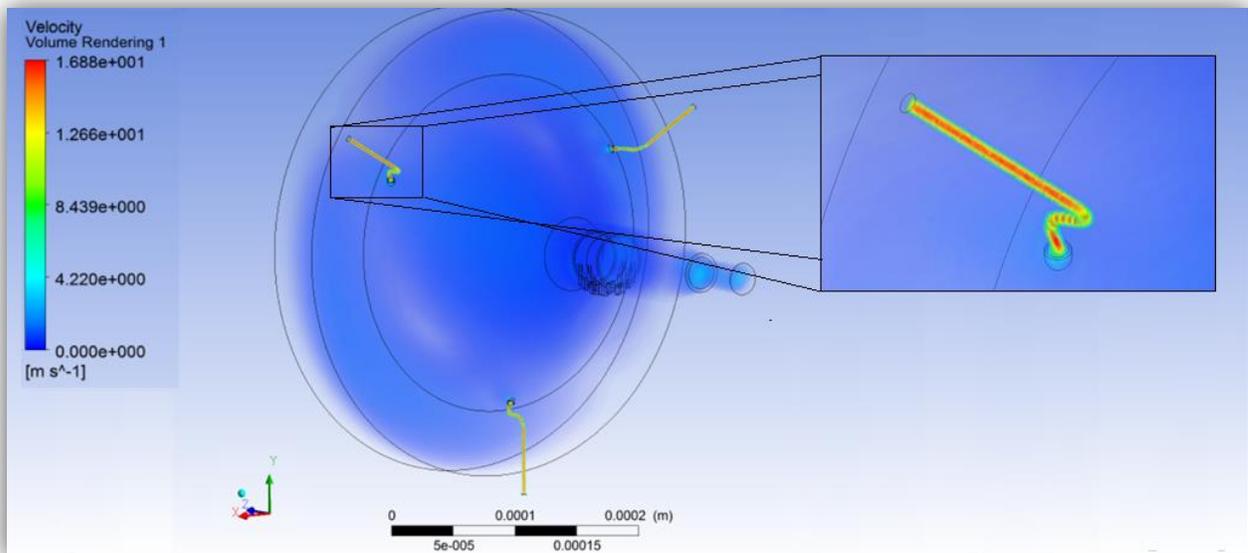


Figura 4.44: Las velocidades más altas se presentan al interior de los tubos inyectores.

Para poder visualizar claramente las zonas en el interior donde las velocidades cambian, se recurre al procedimiento llevado a cabo para el modelo del reactor preliminar. Mediante una modificación del rango, se define una velocidad predeterminada como máxima, para que adquiera el color rojo en la gráfica. Si elegimos una velocidad baja, se pueden determinar más fácilmente las zonas en donde se esperan gradientes importantes de velocidad. La figura 4.45 muestra el gráfico para una velocidad máxima de 1 m/s. En la figura se puede apreciar claramente que las velocidades en los inyectores son mucho mayores, como ya se había mostrado, sin embargo, se observa también que el fluido presenta gradientes notables de velocidad al rodear a la muestra y al aproximarse a la salida del modelo. Una vez identificadas las zonas de interés, se puede realizar una gráfica de contorno de rango local, para conocer y visualizar las velocidades para un plano determinado.

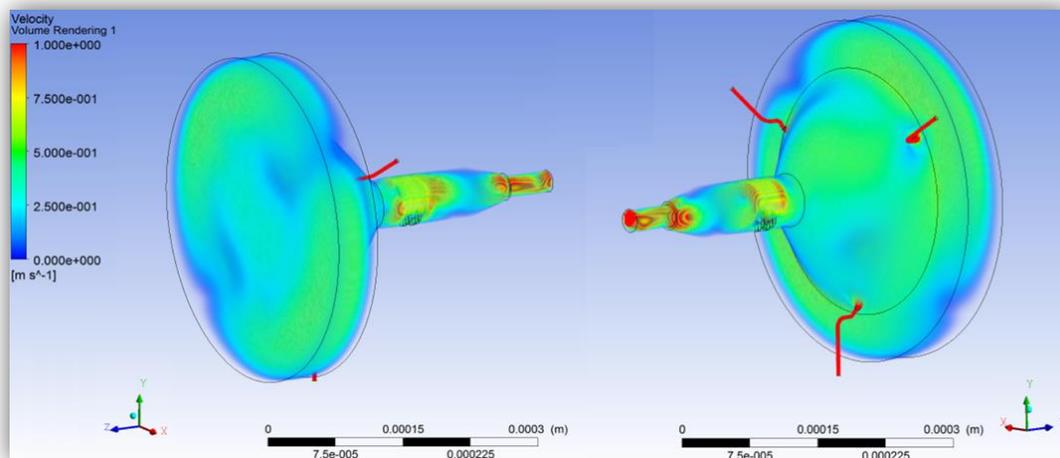


Figura 4.45: Render de volumen para las velocidades del gas de trabajo en el reactor optimizado. Rango de velocidades de 0 a 1 m/s. Simulación con modelo κ - ϵ , método SIMPLE y TKE: Primer Orden.

En las figuras 4.46 y 4.47 se presentan dos gráficas de contornos de rango local para las velocidades. La primera mediante un plano ZX que atraviesa todo el modelo, brindando información importante sobre los gradientes de velocidad en las zonas de interés. La segunda por medio de un plano XY, mostrando los campos de flujo, pero a través de un corte vertical. Con estos gráficos se determina que las velocidades más altas al interior del reactor y fuera de los tubos inyectoras, se presentan en las zonas próximas a la boquilla de salida y son de aproximadamente 4.133 m/s, como se había obtenido en los resultados numéricos de la tabla 4.8.

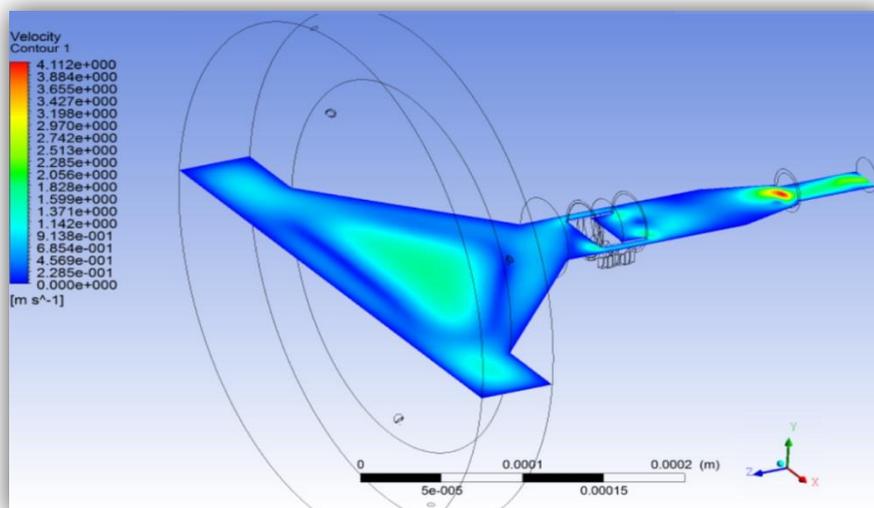


Figura 4.46: Gráfica de contornos del reactor optimizado con rango de velocidades local. Plano ZX a la mitad del modelo. Simulación con modelo κ - ϵ , método SIMPLE y TKE: Primer Orden.

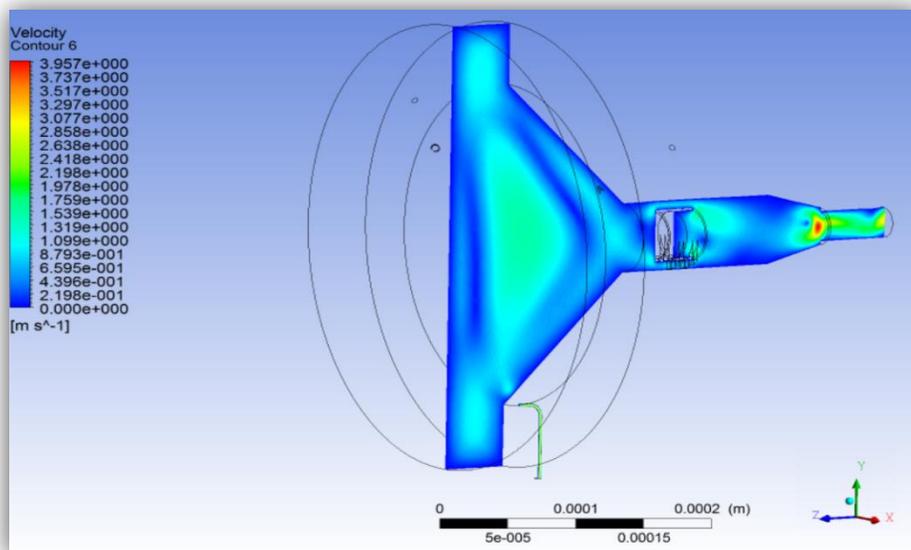


Figura 4.47: Gráfica de contornos del reactor optimizado con rango de velocidades local. Plano XY a la mitad del modelo. Simulación con modelo κ - ϵ , método SIMPLE y TKE: Primer Orden.

Si modificamos el rango de velocidades del modelo, definiendo 4.133 m/s (velocidad más alta a la salida) como la velocidad máxima, podemos apreciar el comportamiento del gas al pasar por la muestra de coque, como se muestra en la figura 4.48.

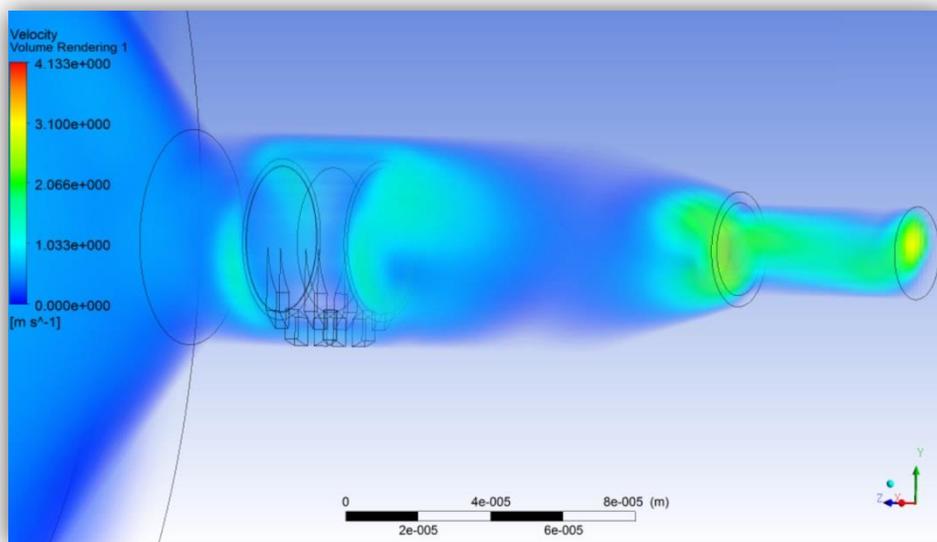


Figura 4.48: Comportamiento del fluido al atravesar la muestra. Render de volumen para las velocidades del gas de trabajo en el reactor optimizado. Rango de velocidades de 0 a 4.133 m/s. Simulación con modelo κ - ϵ , método SIMPLE y TKE: Primer Orden.

Como puede apreciarse, las velocidades en las zonas cercanas a la pastilla son mayores a 1 m/s y aumentan conforme se acercan a la boquilla de salida, alcanzando como máximo velocidades de aproximadamente 4.133 m/s. Además, frente a la pastilla, atrás de ella y en la entrada del cilindro de salida se presentan remolinos de flujo. Estos se aprecian mejor mediante una gráfica de líneas de corriente (fig. 4.49). Los remolinos favorecen el arrastre de los gases hacia la salida del reactor.

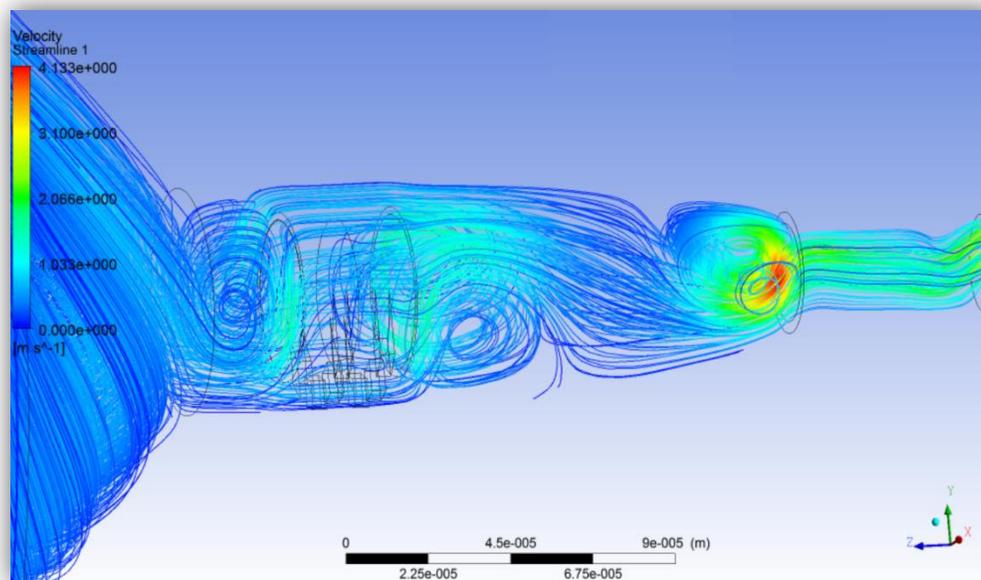


Figura 4.49: Remolinos de flujo generados al rodear la muestra de coque al interior del reactor. Gráfica de líneas de corriente para las velocidades del gas de trabajo en el reactor optimizado. Rango de velocidades de 0 a 4.133 m/s. Simulación con modelo κ - ϵ , método SIMPLE y TKE: Primer Orden.

Los remolinos generados presentan una gran ventaja con respecto al modelo del reactor preliminar, en el cual los gases se estancaban en la mayoría de las zonas del interior de la cavidad. Por otro lado la apertura de cono, cumple la tarea de dirigir el gas hacia el volumen de reacción, sin embargo no se obtiene un incremento de velocidad considerable en éste, como se puede apreciar en las figuras 4.46 y 4.47. Además, los remolinos de flujo que se presentan frente a la pastilla, producen un reflujó entre el cono y el área de reacción, reduciendo las velocidades adquiridas por el gas en su viaje a través del cono. En la figura 4.50 se puede observar más claramente, a través de líneas de corriente, cómo el cono implementado ayuda en la circulación del gas y lo dirige hacia el volumen de reacción. Las velocidades graficadas al interior de la apertura de cono son de más de 1 m/s, de esta manera se comprueban también las ventajas que presenta una apertura de cono con respecto a la apertura del reactor preliminar presentado con anterioridad, en el cual las velocidades eran menores a 1 m/s, presentando un estancamiento. Las líneas de corriente se simulan desde la

entrada 1. Además, mediante la vista frontal mostrada en la misma figura, se puede ver como se reparte el gas por la ventana generando vórtices.

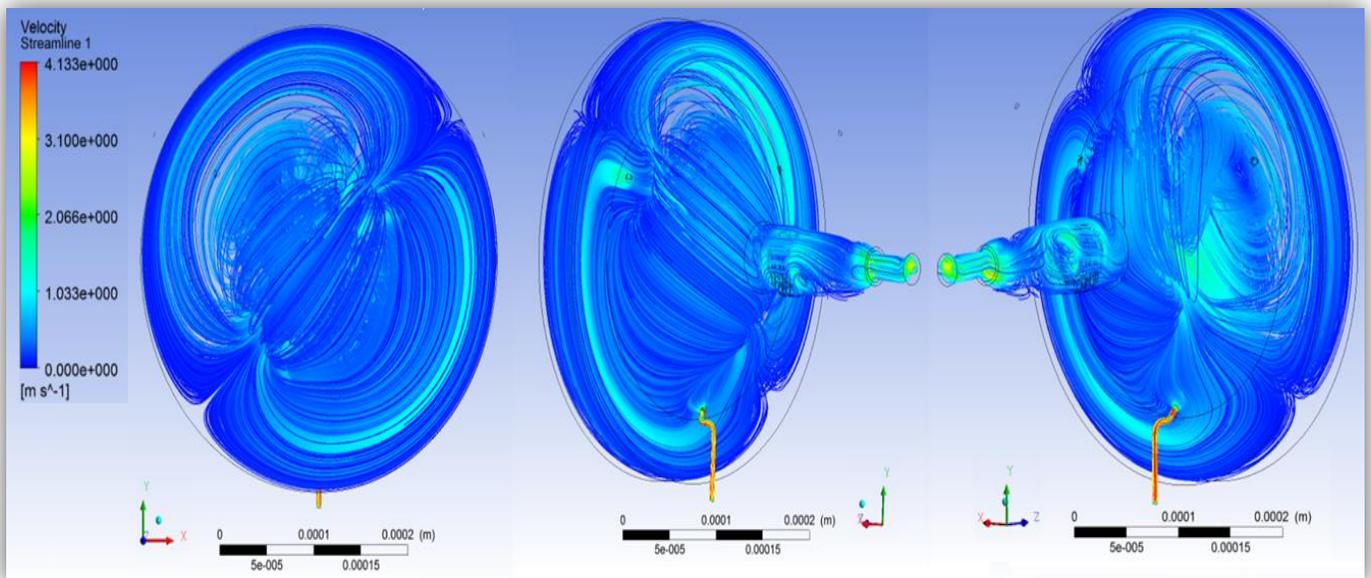


Figura 4.50: Gráfica de líneas de corriente para las velocidades del gas de trabajo en el reactor optimizado. De izquierda a derecha, vista frontal y dos vistas isométricas. Rango de velocidades de 0 a 4.133 m/s. Simulación con modelo κ - ϵ , método SIMPLE y TKE: Primer Orden.

4.8.7 Validación del modelo

El proceso de validación es el mismo empleado para el modelo del reactor preliminar. La única diferencia es la omisión del método de acople presión-velocidad PISO, por el pobre desempeño que presentó en la simulación de este problema en particular.

En la tabla 4.9 se presentan los resultados numéricos de cada combinación de parámetros en la configuración de la simulación. En ella se pueden apreciar los diferentes valores de velocidad obtenidos en cada cálculo, así como la diferencia porcentual de estas velocidades con respecto a los de la primera aproximación descrita anteriormente (modelo κ - ϵ , método SIMPLE, TKE: Primer Orden). Otros datos como el tiempo de cómputo o el número de iteración a la que converge la simulación también se presentan en la misma.

Tabla 4.9: Simulaciones del reactor optimizado con diferentes parámetros de configuración.

Modelo de Turbulencia	Método de acople presión-velocidad	Esquema de diferenciación hacia adelante para ecuación TKE	Velocidad Promedio en boquilla de salida (m/s)	Diferencia porcentual con respecto a la primera simulación (%)	Flujo volumétrico promedio en boquilla de salida (l/min)	Velocidad más alta a la salida (m/s)	Diferencia porcentual con respecto a la primera simulación (%)	Velocidad pico global (m/s)	Desbalance de flujo másico promedio (kg/s)	Iteración a la que converge	Tiempo aproximado de cómputo
κ - ϵ	SIMPLE	Primer Orden	1.263	--	39.464	4.133	--	16.502	9.763×10^{-13}	239	01:04:07
κ - ϵ	SIMPLE	Segundo Orden	1.062	15.91	33.183	4.107	0.63	16.509	9.393×10^{-11}	245	01:14:58
κ - ϵ	SIMPLEC	Primer Orden	0.939	25.65	29.340	6.015	45.54	16.510	3.425×10^{-11}	175	00:59:14
κ - ϵ	SIMPLEC	Segundo Orden	0.953	24.54	29.778	6.322	52.96	16.510	3.403×10^{-11}	174	00:58:43
Esfuerzos de Reynolds	SIMPLE	Primer Orden	0.950	24.78	29.684	3.096	25.09	17.050	3.539×10^{-12}	318	01:16:23
Esfuerzos de Reynolds	SIMPLE	Segundo Orden	0.952	24.62	29.746	3.166	23.40	17.044	1.019×10^{-12}	333	02:22:14
Esfuerzos de Reynolds	SIMPLEC	Primer Orden	0.816	35.39	25.497	5.201	25.84	17.050	1.153×10^{-10}	195	01:38:18
Esfuerzos de Reynolds	SIMPLEC	Segundo Orden	0.986	21.93	30.809	4.442	7.48	17.043	-2.801×10^{-11}	251	02:08:59

Como puede apreciarse en la tabla, las variaciones porcentuales de la velocidad promedio en la boquilla de salida son considerables con respecto a la primera simulación, de más del 20%. Sin embargo, la variación no es muy grande entre las demás simulaciones, es decir, en aquellas en donde se utiliza el modelo κ - ϵ con método SIMPLEC y el resto que consideran un modelo de Esfuerzos de Reynolds, las variaciones porcentuales de las velocidades promedio a la salida son mínimas.

Si recurrimos a la literatura, ésta nos dice que una simulación en donde se utiliza el modelo de transporte de Reynolds, en teoría debe ser más precisa, debido a las 7 ecuaciones de transporte que intervienen en el cálculo. Sin embargo, para poder determinar con exactitud qué solución se aproxima más al comportamiento real del fluido, es necesario complementar el estudio con una validación experimental. Por el momento, en ausencia de una experimentación para corroborar con exactitud los resultados, mediante este estudio se puede suponer que las velocidades promedio en la boquilla de salida del reactor, y que se esperan en el fenómeno real, oscilan en el rango de 0.8 y 1.2 m/s.

La visualización de los campos de velocidades no cambia considerablemente con respecto a la primera simulación realizada con el modelo κ - ϵ y el método SIMPLE, descrita a detalle anteriormente. Como ejemplo, se puede apreciar en la figura 4.51 el mismo comportamiento en las velocidades que presentó el gas al rodear a la muestra

en la primera simulación, pero ahora con un modelo de esfuerzos de Reynolds, método SIMPLEC y un esquema de aproximación de segundo orden.

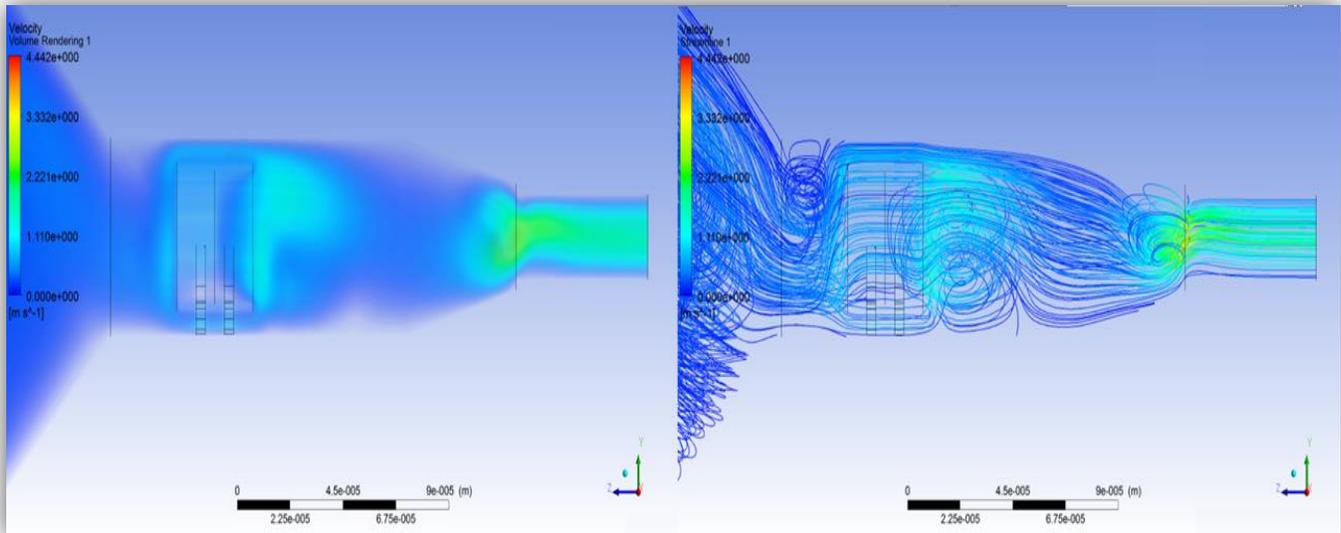


Figura 4.51: Comportamiento del fluido al atravesar la muestra de coque en el reactor optimizado. A la izquierda render de volumen para las velocidades del gas de trabajo, a la derecha gráfica de líneas de corriente para las mismas. Rango de velocidades de 0 a 4.442 m/s. Simulación con modelo de esfuerzos de Reynolds, método SIMPLEC y TKE: Segundo Orden.

4.8.8 Conclusiones de la simulación del reactor optimizado

Con el modelo del reactor optimizado se ha comprobado que el fluido no se estanca al interior del reactor. A pesar de utilizar solo 3 pasa-tubbings para la inyección de la mezcla de gas, el fluido, impulsado por la apertura de cono y los remolinos generados dentro del nuevo volumen, se mantiene en constante movimiento hasta llegar a la boquilla de salida de productos. La velocidad es superior a 1 m/s en la mayoría de las zonas del interior del reactor, comportamiento que no se presentó en el reactor preliminar. El modelo desarrollado requiere de una evaluación experimental para demostrar su validez, sin embargo, un estudio que considera numerosas simulaciones con configuraciones diferentes se realizó, demostrando que las velocidades esperadas a la salida del modelo oscilan en el rango de 0.8 y 1.2 m/s para un flujo de 10 l/min.

CAPÍTULO 5

5 SELECCIÓN DE MATERIALES Y DISEÑO DE LAS PIEZAS

En este capítulo se hace una descripción de las piezas que conforman el reactor preliminar y la propuesta de reactor optimizado, ésta última resultante de los estudios realizados en el capítulo 3 y el capítulo 4. El capítulo inicia con una explicación general de los componentes que conforman el reactor preliminar y después de la propuesta de optimización, es decir, se realiza una breve explicación de algunos dispositivos y accesorios utilizados, la selección de los materiales adecuados para su construcción, y finalmente se lleva a cabo la descripción de las piezas y ensambles para cada reactor.

5.1 Generalidades de algunos dispositivos y accesorios

Como se mencionó al principio del capítulo 3, la propuesta de optimización objetivo de esta tesis, parte de un modelo preliminar desarrollado en una tesis doctoral en proceso, la cual se realiza en el Instituto de Energías Renovables (IER) de la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM). Este modelo es de un reactor solar destinado a la gasificación térmica por vapor de coque de petróleo.

Algunas consideraciones previas deben realizarse para comprender mejor el ensamble del reactor, por ejemplo, conocer las piezas para realizar una conexión en aplicaciones de vacío, o los instrumentos para realizar las mediciones necesarias.

5.1.1 Bridas

Para llevar a cabo la reacción de gasificación del coque de petróleo, es primordial mantener una atmósfera inerte que no afecte en la reacción. Para mantener la atmósfera deseada, se requiere realizar vacío adentro de la cavidad del reactor. De esta manera y por medio de un gas de purga inerte, en este caso Argón, se puede eliminar el aire dentro de la cavidad y por ende trabajar en la atmósfera deseada. Para poder sellar la cavidad y así generar vacío, se usan las bridas.

Las *bridas* se utilizan para hacer conexiones entre diferentes dispositivos, como bombas, tuberías, calderas, instrumentos, válvulas u otros accesorios. La conexión se realiza por medio de dos bridas, una que le corresponde al primer dispositivo y la otra, al dispositivo que se requiere conectar. Las bridas, además de realizar un sello efectivo entre ellas, proporcionan una excelente facilidad de manipulación en el montaje y desmontaje de cualquier dispositivo. En el diseño del reactor se emplean dos tipos de bridas:

- **Bridas de vacío CF.** Las bridas ConFlat o CF (marca registrada por Varian Associates), se utilizan en aplicaciones de alto vacío, además poseen una baja permeabilidad y buenas propiedades térmicas. El funcionamiento de este tipo de bridas es crear un sello mecánico, el cual se logra al presionar el metal de la brida contra un metal más blando, para que al deformarse éste último, se genere el sello. Cada una de las bridas poseen una pestaña maquinada en donde se lleva a cabo el contacto con el metal más blando, la junta metálica deformada rellena cualquier defecto en la superficie de los bordes de la pestaña de la brida. El metal blando generalmente es cobre de alta conductividad y puede utilizarse solo una vez. Por otro lado las bridas CF se forman a partir de cilindros macizos de acero inoxidable con procesos de corte, bajo el estándar internacional ISO 3669. Las bridas CF y la junta metálica se muestran en la figura 5.1.

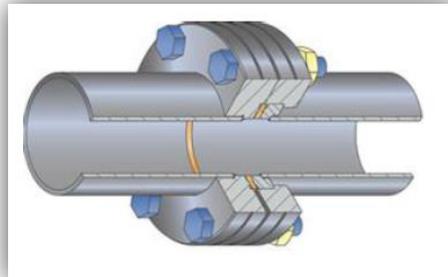


Figura 5.1: Esquema de unión de dos bridas CF y junta metálica de cobre de alta conductividad al centro.

Algunas consideraciones al momento de manipular las bridas son las siguientes: se debe procurar que al atornillarlas la fuerza aplicada sea uniforme para cada tornillo, de esta manera la deformación del sello metálico también será uniforme. También debe utilizarse tornillería de acero inoxidable. Algunas especificaciones para las bridas CF se presentan en la tabla 5.1.

Tabla 5.1: Especificaciones de las bridas CF (Rubí-Delgado, 2014).

Diámetro Nominal	Diámetro mm (inch)	Espesor mm	Diámetro Junta mm	Diámetro Interior mm	Número de tornillos
DN 10	25.4 (1")	6	13.4	18	6 x M3
DN 16	34 (1.33")	8	21	27	6 x M4
DN 25	54 (2.12")	12	33	41	6 x M4
DN 35	70 (2.75")	13	48	59	6 x M6
DN 50	86 (3.38")	16	61	72	6 x M6
DN 63	114 (4.5")	17	82	92	8 x M8
DN 75	117 (4.62")	18	92	102	10 x M8
DN 100	154 (6")	20	120	130	16 x M8
DN 125	171 (6.75")	21	142	152	18 x M8
DN 150	203 (8")	22	171	181	20 x M8
DN 200	254 (10")	25	222	232	24 x M8
DN 250	305 (12")	25	272.7	284	32 x M8
DN 250 "imperial"	305 (12")	27	270	283	32 x M10

- **Bridas de vacío KF.** Del alemán "Klein" que significa pequeña, que en algunos casos se cambia por la Q de "Quick", que en inglés es rápida y "Flange" que significa brida en el mismo idioma, las bridas KF o QF son las conexiones estándar para bombas e instrumentos en aplicaciones de vacío. En este tipo de bridas, el sello lo realiza un anillo tórico que suele ser de vitón, este anillo va colocado en medio de las bridas por medio de un anillo de centrado con una ranura en su diámetro exterior, sobre el cual se coloca el anillo tórico. El ensamble del anillo de centrado con la junta tórica se coloca en la ranura de la brida, y se presionan mediante una abrazadera, deformando el anillo tórico y generando el sello. La abrazadera externa es de bisagra con tuerca de mariposa. El sistema de sellado y sus componentes se presentan en la figura 5.2.

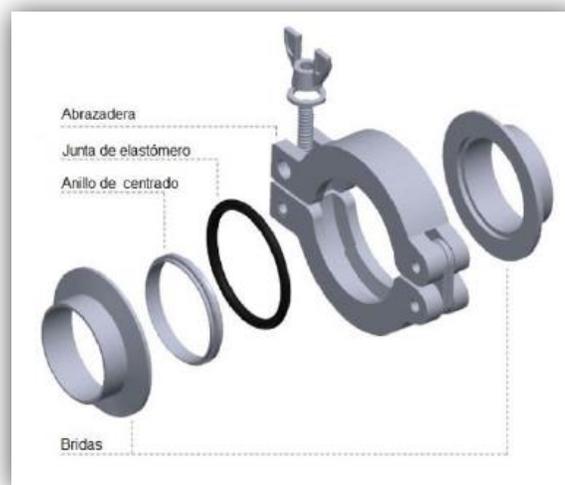


Figura 5.2: Conexión de Brida KF con abrazadera.

Las bridas KF o QF también se fabrican a partir de cilindros macizos de acero inoxidable y por medio de corte con máquinas herramienta, todo esto bajo el estándar ISO 2861. Algunas características de las bridas KF o QF se muestran en la tabla 5.2.

Tabla 5.2: Especificaciones de las bridas KF o QF (Rubí-Delgado, 2014).

Diámetro nominal	Diámetro mm	Diámetro ranura mm	Espesor mm
DN 10	30	12.2	5
DN 16	30	17.2	5
DN 25	40	26.2	5
DN 40	55	41.2	5
DN 50	75	52.4	6

5.1.2 Pasamuros Eléctricos (PME)

Los pasamuros eléctricos son usados para crear una conexión entre herramientas dentro de una región de vacío y el exterior. Están fabricados de uno o más conductores, los cuales pasan por una brida de vacío, pero están aislados de ella. El material aislante, generalmente vitrocerámica, debe poder resistir una presión de 1 bar del lado del aire cuando la cámara haya sido evacuada. La figura 5.3 muestra ejemplos de este tipo de dispositivo. Los PME se pueden diseñar para ser acoplados a una brida CF o KF.



Figura 5.3: Diferentes tipos de pasa muros eléctricos. De izquierda a derecha, para voltaje bajo, voltaje medio y corriente media.

5.1.3 Transductores de presión

Un sensor de presión o transductor de presión, es un elemento que transforma la magnitud física de presión por otra magnitud eléctrica. Esta última es la que se utiliza en los equipos de automatización o de adquisición de datos. Los rangos de medida pueden ser desde unas milésimas de bar, hasta miles de bar.

La conversión de presión en una señal eléctrica se lleva a cabo mediante la deformación física de los extensómetros, los cuales están unidos al diafragma del transductor de presión. La presión que se aplica al transductor, produce una deflexión del diafragma, lo cual introduce la deformación en los medidores. Esta deformación produce un cambio de resistencia eléctrica proporcional a la presión. En la figura 5.4 se presenta un transductor de presión marca COLE-PARMER.



Figura 5.4: Transductor de presión COLE-PARMER.

5.1.4 Termopares

Los termopares son los sensores comúnmente empleados en la medición de la temperatura, debido a su elevada exactitud y a su capacidad de operación en un amplio rango de temperaturas. Su funcionamiento consiste en exponer el conductor eléctrico del que está hecho el termopar, a un gradiente de temperatura, entonces el flujo de calor se asocia al flujo de electrones y es posible medir un voltaje.

En el mercado existen diferentes tipos de termopares, lo cual nos lleva a considerar diferentes criterios para su selección, como por ejemplo, el rango de temperatura a la que se va trabajar, y las condiciones de trabajo. La tabla 5.3 muestra los diferentes tipos de termopares, éstos se clasifican por medio de letras mayúsculas que indican la composición del conductor, en base a las normas del Instituto Nacional Americano de Estándares (ANSI).

Tabla 5.3: Tipos de termopares en el mercado.

Termopar	Conductor +	Conductor -	Rango de Temperatura
K	Níquel – Cromo	Níquel - Aluminio	0 a 1100 °C
T	Cobre	Cobre - Níquel	-185 a 300 °C
J	Hierro	Cobre - Níquel	20 a 70 °C
N	Níquel - Cromo - Silicio	Níquel - Silicio - Magnesio	0 a 1150 °C
E	Níquel – Cromo	Cobre - Níquel	0 a 800 °C
R	Platino - 13% Rodio	Platino	0 a 1600 °C
S	Platino - 10% Rodio	Platino	0 a 1550 °C
B	Platino - 30% Rodio	Platino - Rodio	100 a 1600 °C
G	Tungsteno	Tungsteno - Renio	20 a 2320 °C
C	Tungsteno - 5% Renio	Tungsteno - 26% Renio	50 a 1820 °C
D	Tungsteno – 3% Renio	Tungsteno - 25% Renio	20 a 2320 °C

5.2 Reactor Preliminar

5.2.1 Selección de Materiales

Para la selección de los materiales del reactor, es necesario considerar diversas restricciones:

- El material de la cavidad debe tener una buena resistencia a los choques térmicos.
- La ventana debe poseer una alta transmitancia, esto es, que permita el paso del máximo flujo radiativo posible y soportar altos gradientes térmicos.
- Los materiales de los componentes deben ser estables al momento de entrar en contacto con los reactivos y productos de la gasificación.
- El ensamble debe ser adecuado para operar bajo vacío.

Por esta razón se han propuesto diferentes materiales basándose en trabajos previos realizados sobre la construcción de un reactor solar, de entre los cuales pueden mencionarse:

- Acero inoxidable para la carcasa y bridas, debido a su buena resistencia a los gradientes térmicos. Soporta una temperatura máxima de aproximadamente 800 °C, pero ésta varía de acuerdo a la aleación utilizada. Debido a esto, debe seleccionarse una buena combinación entre calidad y precio.
- La ventana será de cuarzo óptico, debido a su excelente transmitancia en todo el espectro solar, lo cual permite el mayor paso de radiación posible. Además, el cuarzo comienza su degradación aproximadamente a los 900°C. Generalmente se utiliza Pyrex[®] para la construcción de ventanas para aplicaciones solares, debido a que presenta ventajas en sus costos, sin embargo este material no puede soportar temperaturas mayores a los 500°C. Utilizar una ventana de cuarzo también proporciona el beneficio de poder posicionarla más cerca de la zona focal, lo cual con una ventana de Pyrex[®] no puede hacerse.
- Para evitar un excesivo calentamiento en la ventana, se utilizará una brida refrigerante por la cual circulará agua. Este tubo de refrigeración se fabricará con cobre, ya que posee una alta conductividad térmica y una buena maleabilidad.
- Para detener la pastilla de coque, se utilizará un crisol de alúmina de alta pureza, ya que ésta presenta una resistencia térmica de hasta 1800°C (Alonso, 2014). Otra ventaja de la alúmina de alta pureza, es que posee una baja reactividad química y su costo es moderado.

5.2.2 Diseño de las piezas del reactor preliminar

La descripción del diseño de las piezas del reactor preliminar puede dividirse en tres secciones o ensambles, el ensamble frontal, central y posterior.

ENSAMBLE FRONTAL DEL REACTOR

-Bridas de refrigeración CF10.

Las bridas de refrigeración CF10 se posicionan al frente de la ventana de cuarzo, y cumplen, junto con el tubing de cobre, la función de mantener a la ventana a una temperatura adecuada, evitando así el calentamiento excesivo y la degradación de ésta. Las dos bridas son discos de acero inoxidable de un espesor de 12.34mm con un diámetro exterior de 393.69mm, pero con diámetros interiores diferentes, de 224.33mm y 211.65mm como puede verse en la figura 5.5.

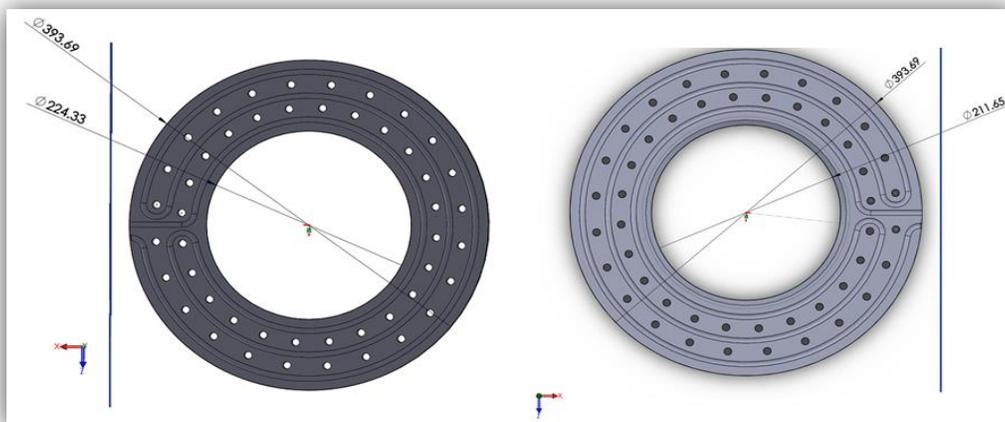


Figura 5.5: Bridas CF10 para la refrigeración de la ventana.

La diferencia de diámetros internos genera un ángulo de 45° al momento de acoplarse ambas bridas, como se observa en la figura 5.6. Esto es para que las bridas bloqueen lo menos posible el paso del flujo solar.

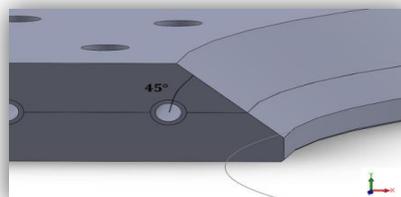


Figura 5.6: Ángulo de 45° entre las bridas

Ambas bridas cubren al tubing de cobre, a través del cual se hará pasar agua como fluido refrigerante. El cobre posee buena conductividad y alta maleabilidad. En la figura 5.7 pueden apreciarse los componentes antes de llevar a cabo el ensamble de ambas bridas y el tubing.



Figura 5.7: Elementos del ensamble de brida y tubing de cobre.

El ensamble de las bridas de refrigeración y el tubing se representa en la figura 5.8. En este punto ya puede ser acoplado a la brida CF10 que sujeta a la ventana de cuarzo de 21.368cm.

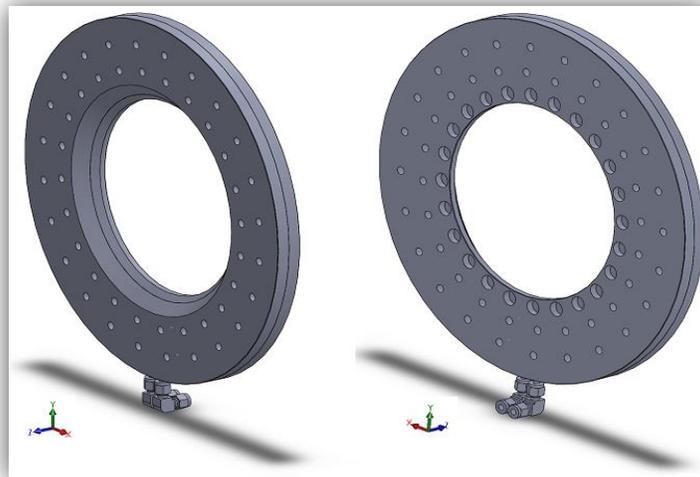


Figura 5.8: Ensamble completo de bridas CF10 de refrigeración y tubing de cobre.

-Ventana de Cuarzo.

La ventana de cuarzo óptico del reactor sería marca Kurt J. Lesker modelo VPZL-1000Q, de 10 pulgadas de diámetro y con una transmitancia desde 0.8 a 1.9 μm . La ventana está sujeta por una brida CF10 de 25.33 cm de diámetro exterior, y debido al grosor de la brida, el diámetro efectivo de la ventana es de 21.368 cm. Entre la brida CF10 y la ventana se encuentra un anillo de vitón para llevar a cabo el sello. Las piezas antes de ser ensambladas se pueden apreciar en la figura 5.9 y el ensamble completo queda representado en la figura 5.10.

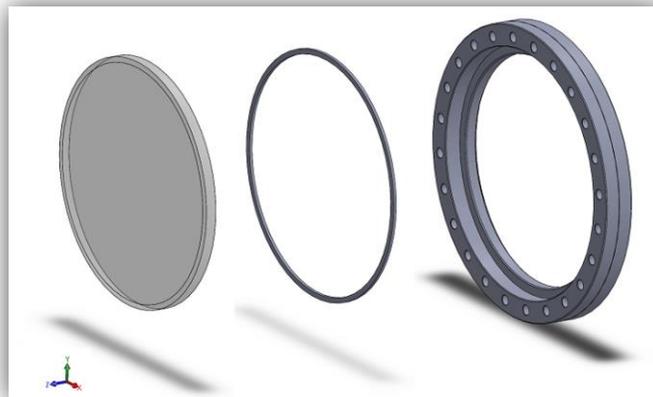


Figura 5.9: Componentes del ensamble de ventana. De izquierda a derecha, Ventana de cuarzo, junta de vitón y brida CF10.

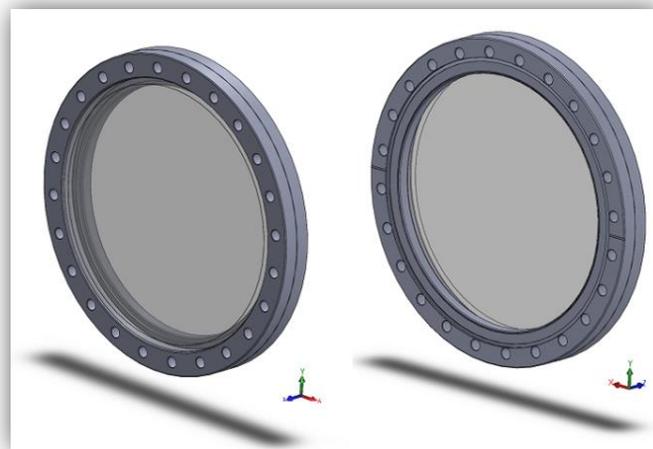


Figura 5.10: Vistas isométricas del ensamble completo de ventana de cuarzo y brida CF10.

La brida CF10, de acero inoxidable, posee 24 barrenos para tornillería 5/16", los cuales coinciden con los orificios de la brida de refrigeración con la que hace contacto.

-Brida de acople CF10 a CF16.50.

La brida CF10 que sostiene a la ventana de cuarzo debe acoplarse al cilindro de la cavidad del reactor, sin embargo, el cilindro tiene un diámetro de 16.5", y por ende necesita ser acoplado a una brida CF16.50. La unión entre la ventana y la cavidad se logra mediante la brida de acople que se muestra en la figura 5.11.

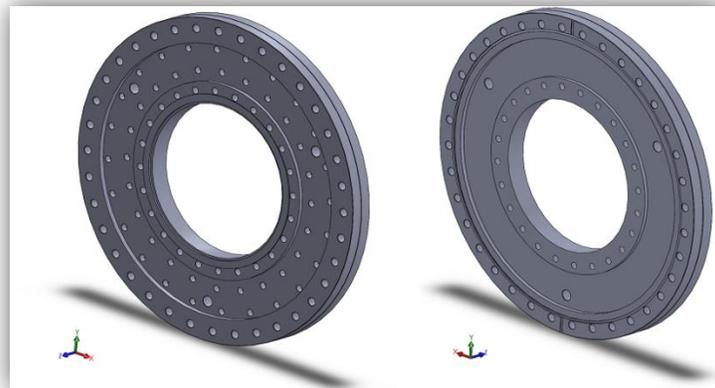


Figura 5.11: Vistas isométricas de la brida de acople.

Esta brida posee un maquinado interno, coincidente con la brida CF10 de la ventana, es decir, del mismo diámetro externo e interno que la brida y con 24 barrenos para tornillería de 5/16". Una junta metálica de cobre permite el sello entre la brida CF10 de la ventana y la brida de acople. En la vista isométrica derecha de la figura 5.11, se puede apreciar en los bordes de la brida, el maquinado que coincide con la brida CF16.50, la cual va unida a la cavidad del reactor y sellada por medio de un anillo de cobre deformable. Esta sección de la brida posee 36 barrenos para tornillería de 3/8", coincidente con los de la brida CF16.50.

Además de las secciones de acople con la brida CF10 y la brida CF16.50, la pieza cuenta con tres orificios de 1/4" de diámetro distribuidos equi-angulamente en la parte plana de la brida, para el paso de los inyectores de Argón. Esto también puede apreciarse en la vista isométrica derecha de la figura 5.11.

-Inyectores de gas.

La figura 5.12 muestra un inyector de gas Argón de tubing de acero inoxidable 326 de 1/4". Se coloca un inyector, a un ángulo de 45° con respecto a un radio, en cada uno de los 3 orificios equi-angulares de la sección plana de la brida de acople, con el fin de crear un canal por el que pueda pasar argón hacia la ventana.



Figura 5.12: Inyector de gas Argón de acero inoxidable.

El gas de purga tiene la función de impedir la acumulación de material sólido o la condensación de algún gas producto de la gasificación, o incluso de vapor de agua, y al mismo tiempo, de enfriar la ventana para evitar un calentamiento excesivo. En la figura 5.13 se muestra el ensamble de los tres inyectores con la brida de acople.

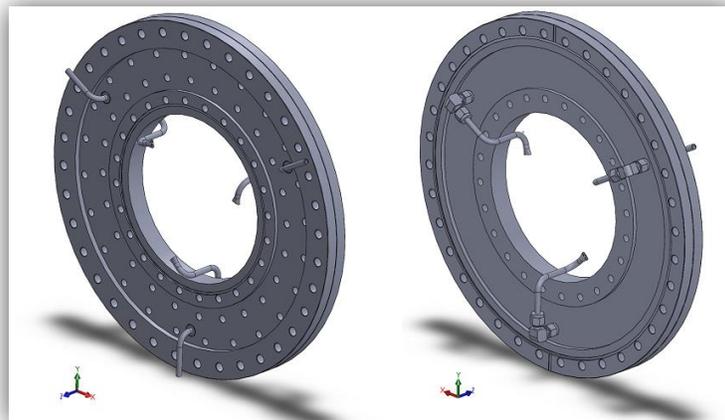


Figura 5.13: Ensamble de brida de acople con los tres inyectores de gas argón.

-Ensamble de componentes.

La figura 5.14 nos muestra a las bridas de refrigeración, la ventana de cuarzo con su brida CF10, la junta metálica de cobre y la brida de acople con sus tres inyectores de purga de la ventana antes de ser ensamblados. El ensamble frontal completo se muestra en la figura 5.15.



Figura 5.14: Componentes del ensamble frontal.

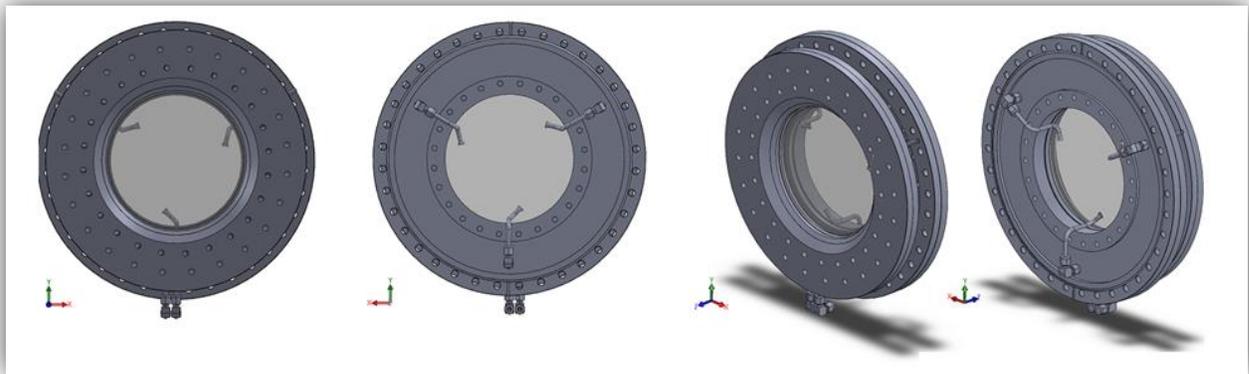


Figura 5.15: Ensamble frontal completo. De izquierda a derecha, vista frontal, vista posterior y dos vistas isométricas.

ENSAMBLE CENTRAL DEL REACTOR

-Cavidad.

La cavidad es la parte más importante del reactor, ya que delimita el volumen donde se llevará a cabo el proceso de gasificación. Además es el esqueleto de la estructura, y el componente que sostiene a todos los demás. Está compuesta por acero inoxidable, posee un diámetro interior de 348 mm, un largo de 300 mm y un grosor de 3.76 mm (fig. 5.16).

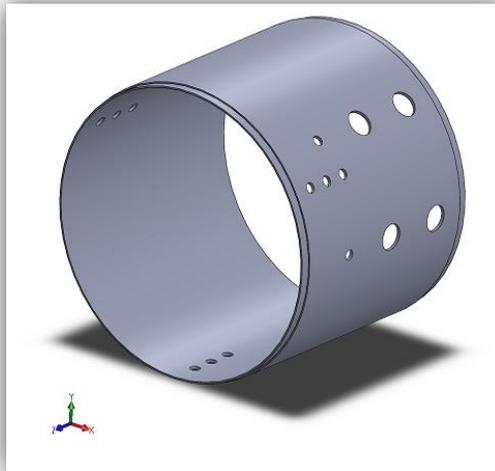


Figura 5.16: Cavity del reactor.

-Brida CF16.50.

La forma de unir el ensamble frontal y el posterior con la cavity, es mediante bridas CF16.50 (fig.5.17). Cada una posee 36 barrenos para tornillería de 3/8" y una junta metálica de cobre para realizar el sello. La brida CF16.50 frontal de la cavity se atornilla a la brida de acople que sostiene a la ventana y a la brida de refrigeración. Por otro lado, la brida posterior de la cavity, se une con la tapa trasera y sus respectivos componentes.

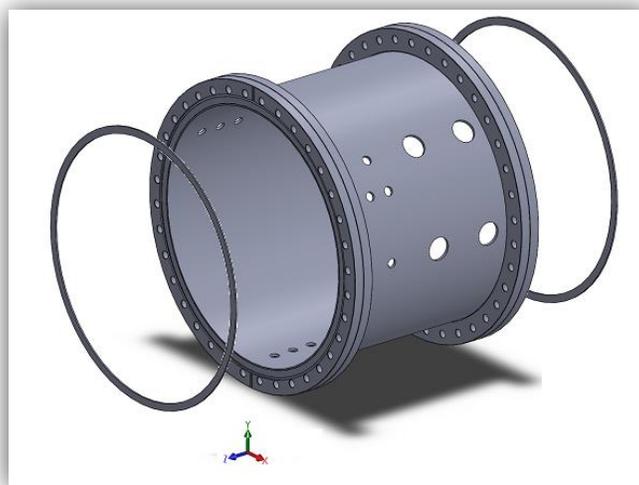


Figura 5.17: Cavity del reactor con bridas CF16.50 y juntas metálicas.

Una ventaja de poder desmontar la parte frontal y posterior del reactor, es la facilidad del montaje de la muestra y manipulación de termopares al interior del mismo. De esta forma se vuelve modular, lo que implica un manejo más accesible del reactor completo.

-Pasa-tubbing.

El pasa-tubbing es una pieza cilíndrica hueca de acero inoxidable con dos diferentes diámetros (fig. 5.18), su única función es la de inyectar gases al reactor. Éste posee un diámetro exterior cuya función es la de poder soldar el pasa-tubbing con la cavidad del reactor. El diámetro en la parte central es de 1/2 "y en los extremos de 1/4". Si se soldara en los tubos de 1/4" existiría riesgo de fugas, ya que no tienen mucho material que aportar a la unión.



Figura 5.18: Pasa-tubbing.

El reactor cuenta con nueve pasa-tubbings de acero inoxidable 316 de 1/4" de diámetro distribuidos equi-angulamente en la sección cilíndrica de la cavidad y cerca de la ventana (fig. 5.19). A través de estos se inyectan los diferentes tipos de gases, como Argón, Vapor de agua o una mezcla de ambos.

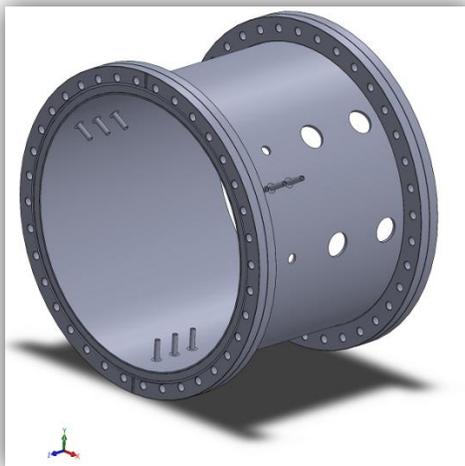


Figura 5.19: Distribución de pasa-tubbings en la cavidad del reactor.

-Muestra de coque.

La pastilla de coque se posiciona en el reactor de acuerdo a la figura 5.20. Como puede observarse, se utiliza un soporte que sujeta a la porta muestras, y esta última a la muestra de coque. El porta muestras, será un crisol de alúmina de alta pureza, ya que soporta temperaturas de hasta 1800°C, y tiene una baja reactividad.

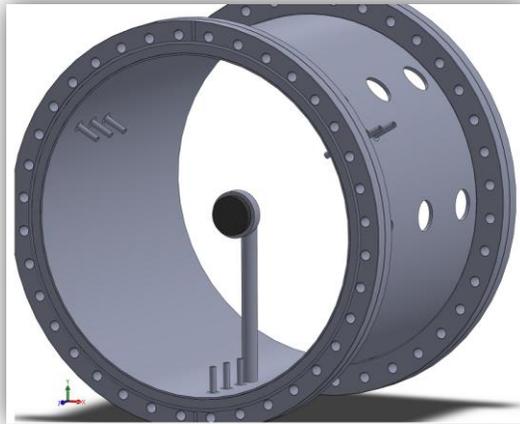


Figura 5.20: Soporte, porta muestras y pastilla de coque ensamblados a la cavidad.

Es importante mencionar que la distancia de la ventana a la muestra es de 11.712 en este reactor preliminar, para garantizar la integridad de la ventana.

-Brida CF2.75.

La brida CF2.75 o CF 3/4", es una pieza de conexión (fig.5.21). El disco posee 11.88 mm de espesor con un diámetro exterior de 69.40 mm y un diámetro interior de 21.33 mm. El diámetro interior es igual al diámetro de la tubería que se utiliza para conectar la brida.

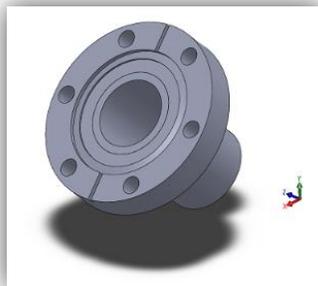


Figura 5.21: Brida CF2.75.

Esta brida realiza el sello de conexión mediante un anillo de cobre, el cual se deforma al conectarse con otra brida CF2.75. Las dos ranuras rectangulares que se aprecian en la figura sirven para remover el anillo deformado.

En la sección cilíndrica del reactor se instalaron cuatro entradas con brida CF2.75 (fig. 5.22), de las cuales pueden utilizarse para varias finalidades. Pueden ser canales para ingresar termopares de ser necesarios, a través de un pasa muros eléctrico, o también pueden utilizarse para acoplar ventanas de cuarzo grado UV, que sirvan como mirillas a la hora de realizar una medición con pirómetro.

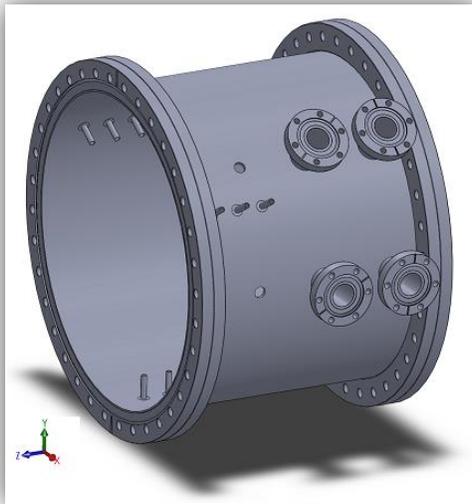


Figura 5.22: Ensamble de bridas CF2.75 en la cavidad del reactor.

Los pasamuros eléctricos serán marca Kurt J. Lesker de termopares tipo R (modelo TFT3RN00003 para 3 alimentaciones), K (modelo TFT5KY00003 para 5 alimentaciones) o C (modelos TFT5CY00003 con 5 entradas).

Las ventanas que pueden acoplarse a las bridas CF2.75 son de cuarzo grado UV marca Kurt J. Lesker, modelo VPZL-275Q con un rango de transmitancia de 0.2 a 1.9 μm . También pueden ser ventanas de fluoruro de magnesio, misma marca, modelo VPZL-275UM y con una transmitancia de 0.2 a 5.5 μm .

El pirómetro OMEGA modelo IR2C-600-33-C24-L2MM con capacidad de 600°C a 1800°C puede ser utilizado en las ventanas antes mencionadas. También el modelo IR2C-1000-33-C24 con rango de temperatura de 1000°C a 3000°C. Ambos tienen un espectro de medición de entre 0.8 y 1.7 μm .

-Bridas CF1.33.

La brida CF1.33 o CF 1 1/3" también es una pieza de conexión (fig.5.23). El disco tiene un grosor de 11.88mm de espesor, un diámetro exterior de 69.40mm y un diámetro interior de 16mm. Al igual que la brida CF2.75, realiza el sello al apretar, en la conexión con otra brida igual, un anillo de cobre hasta deformarse.



Figura 5.23: Brida CF1.33.

En la cavidad del reactor, se utilizan dos bridas CF1.33, que quedan posicionadas como se muestra en la figura 5.24. También pueden servir para acoplar pasamuros eléctricos de termopares, éstos pueden ser de 3 alimentaciones, marca Kurt J. Lesker para termopares tipo R (modelo TFT3RN00002), K (modelo TFT3KY00002) y C (modelo TFT3TN00002).

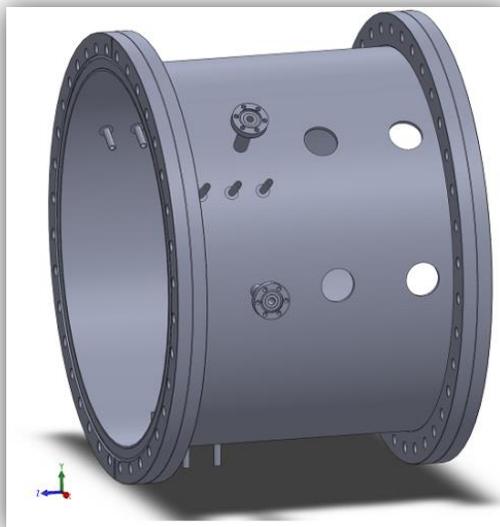


Figura 5.24: Ensamble de bridas CF1.33 en la cavidad del reactor.

-Ensamble de componentes.

Las componentes que se describieron y que conforman el ensamble central se presentan en la figura 5.25 ya ensambladas. Éstas incluyen a la cavidad, las bridas CF16.50, los pasa-tubbings, el soporte de la pastilla de coque, las bridas CF2.75 y las bridas CF1.33.

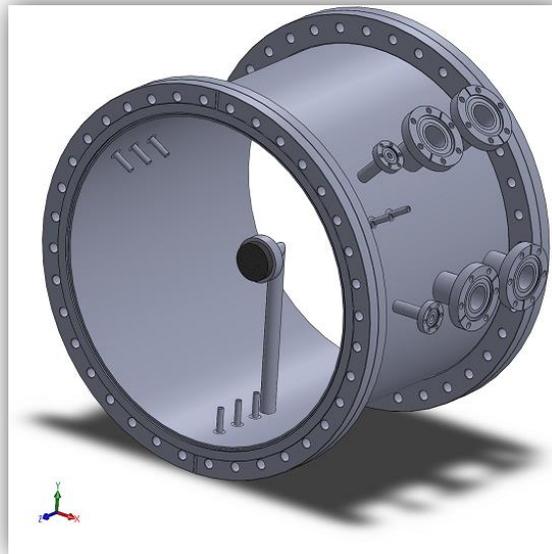


Figura 5.25: Ensamble central completo.

ENSAMBLE POSTERIOR DEL REACTOR

-Brida posterior CF16.50.

Esta brida funciona como tapa del reactor, posee un maquinado que hace posible su acople con la brida CF16.50 de la parte posterior de la cavidad del reactor, por medio de una junta metálica de cobre. Además este acople permite el fácil montaje y desmontaje de la tapa del reactor con la cavidad del mismo. La brida posee 5 orificios, 4 de 12.70 mm repartidos a distancias iguales, en donde se colocarán 2 bridas KF25 y 2 bridas KF16 (fig. 5.26). Los 4 orificios rodean un orificio central de 31.65 mm, en donde se alojará una brida CF2.75, la cual es la principal salida de productos del reactor. También se puede acoplar a la brida CF2.75 un pasa muros eléctrico bridado CF2.75 para termopares tipo K, R o C con tres o cinco terminales.

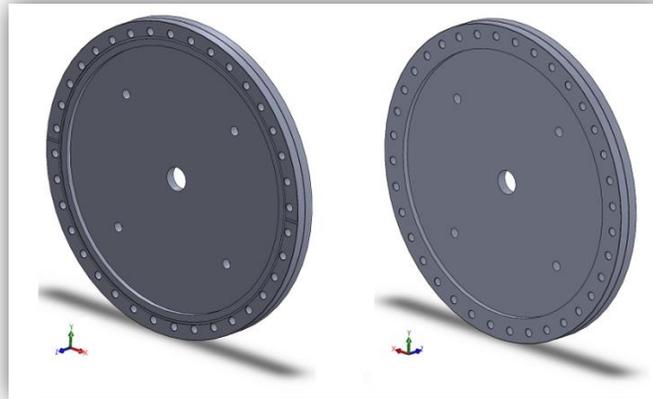


Figura 5.26: Brida posterior CF16.50.

-Brida KF25.

Este tipo de brida también se utiliza para realizar conexiones, y posee un diámetro exterior de 40 mm y un diámetro interior de 12.64 mm. Además, tiene un canal con una profundidad de 2.54 mm, sobre el cual se coloca el anillo de centrado que realizará el sello de la conexión (fig. 5.27).

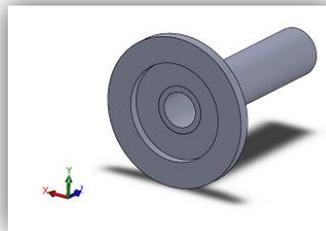


Figura 5.27: Brida KF25.

En la parte posterior del reactor se hallan 2 bridas KF25: una es utilizada para conectar una bomba de vacío mecánica de marca LEYBOLD, modelo TRIVAC D8B para vacío medio de hasta 2×10^{-3} mbar. La otra brida puede ser utilizada como una salida alterna de productos.

-Brida KF16.

Una brida con la misma función pero de menor tamaño, es la brida KF16. Ésta posee un diámetro exterior de 30 mm y un diámetro interior de 12.64 mm, para ser

conectada al mismo tipo de tubería que utiliza una brida KF25. De igual manera, tiene un canal de profundidad de 2.54 mm, en donde se coloca un anillo de centrado para llevar a cabo el sello.

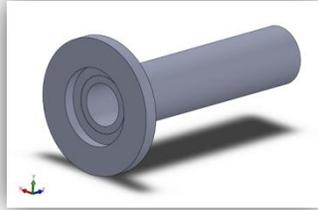


Figura 5.28: Brida KF16.

Por medio de 2 bridas KF16, se alojará un sensor de presión DUALTRANS™ o COLE PARMER con las siguientes características:

- Transductor de presión marca MKS modelo DUALTRANS™ serie 910 con sensores micropirani y piezo transductor absoluto. Rango de medición de 5×10^{-4} Torr a 1500 Torr.
- Transductor de presión compuesto marca COLE PARMER modelo 316 SS 30 Hg 100 psi con rango de -14.7 a 100 psi.

-Ensamble de componentes.

La brida posterior, las dos bridas KF25, las dos bridas KF16 y la brida CF2.75 quedan montadas como se muestra en la figura 5.29.

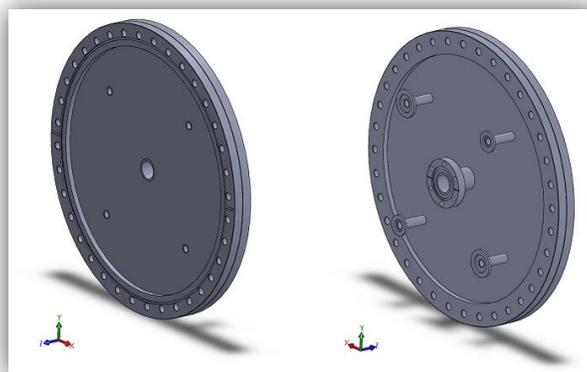


Figura 5.29: Ensamble posterior completo.

5.2.3 Ensamble final del reactor preliminar

La unión final de los ensambles frontal, central y posterior puede observarse en las diferentes vistas presentadas en las figuras 5.30 y 5.31, y en los cortes mostrados en las figuras 5.32 y 5.33.

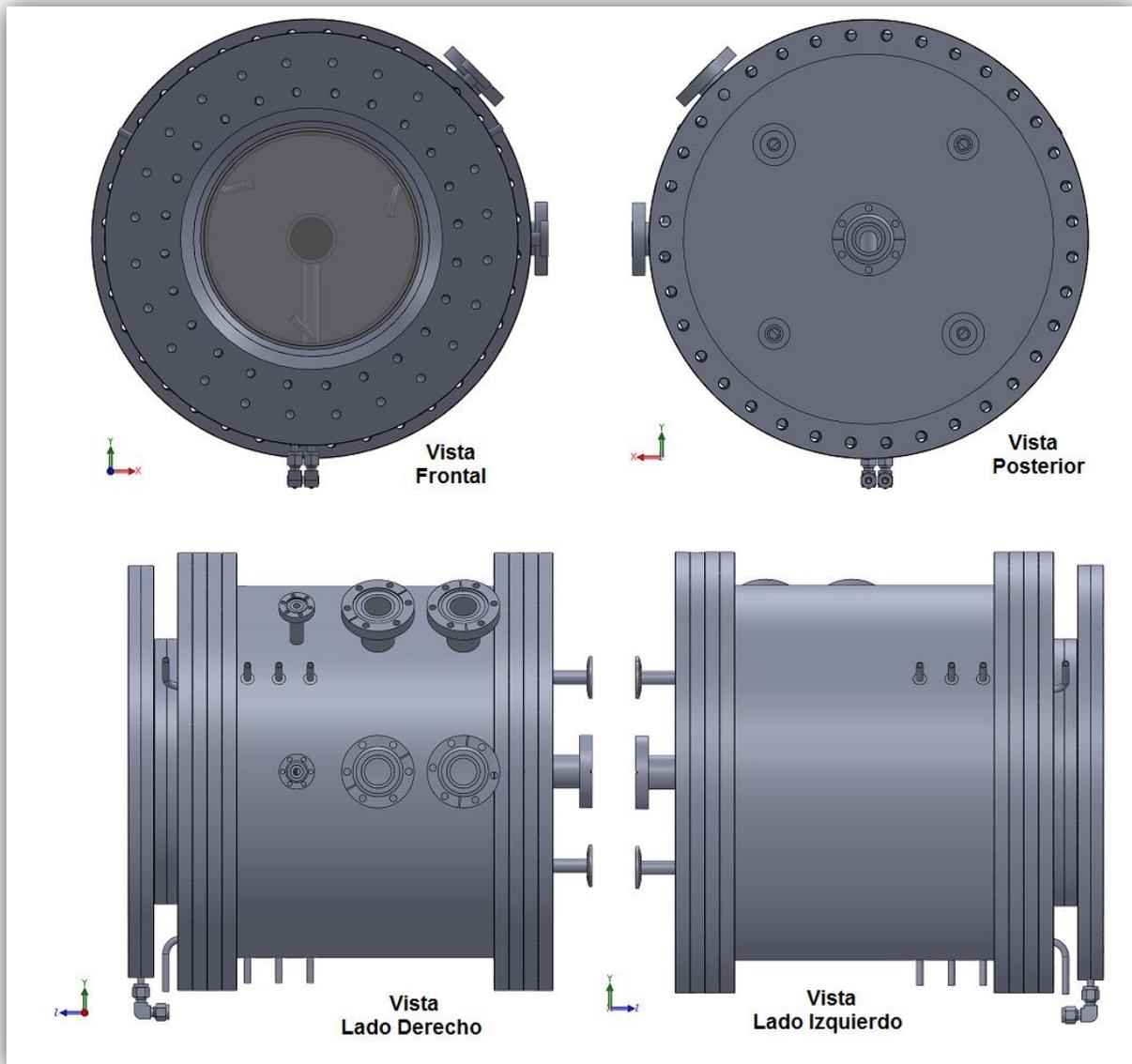


Figura 5.30: Vistas principales del reactor preliminar.

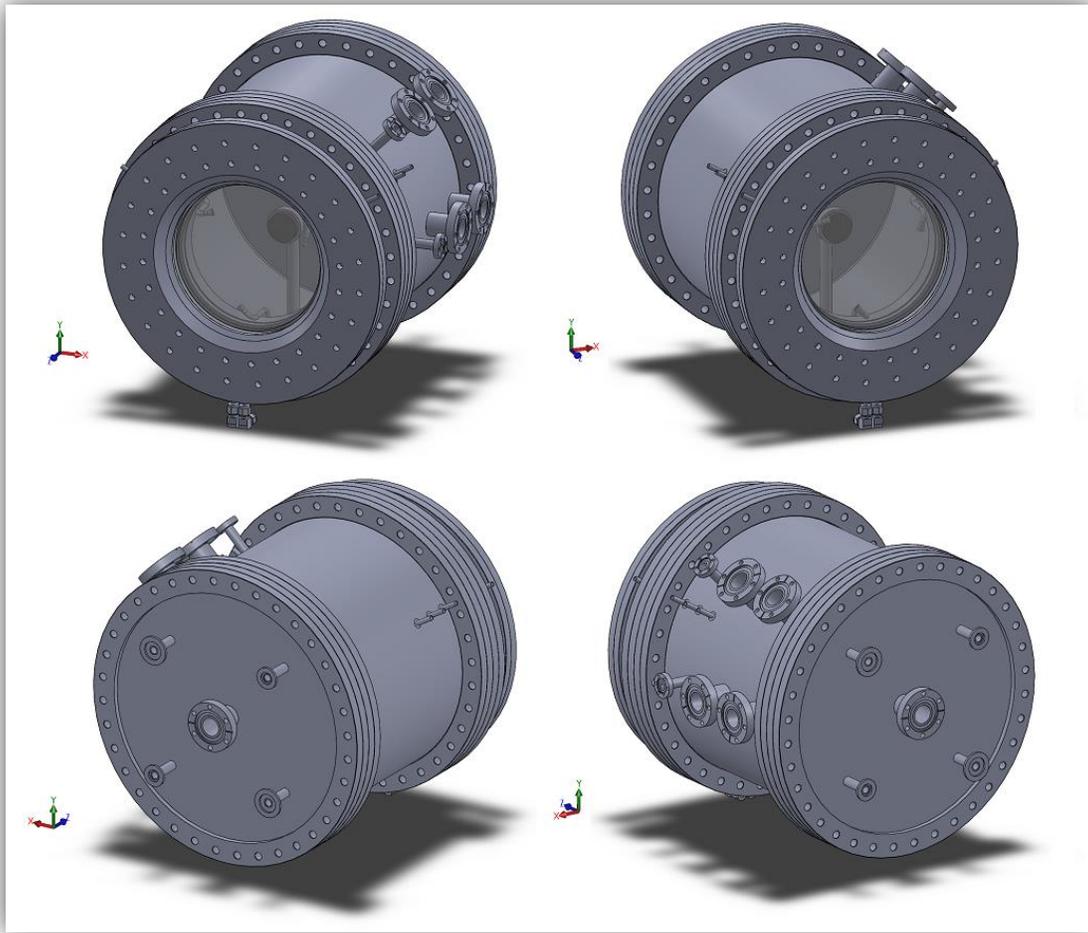


Figura 5.31: Vistas isométricas del reactor preliminar.

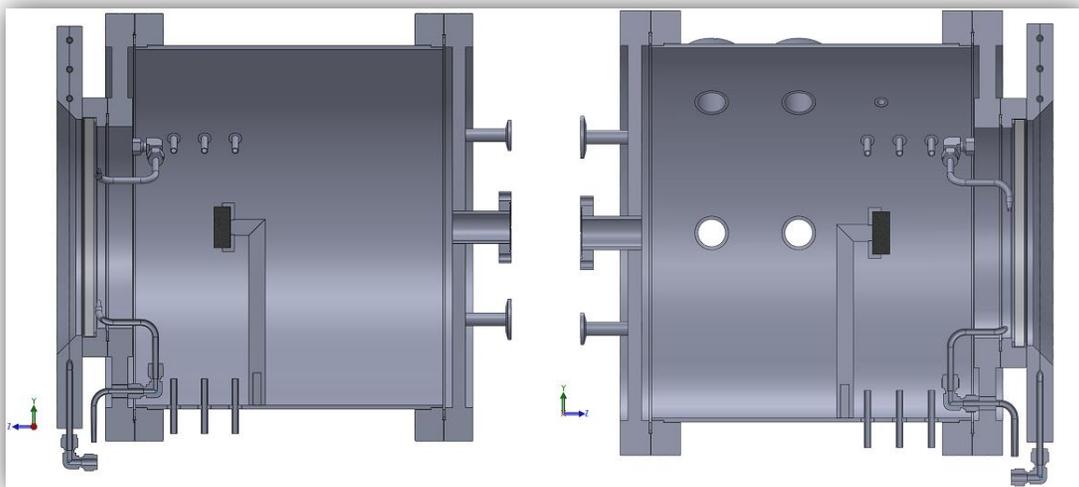


Figura 5.32: Vistas de sección del reactor preliminar.

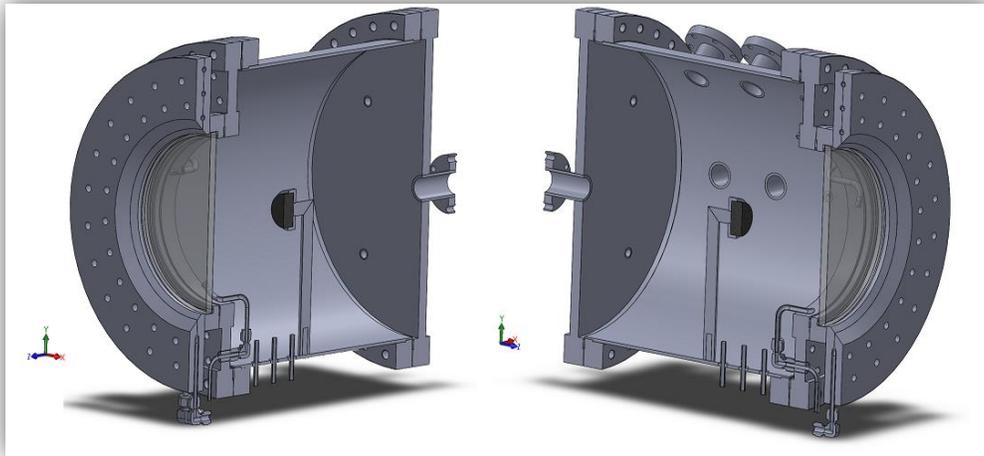


Figura 5.33: Cortes isométricos del reactor preliminar.

5.3 Reactor Optimizado

Como se mencionó anteriormente, el objetivo de esta tesis es una propuesta de optimización para el reactor preliminar descrito anteriormente. En base a los resultados del análisis de distribución de radiación del capítulo 3, en donde se determinó que la distancia adecuada de posicionamiento de la ventana de cuarzo es de 18 cm, y por otro lado, comprobando las ventajas de utilizar una apertura de campana para evitar el estancamiento de los fluidos de arrastre, por medio de simulaciones CFD realizadas en el capítulo 4, a continuación se describe la propuesta de optimización.

5.3.1 Selección de materiales

Los materiales que se mencionaron en el apartado del reactor preliminar, y que se propusieron basándose en el estado del arte de reactores para la gasificación de materiales carbonáceos, se conservan para esta propuesta. Es decir, se utilizará acero inoxidable para la carcasa y las bridas, debido a la capacidad del material de soportar temperaturas de aproximadamente 800°C. De igual manera se utilizará un crisol de alúmina de alta pureza para sostener la pastilla de coque, ya que al posicionar esta muestra en la zona focal, las temperaturas esperadas son muy altas, y el material, además de tener una baja reactividad, presenta una resistencia térmica de hasta 1800°C (Alonso, 2014). Además, se conserva el cuarzo óptico para la ventana, debido a las excelentes propiedades que presenta el material para su uso en aplicaciones solares.

Una de las propuestas de optimización del reactor, es la implementación de una apertura de cono y la reducción del espacio efectivo por el cual fluirán los gases adentro de la sección cilíndrica. Esto lleva a la adición de un material aislante al interior de la cavidad. El material debe tener una conductividad térmica baja, y con esto proteger a la carcasa de acero de alcanzar temperaturas demasiado altas.

La revisión bibliográfica nos dice información valiosa, en general, los reactores para aplicaciones solares utilizan alúmina (Al_2O_3) como material aislante en sus diseños (Murray & Fletcher, 1994), (Melchior et al., 2009), (Litchy et al., 2010), (Z.' Graggen, 2006), (Alonso, 2014). De esta manera, se propone el aislante de baja densidad compuesto por una mezcla de alúmina y sílice (80% Al_2O_3 -20% SiO_2), cuyas propiedades son adecuadas para la reacción de gasificación solar objeto de estudio. Este material, además de soportar altas temperaturas, presenta una conductividad térmica baja a temperatura ambiente y a altas temperaturas, es decir, presenta una conductividad térmica de 0.14 W/m·K a 25°C, y de 0.33 W/m·K a una temperatura de 1400°C (Alonso, 2014). Además, su baja densidad (400 kg/m³) presenta la gran ventaja de evitar añadir peso extra al reactor.

5.3.2 Diseño de las piezas del reactor optimizado

De la misma manera en que se describieron las piezas para el reactor preliminar, dividiremos al reactor optimizado en tres ensambles: frontal, central y posterior.

ENSAMBLE FRONTAL DEL REACTOR

-Bridas de refrigeración CF16.50.

Al igual que en el reactor preliminar, se utilizará un arreglo de bridas para la refrigeración de la ventana. De acuerdo al análisis de distribución de radiación del capítulo 3, se decidió el cambio de ventana de cuarzo de 21.368 cm sujeta por una brida CF10, por una ventana de cuarzo de 37.87 cm sujeta por una brida CF16.50. Este cambio se dio debido a la necesidad de tener una potencia de diseño del reactor de 10 kW que pueda mantener los rangos de temperaturas necesarios para llevar a cabo la reacción de gasificación, pero que al mismo tiempo, que la integridad física de la ventana no se vea comprometida por la distancia de ésta con respecto a la zona focal, ya que si está muy cerca puede sobrecalentarse y sufrir choques térmicos que pueden fracturarla.

El arreglo cuenta también con dos bridas y un tubing de cobre por el cual circulará agua como fluido refrigerante. En este caso se utilizarán bridas CF16.50 para que puedan ensamblarse a la brida CF16.50 que sostiene a la ventana. Los discos de acero

inoxidable poseen un espesor de 12.34 mm con un diámetro exterior de 558.71 mm, pero con diámetros interiores de 389.35 mm y 376.67 mm (fig. 5.34). Como se explicó en el apartado del diseño de las piezas del reactor preliminar, al unir ambas bridas, los diámetros diferentes generan un ángulo de 45° para permitir un mayor paso del flujo solar.

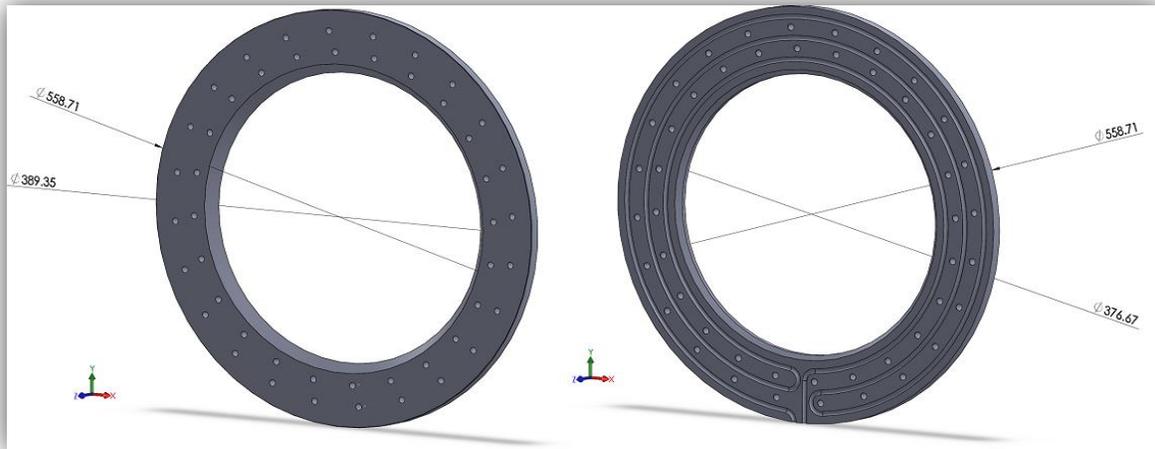


Figura 5.34: Bidas CF16.50 para la refrigeración de la ventana.

En la figura 5.35 se puede apreciar el ensamble de las dos bridas CF16.50 y el tubing de cobre de circulación de refrigerante. La brida de refrigeración que hace contacto con la brida CF16.50 que sujeta a la ventana, posee 36 orificios que coinciden con los 36 barrenos para tornillería 3/8" en la brida CF16.50 de la ventana, éstos pueden apreciarse en la segunda vista isométrica, de izquierda a derecha, de la figura 5.35.

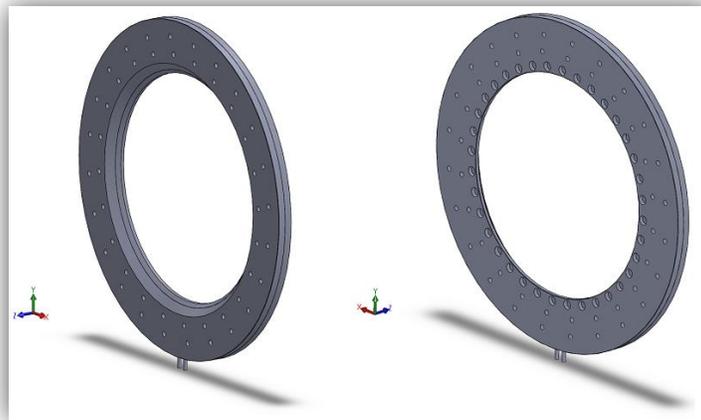


Figura 5.35: Ensamble de bridas CF16.50 de refrigeración con tubing de cobre.

-Ventana de cuarzo.

La ventana de cuarzo óptico, de una transmitancia desde 0.8 a 1.9 μm , está sujeta por una brida CF16.50 con un diámetro exterior de 41.83 cm. El grosor de la brida genera un diámetro efectivo de la ventana de 37.87 cm. De igual manera se utiliza un anillo de vitón para realizar el sello entre la ventana y la brida CF16.50. Las componentes antes mencionadas se presentan en la figura 5.36, y el ensamble se puede apreciar en la figura 5.37.

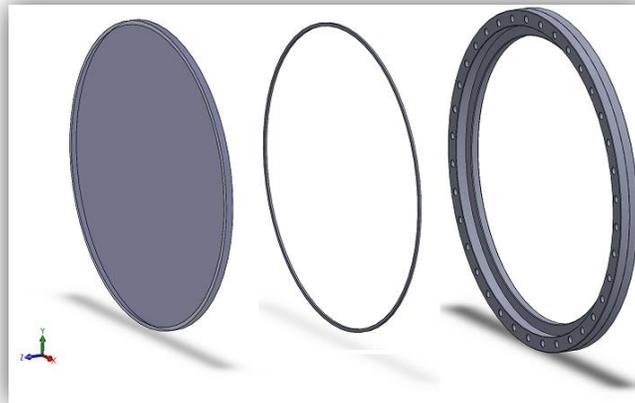


Figura 5.36: Componentes del ensamble de ventana. De izquierda a derecha, Ventana de cuarzo, junta de vitón y brida CF16.50.

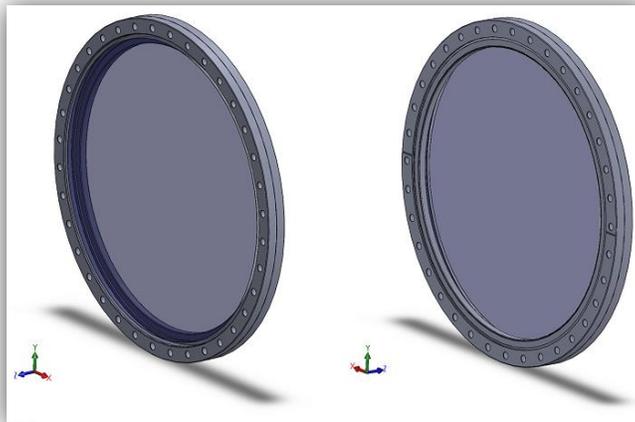


Figura 5.37: Vistas isométricas del ensamble completo de ventana de cuarzo y brida CF16.50.

Como se mencionó anteriormente, la brida CF16.50 tiene 36 barrenos para tornillería 3/8" y posee un maquinado para acoplar una junta metálica para realizar el sello de vacío.

Es necesario mencionar que, debido a que no es necesario acoplar una brida de menor tamaño con la brida CF16.50 de la cavidad, ya no es necesario el uso de una brida de acople de 10" a 16.50". Por lo tanto, la brida CF16.50 que sujeta a la ventana, se conecta directamente con la brida CF16.50 de la cavidad cilíndrica del reactor.

-Ensamble de componentes.

El ensamble final, compuesto por los sub-ensambles previamente descritos se puede observar en la figura 5.38.

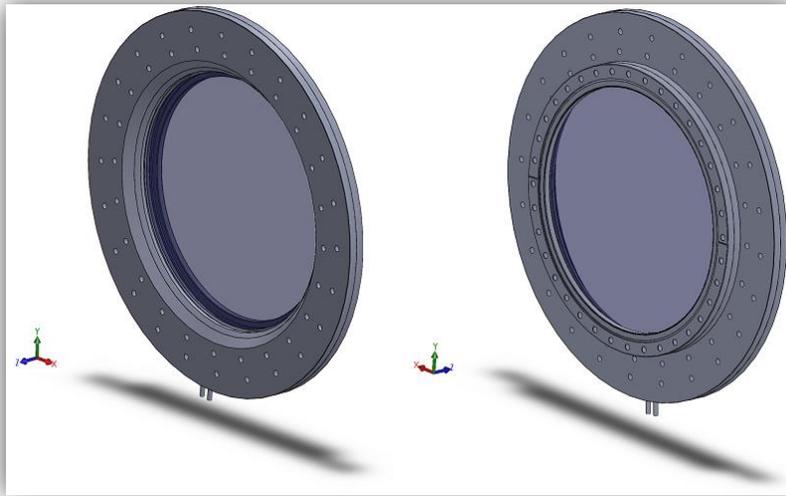


Figura 5.38: Ensamble frontal completo.

ENSAMBLE CENTRAL DEL REACTOR

-Cavidad.

Se utilizará la misma cavidad de acero inoxidable con un diámetro interior de 348 mm, un largo de 300 mm y grosor de 3.76 mm. También, para realizar las conexiones con los diferentes ensambles del reactor, se mantienen las bridas CF16.50 en la parte frontal y posterior del cilindro (fig. 5.39). Como se mencionó anteriormente, el uso de estas bridas proporciona una ventaja en el desmontaje de la parte frontal y posterior del reactor, facilitando la manipulación de la muestra y de los termopares al interior del mismo.

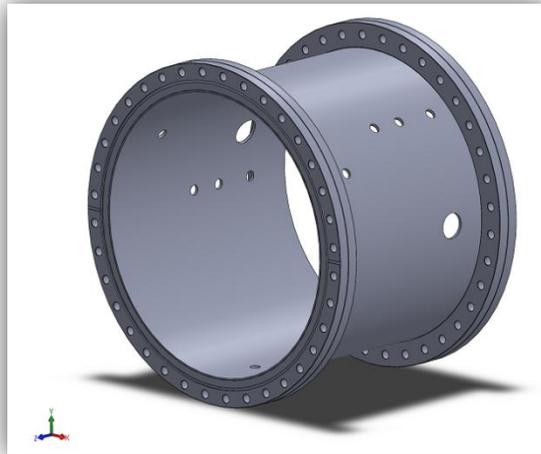


Figura 5.39: Cavity del reactor con bridas CF16.50.

Como puede apreciarse en la figura 5.39, se realizaron modificaciones con respecto al número de orificios para los pasa-tubbings, y al posicionamiento de las bridas CF1.33 y CF2.75 en la sección cilíndrica. Se consideran 3 orificios para colocar pasa-tubbings en vez de los 9 con los que se contó en el reactor preliminar. Los 3 pasa-tubbings se distribuyen equi-angularmente en la sección cilíndrica de la cavity y lo más cerca posible a la ventana (fig. 5.40).

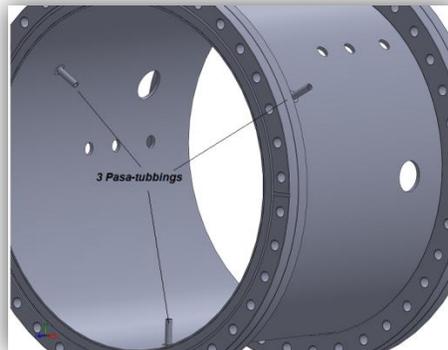


Figura 5.40: Posicionamiento de pasa-tubbings en la cavity del reactor modificada.

Como se explicó en el capítulo 4, la propuesta preliminar consideraba 9 entradas de vapor de agua por medio de pasa-tubbings y 3 inyectores de gas argón, debido a la necesidad de distribuir adecuadamente ambos gases en la cavity. En la propuesta de optimización, el aislante hace innecesarias las demás entradas, ya que la geometría de cono permite un mejor flujo de los gases a través del reactor, como se explicó en el capítulo 4. Por esta razón, para la propuesta de optimización aquí expuesta, se

eliminan los 3 inyectores de gas argón, y se consideran solamente 3 entradas con pasa-tubbing, en las cuales se inyectará al mismo tiempo argón y vapor de agua mezclados.

Los pasa-tubbings se acoplan a otro pequeño tubing para purga, el cual cumple la función de un canal para dirigir los gases hacia la ventana. La tubería inyecta los gases a un ángulo de 60° con respecto a la normal (fig. 5.41). De esta manera, la inyección de la mezcla de vapor de agua y argón de cada uno de los 3 pasa-tubbings, genera un vórtice que facilita el flujo de los fluidos. El ensamble de los 3 pasa-tubbings modificados para una inyección con un ángulo de 60° se puede observar en la figura 5.42.

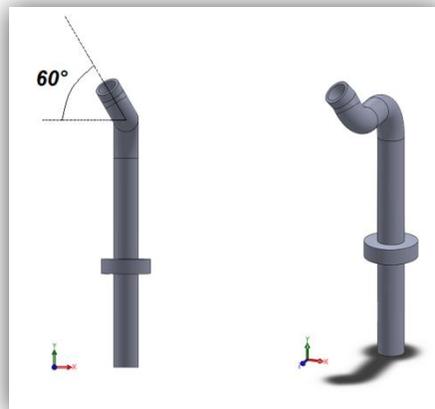


Figura 5.41: Pasa-tubbing con inyección de gases a un ángulo de 60° con respecto a la normal. A la izquierda vista frontal y a la derecha vista isométrica.

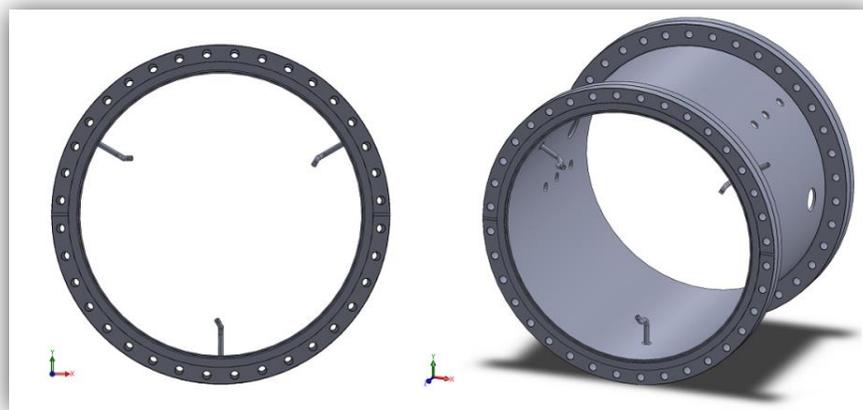


Figura 5.42: Pasa-tubbings modificados con ángulo de inyección de 60° ensamblados con la cavidad del reactor.

Como se mencionó, también se modificó el número de bridas CF2.75 necesarias. Éstas pueden utilizarse para agregar termopares por medio de un pasa muros eléctrico, o también pueden ser usadas para el acople de ventanas de cuarzo que sirvan como mirillas para llevar a cabo una medición con pirómetro. Para la nueva propuesta, se utilizarán solo 2 bridas CF2.75, a diferencia de las 4 consideradas en el reactor preliminar, y se posicionan a una distancia de 160° una con respecto a la otra para un mejor aprovechamiento del espacio dentro del aislante. Las características de los dispositivos utilizados ya se presentaron en el apartado de diseño de piezas del reactor preliminar, es decir, los pasamuros eléctricos, las ventanas de cuarzo de grado UV, y los diferentes modelos de pirómetros que pueden usarse en estas últimas, serán utilizados también para la nueva propuesta.

Otra modificación al reactor, es la implementación de 6 bridas CF1.33, a diferencia de las 2 que se consideraron en la propuesta sin aislante. Estas bridas tienen la función de servir como mirillas, pero principalmente de acoplar pasamuros eléctricos de termopares, éstos pueden ser de 3 alimentaciones. Se consideró adecuado colocar una a la entrada, una en la muestra (pastilla) y otra al final de la cavidad. Otra línea de tres bridas CF1.33 se puede posicionar a 135° respecto de la primera, ya que en esta posición pueden manipularse adecuadamente los termopares, o apuntar sin dificultades el pirómetro. La figura 5.43 muestra el ensamble de bridas CF2.75 y CF1.33 con la cavidad del reactor.

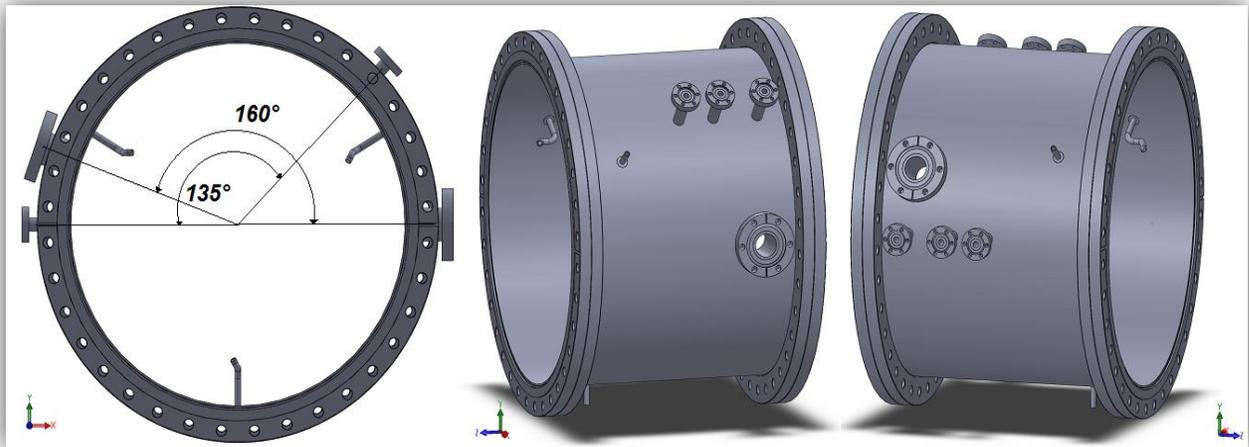


Figura 5.43: Ensamble de bridas CF2.75 y CF1.33 con cavidad del reactor. Vista frontal y dos vistas isométricas.

-Aislante.

El reactor requiere de una apertura de cono y de una reducción de espacio efectivo adentro de la cavidad cilíndrica, esto produce un mejor flujo de los gases hacia la salida del reactor. La implementación de una capa de aislante de baja densidad al interior de la cavidad, además de tener la capacidad de proteger a la carcasa de acero de alcanzar temperaturas muy altas debido a su baja conductividad térmica, también permite moldear la geometría requerida para un mejor flujo de los fluidos.

El aislante adentro del reactor se dividirá en dos secciones, la sección del cono y la sección de la cavidad. Esto se realiza así para facilitar el proceso de manufactura y para tener una mejor manipulación en el ensamblado. La figura 5.44 muestra las dos secciones de aislante en el reactor.

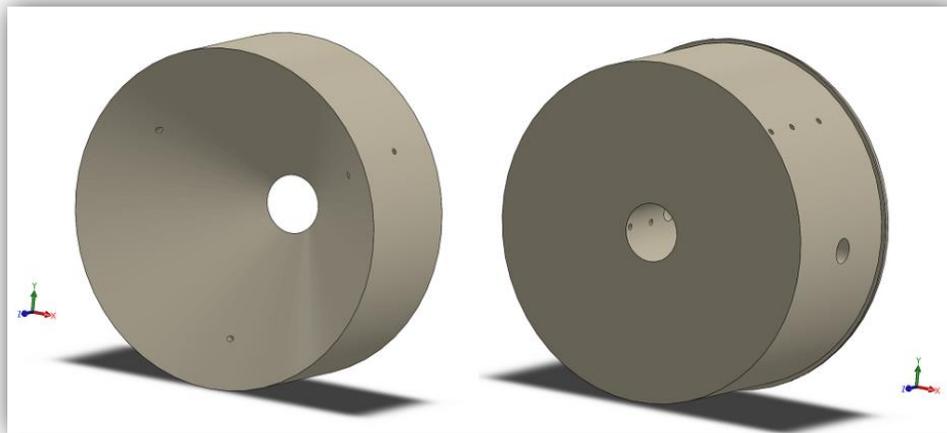


Figura 5.44: Aislante de baja densidad dividido en dos secciones, cono y cavidad.

La apertura del cono quedó definida por la zona focal, en la cual se coloca la muestra, y la ventana de cuarzo posicionada a 18 cm de la misma, de acuerdo al análisis de distribución de radiación del capítulo 3. Por lo tanto, en la figura 5.45 se muestra el triángulo rectángulo formado por los catetos de 180 mm (distancia del foco a la ventana) y de 189.35 mm (radio de la ventana de cuarzo). De esta manera se genera un ángulo de apertura de 46.45° . Cabe mencionar que el aislante debe cubrir los inyectores de gases, de otra manera el acero inoxidable del que están compuestos quedaría completamente expuesto a la radiación, degradando así el material.

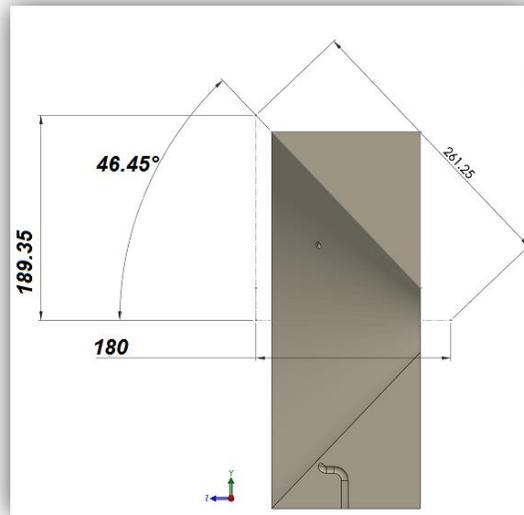


Figura 5.45: Ángulo de apertura de 46.45° para el cono.

Para la sección de la cavidad, se propone un cilindro interior con diámetro de 59.45 mm como volumen útil en donde se colocará el crisol ($\phi=44.45$ mm) que sostiene a la pastilla de coque, y por donde fluirán los gases con dirección a la salida. Ésta última posee un diámetro de 25.65 mm, definido por la brida CF2.75 destinada a la salida de productos. Como puede observarse en la figura 5.46, se realiza una reducción de diámetro a la salida del reactor, igualándose el diámetro de 59.45 mm al diámetro de la brida CF2.75. El ángulo de reducción es de 20.18° con respecto al punto central del cilindro.

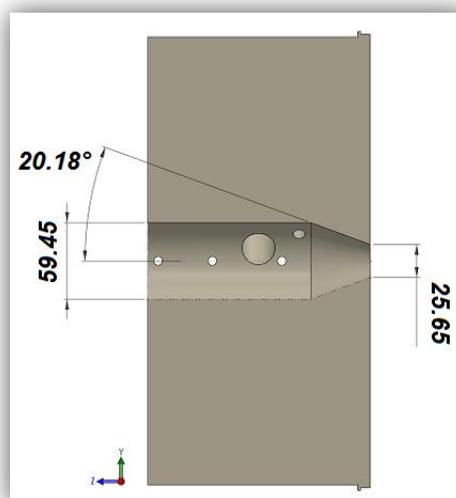


Figura 5.46: Reducción de volumen útil al interior de la cavidad por medio del aislante.

-Muestra de coque.

La pastilla de coque se mantiene de 40 mm de diámetro y 16 mm de altura, debido a las características de la pastilladora automática de 40 ton marca INSMART con la que se cuenta. Por otro lado, el crisol de alúmina de alta pureza es un cilindro con un diámetro exterior e interior de 44.45 mm y 40.50 mm respectivamente. También posee un largo de 32 mm con la posibilidad de colocar dos pastillas de coque al mismo tiempo. El ensamble se sostiene con aletas del mismo material del aislante de baja densidad, para soportar muy altas temperaturas y mantener fija la muestra al mismo tiempo (fig.5.47).

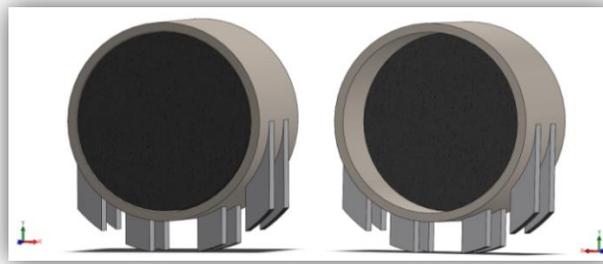


Figura 5.47: Ensamble de muestra de coque y crisol de alúmina de alta pureza.

El ensamble de la muestra de coque se posiciona en la zona focal del concentrador, y la ventana se coloca a 18 cm de distancia de la pastilla, de acuerdo a los resultados obtenidos en el análisis de distribución de radiación del capítulo 3.

-Ensamble de componentes.

El ensamble central se presenta mediante diferentes vistas en la figura 5.48, y mediante los distintos cortes transversales mostrados en la figura 5.49.

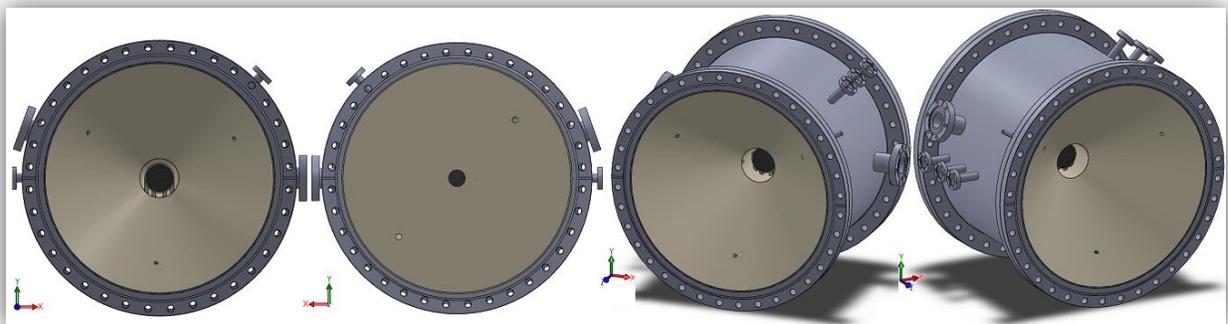


Figura 5.48: Ensamble central completo. De izquierda a derecha, vista frontal, vista posterior y dos vistas isométricas.

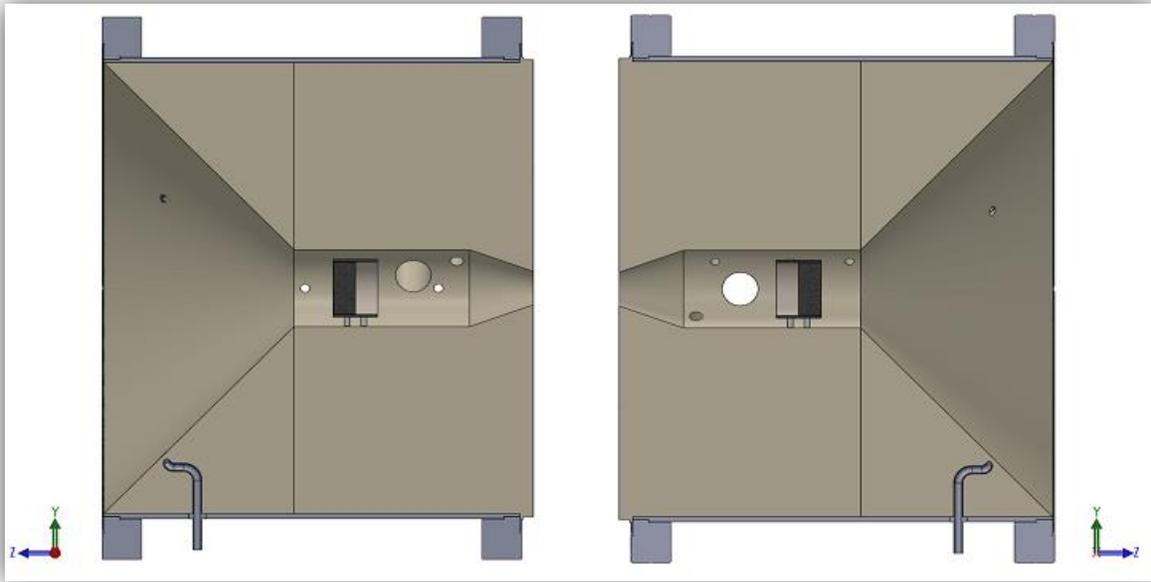


Figura 5.49: Cortes transversales del ensamble central completo.

ENSAMBLE POSTERIOR DEL REACTOR

-Brida CF16.50 posterior.

El ensamble posterior del reactor optimizado permanece prácticamente igual, es decir se mantiene la brida CF16.50 en la parte posterior para cerrar el reactor (fig. 5.50). El sello se realiza también por una junta de cobre metálico entre la brida CF16.50 aquí descrita y la brida CF16.50 acoplada en la parte posterior de la cavidad del reactor. Una única modificación a la brida trasera y que también puede apreciarse en la figura 5.50, es la eliminación de dos orificios para la colocación de bridas KF. En la propuesta preliminar se colocaron dos bridas KF25, una destinada a alojar la bomba de vacío mecánica, descrita en el apartado del reactor preliminar, y la otra servía como salida alterna de productos. Debido a que solo es necesaria una salida de productos, tarea realizada por la brida CF2.75, se elimina una brida KF25 en el ensamble. Por otro lado, se requiere solo de una brida KF16 para alojar el sensor de presión, ya sea DUALTRANS™ o COLE PARMER, por lo que se elimina la segunda brida KF16 que se consideró en la propuesta sin aislante. Los sensores de presión se especifican de igual manera en la sección del diseño de piezas del reactor preliminar.

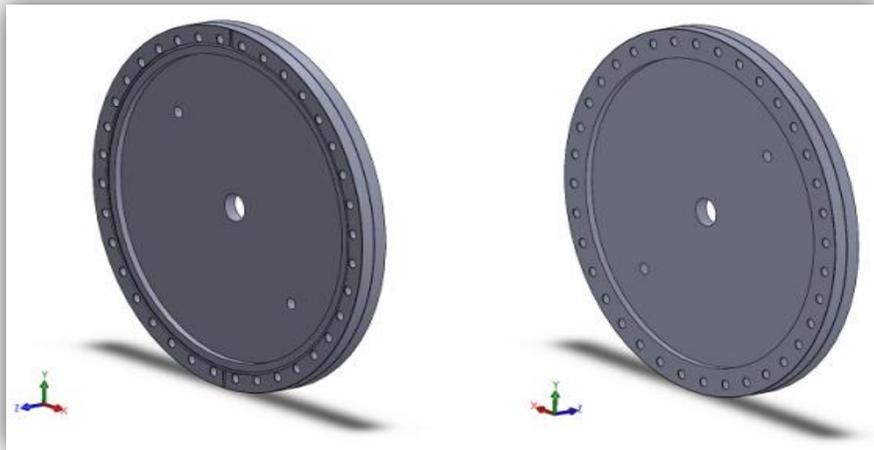


Figura 5.50: Brida CF16.50 posterior para el reactor optimizado.

-Ensamble de componentes.

El ensamble posterior queda finalmente como se muestra en la figura 5.51.

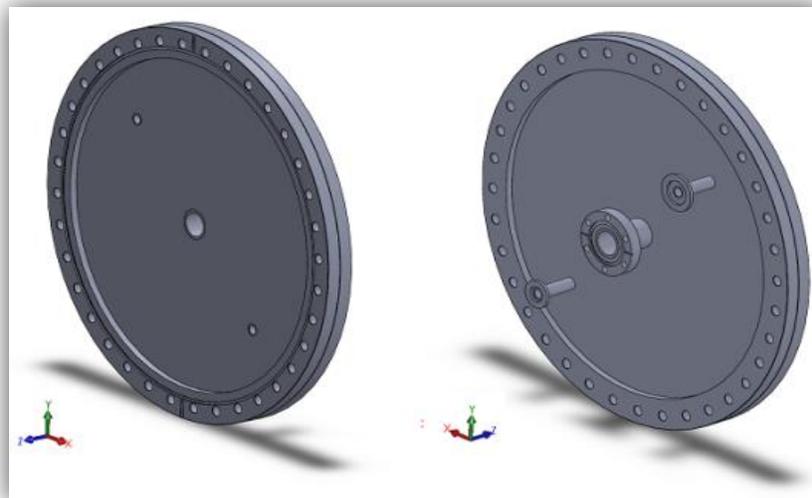


Figura 5.51: Ensamble posterior completo.

5.3.3 Ensamble final del reactor optimizado

La unión final de los ensamblajes frontal, central y posterior para el reactor optimizado puede observarse en las diferentes vistas presentadas en las figuras 5.52 y 5.53, y en los cortes mostrados en la figura 5.54 y 5.55.

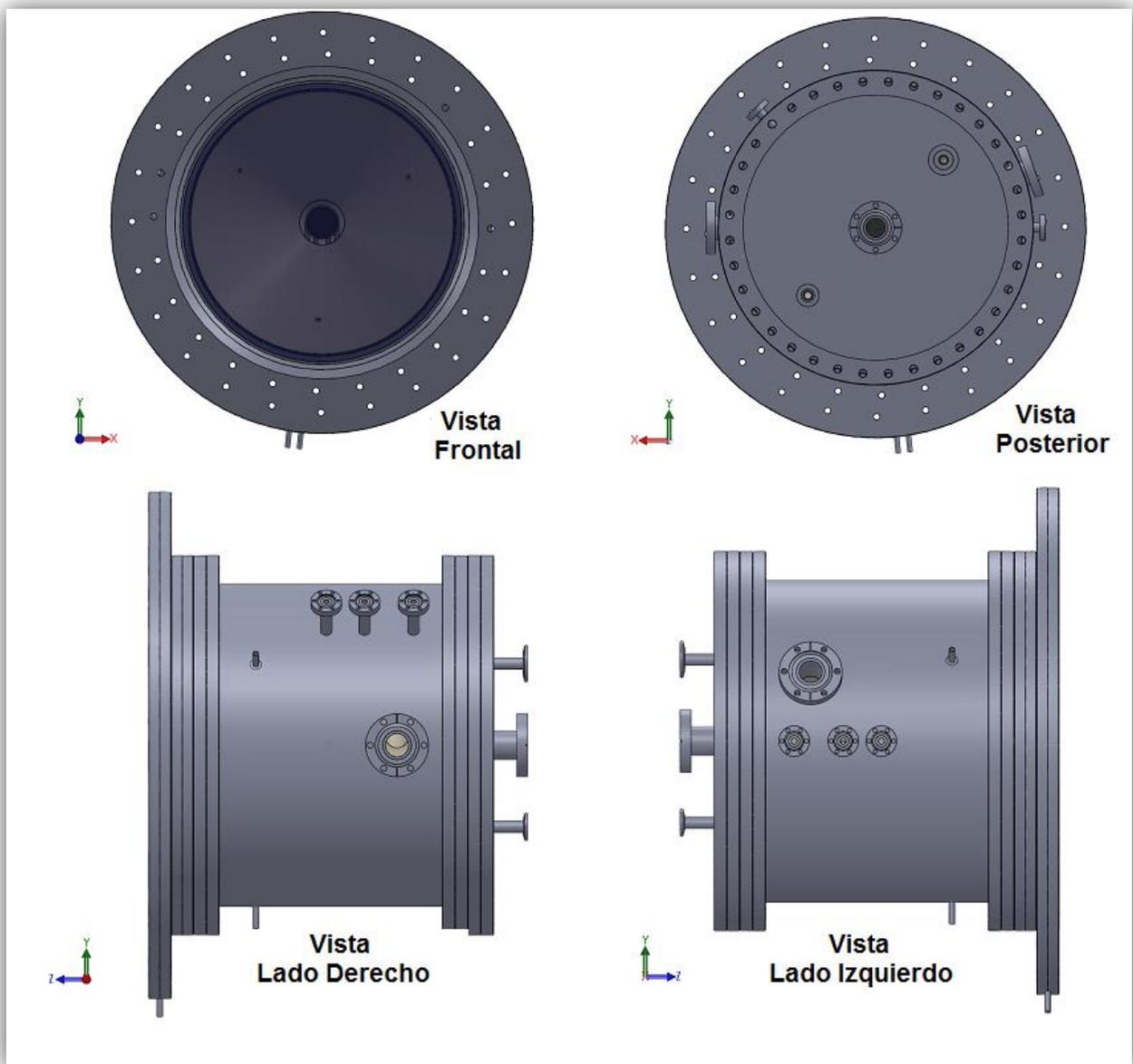


Figura 5.52: Vistas principales del reactor optimizado.

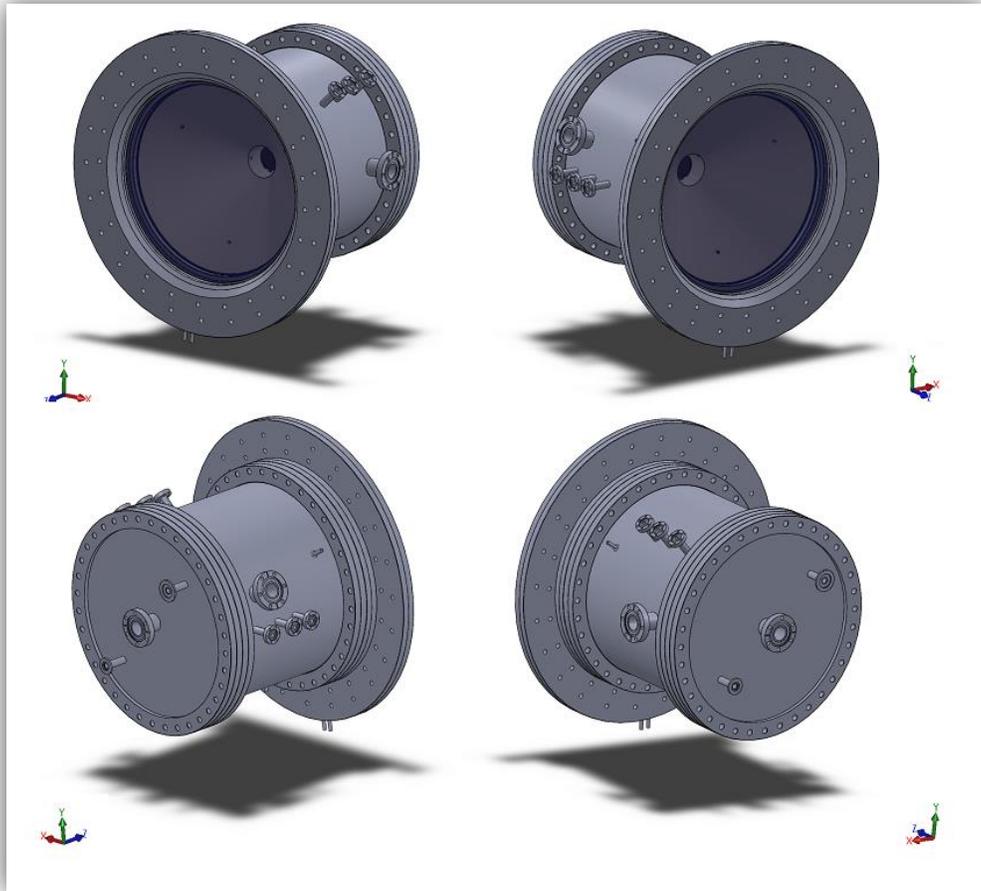


Figura 5.53: Vistas isométricas del reactor optimizado.

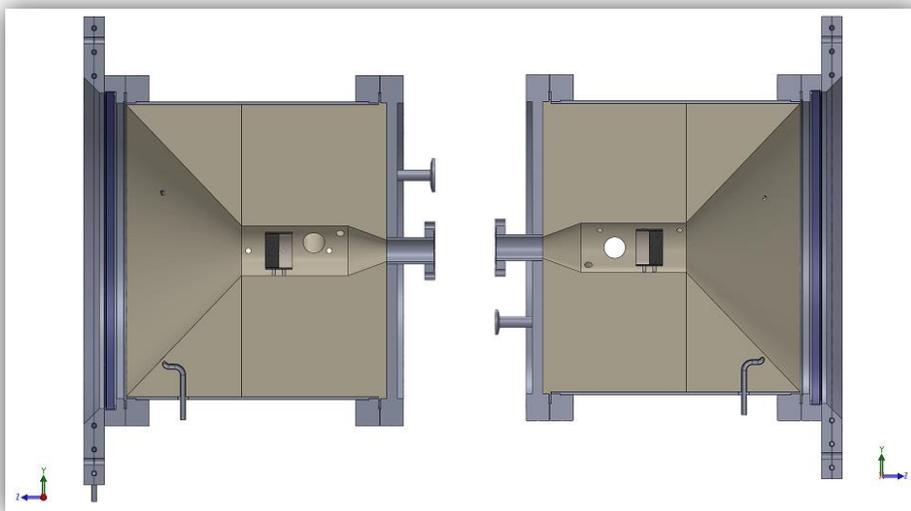


Figura 5.54: Vistas de sección del reactor optimizado.

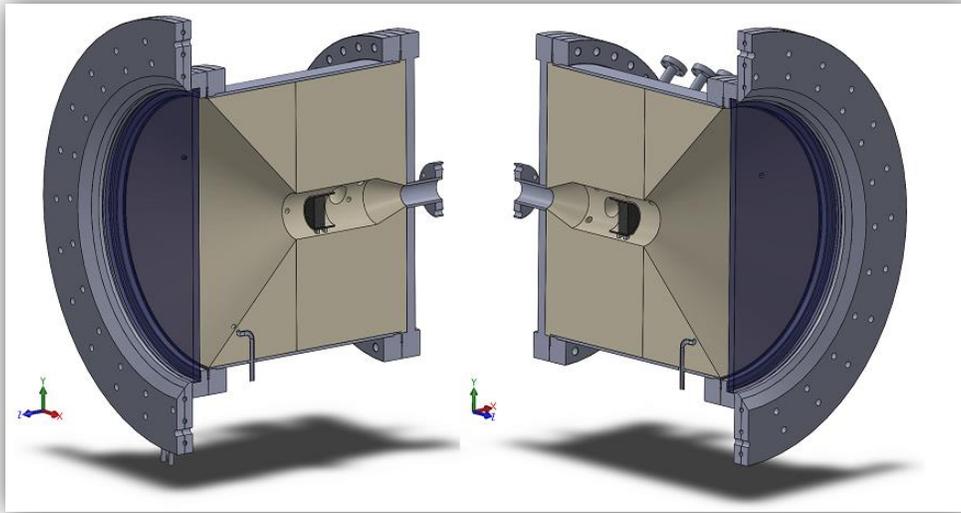


Figura 5.55: Cortes isométricos del reactor optimizado.

En el corte isométrico de la figura 5.56, se muestran los canales para las bridas KF25 y KF16 del ensamble posterior, y que están destinadas al alojamiento de la bomba de vacío y el sensor de presión respectivamente.

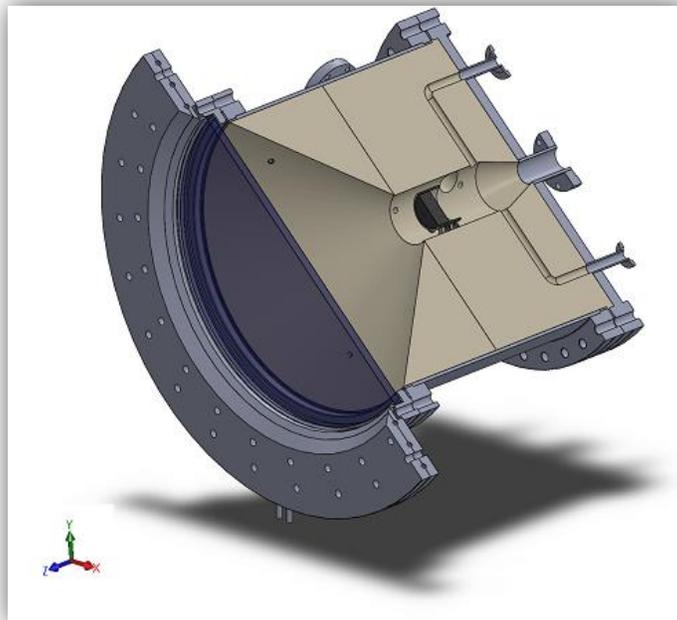


Figura 5.56: Corte isométrico de reactor optimizado que muestra los canales para las bridas KF25 y KF16.

Otro corte isométrico se presenta en la figura 5.57, en ella se muestran los canales para tres de las bridas CF1.33 y para una brida CF2.75. Estos van desde la carcasa de acero hasta el volumen interno donde se encuentra la muestra de coque, atravesando a la capa de aislante de baja densidad.

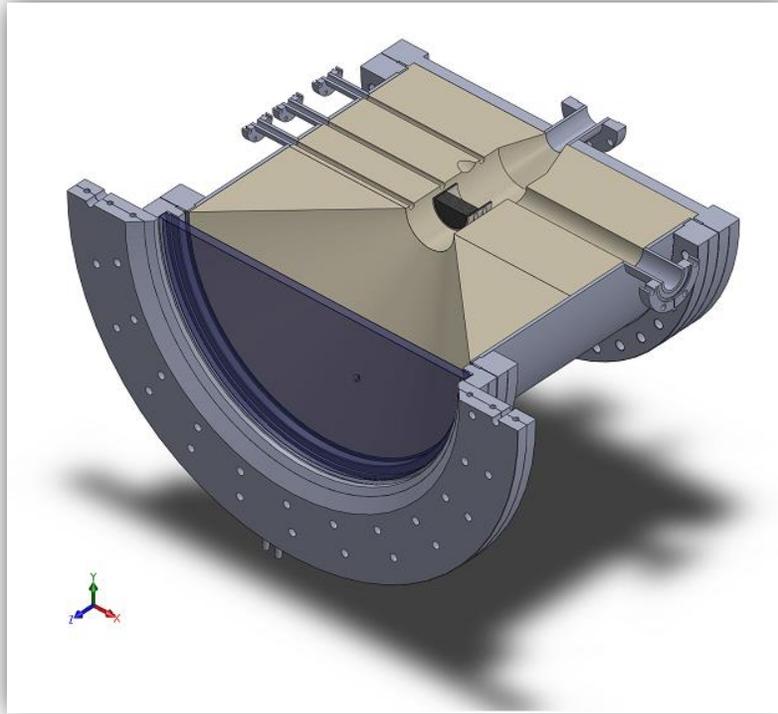


Figura 5.57: Corte isométrico de reactor optimizado que muestra los canales para las bridas CF1.33 y CF2.75.

Conclusiones y recomendaciones futuras

La situación energética actual a nivel global se encuentra en crisis. El descontrolado crecimiento poblacional exige una gran demanda de recursos energéticos, provocando así un rápido agotamiento de las reservas fósiles. Además, el uso excesivo de estos combustibles ha generado un acentuado cambio climático, como consecuencia de las altas emisiones de CO₂. Estos hechos impulsan la búsqueda de nuevas alternativas de generación energética.

En esta tesis se presentó a la energía solar como una alternativa prometedora de disponibilidad energética. Además, se ha mostrado el gran potencial que México presenta para la implementación y desarrollo de tecnologías que permitan aprovechar el alto recurso solar del cual el país se beneficia. Con un promedio por arriba de los 2500 kW/m²/año, las zonas Noroeste, Norte y Norte-Central colocan a México en una excelente postura competente a nivel global, con respecto a la implementación de métodos solares al sector energético.

Por otro lado la producción de hidrógeno por técnicas solares propone una alternativa renovable, limpia y tiene la finalidad de reducir las altas emisiones hasta ahora generadas en el procesamiento de los combustibles fósiles. De entre las rutas de producción de hidrógeno, los procesos termoquímicos, en particular los que utilizan recursos fósiles, se proyectan como la mejor opción a corto plazo. A pesar de ser considerados métodos de “transición”, las ventajas son muy marcadas. Los combustibles solares se postulan para ser la mejor solución en un futuro escaso de hidrocarburos. Partiendo de esta consideración, se ha mostrado el estado del arte de los denominados reactores solares, los cuales aprovechan la energía solar y la transforman en otro tipo de energía. Esta tesis hace énfasis en aquellos que hacen uso de los métodos termoquímicos antes mencionados, principalmente el de la gasificación de hidrocarburos para generar gas de síntesis. Además, este estudio permite comprender el funcionamiento de los reactores.

La producción de coque en México prevé un incremento consecuente del procesamiento de mayores cantidades de crudo pesado en las refinerías, además una disminución de su precio dentro del periodo 2006-2035. Esto presenta un buen panorama para la implementación de la tecnología de gasificación. La gasificación solar por vapor del coque es un método limpio capaz de resolver los problemas que presenta una gasificación convencional, y de aumentar el poder calorífico del coque a disposición. Además de que el carbón de combustión producido en el país es un perfecto candidato para el método.

La revisión bibliográfica nos ha permitido iniciar el proceso para la descripción y optimización de un reactor solar que genere un gas de síntesis con características óptimas por medio de la gasificación solar por vapor. El modelo preliminar optimizado tiene como objetivo una pronta construcción, que pueda demostrar el principio al sector industrial, y con esto demostrar las grandes ventajas que la tecnología presenta.

Mediante un estudio de distribución de radiación, se ha simulado el comportamiento del reactor cuando se posiciona en la zona focal del horno solar de alto flujo radiativo (HoSIER) del Laboratorio Nacional de Concentración Solar y Química Solar de la UNAM. En este análisis se presentaron las ventajas de utilizar una ventana de cuarzo de 37.87 cm en comparación de una de 21.368 cm del reactor preliminar. Además, mediante la implementación de la ventana de cuarzo con diámetro de 37.87 cm, se puede cumplir el objetivo de posicionar la ventana más allá de los 17 cm. La experiencia previa y el estado del arte en los reactores para la gasificación, ha llevado a la necesidad de alejar la ventana a una distancia mayor a los 17 cm, para así evitar la generación de puntos calientes debido a la absorción de radiación infrarroja emitida por la muestra y que causan la degradación del cuarzo. De igual manera, la gasificación del coque de petróleo genera partículas que pueden depositarse en la ventana de cuarzo, opacándola y reduciendo su propiedad de transmisividad. También es importante mencionar que el colocar la ventana a esta distancia, permite obtener las potencias necesarias para llevar a cabo la reacción de gasificación, sin arriesgar la integridad física de la ventana, incluso al abrir el atenuador al 100%, cosa que con una ventana más pequeña no se puede lograr. La comparación entre ambas ventanas se puede ver en la tabla 3.11.

Tabla 3.11: Comparación de parámetros entre ambas ventanas, posicionándolas a 18 cm de la zona focal.

Diámetro de ventana (cm) :	Densidad de flujo pico en zona focal (W/m ²)	Temperatura de flujo pico en zona focal (K)	Densidad de flujo pico en ventana (W/m ²)	Temperatura de flujo pico en ventana (K)	Potencia en zona focal (kW)
21.368	1.7505 x 10 ⁶	2 357.335	269 026	803.131	4.95
37.87	3.3822 x 10 ⁶	2 779.191	266 655	801.390	12.201

La ventana con mayor diámetro presenta las ventajas alcanzar potencias de más de 12 kW al abrir el atenuador al 100%. Precisamente esto permite posicionarla lo suficientemente lejos para evitar el riesgo extra que presenta la radiación emitida por la muestra.

Otro estudio presentado a detalle en esta tesis, fue la simulación de flujo másico en ausencia de radiación de los gases que intervienen en el proceso de gasificación. Las simulaciones del fenómeno se realizaron mediante el software CFD FLUENT de

ANSYS. Debido a la complejidad del software, gran parte del capítulo se dedicó a una explicación detallada de la teoría de mecánica de fluidos sobre la cual el software se fundamenta. Además, se presentaron los métodos numéricos de discretización en los que se basa el programa para llevar a cabo una simulación aproximada del fenómeno. El complejo fenómeno de turbulencia rige el problema, debido a esto también se presenta una sección especial para hablar de fenómeno, así como de los modelos utilizados para representarla en la dinámica de fluidos computacional.

La simulación del reactor preliminar presentó una dificultad del fluido para abandonar la cavidad, es decir, los gases se estancan en la mayor parte del volumen de trabajo. Además, el gasto de gas es muy alto, en adición se presentan las dificultades de mantener una alta presión para lograr una buena distribución del mismo al interior. La propuesta de solución a este problema, es mediante una capa de aislante de baja densidad, la cual permite moldear una apertura de cono a la entrada del reactor. Esta apertura le proporciona una mejor dirección de movimiento al fluido, dirigiéndolo sin estancamientos hacia la salida del reactor. Otra ventaja del aislante, es que genera una reducción de volumen efectivo al interior del reactor, en el cual se posiciona la muestra de coque. Al atravesar el fluido un espacio más reducido, se presentan remolinos de turbulencia que generan un mejor flujo de arrastre hacia la salida del reactor. De esta manera se comprueba que es necesaria la implementación de la capa de aislante para favorecer el flujo del fluido.

Los modelos presentados en el capítulo 4 se someten a un método de validación numérica, a través de diferentes simulaciones con diferentes parámetros en la configuración de las mismas. Sin embargo, se requiere de una validación experimental para complementar el estudio y conocer el comportamiento real del fenómeno.

Una descripción de las piezas y materiales para la construcción del reactor se realiza también en esta tesis mediante el capítulo 5. Se explican a detalle las piezas que conforman al reactor preliminar y posteriormente se presentan los cambios propuestos para el modelo del reactor optimizado. De igual manera se realizó una propuesta de los dispositivos y materiales que podrían servir para la construcción y primeras campañas experimentales del mismo.

Esta tesis revela evidentes mejoras para la propuesta de optimización, en comparación con el reactor preliminar. Además, el riguroso estudio a detalle de cada tema permite a este trabajo ser tomado como antecedente para futuros estudios en el campo de la tecnología de concentración solar, haciendo énfasis en los reactores solares para aplicaciones termoquímicas.

En el proceso de desarrollo de esta tesis se ha detectado la necesidad de implementar diferentes acciones que puedan dar lugar a otra mejora del modelo del

reactor para su construcción final. Algunas recomendaciones de trabajos futuros pueden ser:

- Realizar la caracterización del coque de petróleo mexicano que se va a utilizar, para conocer sus propiedades específicas y así poder generar un estudio más profundo para conocer una mejor aproximación de las temperaturas en la muestra de coque.
- En los modelos numéricos se ha evaluado el efecto de algunos parámetros, sin embargo debe considerarse la influencia de otros que han quedado sin evaluar. Por ejemplo, la distribución de la irradiancia en la muestra o la porosidad en la misma. Por lo tanto, se requiere realizar nuevos modelos que incorporen la ecuación de energía en la simulación de flujo, es decir, considerando la presencia de la radiación en el modelo.
- Realizar simulaciones con diferentes flujos volumétricos de entrada y mediante diferentes combinaciones de modelos de turbulencia, métodos de acople presión-velocidad y esquemas de aproximación. Sin embargo, todo modelo CFD requiere de una validación experimental.
- Análisis más profundo de los materiales y dispositivos que pueden utilizarse para la construcción del reactor y en la experimentación del mismo.
- Lograr una operación continua de los procesos. Debido a la característica intermitente de la tecnología, es un reto lograr una continua alimentación de reactivos y remoción de productos.
- Principalmente, la construcción y experimentación con el reactor real. Ya que solo de esta manera se pueden enfrentar los diferentes problemas que quizás estén pasándose por alto en las simulaciones y modelos numéricos, y que solo el fenómeno real puede revelar.

Referencias

- Adinberg, R., & Epstein, M. (1996). Development of solar coal gasification technology. *Int. Solar Energy Conf.*, 307-314.
- Adinberg, R., Epstein, M., & Karni, J. (2004). Solar gasification of biomass: a molten salt pyrolysis study. *J. Solar Energy Eng.* 126, 850-857.
- Alexander, S. (2012, January 15). Peak Oil, Energy Descent, and the Fate of Consumerism. *Social Science Research Network. University of Melbourne - Office for Environmental Programs*, Explaining Video "There's no tomorrow" elaborated by "incubate Pictures" in association with "Post-carbon institute" can be found in : <https://www.youtube.com/watch?v=VOMWzjrRiBg>.
- Alonso, E. (2014). Desarrollo de un reactor solar para el estudio de la etapa de reducción de ciclos termoquímicos basados en óxidos metálicos no volátiles. *Tesis Doctoral. Instituto IMDEA Energía. Universidad Rey Juan Carlos*.
- Alonso, E., & Romero, M. (2015). Review of experimental investigation on directly irradiated particles solar reactors. *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 41., 53-67.
- ANSYS, Inc. (2011). ANSYS FLUENT User's Guide.
- Breyer, C., & Knies, G. (2009, September). Global Energy Supply Potential of Concentrating Solar Power. *Proceedings SolarPACES*, 15-18.
- Cengel, Y. A., & Ghajar, A. J. (2011). *Transferencia de calor y masa. Fundamentos y aplicaciones* (Cuarta ed.). Mc Graw- Hill.
- Cengel, Y., & Cimbala, J. (2006). *Mecánica de Fluidos. Fundamentos y Aplicaciones*. Mc Graw Hill.
- Chen, J., Lu, Y., Guo, L. Z., & Xiao, P. (2010). Hydrogen production by biomass gasification in supercritical water using concentrated solar energy: system development and proof of concept. *Int. J. Hydrogen Energy* 35, 7134-7141.
- Diver, R. (1986). Receiver/reactor concepts for thermochemical transport of solar energy. *SNL, ERA-11-040256; EDB.86-126746*.
- Estrada et al. (2011). "A new high-flux solar furnace at CIE-UNAM in Temixco. Mexico. First Stage". *SolarPACES 2011 Symposium*.
- Fernández, M. (2008). Nuevos combustibles: coque (de petróleo), carbón y emulsiones. *Boletín IIE*.
- Fernández, M., Manzanares, E., Altamirano, J., & Mani, A. (2007). Estudio de factibilidad de combustibles a gasificar en plantas IGCC. *Instituto de Investigaciones Eléctricas, Informe IIE/44/13043/1002/P*.

- Flamant, G. (1980). Thermochemie solaire à hautes températures, résultats expérimentaux. *Revue de Physique.*, 15, 503-511.
- Flechsénhar, M., & Sasse, C. (1995). Solar gasification of biomass using oil shale and coal as candidate materials. *Energy* 20, 803-810.
- Galli, S., & Stefanoni, M. (1997). Development of solar-hydrogen cycle in Italy. *International Journal of Hydrogen Energy.*, 22:453-8.
- Gargantúa-Sánchez, P. (2006). Estudio del modelo de turbulencia k-w para flujos incompresibles en geometrías rectangulares bidimensionales. *Tesis Doctoral. Centro Nacional de Investigación y Desarrollo Tecnológico (cenidet).*
- Gokon, N., Ono, R., Hatamachi, T., Liuyun, L., Kim, H., & Kodama, T. (2012). CO₂ gasification of coal cokes using internally circulating fluidized bed reactor by concentrated Xe-light irradiation for solar gasification. *Int. J. Hydrogen Energy* 37, 12128-12137.
- González-Rocha, J., Longoria-Ramírez, R., & Urquiza-Beltrán, G. (2008). Resultados de la simulación de gasificación del coque de petróleo mexicano de las refinerías de Ciudad Madero y Cadereyta. *Ingeniería Investigación y Tecnología IX.*, 2. 99-111.
- Gregg, D., Taylor, R., Campell, J., Taylor, J., & Cotton, A. (1980). Solar gasification of coal, activated carbon, coke and coal and biomass mixtures. *Solar Energy*, 25, 353-364.
- Holman, J. (1998). Transferencia de Calor. *McGraw-Hill.*
- IEA. (2009). Renewable Energy Essentials: Concentrating Solar Thermal Power. *OECD/IEA.*
- IEA. (2011). Solar Energy Perspectives. *OECD/IEA.*
- IEA. (2013). Resources to Reserves. *Executive Summary.*
- IEA. (2014). Key World Energy STATISTICS. *OECD/IEA.*
- IIE. (2010). Solar - Hybrid Power and Cogeneration Plants. Market potential assesment for cogenerations systems in Mexico. *Gerencia de Energías No Convencionales.*, Projeo no. 019830.
- Kearney, A. (2010, June). Solar Thermal Electricity 2025. Clean electricity on demand: attractive STE cost stabilize energy production. *STE Industry Roadmap for the European Solar Thermal Electricity Association (ESTELA).*
- Kodama, T., Enomoto, S., & Hatamachi, T. (2008). Application of an internally circulating fluidized bed for windowed solar chemical reactor with direct irradiation of reacting particles. *J. Solar Energy Eng.*, 130, 014504.
- Kodama, T., Gokon, N., Enomoto, S., Itoh, S., & Hatamachi, T. (2010). Coal coke gasification in a windowed solar chemical reactor for beamdown optics. *J. Solar Energy Eng.*, 132,041004.

- Kolb, G. (1998). Economic Evaluation of solar-only and hybrid power towers using molten-salt technology. *Solar Energy*, 62:51-61.
- Koumi, S., & Njomo, D. (2012). An overview of hydrogen gas production from solar energy. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 16, 6782-6792.
- Kruesi, M., Jovanovic, Z. R., & Steinfeld, A. (2014). A two-zone solar-driven gasifier concept: Reactor design and experimental evaluation with bagasse particles. *Fuel*. 117, 680-687.
- Kurt J. Lesker Company. (n.d.). ■CF Flanged Zero Length Kodial Glass Viewports [<http://www.lesker.com>].
http://www.lesker.com/newweb/flanges/viewports_cf_glass.cfm?pgid=0.
- Laing, D., Bahl, C., Bauer, T., Lehmann, D., & Steinmann, W. (2009, September). Thermal energy storage for direct steam generation. *Proceedings SolarPACES 2009*, 15-18.
- Levitan, R., Rosin, H., & Levy, M. (1989). Chemical reactions in a solar furnace. *Solar Energy* 42., 267-273.
- Lichty, P., Perkins, C., Woodruff, B., Bingham, C., & Weimer, A. (2010). Rapid high temperature solar thermal biomass gasification in a prototype cavity reactor. *J. Solar Energy Eng.* 132, 011012.
- Martin, J., & Vitko, J. (1982). ASCUAS: A solar central receiver utilizing a solid thermal carrier. *Sandia National Laboratories*, SAND-8203.
- Matovich, E. (1978). Thagard technology company. High temperature chemical reaction processes utilizing fluidwall reactors. US Patent no. 4095974.
- Meier, A., Ganz, J., & Steinfeld, A. (1996). Modeling of a novel high-temperature solar chemical reactor. *Chemical Engineering Science*, 51, 3181-3186.
- Melchior, T., Perkins, C., Lichty, P., Weimer, A., & Steinfeld, A. (2009). Solar-driven biochar gasification in a particle-flow reactor. *Chem. Eng. Process.: Process Intensificat.* 48, 1297-1287.
- Meurer, C. (1999). PHOEBUS- an autonomous supply system with renewable energy: six years of operational experience advanced concepts. *Solar Energy*, 67: 131-8.
- Montiel-González, M. (2013.). Transferencia de calor en un receptor de energía solar concentrada del tipo cavidad cúbica abierta. *Tesis Doctoral. Instituto de Energías Renovables. Universidad Nacional Autónoma de México.*
- Müller, R., Zedtwitz, P., Wokaun, A., & Steinfeld, A. (2003). Kinetic investigation on steam gasification of charcoal under direct high-flux irradiation. *Chem. Eng. Sci.* 58, 5111-5119.
- Murray, J., & Fletcher, E. (1994). Reaction of steam with cellulose in a fluidized bed using concentrated sunlight. *Energy* 19, 1083-1098.

- Newport Corporation (NASDAQ: NEWP). (n.d.). Optical Materials [<http://www.newport.com>].
<http://www.newport.com/Optical-Materials/144943/1033/content.aspx>.
- Orrego, S. (2009). SIMULACION DE FLUIDOS UTILIZANDO COMPUTADORES: una moderna herramienta para el estudio y análisis de fluidos. *Universidad EAFIT*.
- Pacheco et al. (2002, January). Final test and evaluation results from the Solar Two Project. *SAND2002-0120. Unlimited release*.
- Patankar, V. (1980). Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. *Hemisphere Publishing Corporation*.
- PEMEX. (2013). *Boletines de prensa [pemex.com] de http://www.pemex.com/prensa/boletines_nacionales/Paginas/2013-125_nacional.aspx#VOZeLvmG-Sp*.
- Piatkowski, N., & Steinfeld, A. (2008). Solar- driven coal gasification in a thermally irradiated packed-bed reactor. *Energy Fuels* 22, 2043-2052.
- Piatkowski, N., Wieckert, C., & Steinfeld, A. (2009). Experimental investigation of a packed-bed solar reactor for the steam gasification of carbonaceous feedstocks. *Fuel Process. Technol.* 90, 360-366.
- Platzer, W. (2009). Linear Fresnel collector as an emerging operation for concentrating solar thermal power. *Proceedings of the ISES Solar World Congress*.
- Praxair. (2009). Greenhouse Gases. *Company responsibility. USA*.
- Puig-Arnavat et al. (2013). State of the art on reactor designs for solar gasification of carbonaceous feedstock. *Solar Energy* 97, 67-84.
- Radosevich, L., & Skinrood, A. (1989). The power production operation of Solar One, the 10 MWe solar central receiver pilot plant. *J Solar Energy Eng*, 111:144-151.
- Relloso, S., & Delgado, E. (2009, September). Experience with molten salt thermal storage in a commercial parabolic trough plant. Andasol -1 commisioning and operation. *Proceedings SolarPACES*, 15-18.
- Riveros - Rosas, D. (2008). Diseño óptico del horno solar de alto flujo del CIE - UNAM. *Tesis de Doctorado en Ingeniería - Energía (Solar Fototérmica), UNAM*.
- Riveros-Rosas et al, .. (2011). Concentration image profiles of the high-flux solar furnace of CIE-UNAM in Temixco, Mexico. First Stage.
- Riveros-Rosas, D. (2008). Diseño óptico del horno solar de alto flujo del CIE-UNAM. *Tesis Doctoral*.

- Rodat, S., Abanades, S., Sans, J., & Flaman, G. (2009). Hydrogen production from solar thermal dissociation of natural gas: development of a 10 kW solar chemical reactor prototype. *Solar Energy* 83, 1599-1610.
- Romero, M., & Gonzáles Aguilar, J. (2013). Solar thermal CSP technology. *WIREs Energy and Environment* 2014, 42-59.
- Rubí-Delgado, R. (2014). Diseño y construcción de una cámara inerte para el Laboratorio Nacional de Concentración Solar y Química Solar. *Tesis de Licenciatura. Universidad Autónoma del Estado de Morelos.*
- SENER. (2013). Estrategia Nacional de Energía 2013 - 2027.
- SENER. (2013). Prospectivas de Energías Renovables 2013 - 2027. 50 - 59.
- SENER. (2014). Balance Nacional de Energía 2013. *Dirección General de Planeación e Información Energéticas.*
- Steinfeld, A. (2005). Solar thermochemical production of hydrogen-a review. *Solar Energy* 78, 603-610.
- Steinfeld, A., & Meier, A. (2004). Solar Fuels and Materials. *Encyclopedia of Energy.*, Volume 5.
- Taylor, R., Berjoan, R., & Coutures, J. (1983). Solar gasification of carbonaceous materials. *Solar Energy* 30, 513-525.
- Versteeg, H., & Malalasekera, W. (2007). *An Introduction to Computational Fluid Dynamics. The finite volume method.* Pearson Education Limited.
- Villiermaux, J. (1979). Les réacteurs chimiques solaires. . *Entropie.* , 85:25-31.
- von Zedtwitz, P., & Steinfeld, A. (2005). Steam-gasification of coal in a fluidized-bed/packed-bed reactor exposed to concentrated thermal radiation modeling and experimental validation. *Ind. Eng. Chem. Res.* 44, 3852-3861.
- Wendelin, T., Dobos, A., & Lewandowski, A. (2013). SolTrace: A Ray-Tracing Code for Complex Solar Optical Systems. *National Renewable Energy Laboratory.*
- Z'Graggen, A., Haueter, P., Trommer, D., Romero, M., de Jesús, J., & Steinfeld, A. (2006). Hydrogen production by steam-gasification of petroleum coke using concentrated solar power- II. Reactor design, testing, and modeling. *Int. J. Hydrogen Energy* 31, 797-811.