

MODELADO CFD DE COMBUSTIÓN DE BIOMASA, SIMULACIÓN TRANSITORIA DE CALDERAS Y QUEMADORES

GÓMEZ RODRÍGUEZ, Miguel Ángel ⁽¹⁾; GONZÁLEZ GIL, Arturo ⁽¹⁾

ÁLVAREZ FEJOO, Miguel Ángel ⁽¹⁾; PORTEIRO FRESCO, Jacobo ⁽²⁾

miguelgr@tud.uvigo.es

⁽¹⁾Centro Universitario de la Defensa, Escuela Naval Militar, Marín.

⁽²⁾Universidad de Vigo, Escuela de Ingeniería Industrial, Departamento de Ingeniería Mecánica, Máquinas y Motores Térmicos y Fluidos.

RESUMEN

Se presenta un método de simulación computacional de los procesos implicados en la combustión de biomasa. El modelado implementa varios submodelos que resuelven una amplia variedad de fenómenos de conversión térmica, reacción química e interacción entre partículas sólidas y fase gas. El modelado se basa en las técnicas clásicas de la dinámica de fluidos computacional (CFD) para la resolución de los fenómenos de transporte y reacción de la fase gas, junto con la resolución de un conjunto de variables que definen el estado y la evolución de la fase sólida. El método es aplicado a la simulación de calderas y quemadores de biomasa en los cuales se estudian los parámetros más importantes para el aprovechamiento térmico y la reducción de emisiones contaminantes. La simulación de estos sistemas permite analizar el efecto del combustible, la geometría o la distribución del aire de alimentación en la eficiencia de la combustión.

Palabras clave: Simulación CFD, combustión, biomasa.

1. Introducción

El estudio de la combustión de biomasa tiene actualmente un creciente interés debido a su naturaleza de energía renovable y dada la carencia de combustibles fósiles en numerosos países industrializados. La comprensión del comportamiento de la biomasa es importante a la hora de desarrollar sistemas de aprovechamiento energético mediante combustión. El modelado CFD supone una herramienta muy útil a la hora de comprender los numerosos procesos de conversión térmica y analizar la combustión en diferentes sistemas como hornos calderas o quemadores. Hay numerosas propuestas para afrontar el modelado de la combustión de biomasa de las cuales la mayoría de las publicaciones definen dos zonas bien diferenciadas para lecho y hogar, siendo la zona del lecho la que supone una dificultad a la hora de plantear el modelado. Porteiro et al. [1] y Collazo et al. [2] utilizaron un modelo 0-dimensional para plantear los balances de masa energía y especies que ocurren durante la combustión para introducirlos en la zona del hogar a través de una superficie límite. Otros autores como vanderLans et al. [3], Yin et al. [4] o Kaer [5] plantearon un modelado unidimensional externo al dominio CFD, acoplado mediante una superficie de contorno, para simular una parrilla por la cual el combustible avanza a medida que se consume. Otros autores como Yang et al. [6] o Shin y Choi [7] calcularon ciertas variable de lecho dentro del dominio computacional de cálculo. Otras estrategias como la utilizada por Peters y Bruch [8] utilizan modelado de fase solida discreta (DPM) para aplicar la conversión térmica a una simple partícula y un conjunto de estas formará el lecho. Otros autores como Mehrabian et al. [9] o Ström y Thunman [10] proponen modelos de lecho integrados en el dominio computacional que se centran en la resolución de la partícula mediante capas móviles que representan las distintas etapas de la combustión por las que va pasando cada partícula. Una descripción completa de la evolución del lecho y su interacción con la fase gaseosa fue presentada por Collazo et al. [11] para la simulación de un quemador de biomasa en diferentes condiciones de funcionamiento. Una evolución de este trabajo fue presentada por Gómez at al. [12] utilizando modelos más precisos de transmisión de calor, reacción y compactación de lecho.

Este trabajo aplica un modelo tridimensional transitorio a la simulación de diferentes calderas y quemadores de biomasa experimentales de lecho fijo. Dentro del lecho la fase sólida se modela mediante variables Eulerianas cuyas ecuaciones de transporte definen la evolución de la fase sólida y su estructura física y química. La fase gas está resuelta mediante las técnicas clásicas de volúmenes finitos aplicadas dinámica de fluidos. Este modelado está completado con una serie de modelos que resuelven fenómenos como la transmisión de calor en medios porosos [13], interacción entre partículas sólidas y fase gas, y compactación de las capas de lecho debilitadas por el proceso de degradación causado por la combustión [12].

2. Modelado

En esta sección se describen las ecuaciones que modelan la evolución de la fase sólida y el los modelos y reacciones utilizados para el cálculo de la fase gas.

2.1. Fase solida

Los códigos de CFD comerciales están equipados con una serie de modelos que permiten modelar la combustión homogénea en fase gas. Sin embargo, para representar la combustión de un lecho de partículas sólidas, es necesario implementar el código con funciones externas. Para ello se han definido una serie de variables que definen el estado de la fase sólida de la biomasa y resuelven la evolución de las partículas según avanza la combustión. Estas variables son las siguientes:

- Entalpía del sólido (h)
- Fracción sólida (ϵ)
- Diámetro de partícula (dp)
- Densidad de humedad local (ρ_{hum})

- Densidad de madera seca local (ρ_{mad})
- Densidad de char local (ρ_{char})

A continuación se muestran en la Tabla 1 las ecuaciones de transporte que resuelven localmente la evolución de cada una de las variables en las celdas computacionales.

Tabla 1: Ecuaciones de transporte de las variables de la fase sólida.

Entalpía	$\frac{\partial(\varepsilon\rho_p h_s)}{\partial t} + \nabla(\varepsilon \cdot \rho_p \cdot Rd \cdot \mathbf{v}_s \cdot h_s) = \nabla(k_{s,eff} \cdot \nabla T_s) + S_{h_s}$	(¡Error! Marcador no definido.1)
Fracción sólida	$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \nabla(Rd \cdot \mathbf{v}_s \cdot \varepsilon) = \left(\frac{-\dot{\omega}_{mad}'''}{\rho_{mad}^s} + \frac{\dot{\omega}_{G,char}'''}{\rho_{char}^s} - \frac{\dot{\omega}_{c,char}'''}{\rho_{char}^s} \right) \varepsilon$	(2)
Diámetro de partícula al cubo	$\frac{\partial d_{eq}^3}{\partial t} + \nabla(\varepsilon \cdot Rd \cdot \mathbf{v}_s \cdot d_{eq}^3) = \left(\frac{-\dot{\omega}_{mad}'''}{\rho_{mad}^s} + \frac{\dot{\omega}_{G,char}'''}{\rho_{char}^s} - \frac{\dot{\omega}_{c,char}'''}{\rho_{char}^s} \right) d_{eq}^3$	(3)
Densidad de humedad	$\frac{\partial(\varepsilon\rho_{hum})}{\partial t} + \nabla(\varepsilon \cdot Rd \cdot \mathbf{v}_s \cdot \rho_{hum}) = -\dot{\omega}_{hum}''' \varepsilon$	(4)
Densidad de madera seca	$\frac{\partial(\varepsilon\rho_{mad})}{\partial t} + \nabla(\varepsilon \cdot Rd \cdot \mathbf{v}_s \cdot \rho_{mad}) = -\dot{\omega}_{mad}''' \varepsilon$	(5)
Densidad de char	$\frac{\partial(\varepsilon\rho_{char})}{\partial t} + \nabla(\varepsilon \cdot Rd \cdot \mathbf{v}_s \cdot \rho_{char}) = (\dot{\omega}_{G,char}''' - \dot{\omega}_{c,char}''') \varepsilon$	(6)
Densidad total de la partícula	$\rho_{hum} + \rho_{mad} + \rho_{char} = \rho_p$	(7)

En las ecuaciones de la tabla 1, es necesario definir los términos de generación y consumo de las distintas variables. Las velocidades de reacción de las diferentes densidades de la partícula se muestran en la Tabla 2.

Tabla 2: Velocidad de consumo de las diferentes variables.

Consumo de humedad	$\dot{\omega}_{hum}''' = \tau \frac{\rho_p C_p}{LH_{hum}} \frac{\partial T_s}{\partial t}, T_s \geq T_{evap}$	(10)
Ratio de volatilización	$\dot{\omega}_{mad}''' = \rho_{mad} \sum_{i=1}^3 A_i \exp\left(-\frac{E_i}{RT_s}\right)$	(11)
Generación de char	$\dot{\omega}_{G,char}''' = \rho_{mad} A_3 \exp\left(-\frac{E_3}{RT_s}\right)$	(12)
Consumo de char	$\dot{\omega}_{c,char}''' = K_{glob}^{ox} A_v [O_2] M_C + K_{glob}^{g,1} A_v [CO_2] M_C + K_{glob}^{g,2} A_v [H_2O] M_C$	(13)

La conversión térmica de la fase sólida se produce mediante varias reacciones de devolatilización y reacción química del char. La devolatilización de la madera se modela con tres reacciones controladas térmicamente en las cuales la madera seca se convierte gases e hidrocarburos ligeros, en alquitranes y en char. Por su parte el char formado se consume mediante tres reacciones heterogéneas de oxidación y gasificación con CO₂ y H₂O. Las cinéticas de estas reacciones se muestran en la Tabla 3. Más información sobre el modelado de la fase sólida puede encontrarse en [12].

Tabla 3: Velocidad de consumo de las diferentes variables.

Reacciones de devolatilización		Cinéticas
<i>Madera seca</i> → <i>Gas</i>		$A_1 = 111 \times 10^9 (s^{-1}), E_1 = 177 \times 10^3 (J \cdot mol^{-1})$
<i>Madera seca</i> → <i>Tar</i>		$A_2 = 9.28 \times 10^9 (s^{-1}), E_2 = 149 \times 10^3 (J \cdot mol^{-1})$
<i>Madera seca</i> → <i>Char</i>		$A_3 = 30.5 \times 10^9 (s^{-1}), E_3 = 125 \times 10^3 (J \cdot mol^{-1})$
Combustión heterogénea del char		Cinéticas
(R.1)	$C + \varphi O_2 \rightarrow 2(1 - \varphi)CO + (2\varphi - 1)CO_2$	$K^{ox} = 1.715 \cdot T_s \cdot \exp\left(-\frac{9000}{T_s}\right)$

(R.2)	$C + CO_2 \rightarrow 2CO$	$K^{g,1} = 3.42 \cdot T_s \cdot \exp\left(-\frac{1.56 \times 10^4}{T_s}\right)$
(R.3)	$C + H_2O \rightarrow CO + H_2$	$K^{g,2} = 5.7114 \cdot T_s \cdot \exp\left(-\frac{1.56 \times 10^4}{T_s}\right)$

2.2. Fase gas

El modelado de la fase gas ha sido ampliamente desarrollado y utilizado por los códigos CFD. Estos códigos están programados con un amplio abanico de modelos que permiten simular los distintos fenómenos que ocurren en los fluidos. Mediante estas técnicas se resuelven variables como la presión, velocidades, energía, turbulencia, radiación y especies químicas. Estas se complementan con modelos como el “k-ε realizable” para la turbulencia, “Eddy Dissipation Concept” para las reacciones químicas o el modelo de Ordenadas Discretas modificado presentado en [13] para calcular la transferencia por radiación en medios porosos.

Tabla 4: Esquema de reacciones en fase gas.

Reacciones homogéneas en fase gas		Cinéticas
(R.4)	$C_6H_6 + \frac{9}{2}O_2 \rightarrow 6CO + 3H_2O$	$R_{1,kin} = 1.3496 \times 10^9 \exp\left(-\frac{1.256 \times 10^8}{RT}\right) [C_6H_6]^{-0.1} [O_2]^{1.85}$
(R.5)	$CH_4 + \frac{3}{2}O_2 \rightarrow CO + 2H_2O$	$R_{2,kin} = 5.012 \times 10^{11} \exp\left(-\frac{2 \times 10^8}{RT}\right) [CH_4]^{-0.7} [O_2]^{0.8}$
(R.6)	$H_2 + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow H_2O$	$R_{3,kin} = 9.87 \times 10^8 \exp\left(-\frac{3.1 \times 10^7}{RT}\right) [H_2][O_2]$
(R.7)	$CO + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow CO_2$	$R_{4,kin} = 2.239 \times 10^{12} \exp\left(-\frac{1.702 \times 10^8}{RT}\right) [CO][O_2]^{0.25} [H_2O]^{0.5}$
(R.8)	$H_2O + CO \rightarrow CO_2 + H_2$	$R_{5,kin} = 2.780 \exp\left(-\frac{1.255 \times 10^7}{RT}\right) [H_2O][CO]$
(R.9)	$CO_2 + H_2 \rightarrow H_2O + CO$	$R_{3,kin} = 93690 \exp\left(-\frac{4.659 \times 10^7}{RT}\right) [CO_2][H_2]$

3. Resultados de simulación

El modelo de combustión ha sido aplicado a un quemador experimental y a una caldera de lecho fijo. De la simulación de dichos sistemas se pueden obtener multitud de resultados de las distintas variables

analizadas. La figura 1 muestra los contornos de temperaturas en un quemador experimental y su evolución en distintos instantes. Se observa el avance del frente de ignición a medida que se consume el lecho.

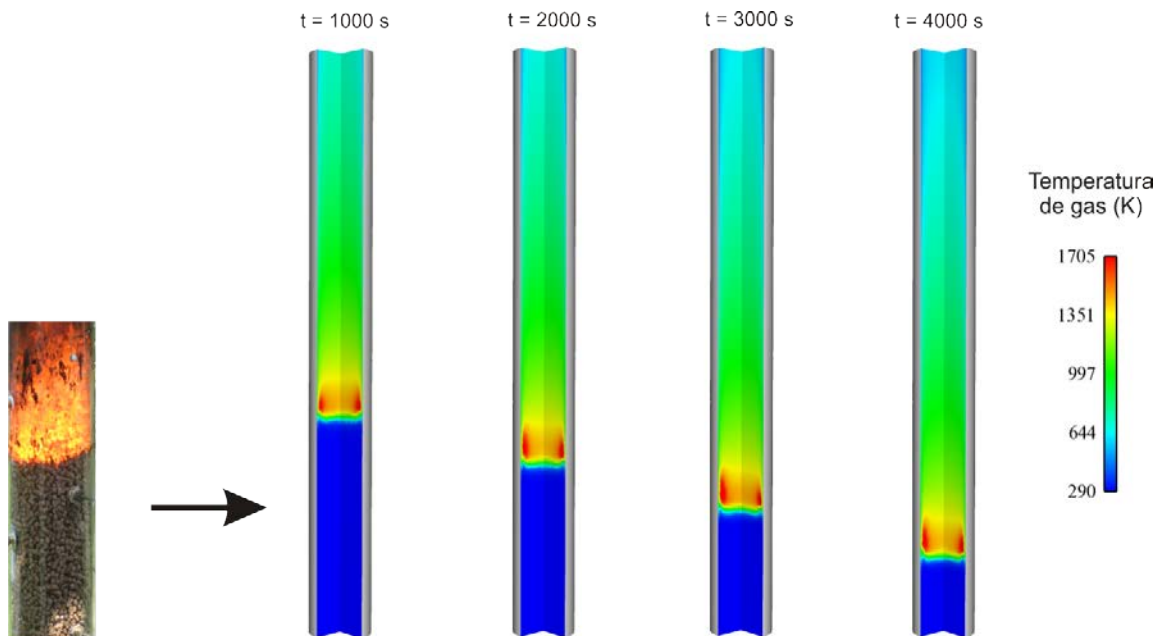
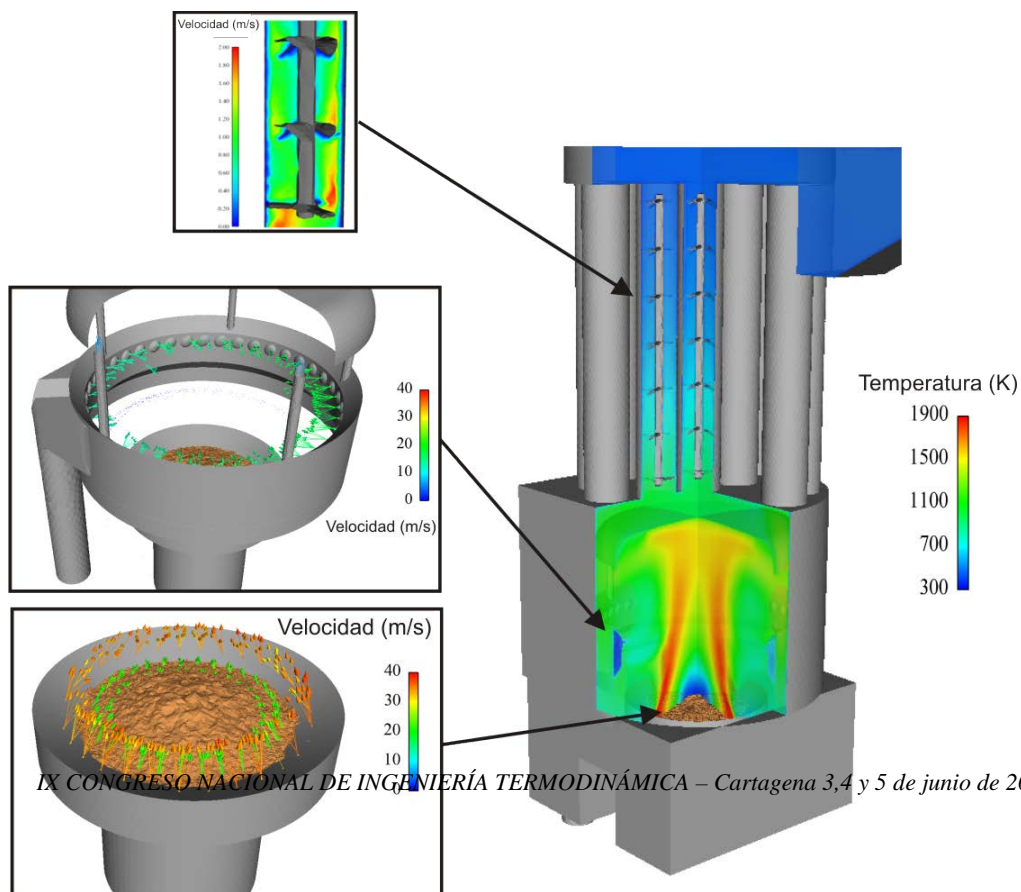


Figura 1: Evolución de los contornos de temperatura de los gases en un quemador experimental.

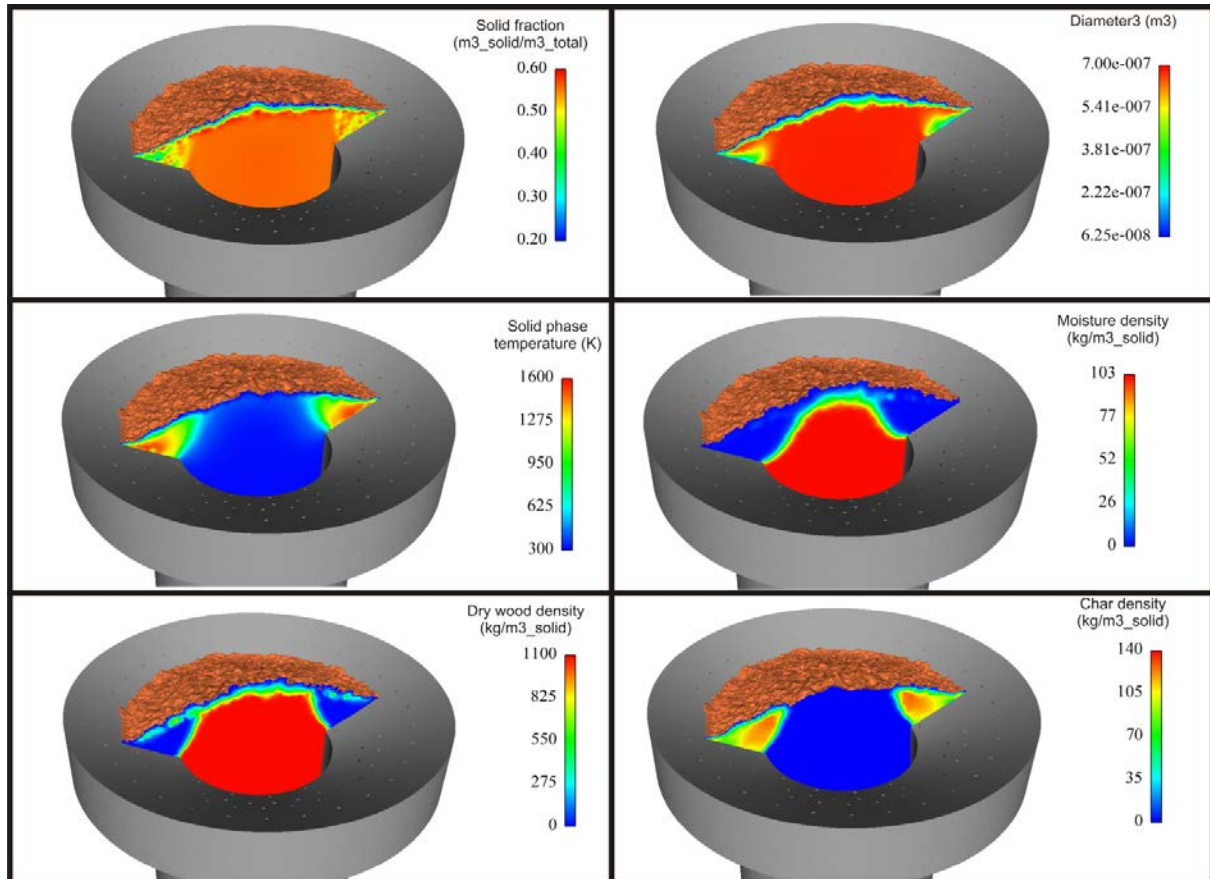
La figura 2 muestra los perfiles de algunas variables obtenidos en la simulación de una caldera de 60 kW de lecho fijo. En ella se pueden observar los contornos de temperatura en el hogar de la caldera y su enfriamiento al paso por los tubos del intercambiador de calor. También se muestran los vectores de



velocidad en las inyecciones de aire primario y secundario así como los contornos de la velocidad del gas al paso por los tabuladores en el intercambiador de calor.

Figura 2: Contorno de temperaturas y vectores de velocidad una caldera de lecho fijo.

La figura 3 muestra los perfiles de las principales variables de la fase sólida dentro del lecho. Estos son la fracción de sólido y el diámetro de las partículas que muestran las zonas más degradadas por la



combustión, la temperatura de las partículas que es elevada en las zonas de reacción y las densidades de humedad madera y char las cuales reflejan la estratificación del lecho en las distintas etapas de la combustión.

Figura 3: Contorno de las principales variables de la fase sólida en el lecho.

4. Contraste experimental

En esta sección se muestran algunos resultados numéricos tomados de las simulaciones del quemador experimental y de la caldera de 60 kW y se comparan con medidas tomadas en ensayos experimentales de los mismos sistemas.

4.1. Quemador experimental

Un parámetro importante en la combustión de biomasa es la velocidad de propagación del frente de llama. De este parámetro dependerán la geometría de los quemadores y los caudales de aire necesarios para la correcta combustión. Se ha simulado el funcionamiento del quemador con varios caudales de aire de alimentación. Las figuras 4 y 5 muestran, respectivamente, los valores simulados y experimentales de la velocidad de propagación del frente de llama y las temperaturas máximas registradas por los termopares situados en el interior del quemador. El modelo CFD predice las

velocidades de propagación razonablemente bien a caudales bajos de aire. Para flujos de aire superiores a $0.2 \text{ kg/m}^2 \cdot \text{s}$ se predicen velocidades excesivas. Las temperaturas máximas son predichas con valores ligeramente superiores a caudales bajos de aire. A caudales superiores a $0.35 \text{ kg/m}^2 \cdot \text{s}$ se produce un apagado prematuro en las simulaciones mientras en el sistema experimental la combustión se sostiene hasta $0.45 \text{ kg/m}^2 \cdot \text{s}$.

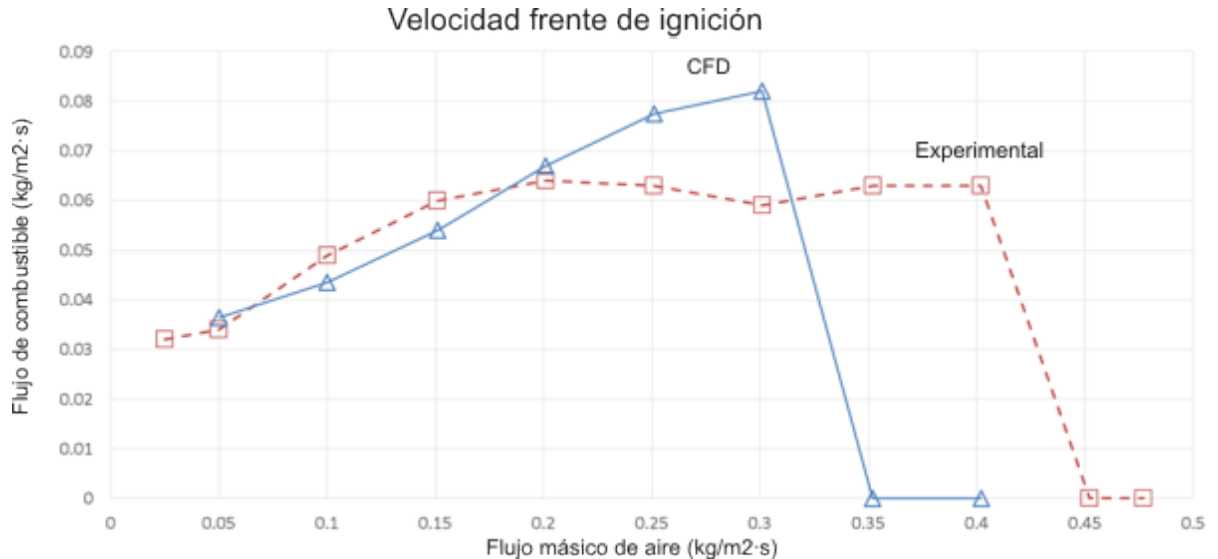


Figura 4: Comparación de predicciones y valores experimentales de velocidad de avance del frente de llama.

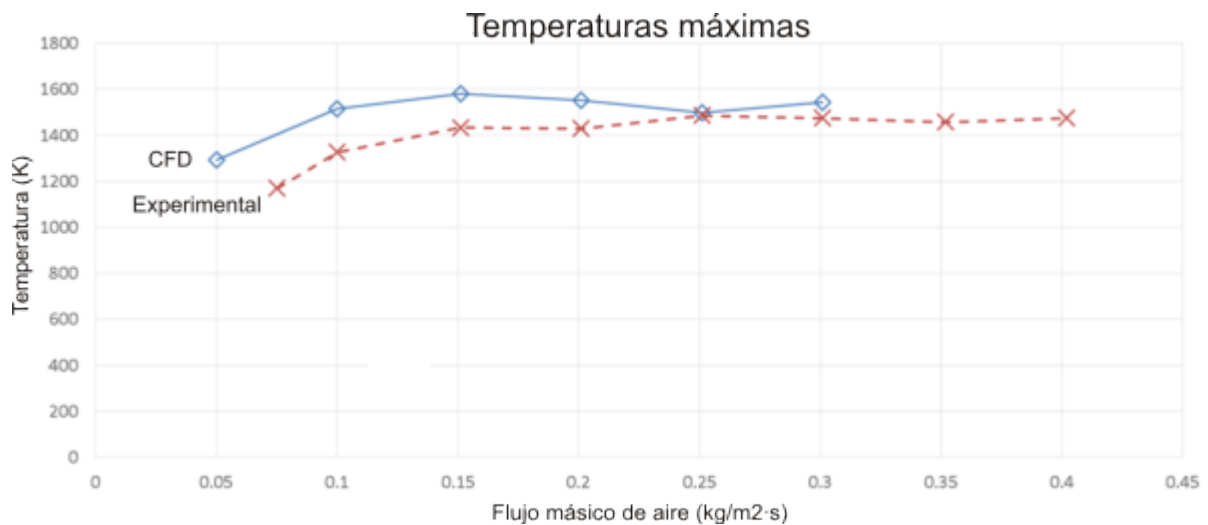


Figura 5: Comparación de predicciones y valores experimentales temperaturas máximas en el interior del quemador.

4.2. Caldera de 60 kW

La caldera fue ensayada en distintas condiciones de funcionamiento variando tanto la de alimentación de combustible como el reparto de aire. En la tabla 5 se muestran las distintas condiciones en las que fue ensayada la caldera. En los ensayos E1 y E2 la caldera funciona a plena carga (aproximadamente 60 kW) con distintos repartos de aire primario secundario e infiltraciones. En los ensayos E3 y E4 la caldera funciona a media carga (aproximadamente 30 kW) con distintos repartos de aire primario secundario e infiltraciones.

Tabla 5: Condiciones de los ensayos en la caldera.

Ensayo	Caudal de combustible ($\text{g}\cdot\text{s}^{-1}$)	Caudal de aire primario ($\text{g}\cdot\text{s}^{-1}$)	Caudal de aire secundario ($\text{g}\cdot\text{s}^{-1}$)	Caudal de infiltraciones ($\text{g}\cdot\text{s}^{-1}$)
E1	4.02	10.4 (30%)	14.5 (41%)	10.2 (29%)
E2	3.69	4.2 (15%)	14.3(50%)	9.9 (35%)
E3	2.06	4.7 (14%)	9.6 (27%)	20.6 (59%)
E4	2.06	7.3 (22%)	8.0 (24%)	17.6 (53%)

En la caldera experimental se han tomado datos de la potencia transmitida al agua así como de datos de temperaturas y emisiones contaminantes en la salida de humos. Estos datos fueron tomados durante varias horas con la caldera estabilizada funcionando a plena carga. Igualmente se han simulado los cuatro ensayos realizados en la caldera durante varias horas de funcionamiento. En la figura 6 se muestran los valores promediados de la potencia transmitida al agua, temperatura, y concentraciones de CO y CO₂ en los humos de la simulación y de los ensayos en la caldera. Las predicciones muestran valores de potencias y temperaturas razonablemente cercanos en la mayoría de los ensayos. La predicción de emisiones contaminantes es razonablemente buena en el caso del CO₂ y dentro del orden de magnitud para el CO, lo cual se puede considerar aceptable dada la simplicidad del mecanismo de reacción de fase gas empleado.

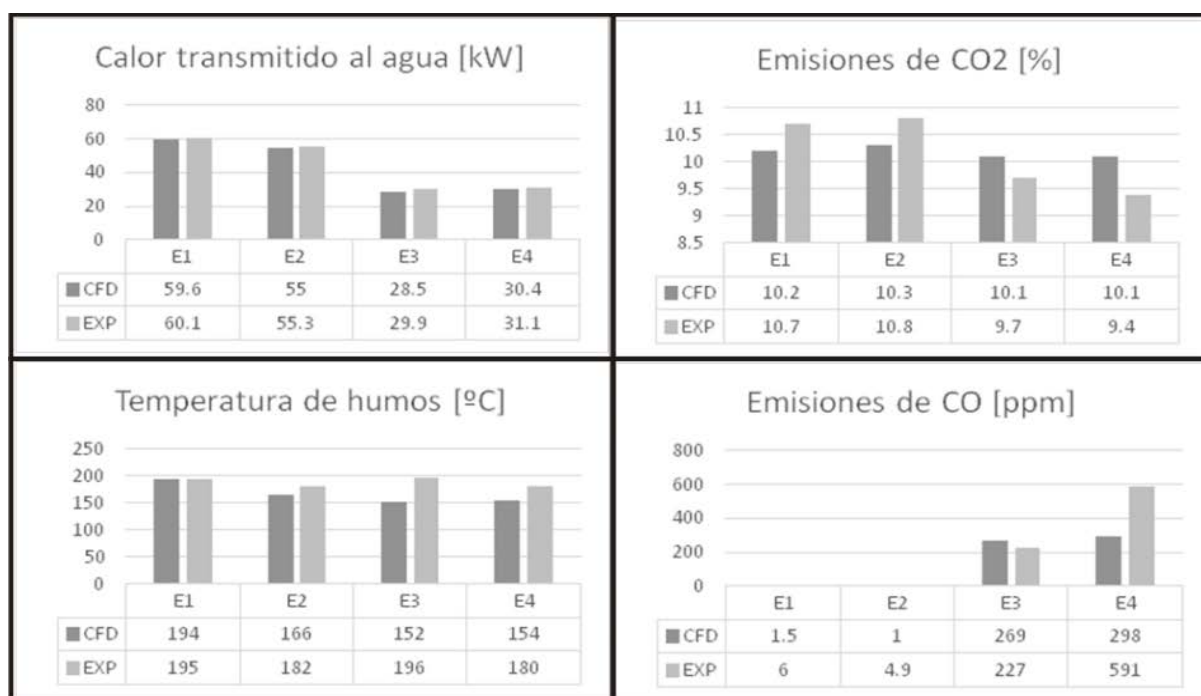


Figura 6: Comparación de predicciones y valores experimentales en distintos parámetros de la caldera.

Puesto que el modelo aquí expuesto es un modelo transitorio se puede analizar la variación temporal de los distintos parámetros. La figura 7 muestra la evolución de las emisiones de CO y CO₂ en el ensayo E1 tanto de las simulaciones como de las mediciones.

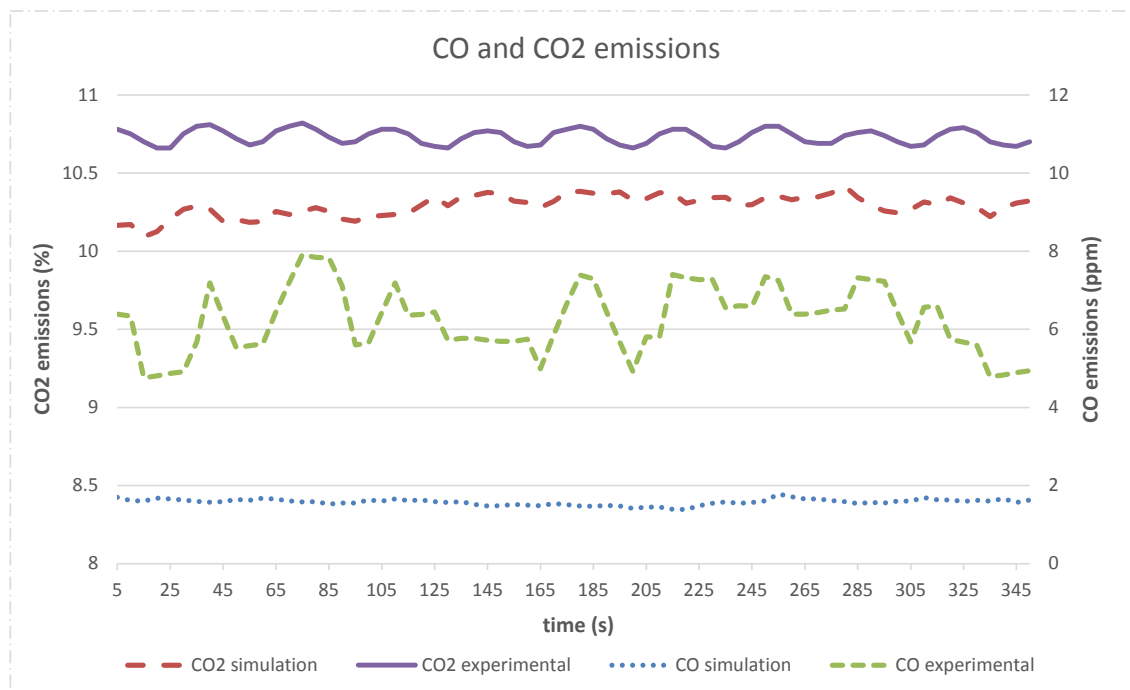


Figura 7: Variación temporal de las emisiones de CO y CO₂ en la simulación y en las mediciones.

5. Conclusiones y consideraciones finales

En este trabajo se utiliza un código de simulación CFD para simular la combustión de biomasa en un quemador experimental y una caldera de lecho fijo. En el código se implementan una serie de funciones y variables que permiten modelar la las partículas sólidas de lecho y sus principales propiedades para estudiar su evolución durante el proceso de combustión.

Como resultado de la simulación se pueden analizar las principales variables de cálculo en el dominio computacional. Estas variables reflejan el estado de la combustión en cada zona del lecho así como la separación de etapas y las temperaturas a las cuales ocurre la conversión térmica. También se pueden analizar variables de la fase gas como temperaturas, velocidades o concentraciones de especies. Algunos parámetros son comparados con resultados experimentales realizados en varios ensayos con distintas condiciones mostrando valores razonablemente cercanos entre las predicciones de las simulaciones y las mediciones. Esto puede ser una importante herramienta en el análisis del funcionamiento de distintos sistemas de combustión y puede servir para el diseño de equipos más eficientes que aprovechen el calor generado y reduzcan las emisiones contaminantes.

Nomenclatura

A_i	Factor pre-exponencial (s^{-1})
A_v	Relación Área-volumen (m^{-1})
d_{eq}	Diámetro equivalente (m)
E_i	Energía de activación ($J \cdot mol^{-1}$)
h_s	Entalpía de la fase sólida ($J \cdot K^{-1}$)
k	Conductividad térmica ($W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$)
K	Constantes de oxidación de char ($m \cdot s^{-1}$)
LH	Calor latente ($J \cdot kg^{-1}$)
M_i	Peso molecular ($kg \cdot kmol^{-1}$)
R	Constante de los gases ideales ($J \cdot K^{-1} \cdot mol^{-1}$)
Rd	Factor de reducción (-)
$R_{i,kin}$	Cinética de reacción (dependiente de cada reacción)
S	Término fuente ($W \cdot m^{-3}$)
T	Temperatura (K)
t	Tiempo (s)
V	Volumen (m^3)

Griegas

ε	Fracción sólida (-)
ρ	Densidad ($kg \cdot m^{-3}$)
τ	Fracción de calor recibido aplicado secado (-)
φ	Parámetro de oxidación de char (-)
$\dot{\omega}_i$	Ratios de generación o consumo ($kg \cdot m^{-3} \cdot s^{-1}$)

Subíndices

p	Partícula
s	Sólido
g	Gas
eff	Efectivo
c	Consumo
G	Generación
hum	Humedad
mad	Madera seca
$char$	Char
$evap$	Evaporación
$glob$	Global
C	Carbón

Superíndices

ox	Oxidación de char
$g,1$	Reacción de gasificación con CO_2
$g,2$	Reacción de gasificación con H_2O

6. Referencias

- [1] PORTEIRO FRESCO, J. GRANADA ÁLVAREZ, E. COLLAZO RODRÍGUEZ, J. PATIÑO VILAS, D. MORÁN GONZÁLEZ, JC. *Numerical modeling of a biomass pellet domestic boiler*. Energy Fuels, 2009, vol23, pp 1067–1075.

- [2] COLLAZORODRÍGUEZ, J. PORTEIRO FRESCO, J. MÍGUEZ TABARÉS, J.L.GRANADA ÁLVAREZ, E. GÓMEZ RODRÍGUEZ, M.A. *Numerical simulation of a small-scale biomass boiler*. *Energ Convers Manage*, 2012, vol 64, pp 87–96.
- [3] VAN DER LANS, R.P. PEDERSEN, L.T. JENSEN, A. GLARBORG, P. DAM-JOHANSEN, K. *Modelling and experiments of straw combustion in a grate furnace*. *Biomass Bioenergy*, 2000, vol 19, pp 199–208.
- [4] YIN, C. ROSENDAHL, L. KÆR, SK. CLAUSEN, S. HVID, SL. HILLER, T. *Mathematical modeling and experimental study of biomass combustion in a thermal 108 MW grate-fired boiler*. *Energy Fuels*, 2008, vol 22, pp 1380–1390.
- [5] KÆR, SK. *Numerical modelling of a straw-fired grate boiler*. *Fuel*, 2004, vol 83, pp 1183–1190.
- [6] YANG, Y.B. GOH, YR. ZAKARIA, R. NASSERZADEH, V. SWITHENBANK, J. *Mathematical modelling of MSW incineration on a travelling bed*. *Waste Manage*, 2002, vol 22, pp 369–380
- [7] SHIN, D. CHOI, S. *The combustion of simulated waste particles in a fixed bed*. *Combust Flame*, 2000, vol 121, pp 167–180.
- [8] PETERS, B. BRUCH, C. *Drying and pyrolysis of wood particles: Experiments and simulation*. *J. Anal. Appl. Pyrolysis*, 2003, vol 70, pp 233–250.
- [9] MEHRABIAN, R. ZAHIROVIC, S. SCHARLER, R. OBERNBERGER, I. KLEDITZSCH, S. WIRTZ, S. SCHERER, V. LU, H. BAXTER, LL. *A CFD model for thermal conversion of thermally thick biomass particles*. *Fuel Process Technol*, 2012, vol 95, pp 96–108.
- [10] STRÖM, H. THUNMAN, H. *CFD simulations of biofuel bed conversion: A submodel for the drying and devolatilization of thermally thick wood particles*. *Combust Flame*, 2013, vol 160, pp 417–431.
- [11] COLLAZO RODRÍGUEZ, J. PORTEIRO FRESCO, J. PATIÑO VILAS, D. GRANADA ÁLVAREZ, E. *Numerical modeling of the combustion of densified wood under fixed-bed conditions*. *Fuel*, 2012, vol 93, pp 149–159.
- [12] GÓMEZ RODRÍGUEZ, M.A. PORTEIRO FRESCO, J. PATIÑO VILAS, D. MÍGUEZ TABARÉS, J.L. *CFD Modelling of Thermal Conversion and Packed Bed Compaction in Biomass Combustion*. *Fuel*, 2014, vol 117, pp 716–732
- [13] GÓMEZ RODRÍGUEZ, M.A. PATIÑO VILAS, D. COMESAÑA MÍGUEZ, R. PORTEIRO FRESCO, J. ÁLVAREZ FEJOO, M.A. MÍGUEZ TABARÉS, J.L. *CFD simulation of a solar radiation absorber*. *Int J Heat Mass Tran*, 2013, vol 57, pp 231–240.