

Javier Pallarés Ranz

PREDICCIÓN DE INQUEMADOS EN CENIZAS
EN CALDERAS DE CARBÓN PULVERIZADO.
ANÁLISIS Y EVALUACIÓN DE
ESTRATEGIAS DE OPERACIÓN

Tesis Doctoral

Directora

Dra. Inmaculada Arauzo Pelet



Zaragoza, 2007

Javier Pallarés Ranz

PREDICCIÓN DE INQUEMADOS EN CENIZAS
EN CALDERAS DE CARBÓN PULVERIZADO.
ANÁLISIS Y EVALUACIÓN DE
ESTRATEGIAS DE OPERACIÓN

Tesis Doctoral

Directora

Dra. Inmaculada Arauzo Pelet



Zaragoza, 2007



La doctora Inmaculada Arauzo Pelet, profesora titular de la Universidad de Zaragoza del Departamento de Ingeniería Mecánica

CERTIFICA

que la presente Memoria, titulada:

“Predicción de inquemados en cenizas de calderas de carbón pulverizado . Análisis y evaluación de estrategias de operación”

ha sido realizada por Javier Pallarés Ranz bajo mi dirección, y que reúne los requisitos para optar al grado de doctor, y por tanto

AUTORIZA

la presentación de dicha memoria para su defensa

Zaragoza, 12 de noviembre de 2007

Fdo. Dra. Inmaculada Arauzo Pelet

Como en todo trabajo de investigación que exige estudio y dedicación durante un largo periodo de tiempo, es imposible llegar hasta el final sin la ayuda de numerosas personas que, colaborando de forma desinteresada, aportan su talento, tiempo y ganas. A todas esas personas que han hecho posible el trabajo de tesis que se presenta en esta memoria va dirigido este reconocimiento.

En primer lugar, quiero mostrar mi más profundo agradecimiento a mi directora de tesis, Inmaculada Arauzo, quien además de meterme en este fregado y contagiarme su optimismo, se ha involucrado tanto como yo desde el primer día hasta el último en el trabajo realizado. También, dentro del ámbito académico de la Universidad de Zaragoza y como director de la división térmica de la Fundación CIRCE, agradezco enormemente a Cristóbal Cortés sus valiosos comentarios y su confianza en mí al permitirme formar parte de su grupo de investigación.

También deseo agradecer a la Fundación CIRCE y a su director Antonio Valero, su apuesta por la investigación y el desarrollo tecnológico, y la oportunidad que me ha brindado amparando y financiando todo el trabajo realizado. De esta manera, CIRCE se ha convertido en mi segunda casa en los últimos siete años, primera en algunos momentos, donde he tenido la suerte de conocer a personas excepcionales y muy brillantes dentro y fuera del trabajo. Gracias a todos, especialmente a Luís Ignacio, Sergio, Mariano, José Miguel, José, Dani, Fernando, Jesús y Toñi, de quienes he aprendido mucho y a los que agradezco enormemente su atención, colaboración y apoyo.

Agradezco a la Unión Europea, que financió el proyecto de investigación 7220-PR-130-CARNO, y a todos los socios participantes en éste, cuyas aportaciones e investigaciones han enriquecido notablemente mi trabajo. Especialmente, quiero agradecer al personal de la central térmica Lamarmora (ASM Brescia, Italia) y al director de generación Marco Treccani, que nos proporcionaran todos los datos técnicos y de operación disponibles en la planta para desarrollar y validar el sistema de predicción de inquemados. Al mismo tiempo, también dentro del proyecto europeo, quiero agradecer particularmente a Peter Stephenson sus consejos y recomendaciones en la modelización de la combustión del carbón, y a Michael Whitehouse sus esfuerzos como coordinador del proyecto.

Gracias también a la Universidad de Leeds, a Mohamed Pourkashanian por permitir mi estancia en el centro de CFD que dirige en la propia universidad, y muy especialmente a Alan Williams, quien me tuteló y fue clave con sus observaciones en el desarrollo final del modelo de combustión. Al mismo tiempo, quiero agradecer muy especialmente a Adrian, Nicu y Raymond, también de la Universidad de Leeds, su ayuda en el desarrollo de la tesis, sobre todo en la revisión y traducción de la memoria, y por supuesto por hacerme sentir como en casa durante el tiempo que pasé en Leeds y en Londres con ellos.

Mil gracias a Enrique Teruel por su paciencia, por dejarse la vista en el portátil con los pesos y los bias, y por todo el trabajo que ha realizado para conseguir que el sistema de redes neuronales saliera del Matrix de su ordenador y fuera una realidad.

También quiero agradecer a Pedro Jodrá sus indicaciones y consejos para el estudio estadístico de los resultados finales del sistema.

Finalmente, dentro del ámbito personal el mayor de los agradecimientos y un beso enorme a mis padres, a mi hermana y a mi tía, por su apoyo incondicional, por sufrirme en demasiados momentos durante los últimos años, y porque sé que ahora mismo están tan contentos como yo; a Miriam porque lo es todo para mí, y a mis amigos por dejarme ver más allá de la tesis al grito de Ludus Magnus.

A mis padres

INDICE

1	INTRODUCCIÓN	1
	1.1 El proceso de combustión en calderas de carbón pulverizado.....	2
	1.2 Problemas derivados de los inquemados	4
	1.3 Factores que influyen en los inquemados	7
	1.4 Medición de inquemados en cenizas volantes	11
	1.5 Sistemas de predicción de inquemados	12
	1.6 Objetivos y contenidos de la tesis.....	14
	Nomenclatura y Acrónimos	18
2	REVISIÓN MODELOS DE COMBUSTIÓN	19
	2.1 Devolatilización.....	21
	2.1.1 Descripción del proceso y resultados más significativos.....	22
	2.1.2 Modelos de devolatilización	26
	2.2 Combustión homogénea de los productos volátiles.....	34
	2.3 Oxidación del residuo carbonoso.....	36
	2.3.1 Descripción del proceso y resultados más significativos.....	36
	2.3.2 Modelos de oxidación del residuo carbonoso.....	45
	2.4 Resumen	63
	Nomenclatura y Acrónimos	65
3	MODELOS CFD	69
	3.1 Método de resolución numérica	70
	3.2 Modelos matemáticos	77
	3.3 Condiciones de contorno	91
	3.4 Verificación y validación.....	93
	3.5 Resumen	95
	Nomenclatura y Acrónimos	96
4	EVALUACIÓN DE SENSIBILIDAD DE LOS PARÁMETROS QUE AFECTAN A LA PRODUCCIÓN DE INQUEMADOS	101
	4.1 Descripción de la central ASM Brescia	102
	4.2 Modelo CFD de la caldera ASM Brescia	104
	4.2.1 Descripción de la geometría	104

4.2.2	Modelos matemáticos	105
4.2.3	Condiciones de contorno	107
4.2.4	Verificación y validación	108
4.3	Descripción de escenarios y estudio de sensibilidad	111
4.3.1	Análisis de parámetros aislados	112
4.3.2	Análisis multiparámetro	122
4.4	Conclusiones	131
	Nomenclatura y Acrónimos	133
5	MODELO DE CONDICIONES LOCALES DE COMBUSTIÓN	135
5.1	Redes neuronales	136
5.2	Estructura del sistema de redes neuronales.....	140
5.3	Entrenamiento del sistema de redes neuronales	144
5.4	Validación del sistema de redes neuronales	149
5.5	Conclusiones	154
	Nomenclatura y Acrónimos	155
6	MODELO DE COMBUSTIÓN	157
6.1	Modelo de devolatilización	160
6.2	Modelo de oxidación del residuo carbonoso	163
6.3	Validación del modelo avanzado de combustión	180
6.4	Conclusiones	188
	Nomenclatura y Acrónimos	190
7	SISTEMA DE PREDICCIÓN DE INQUEMADOS	195
7.1	Descripción del sistema de predicción de inquemados	196
7.2	Validación del sistema de predicción de inquemados	199
7.3	Análisis y valoración del sistema de predicción de inquemados	215
7.4	Conclusiones	219
	Nomenclatura y Acrónimos	222
	SINTESIS, PERSPECTIVAS Y APORTACIONES	225
	ANEXO: Publicaciones	239
	P.1 Numerical prediction for unburned carbon levels in large pulverized coal utility boilers (Pallarés et al. 2005)	241

P.2 Integration of CFD codes and advanced combustion models for quantitative burnout determination (Pallarés et al. 2007)	251
P.3 Design of an engineering system for unburned carbon prediction (Pallarés et al. 2007)	261
BIBLIOGRAFÍA	287

1 INTRODUCCIÓN

El carbón es, hoy en día, el recurso fósil más abundante en el mundo, y como tal, juega un papel decisivo como fuente primaria de energía. Más del 27 % de la energía utilizada, y más del 34 % del total de la electricidad generada en el mundo, tienen como origen la combustión de carbón pulverizado (BP Statistical review of World energy, 2006). En el futuro, las previsiones realizadas por las compañías generadoras de electricidad auguran un cambio radical, posicionando de nuevo al carbón como fuente principal de combustible, y relegando al gas a un papel secundario. Este resurgimiento del carbón respondería a los cambios tecnológicos que permiten reducir las emisiones contaminantes a la atmósfera, y a las dudas creadas sobre la seguridad de los suministros de gas, y acrecentadas por las recientes tensiones internacionales. De manera que en las próximas décadas, no va a dejar de crecer la importancia del carbón, constituyendo una fuente vital de energía. Sin embargo, es necesario un empleo sensato y eficiente, que persiga dos objetivos principales: cumplir las directivas medioambientales y obtener unos costes de producción por kWh generado que sean competitivos en un mercado eléctrico liberalizado.

Desde hace algún tiempo, estos dos objetivos han forzado a los generadores a buscar las condiciones más eficientes de la combustión, utilizando el combustible más barato. Las consecuencias inmediatas de este cambio de política energética traen como respuestas, primero, la implantación de nuevas tecnologías que minimicen las emisiones contaminantes de partículas, SO₂, NO_x y CO₂, causantes de la contaminación atmosférica, lluvia ácida y efecto

invernadero; y en segundo lugar, la búsqueda de alternativas de abastecimiento de combustible más flexibles como son la cocombustión y la mezcla de carbones.

Aumentar la eficiencia, controlar las emisiones de gases y partículas, y minimizar los residuos sólidos se consiguen en gran parte mejorando el proceso de combustión del carbón. Por ello, predecir la eficiencia de la combustión en las calderas de potencia, y en particular, la cantidad de inquemados producidos durante la combustión, es fundamental para alcanzar ambos objetivos. Las partículas inquemadas que abandonan el hogar suponen en primer lugar una pérdida de combustible, reduciendo la eficiencia térmica de la caldera. Además, aumentan la erosión en los intercambiadores de calor, afectan a la eficiencia de los precipitadores electrostáticos, y pueden hacer inservible la reutilización de la ceniza como sustitutivo del cemento o aditivo al hormigón.

En este capítulo, se presentan los problemas derivados del aumento de los inquemados en calderas de potencia, las causas que provocan este aumento, y finalmente, los sistemas de medición y predicción que permiten identificar y evitar las condiciones más desfavorables de operación de una central térmica de carbón, ahorrando un consumo de combustible significativo.

1.1 El proceso de combustión en calderas de carbón pulverizado

Antes de entrar a fondo en las causas y los problemas derivados de los inquemados, primero es necesario hacer un repaso de todo el recorrido del carbón, desde que llega a la central hasta que es expulsado por la chimenea en forma de gases exhaustados y micrométricas partículas suspendidas en estos. Un estudio detallado del proceso de combustión en calderas de carbón pulverizado no se puede limitar exclusivamente al hogar.

El primer paso es la elección del carbón. El carbón que llega a la central se almacena en el parque de carbones. Desde aquí, se gestionan las entradas de las distintas parvas, que se analizan en el laboratorio para determinar su composición y otras propiedades. Estos análisis permiten verificar las condiciones del suministrador, ya que la mayoría de los equipos de las centrales están diseñados para trabajar con un rango y propiedades de carbón determinadas. El precio del carbón es el mayor coste variable. Por lo tanto, un pequeño ahorro en su precio puede suponer una reducción significativa de los gastos de operación de la central. Como el coste de generación entre las distintas centrales es muy semejante, una reducción en el precio del carbón puede determinar si una central oferta, asumiendo un riesgo inferior, un precio de

generación inferior en el mercado mayorista (pool), y así entrar en funcionamiento en lugar de otra central de carbón o de turbina de gas. Tradicionalmente, las calderas se diseñaban para un tipo de carbón particular. Sin embargo, hoy en día, es una práctica habitual mezclar dos o más carbones distintos. Existen dos razones principales para mezclar carbones: reducir el coste total o mejorar alguna característica de uno de ellos. La reducción en el coste del carbón suele ser la razón más común. Sin embargo, si un carbón presenta un problema conocido, como el punto de fusión de las escorias, contenido en azufre o baja reactividad, se pueden mezclar distintos carbones, siempre que sean compatibles, para modificar las propiedades del original y conseguir que éstas se sitúen dentro de los márgenes adecuados para el funcionamiento de los equipos de la central. Otra de las razones que han impulsado a las centrales a mezclar carbones, se fundamenta en obtener una mayor disponibilidad y seguridad en el suministro (Haas et al., 2001).

El carbón que cumple las condiciones de calidad requeridas por la central se conduce, por medio de cintas transportadoras, a unas tolvas de almacenamiento desde donde se alimenta al sistema de molienda. En los molinos se somete a un proceso de molienda y secado simultáneos. A continuación, las partículas de carbón son transportadas neumáticamente por el aire primario hasta los quemadores. En el caso de calderas de fuegos frontales con quemadores de premezcla, como es la central de estudio de este trabajo de tesis, en la salida del quemador, el flujo principal –de aire primario y carbón– se mezcla con el aire secundario procedente de la caja de vientos, y penetra en la caldera, donde un mechero inicia la combustión. El aire secundario rota asegurando la estabilidad de la llama. Dependiendo del tipo de quemadores utilizados en la central, puede existir una entrada adicional de aire, denominado aire terciario, con el fin de escalonar la combustión y disminuir la temperatura máxima alcanzada en la llama para reducir las emisiones de NO_x .

La combustión del carbón, propiamente dicha, puede dividirse en tres etapas. En primer lugar, se produce una pirólisis rápida, llamada devolatilización, donde se liberan los componentes volátiles del carbón, seguido por la combustión homogénea de los productos volátiles, y por una oxidación lenta del residuo carbonoso. No todo el residuo carbonoso se quema completamente, y es esa fracción de carbono la que se denomina inquemados sólidos.

El campo fluido cerca de un quemador de premezcla puede dividirse en dos zonas (Unsworth et al., 1991):

- Una zona cerca del quemador (Figura 1.1, zona C), donde tienen lugar dos recirculaciones: una recirculación –interna– (Figura 1.1, zona A), donde se completa la combustión de la

materia volátil, y una recirculación –externa– (Figura 1.1, zona B) de los productos de la combustión, que suministra el calor necesario para mantener la llama estable.

- Una zona aguas abajo, donde los gases de combustión y las partículas que éstos arrastran, cenizas y residuos inquemados de carbón, se dirigen hacia la salida del hogar (Figura 1.1, zona D).

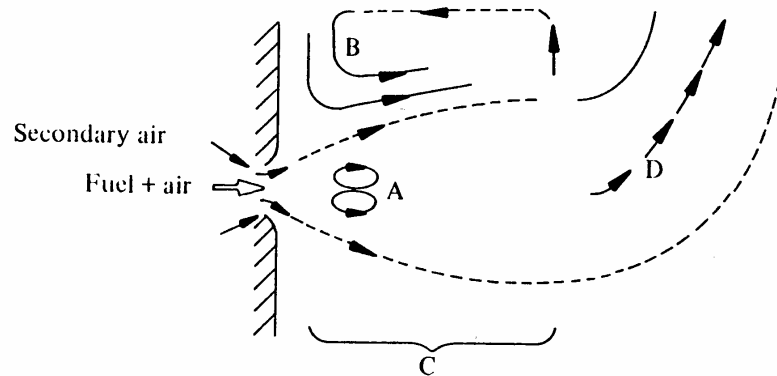


Fig. 1.1 Esquema del flujo cerca del quemador (Unsworth et al., 1991)

Dependiendo de la configuración de los fuegos de la caldera, la posición del quemador en la caldera y las posibles interacciones de llama entre quemadores, el camino recorrido por las partículas hasta alcanzar la salida puede ser más o menos caótico. Parte de esas partículas, en torno al 20 - 40 %, se quedan, bien adheridas a las paredes y a los bancos de tubos, ocasionando fenómenos de ensuciamiento y dificultando la transferencia de calor al lado vapor, o bien se depositan sobre las tolvas de la caldera (Llera, 2002). El flujo de gases de combustión, tras pasar los distintos intercambiadores de calor, que varían en número en función del tipo de caldera (sobrecalentadores, recalentadores, economizadores, precalentadores de aire), y donde también se depositan parte de la partículas –en las tolvas del economizador y de los precalentadores de aire–, llegan a los equipos de eliminación y recolección de partículas. Los más extendidos son los precipitadores electrostáticos, con eficiencias superiores al 95 %. Finalmente, dependiendo del tipo de carbón empleado, se sitúan otros sistemas de limpieza de gases como reactores para la reducción del NO_x y plantas de desulfuración, antes de ser emitidos a la atmósfera, finalizando así, el recorrido del carbón en la planta.

1.2 Problemas derivados de los inquemados

Al hablar de los problemas derivados de las partículas inquemadas arrastradas fuera del hogar, la consecuencia más evidente, es que esas partículas suponen una pérdida de combustible,

disminuyendo por tanto, el rendimiento térmico de la caldera. Además de éste, diversas fuentes bibliográficas coinciden en destacar otros efectos derivados del aumento del contenido de carbono inquemado en la ceniza volante, que a continuación se describen (Walsh y Xie, 1992).

En primer lugar, los inquemados aumentan la erosión de los tubos de los diversos intercambiadores, y su deposición en ellos, puede afectar a la transferencia de calor. La formación de depósitos de cenizas sobre las paredes del hogar –incrustaciones y escorificación– es un fenómeno muy estudiado dado su gran impacto en el funcionamiento de la caldera. La variación en tipo, forma y localización de estos depósitos, depende mucho del tipo del carbón y del diseño y la operación de la caldera. Por ello, se presta especial atención durante la etapa de diseño, aumentando las superficies de intercambio térmico, utilizando aceros más resistentes a la corrosión en la construcción de los tubos que forman las paredes y los bancos más expuestos, e instalando sistemas de limpieza, como por ejemplo sopladores de vapor que eliminan los depósitos de ceniza seca y escorias (Llera, 2002).

Otro efecto citado por muchos autores, es la disminución en el rendimiento de los precipitadores electrostáticos. Sin embargo, no existen en la bibliografía, modelos empíricos que relacionen directamente el aumento de inquemados en cenizas con la disminución de la eficiencia del precipitador electrostático. Esto se debe a que dentro de los parámetros que influyen en la eficiencia de captación, tales como el tamaño, composición, morfología, grado de cohesión y resistividad de las partículas, no predomina especialmente ninguno de ellos, y su contribución depende de la composición propia del carbón y de las condiciones en las que se produce la combustión. En general, se puede afirmar que (Wu, 2000):

- Un aumento en el tamaño de la partícula mejora el rendimiento del precipitador electrostático.
- Las partículas más irregulares, porosas y de morfología complicada, experimentan mayores fuerzas de arrastre, disminuyendo la velocidad de migración y la eficiencia del equipo de colección de partículas.

Particularizando, los carbones de bajo rango tienden a hincharse durante el proceso de combustión, y se queman desde diferentes frentes, aumentando así su porosidad. Si la presión de los gases en el interior de la partícula provoca su fragmentación, se obtiene un número variable de partículas finas de morfología complicada y con porosidades altas. En función del grado de fragmentación, que depende de las condiciones de combustión, se consigue una mayor o menor eficiencia de captación. Una mayor fragmentación producirá un número mayor de

partículas pequeñas –efecto negativo– con morfologías menos enrevesadas –efecto positivo–, y viceversa en el caso de una fragmentación menor. Los carbones de alto rango tienen baja tendencia a hincharse, y favorecen la cohesión al contacto con las inclusiones minerales en estado fundido. Esto da lugar a morfologías menos porosas que en el caso anterior –efecto positivo–, pero con tamaños variables en función del grado de coalescencia. A pesar de estos comportamientos generales, partículas de un mismo carbón pueden presentar comportamientos diversos frente a la combustión, en función de su composición maceral –las partículas de carbón ricas en vitrinita suelen hincharse durante la combustión, mientras que las partículas ricas en exinita se fragmentan durante la devolatilización–, o en función de la composición de la matriz del residuo carbonoso, en especial del contenido en azufre, que hace disminuir la resistividad de la partículas, favoreciendo su captación.

Un último efecto importante de los inquemados en la ceniza volante, es el que afecta a la venta de cenizas como sustitutivo del cemento Portland, o como aditivo al hormigón. Si las cenizas tienen un contenido en inquemados superior a un valor especificado en la normativa de calidad del hormigón (BS8500 en el Reino Unido, BS EN206 en el resto de Europa), éstas no se pueden utilizar en su elaboración (Sear, 2001). La utilización de la ceniza en el hormigón, sustituyendo hasta un 30 % del contenido en cemento en aplicaciones de construcción, es beneficiosa por numerosas razones: aumenta la resistencia, disminuye la permeabilidad, reduce los costes del hormigón, reduce el calor liberado en las reacciones de hidratación, y puede representar una disminución neta de hasta el 30 % en las emisiones del CO₂ asociado al consumo del combustible utilizado en la elaboración del cemento y la calcinación de la caliza (Suuberg et al., 1999). Sin embargo, la ceniza volante utilizada para conformar el hormigón, debe cumplir varias propiedades en cuanto al tamaño, densidad, contenido en SO₃, contenido en NH₃, color, y contenido en carbono. En los hormigones estructurales, los áridos o agregados ocupan alrededor de las tres cuartas partes del volumen total del hormigón. El volumen restante está constituido por pasta endurecida de cemento, agua sin combinar y burbujas de aire. También se suelen añadir aditivos introductores de aire (Air entrainment admixtures, AEA's) que originan burbujas en el hormigón para aumentar su resistencia frente a ambientes con cambios de temperatura periódicos. El efecto adverso del contenido en carbono dentro de la matriz del hormigón, radica en que este carbono adsorbe esos aditivos –AEA's–, disminuyendo el número de burbujas de aire, y por lo tanto, degradando su resistencia (Külaots et al., 1999; Maroto-Valer et al., 2001).

Para determinar el carbono inquemado contenido en las cenizas, se lleva a cabo el test de pérdida de ignición (Loss of ignition, LOI), cuya descripción se comenta en la Sección 1.3. Valores del LOI del 5 % (BS EN206) o 7 % (BS8500) marcan el límite de contenido en carbono

en cenizas permitido para aplicaciones de construcción (Sear, 2001, 2002). Sin embargo, mientras que se sigue utilizando este método basado en la medición de la fracción másica del carbono (LOI), nuevos estudios apuntan que es más importante determinar la porosidad del residuo carbonoso y su área superficial, ya que éstas precisan con mayor exactitud la capacidad del carbón para adsorber estos aditivos. La capacidad de la ceniza volante para adsorber AEA's depende de tres factores principales: la superficie total del carbono en la ceniza, la accesibilidad a esta superficie, y su naturaleza, en la que influye el grado de oxidación alcanzado, y por lo tanto, las condiciones de combustión que han tenido lugar en la caldera (Külaots et al., 1999). La mayoría de las muestras de char tienen áreas superficiales mucho mayores de las que aparentemente se esperan a partir de su geometría externa, ya que estas partículas tienen una gran porosidad incluyendo microporos ($< 20\text{Å}$), mesoporos ($20\text{Å} - 500\text{Å}$) y macroporos ($> 500\text{Å}$). La realización del test LOI no da información sobre la morfología intrínseca de la partícula, y es por ello que por ejemplo, pese a obtenerse valores bajos del test de pérdida de ignición para carbones de bajo rango, estos suelen ser los más problemáticos. La razón es que éstos suelen tener porosidades y áreas superficiales mayores que los de alto rango. El test que mide la adsorción de AEA's, es conocido como test del índice de Foam (Suuberg et al., 1999).

1.3 Factores que influyen en los inquemados

Con objeto de poder predecir y controlar la cantidad de inquemados en plantas de potencia, es necesario establecer qué factores influyen en su formación, y cuantificar su importancia. Como se ha visto en la Sección 1.1, la formación de inquemados no se restringe al proceso de combustión que tiene lugar en el hogar.

Las causas que motivan las pérdidas por inquemados, pueden clasificarse en tres categorías (Walsh y Xie, 1992):

1. Propiedades y características inherentes del carbón pulverizado y del residuo carbonoso.
2. Acondicionamiento, preparación y molienda del carbón.
3. Características del diseño y operación de los quemadores y del hogar.

A continuación, se resume la participación de cada una de estas fuentes.

1. Propiedades y características inherentes del carbón pulverizado y del residuo carbonoso.

En esta primera categoría se engloban las propiedades del carbón y del residuo carbonoso, tales como la composición elemental y maceral, la devolatilización a alta temperatura, la estructura intrínseca del residuo carbonoso, la reactividad del residuo carbonoso, y la composición y propiedades de la ceniza. Su intervención en la formación de inquemados se entiende a través del propio proceso de combustión.

La composición y las características del carbón seleccionado determinan en gran medida el carbono inquemado que se va a producir en la caldera. La composición elemental del carbón se necesita para prever el volumen estequiométrico de aire necesario para la combustión, y por lo tanto, el caudal volumétrico de aire para una cadencia de tiro y un nivel de exceso de aire. Como se comentó en la Sección 1.1, el proceso de combustión puede dividirse en tres etapas: devolatilización, combustión de la fase gaseosa de los volátiles y oxidación del residuo carbonoso. Durante la devolatilización, se libera la materia volátil, que contiene el hidrógeno, nitrógeno, azufre, oxígeno y parte del carbono del combustible que no queda retenido en el residuo carbonoso. Este proceso tiene una enorme influencia en la combustión ya que inicia la ignición de la partícula. Tiene lugar durante los primeros 100 ms en la zona de recirculación cercana al quemador, y es responsable de la estabilidad de la llama. Además el proceso de devolatilización influye significativamente en las propiedades estructurales y reactivas del residuo carbonoso resultante. El análisis inmediato del carbón determina el contenido en materia volátil del carbón. Sin embargo, en procesos de combustión a alta temperatura, como el que tiene lugar en calderas de carbón pulverizado, parte del carbono contenido en la matriz carbonosa se volatiliza, liberando una proporción de volátiles mayor que la obtenida en el análisis inmediato. Este valor de volátiles a alta temperatura, se determina, en función de la temperatura, de la rampa de calentamiento del proceso y del tipo de carbón, por medio de análisis termogravimétricos (thermo-gravimetric analysis, TGA) o mediante ensayos en reactores verticales (drop tube furnace, DTF). Para dar una idea de su importancia, la liberación de volátiles puede aumentar desde un 20 hasta un 75 % por encima del valor en base seca y sin cenizas del análisis inmediato (dry ash free, d.a.f), reduciendo hasta por un factor de dos, el peso del residuo carbonoso resultante, cuya oxidación determina la velocidad de la combustión del carbón (Kobayashi et al., 1976). La combustión posterior de los productos volátiles controla la distribución de temperaturas y concentraciones de oxígeno alcanzadas en la zona cercana a los quemadores, afectando directamente a la velocidad de oxidación del residuo carbonoso.

La morfología del residuo carbonoso y su porosidad, quedan determinadas por las propiedades del carbón una vez se haya completado la devolatilización. La oxidación del residuo carbonoso es un proceso lento que domina el grado de combustión alcanzado, y diversos aspectos

estructurales del carbón, como variaciones en su estructura, variación en la reactividad, grado de difusión en los poros, cambios de área superficial durante la reacción, y fragmentación del residuo, afectan a este proceso (Chan et al., 1999). En la Sección 1.2, ya se comentaron como las características macerales y estructurales del residuo carbonoso, además de influir en el proceso de combustión, también tienen un efecto sobre la eficiencia de los equipos de captación de partículas y sobre la idoneidad del uso de la ceniza volante para la elaboración de hormigón.

El contenido en ceniza de un carbón, tiene un doble efecto sobre la cinética de la combustión. La material mineral desempeña un efecto catalizador que produce un aumento de la reactividad a baja temperatura. Sin embargo, también obstaculiza el proceso de combustión, ya que forma una capa alrededor de la matriz del residuo carbonoso, dificultando la difusión del oxígeno, y disminuyendo la eficiencia de la combustión.

Por último, el contenido en humedad del carbón, generalmente no es una causa preponderante en la formación de inquemados, ya que el aire primario –previamente precalentado– que arrastra las partículas desde los molinos hasta los quemadores, elimina su mayor parte. El efecto que tendría un aumento del contenido en humedad, sería disminuir la temperatura de llama, y en consecuencia la eficiencia de la combustión, dando lugar a un aumento de los inquemados (Kurose et al., 2001). Esta característica, sí se considera en el caso de mezclar carbones bituminosos con sub-bituminosos, que tienen un contenido mayor en humedad (Ikeda et al., 2002).

2. Acondicionamiento, preparación y molienda del carbón

Otra causa importante en la formación de inquemados es el tamaño de las partículas que entran en el hogar. Tamaños mayores de partícula dan lugar a más inquemados. Por ello, el proceso de molienda adquiere gran relevancia en la reducción de éstos, y es preciso un control de la distribución granulométrica del carbón pulverizado. De nuevo, son muchos los factores que determinan la distribución final de tamaños que es arrastrada por el aire primario hasta el quemador: el caudal másico de aire primario, el caudal másico de carbón, las propiedades del carbón (composición e índice de dureza HGI), la posición del clasificador, y el estado de desgaste de las piezas de molienda desde su último reemplazamiento. Por otro lado, el precalentamiento del aire primario, que arrastra neumáticamente el carbón pulverizado desde los molinos, elimina parte de su humedad antes de llegar al hogar, de manera que el control de la temperatura de éste, también permite mejorar la eficiencia de la combustión. Finalmente, el diseño de los conductos que sirven para el transporte neumático del combustible desde los molinos hasta el hogar, puede generar desequilibrios en la carga alimentada por cada quemador,

produciendo patrones de flujo dentro del hogar que originen una mayor pérdida por inquemados.

3. Características del diseño y operación del hogar

En esta categoría se engloban las características y ajustes de los quemadores, el diseño de las entradas de aire secundario –y aire terciario–, la prerrotación del aire primario, la posición de los registros del quemador, el índice de rotación del aire secundario, el número y distribución de quemadores operativos, y las temperaturas de aire primario y aire secundario. La combinación de estos factores determina la mezcla de aire combustible, las temperaturas de combustión, los tiempos de residencia de las partículas, y en definitiva las condiciones en las que tendrá lugar la combustión. Con anterioridad, ya se ha mencionado la importancia de la zona de recirculación cerca del quemador, donde la rotación del aire secundario ayuda a estabilizar la llama mezclando los productos calientes de la combustión con la mezcla aire/combustible que penetra en la caldera proveniente de los molinos. Además, la estructura del residuo carbonoso se constituirá, no solo a partir de las propiedades del carbón, sino también por la evolución de la temperatura y concentración de oxígeno en las trayectorias que las partículas experimentan dentro del hogar; es decir, la temperatura máxima alcanzada, el tiempo de residencia cuando se alcanza esta temperatura, y la atmósfera gaseosa en la que se desarrolla la combustión. Por lo tanto, estas variables, junto con las propiedades del carbón, determinan la cantidad y la naturaleza de los volátiles liberados, su velocidad de liberación, y la morfología y porosidad microscópica del residuo carbonoso resultante.

La porosidad es particularmente importante porque controla la difusión de las especies químicas dentro y fuera de la partícula. Por último, y para entender la enorme importancia que ejerce sobre el proceso de combustión las características intrínsecas del residuo carbonoso, cabe destacar los esfuerzos realizados en los últimos años por describir como varían éstas y como afectan a los procesos de difusión y reacción química de las especies. Históricamente, la combustión de carbón pulverizado se ha modelado como un proceso controlado en todo momento, por la difusión de las especies y la reacción en la superficie de la partícula (Zona II¹).

¹ Teoría de las tres zonas (Unsworth et al., 1991; Hong, 2000) (Capítulo 2, Sección 2.3.1):

Zona I: Combustión controlada por la velocidad de reacción. El oxígeno difunde mucho más rápido hasta la superficie de la partícula de lo que es consumido. La presión parcial del oxígeno en toda la partícula es idéntica a la presión parcial del oxígeno en la atmósfera gaseosa circundante. El oxígeno penetra en la partícula, y se quema en su superficie exterior y en el interior de los poros.

Zona II: Combustión controlada por la velocidad de reacción y la difusión del oxígeno. El oxígeno difunde hasta la superficie externa de la partícula y penetra parcialmente en ésta, mientras se va

Sin embargo, recientes estudios experimentales muestran una variación de la estructura intrínseca de la partícula según va teniendo lugar la oxidación del residuo carbonoso, produciéndose una apreciable disminución de la reactividad del residuo carbonoso en las últimas etapas de la combustión, y provocando una transición hacia la zona controlada exclusivamente por la velocidad de reacción química (Zona I¹). Este fenómeno, conocido como desactivación térmica del residuo carbonoso, está dando lugar a nuevos modelos cinéticos de la oxidación del residuo carbonoso, que si bien aún no han sustituido completamente a los modelos tradicionales, poco a poco se van abriendo camino en el modelado de la combustión del carbón (Capítulo 2).

1.4 Medición de inquemados en cenizas volantes

Para el seguimiento de la cantidad de inquemados en una central se toman muestras de cenizas de alguna de las tolvas situadas en el camino que realizan los gases hasta alcanzar la chimenea. Es habitual, por comodidad, realizarlo en la primera tolva de los equipos de recolección y separación de partículas. Antes, parte de las partículas se habrán depositado en las tolvas de economizadores y precalentadores, quedando sin cuantificar esta pérdida. Una vez extraída la muestra de ceniza, se suelen utilizar 3 métodos distintos para determinar el contenido de carbono en las cenizas:

1. Carbono en cenizas (Carbon-in-ash, CIA). Es el porcentaje másico de carbono en la ceniza después de la combustión. Hay que tener en cuenta que la ceniza volante generalmente representa el 60-80 % de la ceniza total, siendo este porcentaje difícil de cuantificar con precisión en una instalación industrial.
2. Pérdida de ignición (Loss of Ignition, LOI). Este valor proviene de un método alternativo para la medición del carbono inquemado en cenizas. Se mide el calor liberado por la ceniza bajo condiciones especificadas en el test, y se incluye el efecto del azufre retenido por el residuo carbonoso. El valor del LOI es generalmente uno o dos puntos porcentuales mayor

consumiendo en la reacción con el carbono. Su concentración, es por lo tanto, menor en el interior de la partícula que en el exterior.

Zona III: Combustión controlada por la difusión del oxígeno. El oxígeno difunde hasta la superficie externa de la partícula donde, debido a la alta reactividad del residuo carbonoso, se combina inmediatamente con el carbono. La presión parcial del oxígeno en el interior de la partícula es nula, y la combustión de la partícula tiene lugar solo en la superficie exterior.

que el obtenido en el test CIA, aunque si tratamos los valores de ambos tests como equivalentes, se obtienen resultados comparables.

3. Pérdida de combustión (Combustion loss, CL). Este valor expresa el calor remanente en el carbono inquemado como un porcentaje del poder calorífico del carbón original. Conocido el poder calorífico del carbón original y el contenido en ceniza, es posible calcular el CL a partir del CIA, y viceversa.

La concentración de inquemados en cenizas depende del contenido en ceniza del carbón. Incluso si la eficiencia de la combustión es alta, la fracción de carbono inquemado en cenizas es mayor en el caso de un carbón con bajo contenido en cenizas que en el caso de un carbón con alto contenido en cenizas. Por lo tanto, es muy difícil comparar la combustibilidad en distintos carbones a partir de este valor. Para ello se utiliza la fracción de carbono inquemado (Kurose et al., 2001):

$$U_c = 1 - \eta = \frac{U_{c_ash}}{1 - U_{c_ash}} \cdot \frac{C_{ash}}{1 - C_{ash}} \quad (\text{Ec. 1.1})$$

Donde, U_c es la fracción de carbono inquemado por kg de combustible, η es la eficiencia de la combustión, U_{c_ash} es la concentración de carbono inquemado en cenizas, y C_{ash} es el contenido en ceniza del carbón original.

1.5 Sistemas de predicción de inquemados

Tan importante como la medición del contenido en inquemados recogido en una muestra, es su predicción bajo unas condiciones de operación específicas. El comportamiento de la combustión de carbón pulverizado se puede establecer con plantas piloto experimentales, modelos cinéticos de combustión avanzados, y códigos CFD. Las plantas piloto presentan dos inconvenientes. Primero, los fenómenos físicos que tienen lugar en una caldera no son completamente escalables, y en consecuencia, experimentos a pequeña escala se pueden considerar únicamente aproximaciones. Por otro lado, un equipo piloto experimental supone una alta inversión y unos altos costes de mantenimiento.

Un método complementario al estudio experimental consiste en utilizar un modelo cinético detallado de la combustión. La base del método consiste en separar la influencia de las

propiedades del combustible, y las condiciones de combustión en el propio proceso de la combustión. Los parámetros del modelo se ajustan empíricamente: análisis inmediato y elemental, determinación de la devolatilización a alta temperatura (high temperature volatile matter, HTVM), test de reactividad en reactores verticales (DTF), análisis de la cenizas, determinación de la composición maceral del residuo carbonoso, determinación de la porosidad, etc. Estos datos se utilizan para predecir el comportamiento de la combustión en las condiciones de la planta, utilizando algún modelo matemático de combustión (Unsworth et al., 1991). Los modelos de combustión están compuestos de un submodelo de devolatilización y un submodelo de oxidación del residuo carbonoso. Los modelos tradicionales de devolatilización, como el modelo de una sola reacción o el modelo de dos reacciones competitivas, están siendo sustituidos progresivamente por códigos comerciales más complejos basados en un tratamiento detallado de la estructura del carbón, como por ejemplo, el modelo FG-DVC o el modelo FLASHCHAIN, que predicen la liberación y las concentraciones de las especies principales. Al mismo tiempo, los modelos de una película que describen la oxidación del residuo carbonoso, están dando paso a otros modelos cinéticos avanzados que tienen en cuenta las variaciones en la reactividad y en la estructura intrínseca del residuo durante la combustión. En resumen, los modelos cinéticos avanzados permiten obtener resultados rápidamente y a un bajo coste para distintos diseños y condiciones de operación.

Sin embargo, estos modelos, pese a describir con detalle el proceso de combustión en la partícula, no reflejan completamente otros fenómenos que tienen lugar en el hogar, como interacciones entre quemadores, flujos turbulentos, etc.; y generalmente predicen erróneamente los valores reales de inquemados en cenizas. Para superar estos problemas, la utilización de modelos de fluidodinámica computacional (CFD) constituye una herramienta muy útil para estudiar y caracterizar todos los procesos que tienen lugar dentro del hogar, generando una gran cantidad de valores numéricos precisos de las velocidades, temperaturas, concentración de especies, perfiles de irradiación, distribución de la transferencia de calor y formación de contaminantes. En cambio, el uso de códigos CFD tiene el inconveniente de que, dada la variedad de fenómenos a modelar, a menudo han de adaptarse modelos simples. Esto es particularmente cierto en el caso de la turbulencia, radiación térmica y cinética de la combustión. De manera que ninguno de los modelos cinéticos avanzados referidos anteriormente se han acoplado completamente con estos códigos CFD comerciales (Pallarés et al., 2005).

1.6 Objetivos y contenidos de la tesis

En las últimas décadas, las centrales termoeléctricas de carbón pulverizado se han visto afectadas progresivamente por exigencias cada vez más estrictas, que reducen los límites permitidos en las emisiones de partículas, SO_2 , NO_x y CO_2 , causantes de la contaminación atmosférica, lluvia ácida y efecto invernadero. El cumplimiento de la legislación medioambiental ha supuesto un nuevo reto en el desarrollo de nuevas técnicas de reducción de emisiones, y en la implantación de sistemas eficientes de limpieza de gases. Sin embargo, la aplicación de algunas de estas técnicas, como por ejemplo, modificar las condiciones de combustión para reducir la formación de NO_x , provoca una disminución en la eficiencia de la combustión, aumentando significativamente los inquemados a la salida del hogar. En consecuencia, se ha extendido entre los generadores, la necesidad de predecir la eficiencia en la combustión, y de encontrar las condiciones más adecuadas de operación para llegar a un compromiso que permita cumplir la normativa medioambiental y que maximice la conversión del carbón en la caldera.

En este sentido, el objetivo central de esta tesis es desarrollar un sistema predictivo de la combustión, que proporcione a los técnicos de una central una medida de los inquemados en cenizas para las condiciones actuales de operación. Paralelamente, un sistema con este planteamiento, permite determinar las condiciones óptimas de operación, y ante unos niveles inadecuados de inquemados, apuntar las actuaciones necesarias para reestablecer una situación de combustión apropiada.

Resolver un problema de estas características exige modelar todos los procesos que participan en la combustión de carbón en una caldera de potencia real. Es necesario simular con detalle los fenómenos de transporte del problema y la combustión de las partículas micrométricas de carbón. Además, para que la predicción se pueda incorporar a un sistema global de seguimiento en tiempo real de la central, el tiempo de cálculo debe ser razonablemente reducido. Dentro de los distintos métodos predictivos de la combustión, la utilización de códigos CFD ofrece el tratamiento más detallado de los fenómenos de transporte que ocurren en el hogar. Sin embargo, los códigos comerciales CFD incorporan modelos de combustión de carbón excesivamente simplificados, que resultan insuficientes para la obtención de valores cuantitativos del proceso de combustión. Para solventar este inconveniente, se presenta una metodología basada en la utilización de un modelo avanzado de combustión como postproceso del cálculo CFD. Es decir, se obtienen perfiles de temperatura y presión parcial de oxígeno, para un número representativo de partículas en el hogar por medio del código CFD, que a continuación son introducidos en un modelo de combustión avanzado capaz de reproducir de

manera más realista la oxidación de la partícula de carbón. El otro inconveniente derivado de la utilización de códigos CFD, es su elevado coste computacional, y en consecuencia, la imposibilidad de utilizar este tipo de herramientas en aplicaciones que funcionen en tiempo real. Por ello, se planteó en un principio utilizar una alternativa al código CFD, como por ejemplo, modelos zonales. Sin embargo, este tipo de modelos presenta serias limitaciones en la descripción del campo fluido, imposibilitando caracterizar adecuadamente muchos factores relevantes que afectan a la combustión. Por esta razón, se optó por mantener el código CFD, y se propuso utilizar un sistema de redes neuronales que entrenado con la información proporcionada con las simulaciones CFD, generara los perfiles de oxígeno y de temperaturas, y el tiempo de residencia de las partículas para unas condiciones de operación determinadas. La ventaja del nuevo sistema es que el tiempo de respuesta se reduce al orden de segundos, y además permite interpolar dentro del rango de variación para el que ha sido entrenado, y por lo tanto, permite obtener un sistema predictivo completo del rango de operación de la planta.

Para llevar a cabo este trabajo y validar los resultados de cada una de las fases se ha elegido, como central de estudio, una unidad de la central térmica Lamarmora (ASM Brescia, Italia). Esta elección se tomó en base a la estrecha colaboración establecida entre ASM y la Fundación CIRCE durante el desarrollo del proyecto europeo de investigación 7220-PR-130-CARNO. La descripción del trabajo de revisión, y el desarrollo del sistema de predicción de inquemados se presenta en esta memoria de tesis, dividida en los siguientes capítulos:

- Capítulo 2. Revisión modelos de combustión: En este capítulo se lleva a cabo una descripción del proceso de combustión en una partícula de carbón pulverizado, explicando en cada una de las etapas (devolatilización, combustión homogénea de volátiles y oxidación del residuo carbonoso), los mecanismos que tienen lugar y los modelos más característicos disponibles en la bibliografía.
- Capítulo 3. Modelos CFD: En este capítulo se describen las características generales de los códigos CFD. Como en el trabajo de tesis se ha utilizado el código comercial CFX-4 (AEA Technology), se particulariza la descripción del método de resolución numérica y de los modelos a este código. Finalmente se describe el método general de validación seguido en la tesis.
- Capítulo 4. Evaluación de sensibilidad de los parámetros que afectan a la producción de inquemados: En este capítulo, se lleva a cabo un análisis de sensibilidad de los parámetros más influyentes en la formación de inquemados, sobre los que directa o indirectamente el operario de una planta tiene capacidad de maniobra. Para ello, se realiza un doble estudio

de estos parámetros por medio de simulaciones CFD de la central Lamarmora. Por un lado, se determina, dentro del rango habitual de variación, su contribución individual a la formación de inquemados. Por otro lado, se evalúa su interacción con el resto de los parámetros que afectan a la formación de inquemados. Este último estudio, para el que se han utilizado técnicas estadísticas de diseño de experimentos, tiene el valor añadido de dar un enfoque más realista al problema, donde una variación de un parámetro puede contribuir en mayor o menor medida a la formación de inquemados dependiendo de las condiciones del resto de parámetros.

- Capítulo 5. Modelo de condiciones locales de combustión: En este capítulo, se introducen las características generales de las redes neuronales y sus aplicaciones, y se describe el diseño de la estructura del sistema de redes neuronales elegido para la tesis, su entrenamiento a partir de un conjunto de simulaciones CFD de la planta Lamarmora, y la validación del mismo. La función final del sistema es conseguir un modelo autónomo, rápido y preciso que pueda sustituir al código CFD, generando para cada partícula un tiempo de residencia y un perfil de temperatura y presión parcial de oxígeno, que depende del tamaño de la partícula, de su punto de inyección en el hogar y de las condiciones de operación de la caldera.
- Capítulo 6. Modelo de combustión: Este capítulo se centra en la definición del modelo de combustión. La descripción y desarrollo del modelo se concentra en las reacciones que ocurren en la superficie de la partícula; es decir, en la devolatilización y la oxidación del residuo carbonoso. Para el proceso de devolatilización se utiliza el modelo FG-DVC. Para la oxidación del residuo carbonoso se ha desarrollado, un modelo intrínseco, que basado en el modelo CBK8 (Sun y Hurt, 2000), incluye los efectos de la variación de la estructura porosa de la partícula, efectos de desactivación térmica, efectos de la materia mineral y efectos debidos a la composición maceral del carbón. Para completar el capítulo se lleva a cabo una validación del modelo de combustión, bajo nueve escenarios de la planta Lamarmora, introduciendo las soluciones del código CFD en forma de perfiles de oxígeno y temperatura, en el modelo de combustión avanzado.
- Capítulo 7. Sistema de predicción de inquemados: En el último capítulo, se describe el acoplamiento entre el modelo de condiciones locales de combustión y el modelo de combustión para conformar el sistema de predicción de inquemados, y se lleva a cabo la validación del sistema utilizando datos de planta de la central Lamarmora, obtenidos durante un período de tres meses bajo distintas condiciones de operación. A partir de los

resultados, se hace una valoración del modelo, estableciendo comparaciones con otros modelos de predicción de inquemados.

Nomenclatura

C_{ash} % en peso de cenizas en el análisis elemental

U_c fracción de carbono inquemado

U_{cash} fracción de carbono inquemado en cenizas

η eficiencia de la combustión

Acrónimos

AEA air entrainment admixtures

CBK carbon burnout kinetic

CFD computational fluid dynamics

CIA carbon in ash

CL combustion loss

DTF drop tube furnace

HGI hardgrove grindability index

HTVM high temperature volatile matter

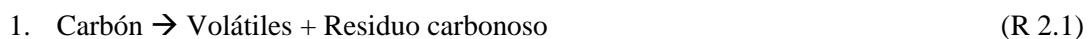
FFB flat flame burner

LOI loss of ignition

TGA thermo-gravimetric analysis

2 REVISIÓN MODELOS DE COMBUSTIÓN

Uno de los objetivos principales en la investigación de la combustión del carbón consiste en desarrollar modelos matemáticos que detallen, de manera realista, el proceso de combustión que experimenta una partícula de combustible pulverizado. Llevar a cabo una descripción completa de la combustión del carbón requiere la incorporación de un modelo de reacción de partícula. En general, la combustión del carbón se puede considerar dividida en las tres etapas siguientes: devolatilización del carbón (R 2.1), combustión homogénea de los productos volátiles (R 2.2) y oxidación heterogénea del residuo carbonoso (R 2.3) (Badzioch y Hawksley, 1970; Backreedy et al., 1999, 2002).



Sin embargo, la complejidad de los fenómenos físicos y químicos, unidos a la amplia variabilidad de condiciones y tiempos de cada una de las etapas por las que transcurre el proceso de combustión, imposibilita la utilización de un modelo global de partícula (Figura 2.1). De manera que, cada una de las etapas se debe modelar matemáticamente de forma independiente:

- Devolatilización del carbón: Esta parte de la reacción transcurre mientras el carbón se calienta en una atmósfera oxidante. Durante el proceso, la partícula sufre una transformación interna, por la que algunas especies de alquitrán condensables (tar) y un

conjunto de gases reactivos y no reactivos, son expelidos fuera de la partícula, quedando una masa residual rica en carbono (Badzioch y Hawskley, 1970). La liberación de materia volátil puede superar el 50 % del peso total de la partícula, y transcurre en unos pocos milisegundos. Además, tiene una gran influencia en la ignición de la partícula, y en el proceso global de combustión, ya que las condiciones de este proceso determinan la naturaleza estructural y reactiva del residuo carbonoso resultante (Smith, 1982).

- Combustión homogénea de los productos volátiles: En esta etapa, los productos liberados durante la devolatilización, incluyendo especies de alquitrán, hidrocarburos, CO₂, CO, H₂, H₂O y HCN, reaccionan con el oxígeno de las proximidades, aumentando la temperatura de la partícula. Este proceso reactivo es muy importante para el control de los óxidos de nitrógeno, para la formación de hollín, para la estabilidad de la llama, y para la ignición del residuo carbonoso (Bartok y Sarofim, 1991).

- Oxidación del residuo carbonoso: En esta parte de la reacción, la partícula residual de la devolatilización del carbón, a suficiente temperatura, se oxida por contacto directo con el oxígeno de sus proximidades. La reacción gas-sólido se produce cuando el oxígeno gaseoso difunde al interior de la partícula y reacciona con la superficie de ésta. Este proceso heterogéneo es mucho más lento que el proceso de devolatilización, necesitando del orden de segundos para completarse (Field, 1967). La velocidad de reacción depende de las características estructurales y reactivas del residuo carbonoso, y de las condiciones de presión, temperatura y concentración de oxidante a las que se produce el proceso (Unsworth et al., 1991).

El objetivo principal de este capítulo, es llevar a cabo una revisión de cada una de estas etapas, explicando los mecanismos subyacentes, y los modelos más característicos disponibles en la bibliografía. Evidentemente, resulta muy prolijo hacer una recopilación completa de todos los modelos y submodelos que han sido publicados para describir cada una de las fases del proceso de combustión. Por ello, se ha intentado presentar los modelos más clásicos, para dar una visión general del problema, junto a otros modelos detallados que profundizan en aspectos más particulares de la combustión del carbón pulverizado. El criterio de selección entre los distintos modelos responde a tres premisas básicas:

- La generalidad de su aplicación dentro de las condiciones típicas en las que se desarrolla la combustión del carbón pulverizado.
- Su grado de aceptación dentro de la comunidad científica.

- Que sirva de referencia y punto de partida para el modelo de combustión desarrollado en este trabajo de tesis en el Capítulo 6.

Finalmente, mencionar que, por analogía con el resto de las publicaciones de combustión, y porque la investigación desarrollada en este trabajo se ha centrado en las reacciones gas-sólido que tienen lugar en la superficie de la partícula, la etapa referente a la combustión homogénea de los volátiles se trata solo de manera descriptiva, como nexo de unión entre las otras etapas.

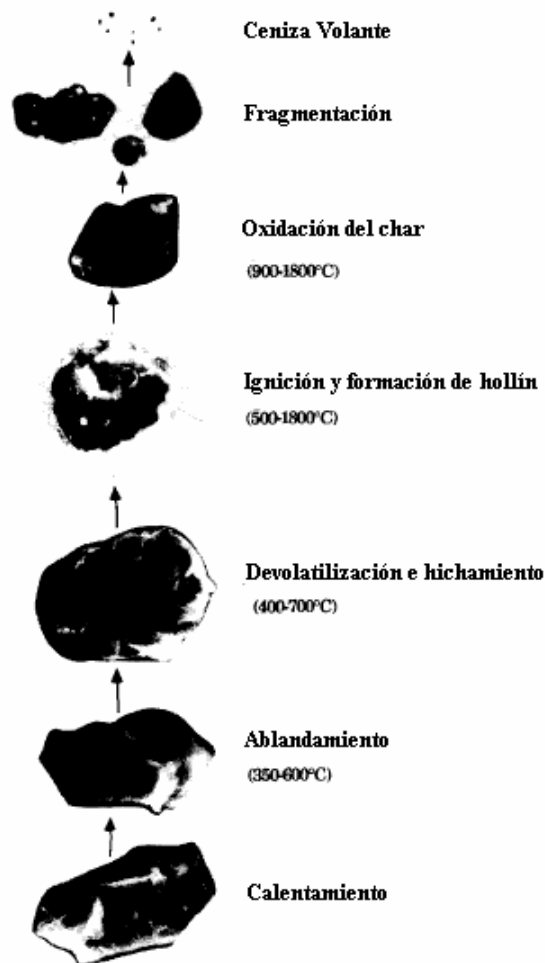


Fig. 2.1 Proceso de combustión de una partícula de carbón (Solomon et al., 1993)

2.1 Devolatilización

El estudio de la cinética de la devolatilización y su influencia en el nivel global de la combustión ha suscitado, desde sus albores, un interés especial dentro de la comunidad científica. El motivo de esta predilección no es extraño, si se considera que más del 50 % de la masa de carbón (en base seca y sin cenizas) que se alimenta en una caldera, se va a volatilizar y

quemar en la fase gas. La materia volátil de un carbón proporciona un indicador de la capacidad de ignición del carbón y de su reactividad. De esta manera, la cantidad de materia volátil de un carbón determina el diseño de la caldera y de los quemadores de una instalación de combustión. Por otro lado, la devolatilización también determina la fracción de residuo carbonoso, y su estructura porosa y propiedades reactivas. Este hecho tiene una gran importancia, ya que la oxidación lenta del residuo carbonoso controla el nivel de combustión alcanzado. Es decir, que de forma indirecta, la devolatilización determina el tiempo de residencia apropiado para minimizar las pérdidas por inquemados de un tipo de carbón (Bartok y Sarofim, 1991).

2.1.1 Descripción del proceso y resultados más significativos

La devolatilización, la primera etapa en la combustión del carbón, consiste en un proceso por el cual, el carbón se descompone térmicamente a elevadas temperaturas produciendo compuestos gaseosos –gas–, especies de alquitrán condensables –tar–, y un residuo carbonoso –char–. A pesar de ser un proceso extremadamente rápido –tiene lugar entre 10 y 200 ms–, posee una profunda importancia en el desarrollo global de la combustión (Smoot y Smith, 1985).

Consideremos una molécula hipotética de carbón como una gran red formada por unidades estructurales de bajo peso molecular –anillos cicloaromáticos, hidroaromáticos y heterociclos–, constituidas predominantemente por carbono, y en menor proporción, por átomos de oxígeno, azufre y nitrógeno, y conectadas entre sí por medio de enlaces covalentes –alifáticos o átomos de oxígeno y azufre–, y de enlaces no covalentes –fuerzas de van der Waals y puentes de hidrógeno–, como la que se muestra en la parte superior de la Figura 2.2 (Solomon et al., 1988).

El proceso de devolatilización comienza con un calentamiento inicial de la partícula, por convección y radiación, hasta alcanzar los 150 – 200 ° C, mientras la partícula va perdiendo la humedad contenida en su matriz. A continuación, conforme sigue aumentando la temperatura entre 200 y 400 ° C, algunos puentes de hidrógeno de su molécula se empiezan a romper. Paralelamente a este proceso, y una vez que se alcanzan temperaturas entre 300 y 400 °C, se empiezan a crear nuevos enlaces produciendo un entrecruzamiento entre algunos de los anillos aromáticos que componen el carbón, fenómeno conocido como recombinación. Este efecto, es más acusado en carbones de bajo rango con un contenido elevado en oxígeno (> 10 %) (Glarborg, 1991).

Una vez finalizada esta fase inicial a baja temperatura, empieza la denominada devolatilización primaria. Ésta tiene lugar a temperaturas superiores a los 600 ° C, y se caracteriza por la ruptura de los enlaces covalentes, produciendo fragmentos moleculares aislados, llamados metaplastos. Estos fragmentos, que disponen de un radical libre en su estructura, captan átomos de hidrógeno

para estabilizarse. Si la molécula formada es lo suficientemente pequeña para vaporizarse y ser transportada fuera de la partícula a la temperatura dada, entonces es liberada en forma de tar. Si por el contrario, la molécula formada es demasiado pesada para vaporizarse, se mantiene formando parte de la estructura del carbón, y participa en nuevos procesos de recombinación. Además de la expulsión de tar, existe otra fuente de liberación de materia volátil producida por la descomposición de grupos funcionales a alta temperatura, expeliendo gases tales como dióxido de carbono, metano, etano, eteno, propano y vapor de agua. Las proporciones de la materia volátil liberada en forma de tar y de gases, dependen del tipo de carbón. Así, los carbones de bajo rango (lignitos y subbituminosos) liberan mucha más cantidad de gases ligeros, principalmente en forma de dióxido y monóxido de carbono, que de tar. Mientras que los carbones de mayor rango (bituminosos), liberan mucha más cantidad de tar que de gases ligeros, principalmente en forma de metano (Genetti, 1999). La devolatilización primaria termina cuando el hidrógeno disponible se ha consumido (Solomon et al., 1988).

Por último, tiene lugar una devolatilización secundaria, en la que los metaplastos que no han podido vaporizarse y abandonar la molécula, pueden seguir recombinándose, pirolizar a presión en residuo carbonoso, o producir, a través de reacciones secundarias, la liberación de otros compuestos menos abundantes como el CH_4 de los grupos metilos, el HCN de los átomos de nitrógeno de los anillos, el CO de la uniones de los grupos etéricos, y el H_2 de la condensación de los anillos aromáticos (Solomon et al., 1988).

La cantidad de materia volátil de un carbón se determina a través de su análisis inmediato. Sin embargo, desde los primeros estudios experimentales que reproducían las condiciones características de una cámara de combustión, se observó que la cantidad de materia volátil liberada era mayor que la que se obtenía por este análisis (Badzioch y Hawskey, 1970). Una posible explicación del aumento de la liberación de los volátiles es que en condiciones de calentamiento muy rápido a alta temperatura, la formación de los volátiles ocurre una vez que el carbón ha alcanzado una temperatura elevada. Esto puede dar lugar a un mayor intercambio de átomos de hidrógeno entre los volátiles dentro de la partícula, y por lo tanto, a una mayor hidrogenación y estabilización de las especies reactivas, y a una menor polimerización y formación del char que de otra forma sí que tendría lugar (Kobayashi et al., 1976). Este hecho puso de manifiesto que la cantidad de volátiles desprendidos depende fuertemente de las condiciones en las que tiene lugar el proceso.

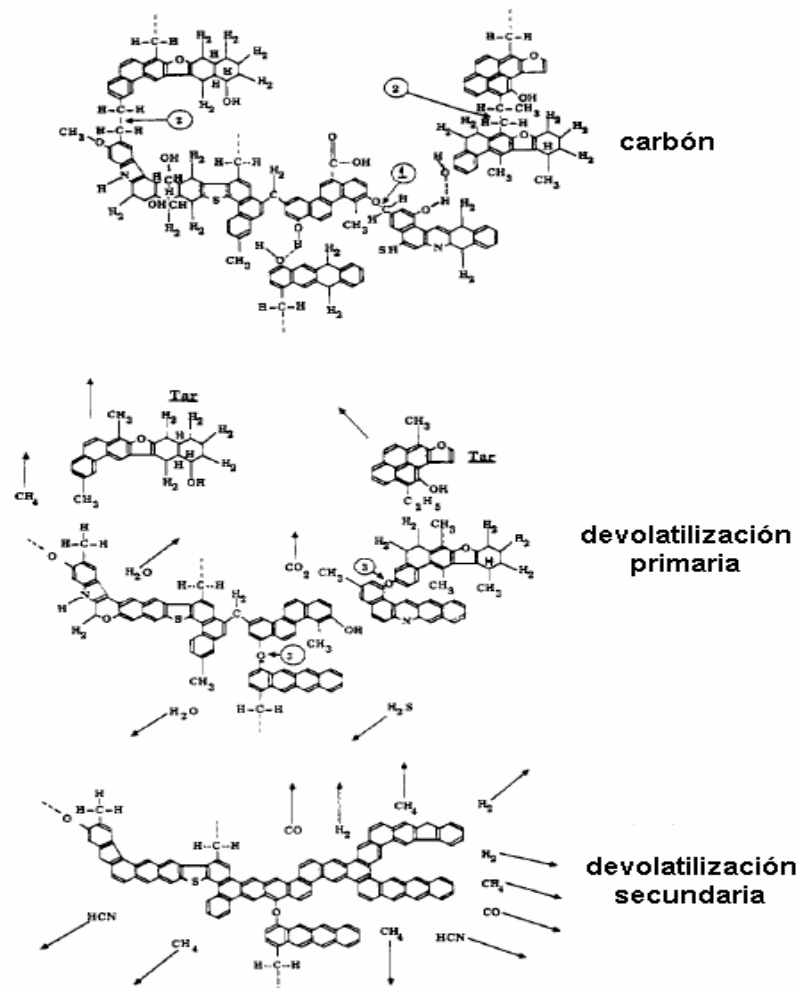


Fig. 2.2 Etapas de la pirólisis en una molécula hipotética de carbón (Solomon et al., 1988)

A continuación se resume la influencia de los parámetros más relevantes que afectan a la cantidad de materia volátil expelida:

- **Temperatura:** Es el parámetro más influyente en la cantidad de volátiles liberados. Con temperaturas características de la combustión de carbón pulverizado (1750 – 2250 K), la pérdida de peso excede típicamente entre un 5 – 60 % la pérdida estimada a partir del análisis inmediato (Smoot y Smith, 1985).
- **Velocidad de calentamiento:** No afecta significativamente a la cantidad final liberada, en las condiciones prácticas de combustión. Sin embargo, sí que afecta enormemente a la velocidad de liberación de los volátiles, siendo más rápida con mayores rampas de calentamiento (Glarborg, 2001).

-
- Presión: En general, el grado de devolatilización disminuye cuando aumenta la presión, y viceversa (Anthony et al., 1976). Como ya se vio anteriormente, el metaplasto puede vaporizar y abandonar la partícula como tar, o pirolizar en gases simples y char por acción de reacciones secundarias. De manera que un aumento de presión confiere a los metaplastos un mayor tiempo de residencia en la partícula, y una oportunidad mejor para craquear en residuo carbonoso, disminuyendo la liberación de volátiles.

 - Tamaño de partícula: La influencia del tamaño de partícula es similar a la influencia de la presión. Un aumento del tamaño de partícula aumenta el tiempo de residencia de las especies reactivas en la partícula, aumentando la probabilidad de que se den reacciones secundarias y de repolimerización. Aunque este efecto no tiene una importancia muy significativa, las partículas de mayor tamaño se calientan más despacio que las partículas pequeñas, así que aumentado el tamaño se disminuye el grado de devolatilización (Smoot y Smith, 1985).

 - Tipo de carbón: En general, en carbones de bajo rango la cantidad de materia volátil liberada es más alta que en carbones de alto rango, ya que el grado de aromaticidad y el número de anillos de la estructura aumentan con el rango del carbón (Solomon et al., 1993).

Sin embargo, la influencia de la devolatilización sobre el proceso global de combustión no se limita a la cantidad de materia volátil liberada, sino que también actúa sobre la estructura y las propiedades reactivas del residuo carbonoso. En este punto, existe unanimidad entre los autores especializados (Ubhayakar et al., 1976, Kobayashi et al., 1976) en señalar la velocidad de calentamiento como el factor más relevante. Una velocidad de calentamiento mayor provoca una volatilización más rápida y violenta. Partiendo del hecho experimental de que la velocidad de calentamiento no afecta a la cantidad final de materia volatilizada, un aumento en la velocidad de liberación genera unos cambios más bruscos en la estructura del carbón, provocando hinchamiento, ablandamiento, agrietamiento e incluso la ruptura en fragmentos más pequeños debido a las tensiones térmicas por el gradiente de temperatura, y a tensiones mecánicas por la presión sobre las capilaridades porosas de la estructura, que ejercen los gases en su camino hacia el exterior de la partícula (Stubington et al., 1989). Además, una liberación rápida minimiza la posibilidad de que se den reacciones secundarias y de recombinación, a la vez que favorece la expulsión de la materia mineral y las impurezas (S, N, H) de la matriz carbonosa. De esta manera, se reduce la relación H/C del residuo carbonoso disminuyendo su reactividad intrínseca (Gale et al., 1996). Del mismo modo, un aumento de la temperatura y del tiempo de residencia, también provoca una disminución de la reactividad del residuo carbonoso (Gale et al., 1996).

Por último, otro aspecto importante de la devolatilización es la influencia que ejerce sobre el proceso de ignición del residuo carbonoso, y en consecuencia, en la estabilidad de la llama. Esto se debe a que la combustión de los productos volátiles en las inmediaciones de la superficie, revierte parte del calor a la partícula, acelerando el calentamiento necesario para su ignición. Sin embargo, la principal fuente de calentamiento no proviene directamente de la combustión de los volátiles de la propia partícula, sino de los gases calientes recirculados hacia la zona de ignición próxima a los quemadores. Otra parte importante proviene de la radiación del entorno, en la que de forma indirecta, también participa la combustión de los volátiles (Bartok y Sarofim, 1991).

2.1.2 Modelos de devolatilización

El primer estudio de la cinética de devolatilización apareció publicado en 1950. Según Badzioch y Hawksley (1970), tres autores soviéticos, Shapatania, Kalyuzhnyi y Chukhanov, estudiaron la posibilidad de controlar la composición de los volátiles variando las condiciones de calentamiento. Pese a que las temperaturas, los tiempos de reacción y los tamaños de partículas de sus experimentos no se correspondían con las condiciones típicas en la combustión de combustibles pulverizados, encontraron uno de los resultados experimentales más divulgados y de mayor importancia en el proceso de devolatilización. Este resultado consistía en que la pérdida de peso, calculada por el análisis inmediato, infravaloraba la cantidad real de volátiles liberada en sus experimentos. A partir de estos resultados, según Badzioch y Hawksley (1970), otros grupos de investigadores (Chukhanov et al., 1962; Loison y Chauvin, 1964; Yellow, 1965) fueron obteniendo resultados similares, al mismo tiempo que investigaban la influencia de las condiciones de operación (temperatura final, presión, velocidad de calentamiento, diámetro de partícula, rango y propiedades del carbón) en la cantidad y composición de la materia volátil liberada.

Sin embargo, y a pesar de todos estos resultados experimentales, todavía se tenía muy poca información sobre los mecanismos y la cinética de la descomposición, especialmente en las condiciones típicas de combustión de carbón pulverizado, donde la velocidad de calentamiento alcanza valores de 10^5 K/s y temperaturas máximas cercanas a 1750 °C. Fueron Badzioch y Hawksley, en 1970, los primeros en publicar estudios cinéticos que correlaban la variación del cambio en la materia volátil liberada con el tiempo y la temperatura, es decir la cinética de la reacción, dando lugar al primer modelo de devolatilización de una reacción de primer orden. Este modelo fue el precursor de otros modelos sencillos, como el modelo de reacciones paralelas con una energía de activación distribuida (Anthony et al., 1976) o los modelos de dos reacciones competitivas (Kobayashi et al., 1976; Ubhayakar et al., 1976), basados en aproximaciones empíricas. Todavía hoy, este tipo de modelos, conocidos como modelos de

pérdida de masa, se siguen utilizando en códigos CFD y en otras aplicaciones que no requieren un nivel de detalle muy exigente. Sin embargo, en la década de los 80, el desarrollo de nuevas técnicas de caracterización del carbón, permitió un mayor entendimiento de su estructura molecular y de las reacciones que en ella se producían. Este hecho, condujo al desarrollo de modelos de devolatilización mecanicistas basados en la estructura química del carbón original, y no en experimentos como lo hacían sus predecesores. Este tipo de modelos, también llamados modelos de devolatilización de redes, describen la descomposición y la recombinación de la red macromolecular a partir de las propiedades del carbón y de las condiciones de la combustión. Dentro de este grupo de modelos se engloban el modelo FG-DVC (Solomon et al., 1988, 1990, 1993), el modelo CPD (Fletcher et al., 1989, 1990, 1992) y el modelo FLASHCHAIN (Niksa et al., 1991, 1994).

Modelos de una reacción de primer orden (SFOR)

El primer modelo cinético del proceso de devolatilización fue propuesto por Badzioch y Hawskey en 1970, conocido comúnmente como modelo de una reacción de primer orden (simple first order reaction model, SFOR). A partir de ensayos en un reactor de flujo laminar con varios carbones sometidos a temperaturas entre 400 °C y 1000 °C durante tiempos entre 30 y 110 ms, obtuvieron unas curvas isotermas de descomposición que dejaban intuir un comportamiento exponencial descrito por la Ec. 2.1.

$$\frac{V}{V_f} = 1 - \exp\left(-\int_0^t k_v \cdot dt\right) \quad (\text{Ec. 2.1})$$

Al reescribir la Ec. 2.1 en forma lineal, Ec. 2.2, las curvas de descomposición isotermas se transforman en rectas que parten de un tiempo aproximado de 20 ms (Ver Figura 2.3), correspondiente al tiempo que transcurre hasta que se calienta la partícula y comienza la devolatilización.

$$\ln\left(1 - \frac{V}{V_f}\right) = -k_v \cdot t \quad (\text{Ec. 2.2})$$

Tan sólo quedaba por resolver cómo variaba la pendiente k_v , y de esta manera encontrar la relación con la temperatura. A partir de experimentos con tasas de calentamiento entre 25000 y 50000 K/s, determinaron un comportamiento exponencial tipo Arrhenius de la constante cinética con la temperatura (Ec. 2.3)

$$k_v = A_v \cdot \exp(-E_{vT} / T) \tag{Ec. 2.3}$$

Finalmente, ajustando los valores del factor preexponencial A_v y de la energía de activación E_{vT} , para las condiciones y los carbones que utilizaron en los ensayos, quedó así, definido el modelo.

La mayor ventaja que supone utilizar un modelo de estas características reside en su sencillez, quedando definido con tan sólo tres parámetros (V_f , A_v y E_{vT}). Un inconveniente es que las constantes cinéticas obtenidas en los experimentos dependen de las condiciones de los mismos, especialmente de la velocidad de calentamiento. Esto significa que para aplicar correctamente el modelo, las constantes cinéticas se deberán determinar para cada carbón con datos obtenidos bajo condiciones lo más similares posibles a las que se tienen en la aplicación para la que se construye el modelo (Eaton et al., 1999). Además, la cantidad final de materia volátil que se libera, depende de la temperatura máxima alcanzada. Por lo tanto, el parámetro V_f se deberá determinar para esa temperatura máxima. A pesar de estos inconvenientes, que lo hacen poco flexible en su aplicación generalizada, es uno de los modelos más extendidos en los paquetes computacionales de combustión.

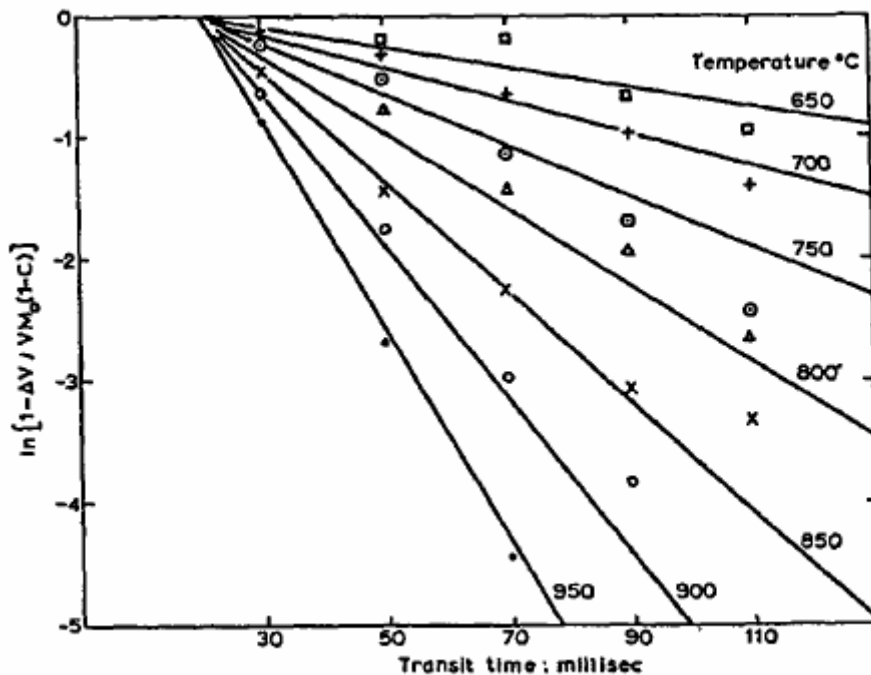


Fig. 2.3 Isothermas de descomposición para diferentes temperaturas (Badz. y Hawsk., 1970)

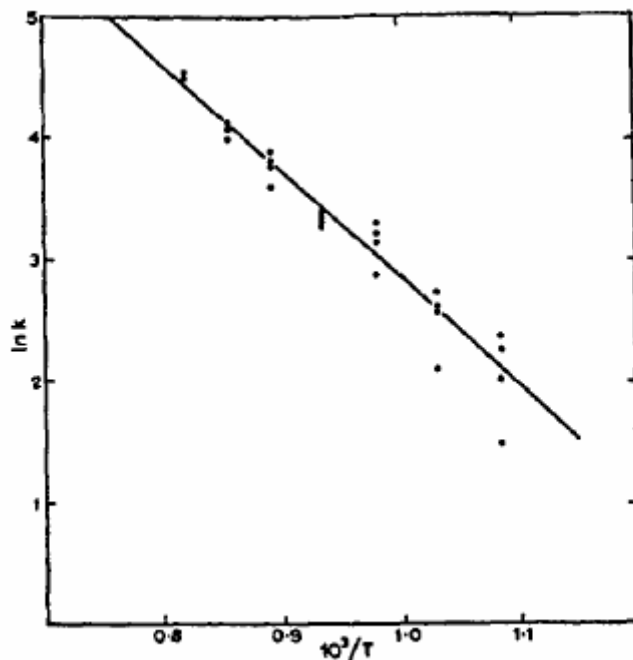


Fig. 2.4 Ajuste empírico de la curva de devolatilización de un carbón (Badz. y Hawsk., 1970)

Modelos de energía de activación distribuida (DAEM)

Una hipótesis inherente a los modelos SFOR es que suponen que todos los enlaces químicos del carbón en descomposición son iguales (Glarborg, 2001). Sin embargo, la descomposición real se debe a un gran número de reacciones químicas que producen la ruptura de distintos enlaces dentro de la molécula. Una aproximación más realista consideraría la liberación de los volátiles debida a cada tipo de enlace químico. De esta manera, tendríamos una reacción de primer orden para cada tipo de enlace *i* considerado, donde los valores de las constantes cinéticas A_{vi} , E_{vTi} y V_{fi} se deberían determinar experimentalmente para todas las reacciones *i* que participan en la descomposición. Para simplificar el problema de trabajar con un número elevado de reacciones, Anthony et al. (1976), propusieron un modelo con la hipótesis de que las constantes cinéticas de todas las reacciones sólo se diferencian entre sí en la energía de activación, y que el número de reacciones es tan grande que éstas se pueden describir por una función continua de distribución $f(E_{vT})$. Por analogía con el modelo de Badzioch y Hawksley (1970), la cantidad de volátiles liberados se obtiene integrando sobre el tiempo todos los valores de E_{vT} (Ec. 2.4).

$$\frac{V}{V_f} = 1 - \int_0^{\infty} \exp\left(-\int_0^t k_v \cdot dt\right) \cdot f(E_{vT}) \cdot dE_{vT} \tag{Ec. 2.4}$$

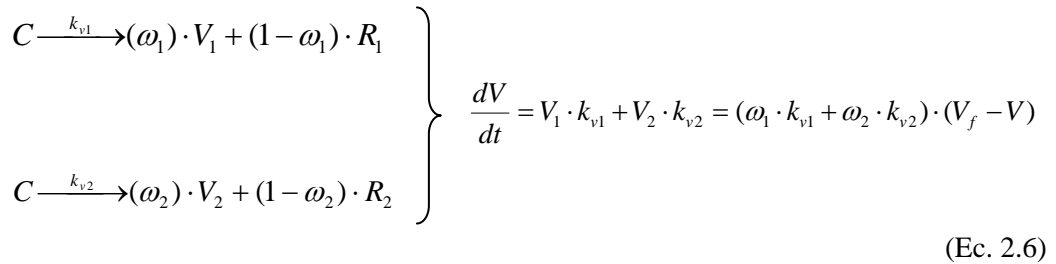
En la mayor parte de la bibliografía, esta función de distribución se aproxima por una función de distribución gaussiana con una energía de activación media E_{vTo} y una desviación estándar σ .

$$f(E_{vT}) = \frac{1}{\sigma \cdot \sqrt{2 \cdot \pi}} \cdot \exp\left[-\frac{(E_{vT} - E_{vTo})^2}{2 \cdot \sigma^2}\right] \quad (\text{Ec. 2.5})$$

En la práctica, los límites de integración de la Ec. 2.4, se sitúan entre los valores de la energía de activación donde tiene lugar la devolatilización ($E_{vTo} \pm 4\sigma$). Una ventaja importante de este modelo es que la dependencia de la velocidad de calentamiento con los parámetros cinéticos ha sido eliminada, y a priori permite utilizar distintas velocidades de calentamiento con los mismos parámetros ($V_f, A_v, E_{vTo}, \sigma$). Además, la dependencia de la pérdida de peso final con la temperatura, también se ha eliminado parcialmente, ya que los volátiles asociados a altas energías de activación se liberan muy lentamente a bajas temperaturas.

Modelos de dos reacciones competitivas (2CSM)

Otro modelo alternativo para explicar el aumento de la liberación de volátiles al aumentar la temperatura es considerar que la devolatilización está gobernada por dos reacciones con distinta energía de activación cada una. Una reacción domina a temperaturas bajas, y la otra reacción a temperaturas altas (Ec. 2.6). De esta manera, el carbón se descompone a través de dos reacciones de primer orden paralelas, donde cada reacción tiene distinta cinética de formación de los volátiles, dependiendo de la historia temperatura-tiempo de la partícula (Ubhayakar et al., 1976; Kobayashi et al., 1976).



Donde,

$$k_{v1} = A_{v1} \cdot \exp\left(-\frac{E_{vT1}}{T}\right) \quad \text{y} \quad k_{v2} = A_{v2} \cdot \exp\left(-\frac{E_{vT2}}{T}\right) \quad (\text{Ecs. 2.7})$$

Las constantes cinéticas son tipo Arrhenius, con la característica de que $E_{vT1} < E_{vT2}$ y $V_{f1} < V_{f2}$ (Ecs. 2.7). Esto significa que si la descomposición ocurre a baja temperatura, domina la primera reacción, y se alcanza un valor asintótico de volátiles V_{f1} ; y si la descomposición ocurre a alta temperatura, la que domina es la segunda reacción, y se alcanza un valor asintótico de volátiles V_{f2} . La liberación total de los volátiles con el tiempo se obtiene análogamente a las expresiones de los modelos anteriores (Ec. 2.8):

$$\frac{V_1 + V_2}{V_f} = 1 - \exp\left(-\int_0^t (k_{v1} + k_{v2}) \cdot dt\right) \quad (\text{Ec. 2.8})$$

La ventaja del modelo es que predice correctamente un aumento en la liberación de volátiles con la temperatura. Sin embargo, al igual que en los anteriores, es necesario determinar empíricamente las constantes cinéticas para cada tipo de carbón en condiciones cercanas a las de la aplicación del modelo, y en este caso son necesarios 6 parámetros (V_{f1} , V_{f2} , A_{v1} , A_{v2} , E_{vT1} , E_{vT2}), frente a los 3 del SFOR (V_f , A_v , E_{vT}) y los 4 del DAEM (V_f , A_v , E_{vT0} , σ) (Bartok y Sarofim, 1991).

Modelos de redes

Se ha descrito como los modelos anteriores, comúnmente llamados modelos de pérdida de peso, utilizan constantes ajustadas empíricamente para determinar la producción de volátiles de un tipo de carbón bajo unas condiciones concretas. Sin embargo, estos valores experimentales son difíciles de generalizar fuera del rango en que han sido obtenidos. Además, se ha visto que la devolatilización global de la partícula está asociada a dos procesos: la liberación en forma de tar y la liberación en forma de gases de bajo peso molecular. La liberación de gases está relacionada con la descomposición térmica de unos grupos funcionales específicos, y puede ser predicha con precisión empleando reacciones cinéticas de primer orden junto con el análisis inmediato. Sin embargo, la formación del tar y del char es más complicada, y es aquí donde fallan la mayoría de los modelos de pérdida de peso. Predecir la formación del tar es sin embargo, importante por varias razones. El tar es el producto volátil más abundante. Su liberación varía substancialmente dependiendo de las condiciones de la reacción (presión, velocidad de calentamiento, temperatura final, geometría de la cámara, tamaño de partícula). Es también el primer producto volátil en ser liberado, y por lo tanto, controla la ignición y la estabilidad de la llama. Además, la formación del tar está ligada a la estructura física y química del char, influyendo en el hinchamiento de la partícula de char y su reactividad. Los modelos de redes están libres de esta problemática. Pese a ser modelos más complicados, ofrecen una mayor flexibilidad y aplicabilidad. Son modelos basados en un tratamiento detallado de la estructura del carbón, permitiendo predecir con bastante precisión la descomposición térmica de éste. Para ello, la estructura del carbón se modela como una red anillos aromáticos unidos por enlaces de distinta reactividad; y el proceso de devolatilización, combinando expresiones de primer orden con distribuciones estadísticas de la energía de activación, y distribuciones estadísticas que describen las velocidades de los enlaces que se rompen, de los enlaces que se forman por recombinación, y de los enlaces que irreversiblemente se unen para formar el residuo carbonoso (Solomon et al., 1988; Genetti, 1999).

Estos modelos son el modelo FG-DVC (Functional-Group Depolymerization Vaporization Cross-Linking, Solomon et al., 1988, 1990, 1993), el modelo CPD (Chemical Percolation Devolatilisation, Fletcher et al., 1989, 1990, 1992) y el modelo FLASHCHAIN (Niksa, 1991, 1994).

FG-DVC (Solomon et al., 1988, 1990, 1993)

La estructura del modelo de Grupos Funcionales - Depolimerización, Vaporización y Recombinación (FG-DVC, Functional Group, Depolymerization, Vaporization and Crosslinking), está dividida, como el propio nombre, en dos partes. La parte del modelo de Grupos Funcionales, describe la liberación de gases de bajo peso molecular debido a la descomposición de ciertos grupos funcionales. La parte del modelo de Depolimerización, Vaporización y Recombinación, describe la competencia entre la rotura de enlaces y la recombinación, para producir fragmentos aislados de carbón (metaplastos); la condensación para producir char, y la vaporización fuera de la partícula en forma de tar. La Figura 2.5 muestra un esquema de la evolución de la estructura del carbón en la simulación del modelo DVC.

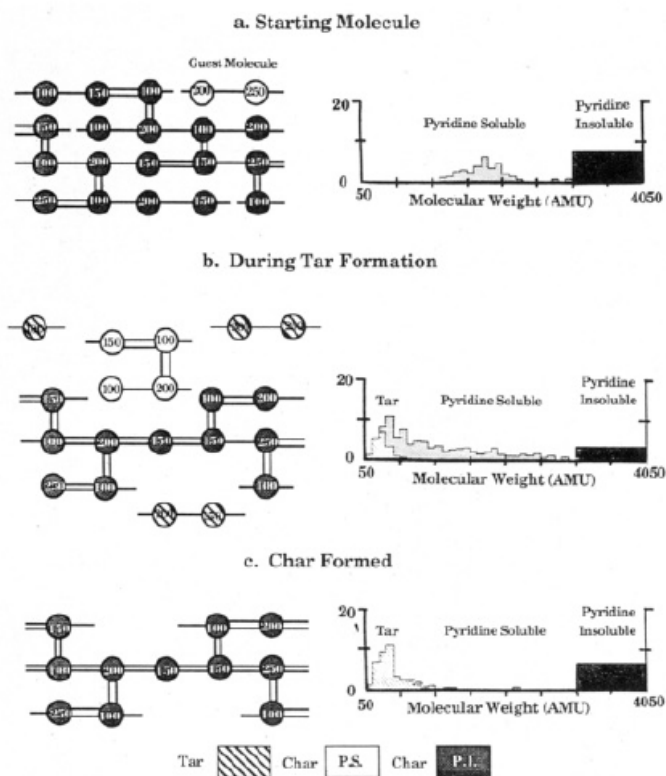


Fig. 2.5 Proceso de formación de tar y char en el modelo DVC (Solomon et al., 1988)

La descripción matemática del modelo representa la estructura del carbón por una red bidimensional de Bethe de anillos aromáticos unidos por puentes alifáticos. La formación de

metaplastos y la posterior liberación del tar, se describen utilizando técnicas estadísticas de la teoría de Percolación. La cinética de la descomposición de cada grupo funcional se modela con ecuaciones de primer orden con una distribución de la energía de activación.

La caracterización del carbón y los parámetros del modelo son determinados utilizando técnicas termoanalíticas como TG-FTIR, NMR y FIMS. El modelo proporciona la liberación de gas, la composición elemental y por grupos funcionales del tar y del char, y la distribución en peso de tar, gas y char.

CPD (Fletcher et al., 1989, 1990, 1992)

El modelo CPD aplica la teoría de Percolación con redes de Bethe para describir la formación de metaplastos, además de un modelo de equilibrio vapor-líquido para predecir la liberación de tar. Finalmente, utiliza el mismo esquema de reacciones y parámetros cinéticos dados por Solomon et al., (1988), para determinar la liberación de los gases de bajo peso molecular. La mayor aportación del modelo fue la introducción de una nueva metodología basada en la teoría de Percolación mejorando notablemente la rapidez de las simulaciones del modelo FG-DVC basadas en el método de Monte Carlo (Solomon et al., 1988).

Otra de sus ventajas es que todos los parámetros, excepto la población de enlaces de char, son determinados por NMR, lo que lo convierte en un modelo más sencillo que el anterior (Genetti, 1999). El modelo proporciona la liberación y distribución en peso de gas, tar y char.

FLASHCHAIN (Niksa, 1991, 1994)

El modelo FLASHCHAIN, a diferencia de los anteriores, describe la estructura de la partícula de carbón como una mezcla de fragmentos de cadenas de distinto tamaño, desde monómeros a cadenas muy largas, con grupos periféricos en los extremos, y unidos entre sí por enlaces estables y enlaces no estables. El modelo se constituye a partir de un mecanismo de cuatro reacciones, funciones estadísticas que determinan la probabilidad de que la ruptura de un enlace genere un tipo u otro de fragmento, funciones estadísticas que determinan la constitución química de los fragmentos de cada tamaño, y por último, un modelo de equilibrio vapor-líquido para predecir la liberación de tar a partir de los fragmentos de menor peso molecular (metaplastos) análogo al del modelo CPD. La Figura 2.6 muestra el esquema de los mecanismos de reacción en el modelo FLASHCHAIN.

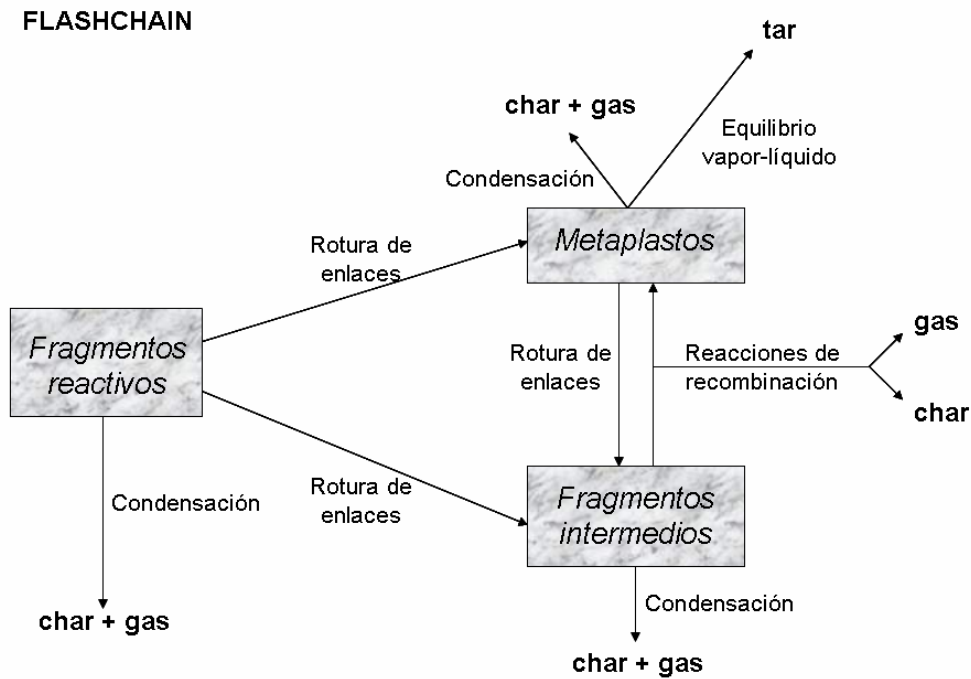


Fig. 2.6 Esquema del proceso de devolatilización en el modelo FLASHCHAIN (Niksa 1991)

Se consideran tres tipos de fragmentos en el modelo: fragmentos reactivos que corresponden con las cadenas al comienzo de la devolatilización, fragmentos intermedios una vez que algún enlace se ha escindido, y por último fragmentos de metaplastos cuando no existen enlaces que lo unan a la estructura macromolecular. En la misma Figura 2.6 se pueden ver las cuatro reacciones que tienen lugar en el proceso: reacciones de rotura de enlaces, reacciones de condensación para la formación del char, reacciones de recombinación que dan lugar a la formación de nuevos enlaces y finalmente, reacciones de los grupos periféricos que dan lugar a la liberación de los gases de bajo peso molecular. La liberación del tar se analiza en forma de equilibrio térmico entre la fase gaseosa y líquida del metaplasto. Al igual que el modelo CPD, la mayor parte de sus parámetros se determinan por NMR, y el modelo proporciona la liberación y distribución en peso de gas, tar y char.

2.2 Combustión homogénea de los productos volátiles

Durante el proceso de devolatilización se liberan una gran variedad de productos en forma de tar y otros gases hidrocarburos, CO₂, CO, H₂, H₂O y HCN. El tar, a su vez, está formado por cientos de compuestos, en su mayoría hidrocarburos aromáticos. Estos productos volátiles se expelen desde la superficie porosa de la partícula de carbón, formando una nube de volátiles que reacciona con el oxígeno en las proximidades de la partícula. Se pueden distinguir cuatro fases en este proceso (Bartok y Sarofim, 1991):

- Macro-mezcla de las partículas en proceso de devolatilización con el oxidante.
- Micro-mezcla de la nube de volátiles con el oxidante.
- Oxidación de las especies volátiles.
- Transferencia de calor desde la fase gas, que contiene los productos de la combustión de los volátiles, a las partículas de char.

A su vez, las reacciones de oxidación de los volátiles liberados en los gases calientes pasan por tres etapas. Al principio, el tar se convierte en hollín más una cantidad adicional de H_2 y CO . A continuación, los compuestos gaseosos de hidrocarburos se oxidan a CO , H_2 y H_2O . Finalmente, el H_2 y CO se queman completamente produciendo CO_2 y H_2O , y se forman los NO_x y SO_x .

Sin embargo, todas estas transformaciones no se modelan realmente en las simulaciones. Una razón es que las cadenas de hidrocarburos representan sólo unos pocos de los miles de compuestos liberados. Además, no existen mecanismos simples de reacción que puedan describir un flujo turbulento con cientos de especies químicas y muchas más reacciones. Así que, son necesarias aproximaciones. En general, se suelen considerar dos aproximaciones para el tratamiento de la combustión de los volátiles: equilibrio local y reacciones globales. La aproximación de equilibrio local considera que los productos volátiles y el gas oxidante, están en equilibrio local termodinámico. Esta hipótesis permite determinar la temperatura del gas y su composición sin conocer las especies químicas liberadas. Todo lo necesario es la composición elemental de los volátiles y el calor generado en la devolatilización. La segunda aproximación, reacciones globales, permite estimar la velocidad de combustión de los volátiles, correlacionando las velocidades de reacción conocidas de varios combustibles (CH_4 , C_2H_6 , $C_xH_yO_z$) para el conjunto de las reacciones. En general, ambas aproximaciones sobrevaloran la velocidad de reacción real. Sin embargo, si se tiene en cuenta que la combustión completa de los productos volátiles dura del orden de milisegundos, la elección de un esquema de reacción u otro no afecta a la reacción global de la partícula, que dominada por la combustión del char, dura del orden de segundos. En otras ocasiones sin embargo, la elección de la aproximación puede ser importante para determinar con precisión la estequiometría, la ignición, la temperatura de la llama, y en consecuencia, las predicciones de NO_x y SO_x (Sami et al., 2001; Backreedy, 2002).

2.3 Oxidación del residuo carbonoso

La oxidación del residuo carbonoso es el último paso en el proceso de combustión. Por ser la etapa más lenta, la velocidad a la que tiene lugar guarda una estrecha relación con la eficiencia del proceso, y en consecuencia, con la cantidad de inquemados. También es la etapa más difícil de modelar, ya que son muchos los factores que influyen en su desarrollo (Unsworth et al., 1991):

- Variaciones en la estructura del carbón
- Difusión de los reactivos
- Efectos del tamaño de la partícula
- Difusión en los poros
- Disminución de la reactividad del residuo carbonoso
- Presencia de catalizadores minerales
- Cambios en el área superficial durante la reacción
- Fragmentación del residuo carbonoso
- Efectos de la temperatura y la presión
- Presión parcial del oxidante

La tarea de incluir todos estos efectos en el modelo de combustión no es sencilla, y no existe ningún modelo que englobe de forma general –para todo tipo de carbones y condiciones– todas estas circunstancias.

2.3.1 Descripción del proceso y resultados más significativos

El residuo carbonoso o char, es la masa residual de carbono resultante del proceso de devolatilización. Además de carbono como elemento predominante, también contiene algo de nitrógeno, azufre y la mayor parte de la material mineral (ceniza) (Essenhigh y Howard, 1967). Tiene forma esférica y su superficie está repleta de grietas y agujeros por donde penetra el oxidante y escapan los gases de combustión. Además, su estructura es muy porosa. Su naturaleza depende del tipo y tamaño del carbón original, y de las condiciones en las que ha tenido lugar la devolatilización (Smith, 1982). El residuo carbonoso, al contacto con el oxidante a altas temperaturas, da lugar a un proceso de oxidación que determina el nivel global de la combustión. Las reacciones más características que tienen lugar en este proceso son (Field, 1967):





Las reacciones con el dióxido de carbono (R 2.4) y con el vapor de agua (R 2.5) son mucho más lentas (10^0 s^{-1} a 1100 K) que las reacciones del carbono con el oxígeno (10^5 s^{-1} a 1100 K) (R 2.7 y R 2.8), y sólo son relevantes para procesos de gasificación. La reacción con el hidrógeno (R 2.6) todavía es más lenta (10^{-3} s^{-1} a 1100 K) que las anteriores, y es despreciable en aplicaciones prácticas. A temperaturas altas (2000 K), las reacciones C-CO₂, C-H₂O y C-O₂ tienen velocidades similares; sin embargo, las velocidades de reacción con el dióxido de carbono y con el vapor de agua seguirán siendo despreciables, ya que la concentración de oxígeno es mucho mayor. De manera que, generalmente, sólo se consideran las reacciones del carbono con el oxígeno en el estudio de sistemas de combustión que no impliquen una gasificación del carbón (Field, 1967).

Reacciones C-O₂

Las velocidades de reacción dependen de las características estructurales y reactivas del char, y de las condiciones de presión, temperatura y concentración de oxidante a las que tiene lugar el proceso. El factor limitante de la reacción puede ser la propia química de la reacción (adsorción del oxidante, reacción, desorción de los productos) o la difusión de las especies gaseosas (a través de la atmósfera circundante a la partícula, o a través de los poros en el interior de la partícula, tanto para el oxidante como para los productos de la reacción). En función del factor limitante en la reacción de oxidación, se establecen tres zonas o regímenes de combustión distintos (Unsworth et al., 1991; Hong, 2000; Backreedy, 2002):

- Zona I (< 900 K): El oxígeno difunde hacia la superficie de la partícula a una velocidad mucho mayor de la que es consumido. La concentración de oxígeno dentro de los poros es similar a la del gas fuera de la partícula. El oxígeno penetra en la partícula, y se produce la combustión en el interior de los poros, manteniendo constante el diámetro de la partícula, y disminuyendo sólo la densidad. La velocidad a la que la partícula se quema está controlada por la velocidad de reacción química entre el carbono y el oxígeno.
- Zona II (1200 – 1700 K): El oxígeno difunde hacia la superficie externa de la partícula y penetra parcialmente en ésta, reaccionando con el carbono antes de llegar a introducirse completamente en los poros, de manera que la concentración de oxidante disminuye en el interior de la partícula. Esta vez, el proceso está controlado por la velocidad de reacción

química y por la difusión. El grado de oxidación depende de la resistencia difusional de la estructura y del área interna de los poros. La partícula disminuye tanto en diámetro como en densidad.

- Zona III (> 1700 K): El oxígeno difunde hasta la superficie externa de la partícula, donde inmediatamente reacciona con el carbono debido a la alta reactividad del residuo carbonoso. La concentración del oxidante se hace cero en la superficie de la partícula. Así que el proceso está controlado por los mecanismos de difusión externa. La partícula disminuye en diámetro.

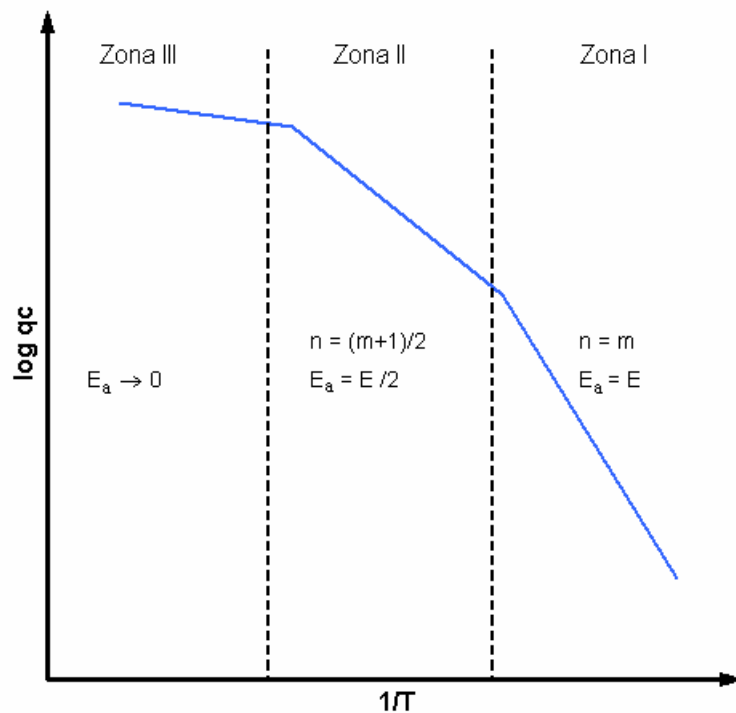


Fig. 2.7 Zonas de combustión

Durante la combustión, una partícula atraviesa habitualmente los tres regímenes. Al principio de la combustión la velocidad de reacción química es todavía pequeña, y la difusión es suficientemente rápida para igualar la concentración de oxidante en la superficie y en el interior de la partícula. Así, la velocidad global de reacción está controlada por la velocidad de reacción química (Zona I). Al aumentar la temperatura de la partícula también aumenta la velocidad de reacción química; tanto que el oxidante se consume antes de penetrar completamente la partícula. Así, la velocidad global de reacción está controlada por la velocidad de reacción química y por la velocidad de difusión (Zona II). Conforme la temperatura sigue subiendo, se puede alcanzar un punto donde la velocidad de reacción química sea tan grande que el oxígeno se consume nada más llegar a la superficie externa de la partícula, sin ni siquiera penetrar en el

interior. En estas circunstancias, la velocidad global de reacción estaría controlada por el proceso de difusión en la capa limitante (Zona III). Conforme sigue avanzando la combustión, si se ha llegado a alcanzar la Zona III, al disminuir la temperatura, de nuevo se vuelve a producir un cambio a la Zona II. Finalmente, en las últimas etapas de la combustión, debido a un fenómeno denominado extinción, se produce una transición desde la Zona II a la Zona I (Abd El-Samed et al., 1990; Hurt et al., 1993,1999; Shim et al., 2000). Este fenómeno de extinción, como se verá a lo largo del capítulo, tiene una gran importancia en la determinación de la combustión en calderas convencionales.

Para conocer el tiempo de combustión de una partícula, es necesario conocer la cinética de las reacciones gas-sólido. Existen varios mecanismos que describen esta cinética. Los más utilizados en la modelización de la combustión heterogénea del char son:

1. Mecanismos de cinética global de ley potencial.
2. Mecanismos de cinética semiglobal de Langmuir-Hinshelwood

Sin embargo, estos mecanismos, pese a tener una gran aceptación por su sencillez, carecen de una base teórica sólida, y se sostienen sólo por la experiencia. Para subsanar este déficit, otros autores (Haynes, 2001; Hurt y Calo, 2001) han desarrollado nuevos modelos más complejos que explican teóricamente los resultados obtenidos experimentalmente. Un ejemplo de este tipo de modelos es:

3. Mecanismos de cinética semiglobal de tres pasos (Hurt y Calo, 2001)

1. Mecanismos de cinética global de ley potencial (Bews, 2001; Hurt et al., 2001, 2004)

Este tipo de mecanismo es el más utilizado dentro de los códigos de combustión. Considera un único paso en la oxidación del carbono, obteniendo como productos CO y CO₂ (R 2.9).



La velocidad de reacción por unidad de superficie q_c , se expresa como el producto de una constante cinética k_c y una potencia de la concentración del agente oxidante en la superficie de la partícula (Ec. 2.9).

$$q_c = k_c \cdot P_s^n \quad (\text{Ec. } 2.9)$$

Donde, n representa el orden aparente de la reacción, y la constante cinética k_c varía exponencialmente con la temperatura según una expresión tipo Arrhenius (Ec. 2.10).

$$k_c = k_0 \cdot \exp(-E/R \cdot T) \quad (\text{Ec. 2.10})$$

La mayor simplificación para la obtención de los parámetros cinéticos del mecanismo (k_0 , E , n), es suponer que la reacción tiene lugar en la superficie de la partícula. Sin embargo, el char es un material poroso, donde el oxígeno penetra y reacciona en el interior de la partícula. Los parámetros cinéticos basados en la superficie externa de la partícula se denominan parámetros extrínsecos, y son válidos sólo en un margen muy estrecho de condiciones de temperatura. Por el contrario, se habla de parámetros intrínsecos cuando también se considera el área superficial interna de la partícula debida a su porosidad. De esta manera, en la Zona III de combustión, donde toda la combustión tiene lugar en la superficie externa de la partícula, la energía de activación y el orden de reacción observables experimentalmente coinciden con los valores extrínsecos. En la Zona I, como la reacción tiene lugar en el interior de toda la partícula los valores cinéticos obtenidos experimentalmente coinciden con los valores intrínsecos. En la Zona II, donde se desarrolla la mayor parte de la reacción, la combustión se produce en la superficie y en una parte del interior de la partícula. En esta zona, las relaciones entre el orden de reacción aparente (observable) e intrínseco, y entre la energía de activación aparente e intrínseca vienen aproximadamente dados por las Ecs. 2.11 y 2.12 (Smith, 1978, 1982).

$$n = \frac{(m+1)}{2} \quad (\text{Ec. 2.11})$$

$$E_a = E/2 \quad (\text{Ec. 2.12})$$

La idoneidad del modelo pasa por reproducir adecuadamente la dependencia de la reacción con la temperatura a través de la energía de activación E_a , y de la concentración de oxidante a través del orden de reacción n , a lo largo de todo el proceso de combustión. Sin embargo, en la bibliografía no se encuentra un consenso general en los valores de estas magnitudes (orden de reacción y la energía de activación) (Bews et al., 2001). Dichas discrepancias se atribuyen a errores derivados de las técnicas experimentales, ya que a menudo, estos valores cinéticos se han obtenido para muestras estadísticamente poco representativas de la heterogeneidad del carbón (Hurt et al., 2004).

La Figura 2.8 muestra algunos de los valores del orden de reacción obtenidos por varios autores. En la Zona I de la combustión, a baja temperatura, se obtienen valores altos del orden de

reacción (0.6 – 1). Sin embargo, en la Zona II, el orden de reacción no está tan bien delimitado. Algunos autores han obtenido un orden intrínseco de reacción igual cero (Tyler et al., 1976), mientras que otros han obtenido un orden de reacción igual a uno (Field, 1967; Smith et al., 1971, 1972; Charpenay et al., 1992; Backreedy et al., 2006). Incluso otros muchos autores han encontrado un orden de reacción igual a 0.5 (Hurt et al., 1982, 1998; Mitchell y McLean, 1982; Young y Smith, 1989; Sun et al., 2000). En cuanto a la magnitud de la energía de activación existe mayor acuerdo entre los distintos autores, que la sitúan entre 105 y 200 kJ/mol (Backreedy, 2002). De estos estudios, se deduce por tanto, que pese a la amplia utilización de la ley exponencial, resulta una expresión inapropiada como forma general, y necesita ser particularizada en cada aplicación.

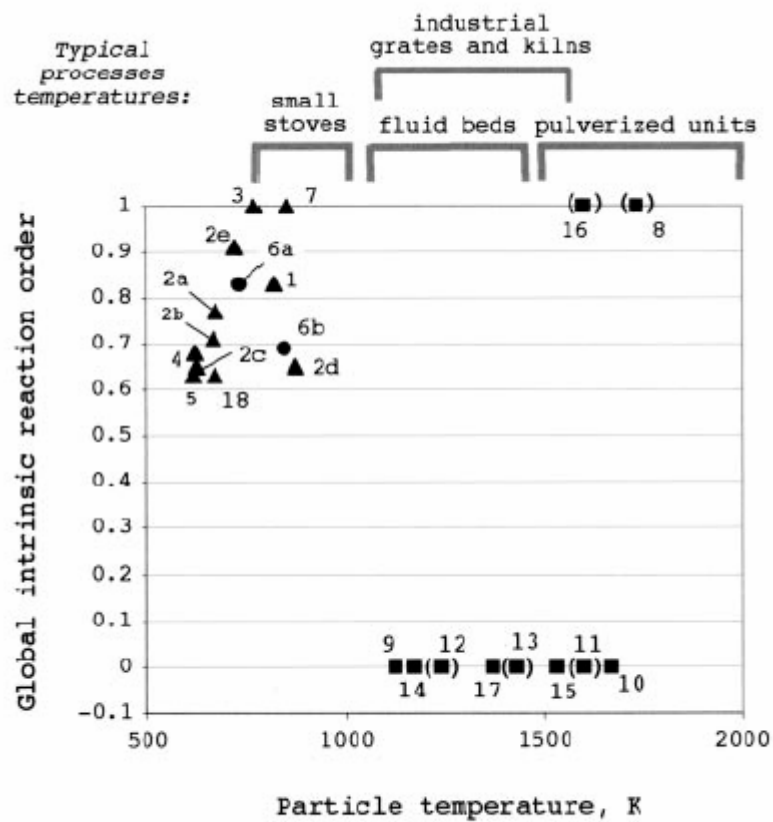


Fig. 2.8 Orden de reacción para varios regímenes (Hurt y Calo, 2001)

2. Cinética semiglobal de Langmuir-Hinshelwood (Hong, 2000; Hurt y Calo, 2001)

La forma más simple de la cinética de Langmuir-Hinshelwood es también ampliamente utilizada en combustión. El modelo considera un mecanismo de dos reacciones correspondientes a la adsorción de oxígeno (R 2.10) y a la desorción de monóxido de carbono (R 2.11) (Langmuir, 1921).



La velocidad de reacción por unidad de superficie q_c se expresa en función de las constantes cinéticas k_{c1} , k_{c2} y de la concentración del oxidante en la superficie de la partícula P_s (Ec. 2.13).

$$q_c = \frac{k_{c1} \cdot k_{c2} \cdot P_s}{k_{c1} \cdot P_s + k_{c2}} \quad (\text{Ec. 2.13})$$

Donde, k_{c1} y k_{c2} son las constantes cinéticas de las reacciones de adsorción (R 2.10) y desorción (R 2.11), respectivamente (Ecs. 2.14 y 2.15).

$$k_{c1} = k_{01} \cdot \exp(-E_{ads} / R \cdot T) \quad (\text{Ec. 2.14})$$

$$k_{c2} = k_{02} \cdot \exp(-E_{des} / R \cdot T) \quad (\text{Ec. 2.15})$$

Las energías de activación del proceso de adsorción, E_{ads} , se encuentran dentro del rango 10 – 125 kJ/mol, mientras que las correspondientes al proceso de desorción, E_{des} , quedan dentro del rango 160 – 400 kJ/mol. El orden efectivo de la reacción varía con la temperatura y la concentración de oxígeno según la Ec. 2.13, exhibiendo dos casos límite. A baja temperatura, la presión parcial de oxidante es muy alta, y domina el proceso de adsorción ($E_{des} \gg E_{ads}$). Por tanto, a partir de la Ec. 2.13 se obtiene una expresión de orden de reacción cero (Ec. 2.16).

$$q_c = \frac{k_{c1} \cdot k_{c2} \cdot P_s}{k_{c1} \cdot P_s + k_{c2}} \xrightarrow{k_{c1} \gg k_{c2}} q_c \cong k_{c2} \quad (\text{Ec. 2.16})$$

A alta temperatura ocurre lo contrario, la presión parcial de oxidante es muy baja, y domina el proceso de desorción, obteniéndose un orden de reacción igual a uno (Ec. 2.17).

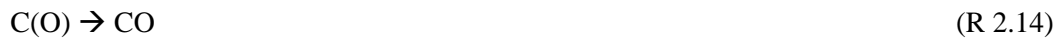
$$q_c = \frac{k_{c1} \cdot k_{c2} \cdot P_s}{k_{c1} \cdot P_s + k_{c2}} \Rightarrow \xrightarrow{k_{c2} \gg k_{c1}} q_c \cong k_{c1} \cdot P_s \quad (\text{Ec. 2.17})$$

Entre estos dos casos límite, se obtienen valores intermedios que muestran la transición entre el orden de reacción cero a baja temperatura y orden de reacción uno a alta temperatura. Sin embargo, volviendo a la Figura 2.8 se encuentra justamente el comportamiento contrario. Este hecho evidencia la presencia de otras etapas intermedias en el mecanismo de reacción, que quedan encubiertas dentro de los valores cinéticos asignados al proceso de adsorción y desorción. De manera que diversos autores han optado por ajustar los valores de las energías de activación del proceso de adsorción E_{ads} , y del proceso de desorción E_{des} , de forma que describan una disminución del orden de reacción con la temperatura que se ajuste a los resultados

experimentales. De nuevo, se pierde el significado físico del modelo. La ventaja de este mecanismo frente al de ley potencial es que permite la variación del orden de reacción conforme transcurre la combustión.

3. Mecanismos de cinética semiglobal de tres pasos (Hurt y Calo, 2001)

En la explicación del modelo anterior se ha dejado entrever la existencia de reacciones complejas del O_2 con el carbono. Estas reacciones secundarias dan lugar a compuestos complejos de dióxido de carbono que finalmente reaccionan de nuevo con el oxígeno para formar la mayor parte del CO_2 producido. Por lo tanto, se introduce otra etapa intermedia en el mecanismo (R 2.13), que tiene lugar tras la adsorción y que compite con la desorción de CO (R 2.14).



Esta competencia en el proceso de desorción explica en cierta manera por qué invirtiendo las energías de activación, disminuyendo significativamente la del proceso de desorción ($E_{des} \approx 170$ kJ/mol) y aumentando la del proceso de adsorción ($E_{ads} \approx 200$ kJ/mol), la ley de Langmuir-Hinshelwood ajusta adecuadamente los valores experimentales.

La velocidad de reacción por unidad de superficie q_c , se expresa en función de las constantes cinéticas k_{c1} , k_{c2} , k_{c3} y de la concentración del oxidante en la superficie de la partícula (Ec. 2.18).

$$q_c = \frac{k_{c1} \cdot k_{c2} \cdot P_s^2 + k_{c1} \cdot k_{c3} \cdot P_s}{k_{c1} \cdot P_s + k_{c3} / 2} \quad (Ec.\ 2.18)$$

Donde, k_{c1} , k_{c2} y k_{c3} son las constantes cinéticas de la reacción de adsorción (R 2.12), de la reacción compleja con el oxígeno (R 2.13), y de la reacción de desorción (R 2.14) respectivamente (Ecs. 2.19 – 2.21).

$$k_{c1} = k_{01} \cdot \exp(-E_{ads} / R \cdot T) \quad (Ec.\ 2.19)$$

$$k_{c2} = k_{02} \cdot \exp(-E_{O_2} / R \cdot T) \quad (Ec.\ 2.20)$$

$$k_{c3} = k_{03} \cdot \exp(-E_{des} / R \cdot T) \quad (Ec.\ 2.21)$$

Las energías de activación del mecanismo se han ajustado a los valores $E_{ads}=35$ kJ/mol, $E_{O_2}=130$ kJ/kmol y $E_{des}=180$ kJ/kmol. El orden efectivo de la reacción varía con la temperatura y la concentración de oxígeno según la Ec. 2.18. Para ver esta variación, se consideran los casos límite y la transición entre estos. A baja temperatura, domina el proceso de adsorción, siendo el factor limitante el proceso de desorción ($k_{c3} \ll k_{c2}, k_{c1}$). Por lo tanto, a partir de la Ec. 2.18 se obtiene una expresión de orden uno (Ec. 2.22).

$$q_c = \frac{k_{c1} \cdot k_{c2} \cdot P_s^2 + k_{c1} \cdot k_{c3} \cdot P_s}{k_{c1} \cdot P_s + k_{c3} / 2} \xrightarrow{k_{c3} \ll k_{c2}, k_{c1}} q_c \cong k_{c2} \cdot P_s \quad (\text{Ec. 2.22})$$

A alta temperatura, el proceso que domina es la desorción ($k_{c3} \gg k_{c2}, k_{c1}$), siendo el factor limitante el proceso de adsorción. Por lo tanto, a partir de la Ec. 2.18 se obtiene también una expresión de orden uno (Ec. 2.23).

$$q_c = \frac{k_{c1} \cdot k_{c2} \cdot P_s^2 + k_{c1} \cdot k_{c3} \cdot P_s}{k_{c1} \cdot P_s + k_{c3} / 2} \xrightarrow{k_{c3} \gg k_{c2}, k_{c1}} q_c \cong 2 \cdot k_{c1} \cdot P_s \quad (\text{Ec. 2.23})$$

Por último, tiene lugar un régimen de transición a temperaturas moderadas, donde se produce la competencia entre las reacciones secundarias complejas (R 2.13) y la reacción de desorción ($k_{c1} P_s \gg k_{c3} \gg k_{c2} P_s$). A partir de la Ec. 2.18 se obtiene una expresión de orden cero (Ec. 2.24).

$$q_c = \frac{k_{c1} \cdot k_{c2} \cdot P_s^2 + k_{c1} \cdot k_{c3} \cdot P_s}{k_{c1} \cdot P_s + k_{c3} / 2} \xrightarrow{k_{c1} \gg k_{c3} \gg k_{c2}} q_c \cong k_{c3} \quad (\text{Ec. 2.24})$$

Volviendo a la Figura 2.8, se comprueba que ahora sí, la variación del orden de reacción se reproduce adecuadamente. Es decir, que con la introducción de una etapa intermedia en el mecanismo, se dota al modelo de un sentido físico del que carecían los anteriores modelos.

Las reacciones C-O₂, lejos de ser sencillas, son bastante complejas y están influidas por la heterogeneidad de la actividad de la superficie. Todas las partículas tienen variaciones locales en su composición y en su microestructura. Esta heterogeneidad intrínseca se manifiesta como variaciones en las energías de activación de los procesos de adsorción y desorción (Hurt et al., 2004). Otro efecto de gran influencia en la cinética de las reacciones es la materia inorgánica presente en el residuo carbonoso (Essenhig 1981). La ceniza, además de consumir parte del calor generado en la reacción, ejerce un doble efecto en la cinética de la combustión. Por un lado, tiene un efecto catalizador que produce un aumento de la reactividad a baja temperatura.

Por otro lado, la capa de ceniza que va cubriendo la partícula, dificulta la difusión del oxidante hasta la superficie reactiva de la partícula (Hampartsoumian et al., 1989; Charpeney et al., 1992). De manera que el efecto global sobre la combustión es incierto y difícil de predecir, y dependerá de la cantidad y las propiedades de la ceniza, de las propiedades del residuo carbonoso, y de las condiciones de la combustión (Backreedy, 2002).

2.3.2 Modelos de oxidación del residuo carbonoso

Antes de pasar a resumir los modelos más característicos del proceso, se establece una clasificación de los tipos de modelos existentes:

1. Modelos Globales: Este tipo de modelos extrínsecos consideran que las partículas de residuo carbonoso son impermeables a los efectos de difusión en los poros, y calculan la velocidad de reacción y la concentración de oxidante en la superficie externa de la partícula. Todos los efectos intrínsecos de la partícula (hinchamiento, porosidad del residuo carbonoso, difusión del oxidante hasta el interior de la partícula, reacción en toda la superficie activa de la partícula) se incluyen en el modelo a través de constantes cinéticas de reacción, por lo que se trata de modelos muy empíricos que necesitan recalcular estas constantes siempre que cambie el tipo de carbón o las condiciones de combustión.
2. Modelos Intrínsecos: Estos modelos relacionan la velocidad de oxidación del residuo carbonoso con el área superficial activa, incluyendo su estructura interna, y consideran la existencia de un perfil de concentraciones de oxígeno en el interior de la partícula. El uso de modelos intrínsecos tiene la ventaja de proporcionar correlaciones cinéticas generales, que relacionan las características estructurales del carbón y las condiciones de la combustión, con la cinética de la combustión. Por lo tanto, son aplicables para distintos carbones y diferentes condiciones, mientras que en general, los modelos globales sólo se pueden aplicar para un carbón y unas condiciones específicas.

1. Modelos globales

El modelo de combustión más general, y a su vez más extendido –lo manejan la mayoría de los códigos de combustión–, es el modelo de una película de Field et al. (1967). El modelo de Field plantea el problema como una partícula esférica de carbón rodeada por una capa imaginaria de gas, a través de la cual el oxígeno difunde desde la mezcla de gases en el exterior. Este oxígeno reacciona en la superficie de la partícula, formando los productos que difunden hacia el exterior, atravesando de nuevo esta capa. Los productos son una mezcla de CO y CO₂ (Longwell et al., 1993), pero es habitual considerar que la oxidación del monóxido de carbono a dióxido de

carbono, ocurre muy cerca de la superficie de la partícula, de manera que fuera de la capa imaginaria sólo se tiene CO₂.

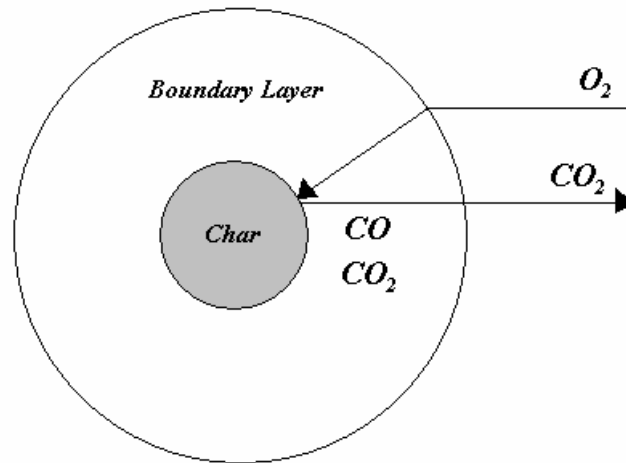


Fig. 2.9 Modelo de una película (Field, 1967).

La velocidad de combustión de la partícula se determina en términos de la velocidad de reacción química k_c –según un mecanismo de reacción C-O₂ global de ley potencial–, y de la velocidad de difusión k_d a través de la capa imaginaria que rodea a la partícula.

$$q_c = k_c \cdot P_s^n \tag{Ec. 2.25}$$

$$q_c = k_d \cdot (P_g - P_s) \tag{Ec. 2.26}$$

Combinando las expresiones obtenidas a partir de las ecuaciones de difusión de especies –del oxígeno hasta la superficie de la partícula y de los productos hasta la fase gas– (Ec. 2.26), y considerando la reacción de orden $n = 1$ en la superficie de la partícula (Ec. 2.25), se obtiene una expresión alternativa de la reacción global de combustión, en función de la presión parcial de oxidante en la atmósfera circundante a la partícula P_g (Ec. 2.27).

$$q_c = \frac{P_g}{\left(\frac{1}{k_d} + \frac{1}{k_c} \right)} \tag{Ec. 2.27}$$

Dado que la estructura interna de la partícula es desconocida, se considera que la reacción tiene lugar en la superficie de la partícula, y por lo tanto, se tiene en cuenta exclusivamente la difusión del oxígeno a través de la capa limitante (Ec. 2.28).

$$k_d = \frac{24 \cdot \varphi \cdot D_{O_2}}{d_p \cdot R \cdot T_m} \quad (\text{Ec. 2.28})$$

El coeficiente estequiométrico de la reacción de oxidación φ identifica la relación entre el número de moles de producto por moles de oxidante –vale 1 si el producto es CO_2 , y 2 si el producto es CO –. El coeficiente de difusión molecular del oxígeno en nitrógeno, D_{O_2} , se puede estimar a través de la teoría de coeficientes de difusión binaria (Turns, 1993) (Ecs. 2.29 - 2.33).

$$D_{O_2} = \frac{0.0266 \cdot T_m^{3/2}}{P_{boiler} \cdot PM_{O_2N_2}^{1/2} \cdot \sigma_{O_2N_2}^2 \cdot \Omega_D} \quad (\text{Ec. 2.29})$$

$$PM_{O_2N_2} = 2 \cdot [(1/PM_{O_2}) + (1/PM_{N_2})]^{-1} \quad (\text{Ec. 2.30})$$

$$\sigma_{O_2N_2} = (\sigma_{O_2} + \sigma_{N_2})/2 \quad (\text{Ec. 2.31})$$

$$\Omega_D = \frac{1.06036}{(T^*)^{0.15610}} + \frac{0.193}{\exp(0.47635 \cdot T^*)} + \frac{1.03587}{\exp(1.52996 \cdot T^*)} + \frac{1.76474}{\exp(3.89411 \cdot T^*)} \quad (\text{Ec. 2.32})$$

$$T^* = k_{N_2} \cdot T_m / (\varepsilon_{O_2} \cdot \varepsilon_{N_2})^{1/2} \quad (\text{Ec. 2.33})$$

Donde, σ_{O_2} ($\approx 3.467 \text{ \AA}$) y σ_{N_2} ($\approx 3.798 \text{ \AA}$) son los diámetros de las esferas de colisión de las respectivas especies, y Ω_D un coeficiente adimensional de colisión expresado en función de una temperatura adimensional T^* . Ésta, a su vez, se expresa en función de la temperatura del gas y de los coeficientes característicos de Lennard-Jones de las energías de las moléculas $\varepsilon_{O_2}/k_{N_2} \approx 106.7 \text{ K}$ y $\varepsilon_{N_2}/k_{N_2} \approx 71.4 \text{ K}$. Otra forma, más habitual, de estimar el coeficiente de difusión D_{O_2} es a través de la Ec. 2.34 (Jensen, 2001), donde D_0 es el propio coeficiente en unas condiciones P_0 y T_0 de referencia (P. ej. $2.201 \text{ cm}^2/\text{s}$ a presión atmosférica y $T = 1200 \text{ K}$), y T_m la temperatura media del gas y la superficie de la partícula.

$$D_{O_2} = D_0 \cdot \frac{T_m^{1.75}}{P_{boiler}} \quad (\text{Ec. 2.34})$$

Por otra parte, la velocidad de reacción k_c de la etapa de reacción, se describe con una expresión tipo Arrhenius (Ec. 2.35). Las características intrínsecas se introducen en el modelo a través de la energía de activación E_a y del factor preexponencial A_a , para un tipo de carbón y unas condiciones determinadas (Ec. 2.35).

$$k_c = A_a \cdot \exp(-E_a / R \cdot T_p) \quad (\text{Ec. 2.35})$$

Otro modelo muy extendido es el de Baum y Street (1971), que se diferencia levemente del de Field, en la descripción de las constantes cinéticas de difusión y de reacción.

Hasta el momento, tanto el modelo de Field como el de Baum y Street presumen un primer orden en la reacción C-O₂. Sin embargo, como ya se ha mencionado en la descripción de los mecanismos de reacción, el orden de reacción n varía entre cero y uno, dependiendo de las propiedades del char y de las condiciones de la combustión (Bews et al., 2001; Hurt y Calo, 2001). De manera que en estos casos, es necesario resolver de forma iterativa una expresión general de la velocidad de combustión para un orden de reacción n (Ec. 2.36).

$$q_c = k_d \cdot \left[P_g - \left(\frac{q_c}{k_c} \right)^{1/n} \right] \quad (\text{Ec. 2.36})$$

En el ánimo de mejorar y generalizar el uso de los modelos, numerosos autores han desarrollado distintas correlaciones que permiten vincular las constantes cinéticas de la reacción con las propiedades del carbón, posibilitando la extensión del modelo a distintos tipos de carbón. Una de las más extendidas dada su simplicidad, ya que relaciona E_a y A_a con el análisis elemental para un amplio espectro de carbones de distinto rango, fue propuesta por Hurt y Mitchell (1992) (Ecs. 2.37-2.39).

$$E_a = (-5,94 + 35,5 \cdot \%C) \quad (\text{Ec. 2.37})$$

$$A_a = \exp(\ln(k_{c,1750K}) + \frac{E_a}{1750R}) \quad (\text{Ec. 2.38})$$

Donde,

$$\ln(k_{c,1750K}) = (2,80 - 0,0758 \cdot \text{wt}\%C(d.a.f.)) \quad (\text{Ec. 2.39})$$

Todos los modelos descritos hasta este momento, consideran que las características reactivas del carbón se mantienen invariables durante todo el proceso de combustión. Sin embargo, a partir de estudios experimentales se descubrió que los distintos fenómenos, que tienen lugar durante la combustión del residuo carbonoso –variaciones en la estructura del carbón, fragmentación del residuo, condiciones del entorno, efectos de la materia mineral–, provocan un aumento del tiempo necesario para completar la conversión del carbón (Hurt et al., 1998). Este fenómeno, conocido habitualmente como extinción, se debe principalmente a dos contribuciones: la disminución de la reactividad del residuo carbonoso en las últimas etapas de la combustión (desactivación térmica) (Suuberg, 1991), y la aparición de una capa de ceniza que recubre la superficie de la partícula, dificultando la difusión del oxidante hasta ésta.

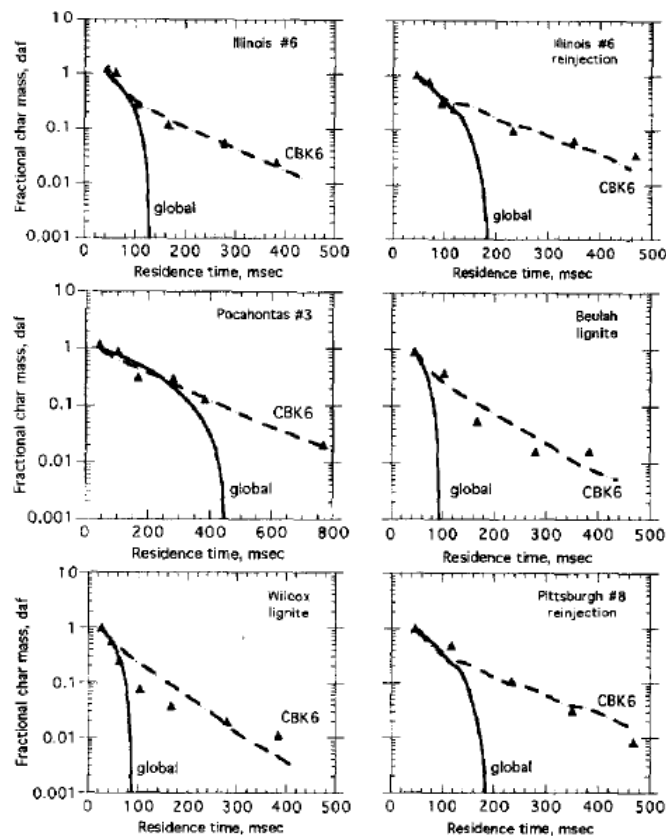


Fig. 2.10 Comparación de la aplicación de un modelo de película simple (línea continua) y el modelo CBK (línea de trazos) para reproducir los resultados experimentales de combustión (triángulos) de varios carbonos (Hurt et al., 1998)

Además, el fenómeno de extinción provoca una transición de régimen de combustión desde la Zona II hacia la Zona I (Abd El-Samed et al., 1990; Hurt et al., 1993, 1999; Shim y Hurt, 2000). No incluir este fenómeno en los cálculos de combustión explica por qué muchos modelos predicen adecuadamente el nivel de combustión obtenido en un quemador experimental o DTF, donde habitualmente no se estudia más allá del 70 % de la conversión del carbón, y sin

embargo, predicen erróneamente los inquemados sólidos producidos en calderas convencionales, donde el grado de combustión supera habitualmente el 90 %.

El primer modelo que recoge este fenómeno de extinción (desactivación térmica y efecto de inhibición de la ceniza), fue desarrollado por Hurt et al. (1998), y es conocido por el nombre de modelo cinético de combustión del carbono (carbon burnout kinetics, CBK). De esta manera, se consigue mejorar notablemente la predicción de combustión e inquemados en calderas convencionales, donde se alcanzan valores de conversión por encima del 90 % (Figura 2.10).

En su primera versión, el modelo CBK consiste en un modelo global que añade al modelo simple de una película, tres submodelos más para contabilizar el efecto de estos fenómenos. Los componentes del modelo CBK son:

- Modelo simple de una película (Field, 1967) con correlaciones dependientes de la composición del carbón (Hurt y Mitchell, 1992).
- Submodelo de la desactivación térmica del residuo carbonoso (Thermal annealing).
- Submodelo de mecanismo inhibidor de la ceniza en las últimas etapas de la combustión (Ash inhibition).
- Submodelo que describe las variaciones de las propiedades de la partícula (diámetro, densidad, porosidad) conforme tiene lugar la combustión.

Originalmente, el modelo CBK contenía además, un submodelo estadístico para evaluar la heterogeneidad de la reactividad, y la densidad dentro de la propia partícula. Sin embargo, éste fue eliminado en las versiones posteriores del modelo.

La introducción de estos submodelos dentro del modelo simple de una película, se realiza a través de las constantes cinéticas de difusión y de reacción. La constante cinética de reacción k_c se determina a partir de la Ec. 2.35; donde, la energía de activación E_a , se estima a partir de las correlaciones de Hurt y Mitchell (1992) según la Ec. 2.37. El proceso de desactivación térmica del residuo carbonoso se introduce en el modelo simple de una película, a través del factor preexponencial A_a . El factor preexponencial A_a , es una variable que depende de la evolución de la partícula, y contabiliza la disminución de la reactividad conforme tiene lugar el proceso de combustión. A partir de experimentos se ha determinado que el cambio de la reactividad, en la Zona II de combustión, entre dos instantes consecutivos A_i/A_{i-1} , si los efectos de la desactivación térmica se limitan a cambios en el área intrínseca superficial y su reactividad, viene expresado por la Ec. 2.40.

$$A_i = A_{i-1} \cdot \sqrt{\frac{N}{N_o}} \quad i = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{Ec. 2.40})$$

Donde, N/N_o representa la disminución de sitios activos –emplazamientos locales donde puede tener lugar la reacción de oxidación– dentro de la matriz del residuo carbonoso. Es decir, el modelo considera que la reactividad global es el resultado independiente de numerosas reacciones de oxidación simultáneas, en distintos sitios activos de la partícula. Estos sitios activos se destruyen siguiendo un proceso térmico de primer orden (Ec. 2.41).

$$\frac{dN_j}{dt} = -N_j \cdot A_d \cdot e^{(-E_d/RT_p)} \quad (\text{Ec. 2.41})$$

Donde, A_d y E_d son parámetros cinéticos empíricos. Se considera que todos los sitios activos comparten el mismo factor A_d , pero se postula que existe una distribución de la energía de activación E_d , que rige el proceso de desactivación térmica (Ec. 2.42).

$$\sqrt{\frac{N}{N_o}} = \int_0^{\infty} f_E(E_d, t) \cdot dE_d \quad (\text{Ec. 2.42})$$

Donde, f_E representa una distribución logarítmica normal de parámetros $E_d = 16.44$ kcal/mol, $\sigma_d = 0.46$, $A_d = 8.863 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$ (Ec. 2.43).

$$f_E(E_d) = \frac{1}{\sigma_d \cdot \sqrt{2 \cdot \pi}} \exp\left[-\frac{(E_d - E_{do})^2}{2 \cdot \sigma_d^2}\right] \quad (\text{Ec. 2.43})$$

Volviendo a la Ec. 2.40, el valor de la reactividad inicial del residuo carbonoso, A_o , se calcula, para carbones ricos en vitrinita y con contenidos en carbono desde el 60 % hasta el 90 % en el análisis elemental en base seca sin cenizas, según la Ec. 2.44.

$$\ln(A_o) = (10,82 - 7,15 \cdot \text{wt}\%C(d.a.f.)) \quad (\text{Ec. 2.44})$$

Este valor inicial no describe la reactividad de ninguna muestra de laboratorio, sino que corresponde a un hipotético estado inicial calculado por regresión a partir de datos experimentales del valor A_a para distintas muestras, conocida la evolución de la temperatura.

La constante cinética de difusión añade al modelo simple de una película una resistencia adicional debida a la capa de ceniza que se va formando alrededor de la partícula, y que dificulta la difusión del oxígeno (Ec. 2.45).

$$k_d = \frac{Sh \cdot D_{O_2} \cdot d_p \cdot \theta_{af}^{2.5}}{R \cdot T_m \cdot (Sh \cdot \delta \cdot d_c + \theta_{af}^{2.5} \cdot d_c^{2.5})} \quad (\text{Ec. 2.45})$$

Donde, Sh es el número de Sherwood (para tamaños característicos de partículas pulverizadas, $Sh = 2$), D_{O_2} es el coeficiente de difusión, d_p es el diámetro de la partícula, θ_{af} es la porosidad de la película de ceniza (según Hurt et al., (1998), $\theta_{af} = 0,16 \div 0,25$), R es la constante de los gases ideales, δ es el espesor de la película de ceniza, y d_c es el diámetro de la partícula sin contar la película de ceniza ($d_c = d_p - (2\delta)$).

Al principio, cuando la conversión del carbón es todavía pequeña, la capa de ceniza está dispersa en forma de granos sobre la superficie de la partícula, formando una mínima película de espesor δ_m (se puede estimar por $\delta_m = 1 \mu\text{m}$) (Figura 2.11).

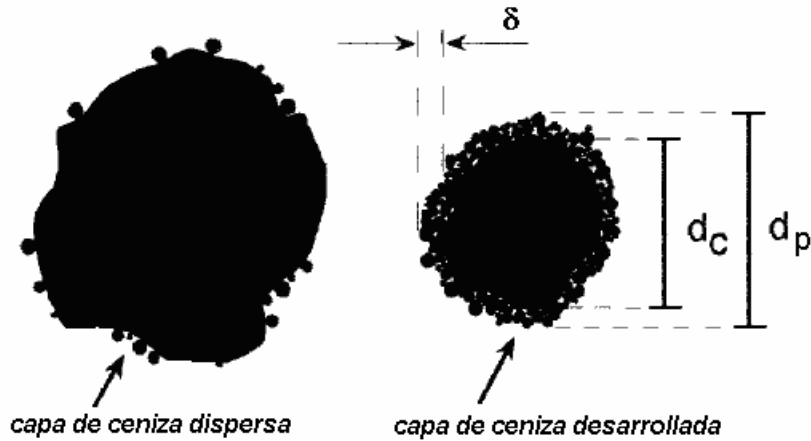


Fig. 2.11 Modelo de inhibición de la capa de ceniza (Hurt et al., 1998)

Conforme va avanzando el proceso de conversión, se añaden más granos a la película, disminuyendo su porosidad. A partir de un determinado momento, los granos comienzan a agolparse, aumentando el espesor de la película y manteniéndose una porosidad constante (θ_{af}).

$$\theta_{af} = 1 - \left(\frac{X_a \cdot \rho - X_{a0} \cdot \rho_0 \cdot \left(1 - \frac{2 \cdot \delta_m}{d_p}\right)^3}{\rho_{at} - \rho_{at} \cdot \left(1 - \frac{2 \cdot \delta_m}{d_p}\right)^3} \right) \quad (\text{Ec. 2.46})$$

La Ec. 2.46 permite calcular la porosidad de la capa de ceniza a partir de las propiedades de la partícula en cada instante, antes de que se alcance el valor crítico θ_{af} , a partir del cual ésta permanece constante. Por eso mismo, al tratarse de un proceso dinámico, también es necesario ir calculando cómo varían la densidad y el diámetro de la partícula conforme se va desarrollando el proceso de combustión. La variación de la densidad, excluyendo la capa de ceniza, se calcula según la Ec. 2.47, en función de la conversión del carbón elevado a una potencia α , determinada empíricamente para cada tipo de carbón, y denominada factor de combustión. Para carbones desconocidos se puede suponer un valor de 0.2.

$$\frac{\rho_c}{\rho_{c0}} = \left(\frac{m_c}{m_{c0}} \right)^\alpha \quad (\text{Ec. 2.47})$$

A partir de esta densidad es posible calcular la densidad global de la partícula (Ec. 2.48).

$$\frac{1}{\rho} = \frac{(1 - X_a)}{\rho_c} + \frac{X_a}{\rho_a} \quad (\text{Ec. 2.48})$$

Finalmente, a partir de consideraciones geométricas se obtiene el diámetro de la partícula en cada instante (Ec. 2.49).

$$\frac{d_p}{d_{p0}} = \left(\frac{m_p}{m_{p0}} \cdot \frac{\rho_0}{\rho} \right)^{1/3} \quad (\text{Ec. 2.49})$$

El modelo CBK es muy utilizado en el ámbito científico, y ha supuesto la base para otros modelos que, incorporando otros elementos, permiten mejorar sus prestaciones y hacer extensiva su utilización a todo tipo de carbones y condiciones (Domino y Smith, 1999; Cloke et al., 2003; Pallarés et al., 2005).

2. Modelos intrínsecos

El origen de los modelos intrínsecos surgió a partir de que diversos estudios experimentales revelaran que el área superficial interna y los efectos de difusión en el interior de los poros tienen una relevancia especial en la determinación de la combustión heterogénea del residuo carbonoso. Así, el desarrollo de modelos intrínsecos necesita, no sólo del conocimiento de la cinética intrínseca y de las condiciones de la reacción, sino además, de la estructura porosa inicial de la partícula y de los cambios de ésta durante el proceso de combustión.

En general, en los modelos intrínsecos, la velocidad de reacción se expresa como el producto de un coeficiente de reacción (R_c) y una potencia de la presión parcial del oxígeno en la superficie de la partícula (Ec. 2.50).

$$q_c = R_c \cdot P_{O_2}^n \quad (\text{Ec. 2.50})$$

El coeficiente de reacción R_c , depende tanto de las propiedades intrínsecas de la estructura del carbón, como de las condiciones en las que tiene lugar la combustión (Ec. 2.51). Entre los factores que habitualmente se utilizan para modelarlo, se encuentran: un factor de eficacia (η) que representa la relación entre la velocidad de reacción en un instante determinado y la que se obtendría si no existiera una resistencia a la difusión en los poros, el tamaño característico de la partícula (γ), la densidad aparente (ρ), el área superficial activa del residuo carbonoso (A_g), un coeficiente de reacción intrínseco (R_i), la temperatura de la partícula (T_p), el análisis elemental del carbón (C), y en algunos casos, las propiedades macerales del carbón (M_{ac}).

$$R_c = f(\eta, \gamma, \rho, A_g, R_i, T_p, C, M_{ac}, \dots) \quad (\text{Ec. 2.51})$$

Para el desarrollo de este tipo de modelos es imprescindible conocer cómo afecta la estructura porosa del residuo carbonoso a la combustión, y cual es su evolución durante el proceso. Por un lado, el tamaño de los poros controla el proceso de difusión del oxidante a través de ellos, y es el mecanismo de transporte dominante cuando las colisiones con las paredes de los poros son más frecuentes que las colisiones entre moléculas (Jensen, 2001). De manera que con tamaños de poro inferiores a 1 μm , el transporte a través de los poros controla la velocidad de combustión. Por otro lado, el tamaño de los poros y su evolución durante el proceso de combustión, determina en cada momento el área superficial activa en la que pueden darse las reacciones de oxidación. Conforme va transcurriendo la combustión, el tamaño de los poros aumenta, dando lugar a una mayor área superficial. Sin embargo el aumento del área superficial alcanza un límite cuando los poros se hacen tan grandes que sus paredes colapsan. Entonces, el área superficial comienza a decrecer hasta alcanzar un valor nulo al completarse la combustión (Figura 2.12).

Por esta razón, una de las características más importantes de este tipo de modelos, es conseguir describir adecuadamente la morfología porosa del residuo carbonoso y la difusión del oxidante a través de los poros, a lo largo de todo el proceso de combustión. En este sentido, se han desarrollado distintas aproximaciones conocidas como modelos de poro. Dependiendo del

tratamiento macroscópico o microscópico que se le de al problema, los modelos intrínsecos se dividen respectivamente en dos grupos.

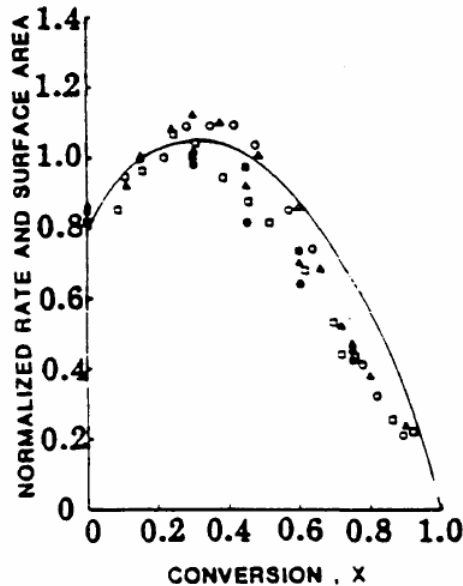


Fig. 2.12 Evolución del área superficial durante la combustión del char (Jensen, 2001)

El tratamiento macroscópico, que forma parte de la mayor parte de los modelos, introduce la naturaleza porosa del residuo carbonoso y su influencia en el proceso de combustión, a través de un coeficiente efectivo de difusión. Este coeficiente de difusión efectivo combina los efectos de la difusión molecular y la difusión por medio de colisiones con las paredes de los poros (Ec. 2.52).

$$D_{eff} = \left(\frac{1}{D_{eO_2}} + \frac{1}{D_{ekn}} \right)^{-1} \quad (\text{Ec. 2.52})$$

La difusividad molecular efectiva D_{eO_2} , se trata de manera análoga a como se expuso en el apartado de los modelos globales (Ecs. 2.29 a 2.34), pero incluyendo el efecto de la presencia de la estructura porosa, que disminuye el área total disponible para la difusión molecular (Ec. 2.53). Ésta disminución del área efectiva se introduce a través de la porosidad del residuo carbonoso θ . Además, hay que tener en cuenta que las trayectorias de los poros no son rectas, sino que por el contrario suelen ser intrincadas e irregulares, disminuyendo también el proceso de difusión. Esta característica, se introduce a través de un factor conocido como tortuosidad τ .

$$D_{eO_2} = D_{O_2} \cdot \frac{\theta}{\tau} \quad (\text{Ec. 2.53})$$

Al igual que la porosidad del residuo carbonoso θ cambia conforme se va completando la combustión (Ec. 2.54), es posible utilizar una expresión que muestre la variación de la tortuosidad con el grado de combustión alcanzado (Backreedy, 2002) (Ec. 2.55), donde, la tortuosidad inicial del char τ_0 se suele aproximar por $\sqrt{2}$.

$$\theta = 1 - \frac{\rho}{\rho_c} \quad (\text{Ec. 2.54})$$

$$\tau = 1 + \left\{ (\tau_0 - 1) \cdot \left(\frac{m_c}{m_{c0}} \right) \right\} \quad (\text{Ec. 2.55})$$

La difusión debida a las colisiones con las paredes de los poros se denomina tipo Knudsen. Este tipo de difusión se da cuando el tamaño de los poros es del orden del recorrido libre medio de la molécula en difusión; es decir, si el radio del poro es muy pequeño, las colisiones ocurren principalmente entre las moléculas del gas y las paredes del poro, y no entre las propias moléculas. La difusividad Knudsen depende de la velocidad molecular y del radio del poro (Ec. 2.56).

$$D_{kn} = 97 \cdot r_{por} \cdot \sqrt{\frac{T_p}{PM_{O_2}}} \quad (\text{Ec. 2.56})$$

El radio promedio del poro r_p se puede obtener a través de consideraciones geométricas (Ec. 2.57), que requieren el conocimiento del área superficial activa de la partícula A_g . Ésta se puede obtener experimentalmente por medio de técnicas de absorción de CO_2 o N_2 .

$$r_{por} = 2 \cdot \theta \cdot \tau^{0.5} / A_g \cdot \rho \quad (\text{Ec. 2.57})$$

Análogamente a la difusividad molecular efectiva, la difusividad tipo Knudsen efectiva se obtiene introduciendo la porosidad y la tortuosidad del residuo carbonoso (Ec. 2.58).

$$D_{ekn} = D_{kn} \cdot \frac{\theta}{\tau} \quad (\text{Ec. 2.58})$$

Una vez definidas las generalidades del proceso de difusión, cada autor acomoda las expresiones en función del problema y de las condiciones que esté resolviendo, para reproducir de manera más realista los resultados experimentales.

Antes de pasar a describir algunos de los modelos intrínsecos más característicos (con un tratamiento macroscópico de la estructura porosa), se van a introducir brevemente los modelos microscópicos, sus características y las referencias bibliográficas más significativas. Como se acaba de ver, los modelos macroscópicos utilizan una expresión global del proceso de difusión a través de la estructura porosa de toda la partícula. Por el contrario, los modelos microscópicos intentan describir el proceso de difusión que tiene lugar a través de un único poro de la partícula. Posteriormente, a través de modelos estadísticos que describen la distribución de tamaños de poro en la partícula, extienden este comportamiento individual al resto de la partícula para predecir el proceso global de difusión. De esta manera, no se establece una difusividad isótropa en toda la partícula, sino que ésta varía con la posición y con el nivel de combustión alcanzado, ya que el tamaño de los poros varía también con la combustión (Smoot y Smith, 1985). Algunos modelos incluso incluyen los efectos de poros ciegos, coalescencia de poros, y fragmentación de la partícula. En definitiva, permiten un tratamiento mucho más detallado y real del proceso de difusión que se da en la partícula, a cambio de una mayor complejidad y coste computacional. Como ejemplos clásicos de este tipo de modelos se pueden citar los modelos de Gavalas et al. (1981), Bhatia y Perlmutter (1981), y Simons et al. (1982).

Volviendo al tratamiento macroscópico de los modelos intrínsecos, el modelo de Smith (1982) es el más extendido. Este modelo determina el coeficiente de reacción R_c según la Ec. 2.59.

$$R_c = \eta \cdot \gamma \cdot \rho \cdot A_g \cdot R_i \quad (\text{Ec. 2.59})$$

El factor de eficacia η , como se comentó con anterioridad, representa la relación entre la velocidad real de reacción y la velocidad de reacción que tendría lugar si toda la partícula estuviese expuesta a la misma concentración de oxidante que existe en la superficie (Levenspiel, 2001; Santamaría et al., 1999). En el caso de una reacción de primer orden, el factor de eficacia se puede determinar resolviendo el balance de materia para una partícula esférica de radio r_p (Ec. 2.60), obteniéndose como solución, la variación radial de la presión parcial de oxígeno en el interior de la partícula (Ec. 2.61).

$$D_{eff} \cdot \nabla^2 P_{O_2} = -q_c \cdot \rho \quad (\text{Ec. 2.60})$$

$$P_{O_2} = P_s \cdot \frac{r_p}{r} \cdot \frac{\sinh(\phi \cdot \frac{r}{r_p})}{\sinh(\phi)} \tag{Ec. 2.61}$$

Donde, ϕ es el modulo adimensional de Thiele definido por la Ec. 2.62. El modulo de Thiele puede considerarse como una medida de las velocidades relativas de los procesos de reacción y difusión. Así, un valor elevado del modulo de Thiele significa que la constante de velocidad de reacción es alta comparada con el coeficiente de difusión, lo que impide que el oxidante llegue a todas las partes de la partícula. Por el contrario, un modulo de Thiele muy bajo indica que la velocidad de reacción es baja, y por lo tanto, posibilita que el oxidante llegue por difusión a todas las zonas de la partícula (Levenspiel, 2001; Santamaría et al., 1999).

$$\phi = r_p \cdot \sqrt{\frac{k_c \cdot \rho}{D_{eff}}} \tag{Ec. 2.62}$$

Combinando la propia definición de factor de eficacia con las Ecs. 2.61 y 2.62 se llega a una expresión que relaciona el factor de eficacia y el modulo de Thiele (Ec. 2.63).

$$\eta = \frac{3}{\phi} \left[\frac{1}{\tanh(\phi)} - \frac{1}{\phi} \right] \tag{Ec. 2.63}$$

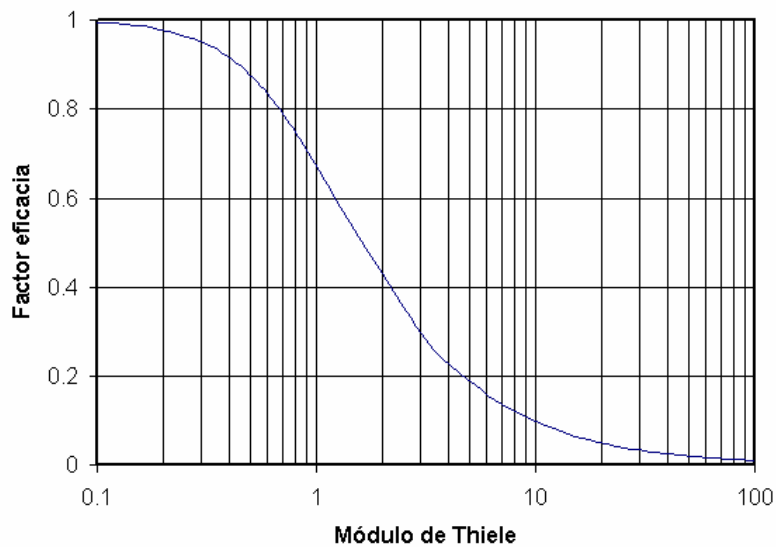


Fig. 2.13 Relación entre el modulo de Thiele y el factor de eficacia para partículas esféricas

A partir de la Figura 2.13, se puede deducir que con valores del modulo de Thiele inferiores a 0.2, el factor de eficacia está próximo a la unidad. Es decir, la partícula está expuesta a las mismas condiciones que la superficie. Mientras que valores del modulo de Thiele superiores a 30 arrojan valores del factor de eficacia próximos a cero, mostrando un perfil decreciente de la concentración de oxígeno en el interior de la partícula.

El balance de materia planteado en la Ec. 2.60 corresponde al caso más sencillo para una reacción de primer orden. En el caso de situaciones más complejas, que involucran cinéticas de orden arbitrario n , es necesario recurrir a métodos numéricos, y el resultado depende de la forma específica de la ecuación cinética.

En el caso concreto del modelo intrínseco de Smith (1978, 1982) para una reacción de orden aparente n (Ecs. 2.50 y 2.59), la relación entre el factor de eficacia y modulo de Thiele viene dada por la Ec. 2.64.

$$\eta \cdot \phi^2 \cdot (n + 1) / 2 = \gamma \cdot q_c \cdot (n + 1) / (8 \cdot D_{eff} \cdot P_s) \tag{Ec. 2.64}$$

Para resolverla, es necesario determinar experimentalmente todos los términos de la parte derecha de la ecuación, y posteriormente utilizar las gráficas de Mehta y Aris (1971) que relacionan η y $\eta\phi^2$ (Figura 2.14).

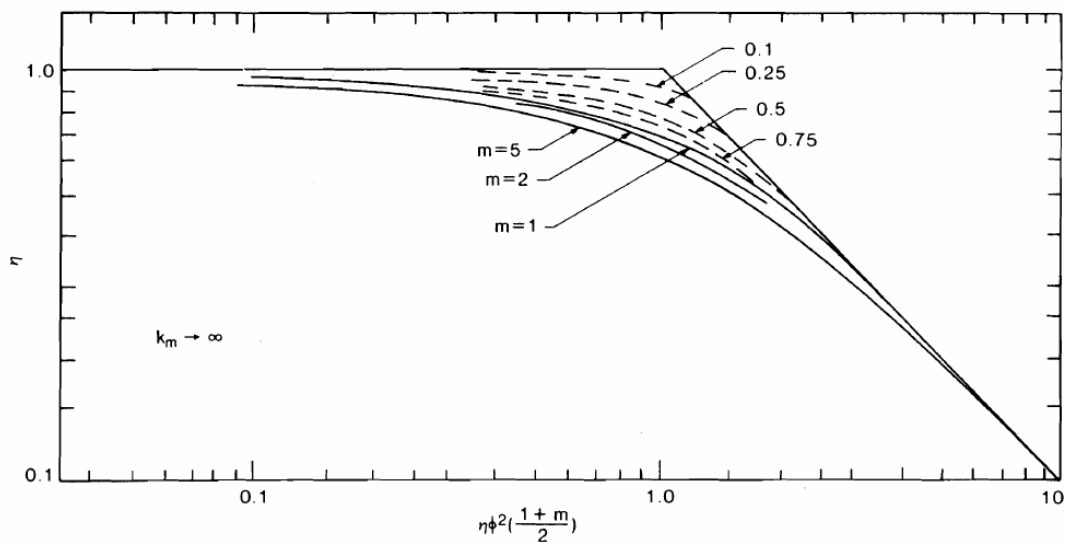


Fig. 2.14 Relación entre el modulo de Thiele y el factor de eficacia para partículas esféricas para distintos ordenes de reacción (Mehta y Aris, 1971)

El coeficiente de difusión efectiva D_{eff} , se corresponde con la difusividad molecular efectiva D_{eO_2} si el tamaño del poro es superior a $1 \mu\text{m}$ (Ec. 2.53), y con la difusividad tipo Knudsen D_{kn} si el tamaño del poro es inferior a $1 \mu\text{m}$ (Ec. 2.58).

Finalmente el coeficiente de reacción intrínseco R_i , se modela según una expresión tipo Arrhenius (Ec. 2.65).

$$R_i = A_{ai} \cdot \exp(-E_{ai}/R \cdot T) \quad (\text{Ec. 2.65})$$

De manera análoga a la evolución de los modelos globales, Sun et al. (2000) desarrollaron una versión intrínseca del modelo CBK, llamada CBK8. Este modelo contiene todos los submodelos incluidos en el modelo global pero desde una descripción intrínseca:

- Modelo simple de una película con cinética intrínseca, que incorpora un modelo macroscópico de poro sencillo para describir el proceso de difusión a través de los poros.
- Submodelo de la desactivación térmica del residuo carbonoso (Thermal annealing).
- Submodelo de mecanismo inhibidor de la ceniza en las últimas etapas de la combustión (Ash inhibition).
- Submodelo que describe las variaciones de las propiedades de la partícula (diámetro, densidad, porosidad) conforme tiene lugar la combustión.

De esta manera, el modelo permite describir el fenómeno de extinción que tiene lugar en las últimas etapas de la combustión ($> 95 \%$ de conversión), debido a la disminución de la reactividad del residuo carbonoso (Submodelo de desactivación térmica del char), y a la aparición de una capa de ceniza sobre la superficie de la partícula (Submodelo de inhibición de la ceniza). Cómo la mayor parte de los submodelos se han visto en la descripción del modelo global CBK, a continuación, nos centraremos exclusivamente en las características intrínsecas del modelo.

En el modelo CBK8 la velocidad de combustión viene determinada por la expresión general descrita en la Ec. 2.50, donde el coeficiente de reacción R_c , se calcula según la Ec. 2.66.

$$R_c = \eta \cdot k_o \cdot S \cdot e^{(-E/R T_p)} \cdot m_c \quad (\text{Ec. 2.66})$$

La dependencia del factor de eficacia con las condiciones de la reacción se establece a través del modulo de Thiele según las Ecs. 2.62 y 2.63. Un valor de η cercano a la unidad indica que la

reacción se encuentra dentro de la Zona I, en donde se observa que la velocidad global de la reacción es aproximadamente igual a la velocidad de la reacción química intrínseca. Valores de η mucho menores que la unidad indican que la reacción se encuentra dentro de la Zona II o III, donde la velocidad global de la reacción observada es mucho menor que la velocidad de reacción química intrínseca.

A su vez el coeficiente de difusión efectivo D_{eff} , se calcula considerando despreciable la contribución de los poros más pequeños al transporte del oxidante (Gale et al., 1996). De manera que solo se tiene en cuenta la contribución de la difusividad molecular efectiva según la Ec. 2.53.

Al producto $k_0 S$ se le denomina reactividad intrínseca específica, y a través de él, se introduce el proceso de desactivación térmica (Ec. 2.67).

$$k_0 \cdot S = k_0 \cdot S_0 \cdot \int_0^{\infty} f_E(E_d, t) dE_d \quad (\text{Ec. 2.67})$$

Los valores iniciales $k_0 S_0$ se calculan a partir de correlaciones dependientes de la composición del carbón (Ec. 2.68), y la distribución logarítmica f_E se obtiene, de forma análoga al modelo global, según la Ec. 2.43.

$$\text{Log}_{10}(k_0 \cdot S_0) = 14,97 - 0,0764 \cdot \%C \quad (\text{Ec. 2.68})$$

Otro modelo de gran interés fue desarrollado por Hampartsoumian et al. (1989), a partir del estudio de la influencia de la composición maceral del carbón sobre el proceso global de combustión. La expresión del coeficiente de reacción R_c , obtenida por técnicas de regresión múltiple sobre las propiedades estructurales de interés, incluye un término adicional f_{mac} , que introduce la influencia de la composición maceral sobre la reactividad en carbones con alto contenido en inertinita, ya que ésta se consume más lentamente que la vitrinita (Unsworth et al., 1991).

$$R_c = \exp^{(-89)} \cdot \rho^{(-7.5)} \cdot A_g^{(-0.5)} \cdot \%C^{(3.5)} \cdot T_p^{(9.5)} + f_{mac} \quad (\text{Ec. 2.69})$$

Donde el factor de corrección maceral se describe en función del contenido en vitrinita e inertinita del carbón original según la Ec. 2.70.

$$f_{mac} = [1.4 \cdot (Vit_M + 0.83 \cdot Vit_{PS})] - [0.6 \cdot (In_R + 1.6 \cdot In_{LR})] \quad (\text{Ec. 2.70})$$

Para finalizar esta revisión, se cita el modelo desarrollado por Backreedy et al. (2006), que utilizando una descripción alternativa al modelo CBK8, introduce expresiones del análisis maceral del carbón al modelo. El coeficiente de reacción R_c se expresa según la siguiente ecuación.

$$R_c = (\alpha_D \cdot A_g) \cdot f_{ann} \cdot R_i \cdot m_c \cdot \eta \cdot f_{mac} \quad (\text{Ec. 2.71})$$

En esta expresión, el producto $(\alpha_D A_g)$ calcula la variación del área superficial específica interna en función del grado de combustión, a través de un parámetro α_D (Ec. 2.72), determinado a partir de estudios experimentales.

$$\alpha_D = 0.3 \cdot \left(-28.44 \cdot \left(\frac{m_c}{m_{c0}} \right)^4 + 85.33 \cdot \left(\frac{m_c}{m_{c0}} \right)^3 - 85.33 \cdot \left(\frac{m_c}{m_{c0}} \right)^2 + 28.44 \cdot \left(\frac{m_c}{m_{c0}} \right) + 1 \right) \quad (\text{Ec. 2.72})$$

El proceso de desactivación térmica, con el objeto de disminuir el coste computacional, se introduce de manera abreviada a través del factor f_{ann} . Este factor toma el valor de 0.9 en caso de que $(70 \% < \%wt C (daf) < 90 \%)$, $(20 \mu\text{m} < d_p < 100 \mu\text{m})$ y $(T_p > 1400 \text{ K})$.

El factor de eficacia, considerando una ecuación de reacción de primer orden, se calcula según las Ecs. 2.62 y 2.63.

Y finalmente, para carbones con alto contenido en inertinita, se introduce el factor de corrección maceral expresado en la Ec. 2.70, o bien un factor de corrección maceral abreviado, cuando no se dispone de la composición maceral completa del carbón (Ec. 2.73)

$$f_{mac} = 1.68 \cdot Vit - 0.6 \cdot In \quad (\text{Ec. 2.73})$$

Como se comentó en la introducción de este capítulo, existen muchos más modelos globales e intrínsecos en la bibliografía que han quedado fuera de esta breve revisión (Charpenay et al., 1992; Cloke et al., 2003; Pallarés et al., 2007), pero cuyas referencias se pueden encontrar en la bibliografía.

2.4 Resumen

La investigación de la combustión del carbón requiere entender los fenómenos físicos y químicos que tienen lugar durante el proceso, y desarrollar modelos matemáticos que los describan. La combustión del carbón tiene lugar en tres etapas diferenciadas, aunque en general existe una superposición de las mismas. Estas etapas son: la devolatilización, la combustión de los productos volátiles y la oxidación del residuo carbonoso. Aunque no se incluyen propiamente como etapas de la combustión, los procesos de calentamiento e ignición de la partícula, resultan de gran importancia para entender todo el proceso. A lo largo del capítulo, en cada sección se ha analizado individualmente la parte del proceso de combustión que tiene lugar en cada una de las etapas, y los modelos que la describen.

El proceso de devolatilización, pese a ser un proceso muy rápido, tiene una gran influencia en la combustión global de la partícula. Las condiciones a las que transcurre, influyen notablemente en la cantidad final de volátiles liberados, y por lo tanto, en el residuo carbonoso resultante, y en sus propiedades estructurales y reactivas. Para describir este proceso de descomposición térmica, habitualmente se recurre a modelos de pérdida de peso basados en aproximaciones empíricas (SFOR, DAEM, 2CSM). Sin embargo, estos modelos son demasiado sencillos, y no describen adecuadamente la formación de tar y char. Por lo tanto, en aplicaciones en las que se requiere un estudio detallado del proceso de devolatilización, se recurre a modelos basados en aproximaciones mecanicistas de la estructura del carbón (FG-DVC, CPD, FLASH-CHAIN).

La siguiente etapa consiste en la combustión homogénea de los productos volátiles liberados. Ésta proporciona el calor necesario para la ignición de la partícula, y determina la temperatura y la estequiometría, de gran importancia en la formación de NO_x . Para describir esta etapa se suelen considerar dos aproximaciones: equilibrio local y reacciones globales.

Por último, la oxidación del residuo carbonoso es la etapa más lenta de todo el proceso de combustión, y por lo tanto, la que condiciona la eficiencia de la combustión alcanzada. Atendiendo a la consideración implícita o explícita de las propiedades estructurales internas de la partícula, los modelos de oxidación del residuo carbonoso se dividen respectivamente en modelos globales e intrínsecos. Los modelos globales, se basan en un modelo de una película, en el que la velocidad global de combustión está limitada por la difusión del oxidante hasta la superficie de la partícula, y por la velocidad de reacción de éste con el carbono, internalizando los efectos intrínsecos de la partícula dentro de las constantes cinéticas de reacción. Los modelos intrínsecos, por el contrario, relacionan directamente la velocidad de combustión con variables que describen la estructura interna de la partícula (área superficial, porosidad,

reactividad intrínseca, etc.) y su efecto en el proceso de oxidación. Tanto considerando una aproximación como la otra, los primeros modelos (Field en el caso de los modelos globales y Smith en el caso de los modelos intrínsecos) son ampliamente utilizados en los códigos de combustión, y sirven de base para el desarrollo de modelos más detallados, añadiendo por ejemplo, mecanismos de reacción más complejos (Hurt et al., 2001), modelos de poro (Gavalas et al., 1981), efectos de desactivación térmica (Hurt et al., 1998, 2000), efectos de la ceniza (Hurt et al., 1998, Hampartsoumian et al., 1989), efecto de la composición maceral del carbón (Backreedy et al., 2003,2006; Cloke et al., 2003), etc. De esta manera, en la bibliografía se encuentra una gran variedad de modelos que permiten elegir entre uno u otro, en función de las necesidades concretas del estudio que se lleve a cabo.

Nomenclatura

A_a	factor preexponencial (g C/cm ² s)
A_{ai}	factor preexponencial intrínseco (g C/cm ² s atm ⁿ)
A_d	factor preexponencial proceso de desactivación térmica
A_i	factor preexponencial de la cinética de reacción (g C/cm ² s atm ⁿ)
A_g	área superficial intrínseca de la partícula (cm ²)
A_v	factor preexponencial proceso de devolatilización (s ⁻¹)
A_0	factor preexponencial inicial de la cinética de reacción (g C/cm ² s atm ⁿ)
d_c	diámetro del núcleo de la partícula de char (cm)
d_p	diámetro de la partícula de char (cm)
D_{eff}	coeficiente de difusión efectivo (cm ² /s)
D_{ekn}	coeficiente de difusión efectivo tipo Knudsen (cm ² /s)
D_{kn}	coeficiente de difusión tipo Knudsen (cm ² /s)
D_{eO_2}	coeficiente de difusión molecular efectivo del O ₂ en N ₂ (cm ² /s)
D_{O_2}	coeficiente de difusión molecular del O ₂ en N ₂ (cm ² /s)
D_0	coeficiente de difusión molecular de referencia del O ₂ en N ₂ (cm ² /s)
E	energía de activación (J/mol)
E_a	energía de activación (J/mol)
E_{ai}	energía de activación intrínseca (J/mol)
E_{ads}	energía de activación proceso de adsorción (J/mol)
E_{ap}	energía de activación aparente (J/mol)
E_d	energía de activación proceso de desactivación térmica (kJ/mol)
E_{des}	energía de activación proceso de desorción (J/mol)
E_{O_2}	energía de activación reacción compleja oxígeno (J/mol)
E_{vT}	temperatura de activación proceso de devolatilización (K)
f_{ann}	factor de desactivación térmica
$f_E(E_d)$	función de distribución estadística de energías de activación proceso desactivación térmica
$f_E(E_v)$	función de distribución estadística de energías de activación proceso devolatilización
f_{mac}	factor maceral de corrección
In	inertinita
In_{LR}	fusinita
In_R	semi-fusinita
k_c	constante cinética de reacción (g C/cm ² s atm ⁿ)
k_d	constante de cinética de difusión (g C/cm ² s atm)

k_o	factor preexponencial ($\text{g C/cm}^2 \text{ s atm}^n$)
k_v	constante cinética de la reacción (s^{-1})
k_{0S}	reactividad intrínseca específica ($1/\text{s atm}^n$)
m	orden de reacción verdadero
m_c	masa de carbono en la partícula de char (g C)
m_{c0}	masa inicial de carbono en la partícula de char (g C)
m_p	masa de la partícula de char (g)
m_{p0}	masa inicial de la partícula de char (g)
n	orden de reacción aparente
N	sitios activos en el área superficial del char
N_0	sitios inicialmente activos en el área superficial del char
P_{boiler}	presión en el hogar (Pa)
P_g	presión parcial del oxidante en la fase gas (atm)
P_{O_2}	presión parcial del oxidante (atm)
P_s	presión parcial de oxidante en la superficie de la partícula (atm)
PM_{O_2}	peso molecular del O_2 (32 g/mol)
PM_{N_2}	peso molecular del N_2 (28 g/mol)
q_c	velocidad de combustión ($\text{g C/cm}^2 \text{ s}$)
r_p	radio partícula de char (cm)
r_{por}	radio promedio de poro (cm)
R	constante universal de gas ideal (8.3145 J/mol K)
R_c	coeficiente de reacción ($\text{g C/cm}^2 \text{ s atm}^n$)
R_i	coeficiente de reacción intrínseco ($\text{g C/cm}^2 \text{ s atm}^n$)
Sh	número adimensional de Sherwood ($Sh = k_m L_c / D$)
t	tiempo (s)
T	temperatura (K)
T_g	temperatura en la fase gas (K)
T_m	temperatura media (K)
T_p	temperatura partícula (K)
T^*	temperatura adimensional
V	fracción instantánea de volátiles liberados
V_f	fracción final de volátiles liberados
V_{it}	vitritina y pseudo-vitritina
V_{itM}	vitritina
V_{itPS}	pseudo-vitritina
X_a	fracción másica de ceniza

X_{a0}	fracción másica inicial de ceniza
%C	% en peso de carbono en el análisis elemental en base seca y sin cenizas
α	factor de combustión (0.2)
α_D	factor de desactivación
γ	tamaño característico de la partícula (cm)
δ	espesor de la capa de ceniza (cm)
δ_m	espesor mínimo de la capa de ceniza (cm)
Ω_d	coeficiente adimensional de colisión entre moléculas
φ	coeficiente estequiométrico
ϕ	modulo de Thiele
η	factor de efectividad
θ_{af}	porosidad de la capa de ceniza
θ	porosidad de la partícula
ρ	densidad de la partícula de char (g/cm^3)
ρ_{at}	densidad de la ceniza (g/cm^3)
ρ_c	densidad del carbono (g/cm^3)
ρ_{c0}	densidad inicial del carbono (g/cm^3)
ρ_0	densidad inicial de la partícula de char (g/cm^3)
τ	tortuosidad
τ_0	tortuosidad inicial ($\sqrt{2}$)
σ	desviación estándar
σ_d	desviación típica proceso de desactivación térmica (kJ/mol)
σ_{O_2}	diámetro molécula aproximada de O_2 (Å)
σ_{N_2}	diámetro molécula aproximada de N_2 (Å)
ω	coeficiente de distribución

Acrónimos

CBK	carbon burnout kinetic
CFD	computational fluid dynamics
DAEM	distributed activation energy models
FG-DVC	functional group depolymerization vaporization cross-linking
FIMS	field-ionization mass spectroscopy

NMR	nuclear magnetic resonance
2CSM	two-competing step model
SFOR	single first order reaction
TG-FTIR	thermo-gravimetric Fourier transform infrared spectroscopy

3 **MODELOS CFD**

Tradicionalmente, los experimentos han constituido el medio más extendido y eficiente para medir los parámetros globales que permiten describir un campo fluido. Sin embargo, la continua demanda tecnológica de diseños más especializados, requiere descripciones cada vez más precisas de la fluidodinámica del problema. Llevar a cabo esta labor por la vía puramente experimental resulta económicamente caro, y necesita una inversión elevada de tiempo y de trabajo. En este sentido la fluidodinámica computacional (CFD) ofrece un complemento atractivo a los métodos experimentales, procurando un ahorro importante de tiempo y dinero, permitiendo obtener resultados, si bien no completamente realistas siempre, al menos de gran utilidad a menudo.

Los conceptos básicos de los métodos numéricos de resolución de ecuaciones diferenciales se establecieron hace más de un siglo. No obstante, su aplicación fue mínima hasta la aparición de los primeros ordenadores en la década de 1950. A partir de ese momento, las posibilidades de cálculo ofrecidas por estas máquinas despertaron de nuevo, un interés por los métodos numéricos para la resolución de todo tipo de problemas físicos. Así, paralelamente al desarrollo de nuevos ordenadores con mayor capacidad de computación y almacenamiento, se fue ampliando el número de problemas abordables desde un punto de vista numérico. Cuando esta corriente alcanzó el estudio de la dinámica de fluidos, tuvo tal aceptación y desarrollo, que no tardó en dar lugar a un nuevo campo de estudio independiente, denominado fluidodinámica computacional (CFD).

Aunque al principio, la fluidodinámica computacional estuvo limitada al campo de la investigación, de nuevo gracias a la rápida evolución de los ordenadores, no tardó en dar el salto a la industria, donde hoy en día, constituye una herramienta habitual de predicción y/o diseño. Para absorber esta demanda tecnológica, en el mercado compiten muchos paquetes comerciales de CFD. Entre ellos podemos destacar FLUENT, CFX o StarCD, por ser los más extendidos tanto en industrias como en instituciones de investigación.

En este trabajo de tesis se ha utilizado el código comercial CFX-4 (AEA Technology). A lo largo del capítulo, se lleva a cabo la descripción de las características de este paquete comercial, particularizando la exposición, para el problema de la combustión de carbón pulverizado en una caldera de potencia. Para ello, el capítulo se divide en una serie de subcapítulos que abarcan:

- La descripción del método de resolución numérica de los volúmenes finitos: discretización del dominio y de las ecuaciones de transporte que gobiernan el problema.
- La descripción de los modelos matemáticos involucrados en el problema.
- La descripción de las condiciones de contorno del problema.
- La validación del método numérico.

3.1 Método de resolución numérica

La descripción de flujos se lleva a cabo por medio de ecuaciones diferenciales que, en general, no se pueden resolver analíticamente. De manera que para obtener una solución numérica aproximada, deberemos utilizar un método de discretización que aproxime las ecuaciones diferenciales por un sistema algebraico de ecuaciones (Ferziger y Peric, 2002).

El campo fluido se discretiza en un conjunto de celdas no superpuestas que cubren el total del dominio (Dick, 2002). Las ecuaciones de conservación se aplican para determinar las variables del fluido en puntos discretos de las celdas, denominados nodos. Los nodos pueden definirse bien en los vértices o en el centro de la celda. CFX-4 define los nodos en el centro de las celdas (Figura 3.1, nodo P). Por lo tanto, el conjunto de nodos en los que se calculan las variables, quedan definidos por la malla de celdas, que es esencialmente una representación del dominio geométrico en el que se va a resolver el problema.

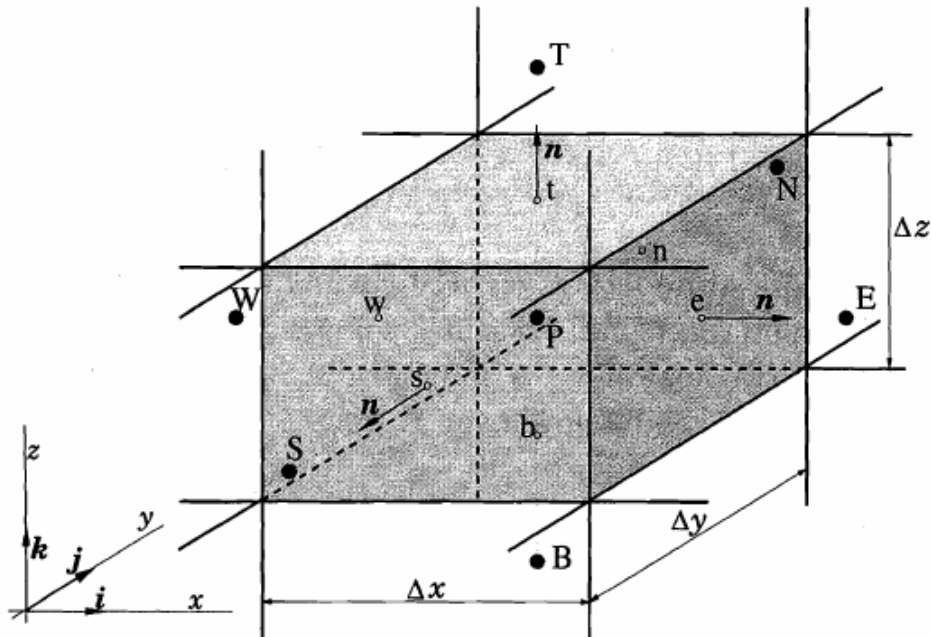


Fig. 3.1 Celda de volumen fluido típica utilizada en el MVF (Ferziger y Peric, 2002)

La generación de la malla es un proceso generalmente largo y costoso, y suele consumir la mayor parte del tiempo de la resolución de un problema, ya que la precisión de la solución depende de la calidad de la malla y de las aproximaciones utilizadas para la discretización de las ecuaciones. Existen distintos tipos de mallas clasificadas en función de la disposición de las celdas en su interior: estructuradas, no estructuradas e híbridas. Una malla estructurada consiste en una familia de curvas con la propiedad de que las curvas de una familia no se cruzan entre sí; y se cruzan con las de otras familias una única vez. Es el tipo de mallas más sencillo, equivalente a una malla cartesiana, donde cada nodo (Figura 3.1, nodo P) tiene seis vecinos correspondientes a los de las celdas adyacentes (Figura 3.1, nodos B, T, E, W, S, N). Este tipo de conectividad simplifica la programación, y la matriz del sistema algebraico de ecuaciones tiene una estructura regular, con lo que existen muchas técnicas eficientes de cálculo para resolver el problema. La desventaja de este tipo de mallado es que se pueden utilizar únicamente cuando se tienen dominios geoméricamente sencillos. El otro problema es que resulta difícil controlar la distribución de puntos en la malla, ya que la concentración de puntos, para obtener una solución más precisa en una zona del mallado, produce que en otras partes del dominio se tenga una malla también fina, desperdiciando recursos computacionales y pudiendo afectar a la convergencia del problema (Ferziger y Peric, 2002). Las mallas no estructuradas son mucho más flexibles que las estructuradas, y se utilizan en geometrías muy complicadas. En este caso, las celdas pueden tener cualquier forma, ya que no existen restricciones en el número de nodos o elementos adyacentes. La ventaja de la flexibilidad que ofrece este método, se contrarresta con la desventaja de la irregularidad del mallado. La matriz del sistema algebraico de

ecuaciones no es diagonal, y por lo tanto, la resolución es mucho más lenta que en las anteriores (Ferziger y Peric, 2002).

Como se verá en el siguiente capítulo, la malla utilizada en este trabajo para la representación de la geometría del hogar de la caldera es del tipo estructurada. Sin embargo, CFX-4 implementa un tipo especial de mallas estructuradas denominada malla ajustada al dominio, que permite la introducción de geometrías complicadas. De esta manera, se deforma la malla siguiendo los contornos del dominio. Al mismo tiempo, y para la resolución de las ecuaciones de transporte, se lleva a cabo una transformación del campo físico cartesiano en un campo computacional de coordenadas curvilíneas no ortogonales. Con este cambio, aumenta la complejidad en la resolución de las ecuaciones de transporte, pero se facilita la introducción de las condiciones de contorno.

El método de volúmenes finitos (MVF) utiliza la forma integral de las ecuaciones de conservación como punto de partida. Estas ecuaciones de conservación, se aplican en cada una de las celdas del dominio para calcular todas las variables en los nodos de la malla numérica. La forma general de todas las ecuaciones de conservación, salvo la ecuación de continuidad, tiene la estructura de la Ec. 3.1. Esta ecuación expresa que la variación temporal de una propiedad genérica ϕ dentro del volumen de control es igual al aporte neto debido a los flujos difusivos y convectivos a través de las superficies, más la generación o destrucción interna representada por el término fuente S_ϕ .

$$\int_V \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} \cdot dV + \int_A \rho \phi \vec{v} \cdot \vec{n} \, dA = \int_A \Gamma \nabla \phi \cdot \vec{n} \, dA + \int_V \bar{S}_\phi \cdot dV \quad (\text{Ec. 3.1})$$

Las integrales de volumen y superficie, se aproximan utilizando formulas de cuadratura adecuadas. Así, se obtiene una ecuación algebraica para cada volumen de control, en función de los valores de los nodos de las celdas vecinas. A continuación, se presenta la aproximación numérica de los términos que aparecen en la Ec. 3.1:

- Discretización de las integrales de superficie: El flujo neto a través de las fronteras del volumen de control es la suma de las integrales a través de las seis caras de la celda.

$$\int_{A_i} f \cdot \vec{n}_i \, dA_i = \sum_{i=1}^{n_c} \int_{A_i} f \cdot \vec{n}_i \, dA_i \quad (\text{Ec. 3.2})$$

Donde, f es la componente convectiva ($f_c = \rho\phi v \cdot n$) o difusiva ($f_d = \Gamma \nabla \phi \cdot n$) del vector de flujo en la dirección normal a la cara del volumen de control.

Para calcular de manera exacta la integral de la Ec. 3.2, se necesita conocer el integrando f en cada lugar de cada superficie A_e (cara e de la celda). Esta información no es conocida, ya que solo se tienen los valores en el centro del volumen fluido; de manera que el integrando se aproxima por el valor promedio en el centro de la cara (Ec. 3.3).

$$F_e = \int_{A_e} f \cdot \bar{n}_e dA_e = \bar{f}_e \cdot A_e \approx f_e \cdot A_e \quad (\text{Ec. 3.3})$$

Como el valor de f en el centro de la cara e tampoco es conocido, se obtiene interpolando a partir de los valores en los nodos de las celdas vecinas. Para llevar a cabo este tipo de aproximaciones, existen muchos algoritmos de distinto orden de precisión. En general, los algoritmos de discretización de primer orden son los más robustos, pero introducen errores numéricos importantes. Por ello, suelen utilizarse para obtener una primera aproximación a la solución del problema, pero luego es recomendable utilizar algoritmos de mayor orden de precisión para obtener la solución definitiva. CFX-4 permite utilizar distintos algoritmos: upwind (UDS), diferencias centrales (CDS), upwind de segundo orden (HUW), upwind de tercer orden (QUICK).

- Discretización de las integrales de volumen: Algunos términos de la ecuación de transporte requieren una integración sobre el volumen de la celda. La aproximación de segundo orden más sencilla, consiste en reemplazar la integral de volumen por el producto del valor promedio del integrando y el volumen de la celda, y aproximar el valor promedio del integrando por el valor en el centro de la celda (Ec. 3.4).

$$Q_p = \int_V \phi_p \cdot dV = \bar{\phi}_p \cdot V \quad (\text{Ec. 3.4})$$

Donde, el promedio de ϕ_p es el valor en el centro de la celda. Esta cantidad se calcula fácilmente ya que todas las variables están definidas en el nodo P y no es necesario interpolar.

Así pues, para obtener la discretización de la Ec. 3.1, se aproximan las integrales sobre las superficies del volumen de control como la suma de las integrales para cada una de las caras de éste, y las integrales de volumen como el producto de la variable solución promediada para todo el volumen y el propio volumen.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\bar{\phi}V) + \sum_{i=1}^{n_c} \int_{A_i} \rho\bar{\phi}\bar{v} \cdot \bar{n}_i dA_i = \sum_{i=1}^{n_c} \int_{A_i} \Gamma \nabla \phi \cdot \bar{n}_i dA_i + \bar{S}_\phi \cdot V \quad (\text{Ec. 3.5})$$

En las Ecs. 3.1 y 3.5, se ha expresado la forma general de una ecuación de conservación. No obstante, en la ecuación de conservación de la cantidad de movimiento, existe una contribución de la presión que exige un tratamiento especial como se ve a continuación.

El término convectivo es no lineal y se puede resolver de igual manera a como se ha descrito con anterioridad (Ec. 3.6). Por su parte, el término difusivo introduce un tensor de esfuerzos τ_{ij} (Ec. 3.7) que se descompone en las fuerzas asociadas a la presión y las asociadas a los esfuerzos viscosos (Ec. 3.8).

$$\int_A \rho\bar{\phi}\bar{v} \cdot \bar{n} dA = \int_A \rho\bar{v}\bar{v} \cdot \bar{n} dA \quad (\text{Ec. 3.6})$$

$$\int_A \Gamma \nabla \phi \cdot \bar{n} dA = \int_A \bar{\tau}_{ij} \cdot \bar{n} dA \quad (\text{Ec. 3.7})$$

$$\bar{\tau}_{ij} = -p \cdot \delta_{ij} + \bar{\tau}'_{ij} \quad (\text{Ec. 3.8})$$

Donde, la ley de Navier-Poisson establece que los esfuerzos viscosos τ'_{ij} son proporcionales a las componentes del tensor de deformación (Ec. 3.9).

$$\bar{\tau}'_{ij} = \mu \cdot \nabla v_i + \lambda \cdot \nabla \bar{v} \cdot \delta_{ij} \quad (\text{Ec. 3.9})$$

De esta manera, se puede reescribir el término difusivo según la Ec. 3.10.

$$\int_A \Gamma \bar{\nabla} \phi \cdot \bar{n} dA = \int_A (\mu \cdot \nabla v_i + \lambda \cdot \nabla \bar{v} \cdot \delta_{ij}) \cdot \bar{n} dA + \int_A (-p \cdot \delta_{ij}) \cdot \bar{n} dA \quad (\text{Ec. 3.10})$$

Y discretizarlo como se ha explicado con anterioridad, según la Ec. 3.11.

$$\sum_{l=1}^{n_c} \int_{A_l} \Gamma \bar{\nabla} \phi \cdot \bar{n} dA = \sum_{l=1}^{n_c} \int_{A_l} (\mu \cdot \nabla v_i + \lambda \cdot \nabla \bar{v} \cdot \delta_{ij}) \cdot \bar{n} dA + \sum_{l=1}^{n_c} \int_{A_l} (-p \cdot \delta_{ij}) \cdot \bar{n} dA_i \quad (\text{Ec. 3.11})$$

La resolución de las ecuaciones de Navier-Stokes es complicada porque no existe una ecuación independiente para la presión, y además, su gradiente contribuye en cada una de las ecuaciones de cantidad de movimiento. De manera que, es necesario solucionar el acoplamiento presión-velocidad. Para ello se parte de la ecuación de continuidad (Ec. 3.12) y de las ecuaciones de cantidad de movimiento correspondientes a las tres componentes de la velocidad (Ec. 3.13).

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\int_V \rho \cdot dV \right) + \int_A \rho \bar{v} \cdot \bar{n} dA = 0 \quad (\text{Ec. 3.12})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \bar{v} \cdot dV + \int_A \rho \bar{v} \bar{v} \cdot \bar{n} dA = \int_A (-p \cdot \delta_{ij} + \bar{\tau}'_{ij}) \cdot \bar{n} dA + \int_V \rho \cdot \bar{f}_v \cdot dV \quad (\text{Ec. 3.13})$$

Expresadas en forma diferencial, las Ecs. 3.12 y 3.13, se convierten en las Ecs. 3.14 y 3.15.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \cdot \bar{v}) = 0 \quad (\text{Ec. 3.14})$$

$$\frac{\partial(\rho \bar{v})}{\partial t} + \text{div}(\rho \cdot \bar{v} \cdot \bar{v}) = \text{div}(-p \cdot \delta_{ij} + \bar{\tau}'_{ij}) + \rho \cdot \bar{f}_v \quad (\text{Ec. 3.15})$$

Aplicando la divergencia a la ecuación de cantidad de movimiento, y simplificando a partir de la ecuación de continuidad, se llega a una expresión de Poisson para la presión (Ec. 3.16), que relaciona el campo de velocidades y el de presiones.

$$\text{div}(\text{grad } p) = -\text{div} \left[\text{div}(\rho \cdot \bar{v} \cdot \bar{v} - \bar{\tau}'_{ij}) - \rho \cdot \bar{f}_v + \frac{\partial(\rho \bar{v})}{\partial t} \right] \quad (\text{Ec. 3.16})$$

Para resolver numéricamente esta expresión se recurre a métodos numéricos implícitos o explícitos. Estos métodos usan una ecuación de corrección de la presión, para forzar la conservación de la masa en cada iteración. Los métodos implícitos son los más utilizados para flujos estacionarios (SIMPLE, SIMPLEC, y PISO).

Para resolver el acoplamiento velocidad-presión, CFX-4 resuelve secuencialmente las ecuaciones de cantidad de movimiento, siendo incógnitas únicamente las velocidades u_i^{m*} expresadas en función de la velocidad en los nodos adyacentes, y de la presión en el instante anterior p^{m-1} . Por lo tanto, las velocidades obtenidas no satisfacen la ecuación de continuidad, dando lugar a un desequilibrio en el balance de masa. Para forzar la continuidad, se corrigen las

velocidades (Ec. 3.17), aunque para ello, también se requiere modificar el campo de presiones (Ec. 3.18). A partir de una expresión discreta de la ecuación de Poisson para la presión, se obtiene la corrección de la presión p' ; de manera que es posible calcular los valores de velocidades u_i^m y presión p^m que satisfacen la ecuación de continuidad, pero que en principio, no satisfacen las ecuaciones de cantidad de movimiento. Así se inicia un proceso iterativo hasta que las velocidades satisfagan ambas ecuaciones.

$$u_i^m = u_i^{m*} + u' \quad (\text{Ec. 3.17})$$

$$p^m = p^{m-1} + p' \quad (\text{Ec. 3.18})$$

Donde, u_i^m es el valor de la componente de velocidad i en la iteración m , u_i^{m*} es el valor de la componente de velocidad i en la iteración m , obtenida de la resolución de las ecuaciones de cantidad de movimiento, y u' la corrección que deberemos aplicar a la velocidad. Y p^m la presión en la iteración m , p^{m-1} la presión en la iteración anterior, y p' la corrección que deberemos aplicar a la presión.

Según como se traten los términos en la ecuación de corrección de la presión, se obtienen distintos métodos: SIMPLE, SIMPLEC, PISO.

Una vez establecida la discretización de las ecuaciones de transporte y el tratamiento del acoplamiento presión-velocidad para la resolución de las ecuaciones de Navier Stokes, en la Figura 3.2 se describe el esquema global del método numérico de resolución llevado a cabo por el código CFX.

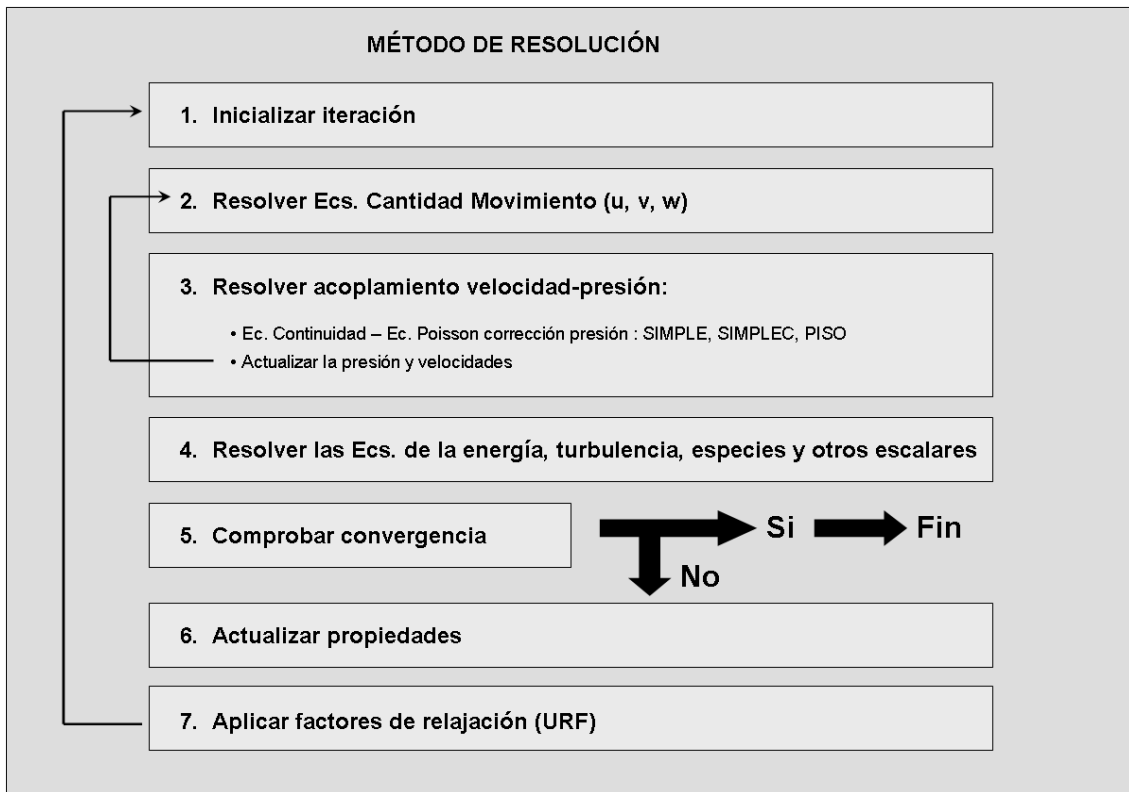


Fig. 3.2 Método de resolución de volúmenes finitos

3.2 Modelos matemáticos

Resolver el problema de la combustión de carbón pulverizado en una caldera, implica la simulación de todos los procesos que tienen lugar en el hogar:

1. Modelo de turbulencia
2. Modelo de transporte de partículas
3. Modelo de combustión del carbón
4. Modelo de combustión de los productos volátiles
5. Modelo de radiación

A continuación se detallan estos modelos, particularizando su aplicación al caso de estudio de este trabajo de tesis.

1. Modelo de turbulencia (Launder y Spalding, 1974)

Para modelar la fase gas –continua– se adopta una aproximación euleriana, resolviendo numéricamente las ecuaciones promediadas de Navier Stokes (RANS) a lo largo del dominio.

Éstas se pueden resumir como sigue:

- Ecuación de continuidad

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_j} = 0 \quad (\text{Ec. 3.19})$$

- Ecuación de conservación de la cantidad de movimiento

$$\rho \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \rho u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial p'}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left((\mu + \mu_T) \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right) + S_M \quad (\text{Ec. 3.20})$$

- Ecuación conservación de la energía

$$\rho \frac{\partial h_T}{\partial t} + \rho u_j \frac{\partial h_T}{\partial x_j} = \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\frac{\lambda}{C_P} + \frac{\mu_T}{\sigma_H} \right) \frac{\partial h_T}{\partial x_j} \right) + S_R \quad (\text{Ec. 3.21})$$

- Ecuación conservación de la especie química

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} + \rho u_j \frac{\partial Y_i}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\rho D_i + \frac{\mu_T}{\sigma_i} \right) \frac{\partial Y_i}{\partial x_j} \right) + S_i \quad (\text{Ec. 3.22})$$

Se omite una explicación más detallada de las ecuaciones promediadas de Navier Stokes, al considerar su comportamiento ampliamente descrito en cualquier texto de mecánica de fluidos (p.ej. Pope, 2000).

Para el cierre de la turbulencia se ha utilizado el modelo de segundo orden $k - \varepsilon$ estándar (Launder y Spalding, 1974), que resuelve dos ecuaciones adicionales de transporte, una para la energía cinética turbulenta k (Ec. 3.23) y otra para la disipación viscosa ε (Ec. 3.24):

- Ecuación de transporte de la energía cinética turbulenta

$$\rho \frac{\partial k}{\partial t} + \rho u_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \varepsilon + G \quad (\text{Ec. 3.23})$$

- Ecuación de transporte de la disipación viscosa

$$\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} + \rho u_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) + C_1 \frac{\varepsilon}{k} \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - C_2 \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (\text{Ec. 3.24})$$

La definición de la viscosidad turbulenta y los coeficientes de cierre necesarios para completar el problema son:

$$\begin{aligned} \mu_T &= C_\mu k^2 / \varepsilon & C_\mu &= 0,09 & C_l &= 1,44 \\ C_2 &= 1,92 & \sigma_k &= 1 & \sigma_\varepsilon &= 1,3 \end{aligned}$$

En todas las ecuaciones anteriores se observa que la densidad se ha extraído de las derivadas parciales, como una constante. Se ha optado por utilizar el modelo “débilmente compresible”, cuyo comportamiento es análogo al incompresible, y cuya aproximación es particularmente apropiada, para flujos con $Ma < 0.3$, cuando las variaciones de temperatura son considerables para establecer la hipótesis de flujo incompresible. Las hipótesis del modelo “débilmente compresible” son (CFX-4):

- Se ignoran las fluctuaciones de presión

$$p' = p + \frac{2}{3} \rho \cdot k + \left(\frac{2}{3} \mu_{eff} - \mu_v \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \cong p \quad (\text{Ec. 3.25})$$

- Se ignora el término cinético de la entalpía total

$$h_T = h + \frac{1}{2} u_i^2 + k \cong h \quad (\text{Ec. 3.26})$$

Así resulta $\rho = \rho(T)$, y se calcula a través de la ecuación de estado $\rho = \frac{P_0 \cdot PM}{R \cdot T}$.

Para completar el modelo de turbulencia, es preciso calcular el comportamiento del fluido en las cercanías de las paredes. En las zonas cercanas a la pared, muchas de las variables cambian rápidamente, y se necesitarían mallados extremadamente finos para resolver estas variaciones. En lugar de esto, es posible utilizar funciones de pared, que son fórmulas semiempíricas que

enlazan la solución de las variables en la zona cercana a la pared. Existen leyes de pared para la velocidad media, la temperatura y otros escalares (Wilcox, 1998).

- Ley de pared para la velocidad media:

A través de experimentos se ha demostrado que la variación del esfuerzo viscoso en las cercanías de la pared es muy pequeña, así que se puede aproximar por medio del esfuerzo cortante en la pared τ_w . Definiendo una velocidad de escala, conocida como velocidad de

fricción $u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}}$ (Wilcox, 1998); se describen dos variables adimensionales:

$$u^+ = \frac{u}{u_\tau} \quad \text{y} \quad y^+ = \frac{(\rho \cdot \tau_w)^{1/2}}{\mu} y \quad (\text{Ecs. 3.27 y 3.28})$$

A partir de estas variables adimensionales, los perfiles que se obtienen en la cercanía de la pared vienen dados por las Ecs. 3.29 y 3.30 (Figura 3.3).

$$u^+ = y^+ \quad \text{si } y^+ < y_0^+ \quad (\text{Ec. 3.29})$$

$$u^+ = \frac{1}{\kappa} \ln(E^+ \cdot y^+) \quad \text{si } y^+ > y_0^+ \quad (\text{Ec. 3.30})$$

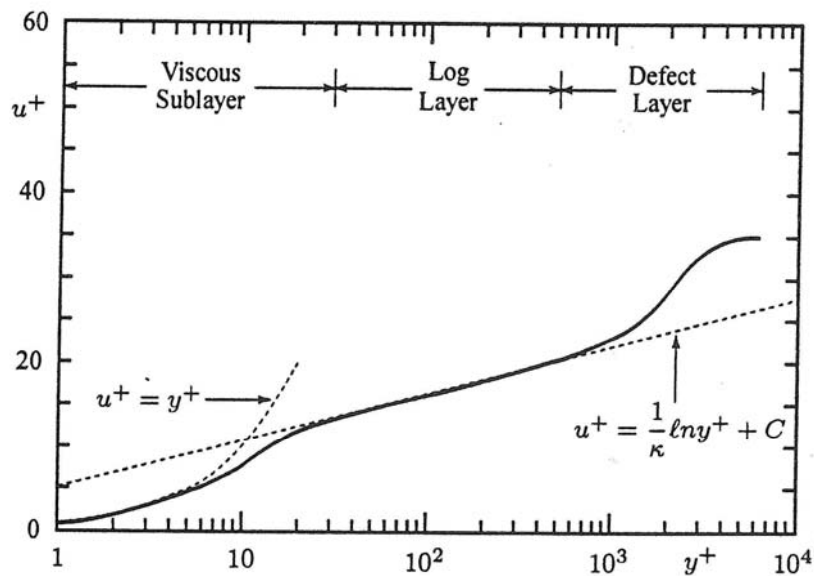


Fig. 3.3 Perfil de velocidad típico para capa límite turbulenta (Wilcox, 1998)

- Ley de pared para la temperatura y otros escalares:

Análogamente se pueden definir unas condiciones de pared para la temperatura y otras variables escalares (f , G):

$$\phi^+ = Pr_\phi \cdot y^+ \quad \text{si } y^+ < y_\phi^+ \quad (\text{Ec. 3.31})$$

$$\phi^+ = \frac{\sigma_\phi}{\kappa} \ln(E_\phi^+ \cdot y^+) \quad \text{si } y^+ > y_\phi^+ \quad (\text{Ec. 3.32})$$

Donde, ϕ^+ es una propiedad adimensional $\phi^+ = \frac{(\rho \cdot \tau_w)^{1/2}}{J_\phi} (\phi_w - \phi)$; con J_ϕ el flujo de ϕ en la pared, Pr_ϕ es el número de Prandtl, σ_ϕ es el número de Prandtl turbulento y E_ϕ^+ se calcula a partir de la fórmula de Jayatilleke (1969) (Ec. 3.33).

$$E_\phi^+ = E^+ \cdot \exp \left[9 \cdot \kappa \cdot \left(\left(\frac{Pr}{\sigma_\phi} \right)^{0.75} - 1 \right) \left(1 + 0.28 \exp \left(-0.007 \frac{Pr}{\sigma_\phi} \right) \right) \right] \quad (\text{Ec. 3.33})$$

Para la concentración de las especies se utiliza la misma relación de pared, pero sustituyendo el número de Prandtl por el número de Schmidt.

$$Y^+ = Sc_\phi \cdot y^+ \quad \text{si } y^+ < y_\phi^+ \quad (\text{Ec. 3.34})$$

$$Y^+ = \frac{Sc_\phi}{\kappa} \ln(E_\phi^+ \cdot y^+) \quad \text{si } y^+ > y_\phi^+ \quad (\text{Ec. 3.35})$$

Así pues, utilizando el modelo k- ε se resuelve la ecuación de transporte de la energía cinética turbulenta k (Ec. 3.23) en las celdas adyacentes a la pared. Al resolver esta ecuación, el término de producción τ_{ij} se aproxima por τ_w , y se mantiene constante en toda la celda. La ecuación de transporte de la disipación viscosa ε no se resuelve, sino que se computa según la relación

$$\varepsilon = \frac{C_\mu^{3/4} \cdot k^{3/2}}{\kappa \cdot y}, \text{ y también se mantiene constante en toda la celda.}$$

2. Modelo de transporte de partículas (Sommerfeld, 2000)

El movimiento de las partículas de carbón en la fase gas ha sido modelado según una aproximación lagrangiana, considerando que la fase de partículas ésta diluida en la fase continua de gas (Sommerfeld 2000). El flujo total se modela describiendo la evolución espacial y temporal de las trayectorias de un número representativo de partículas esféricas a través del fluido continuo. A pesar de la hipótesis de suspensión diluida (flujo disperso), sí se ha tenido en cuenta la influencia de las partículas en el flujo principal (two-way coupling), ya que la fracción volumétrica de partículas en la entrada al hogar es $\Phi_v \approx 10^{-4}$ (Figura 3.4). Por el contrario, se ha considerado despreciable la contribución debida a las interacciones entre partículas (four-way coupling).

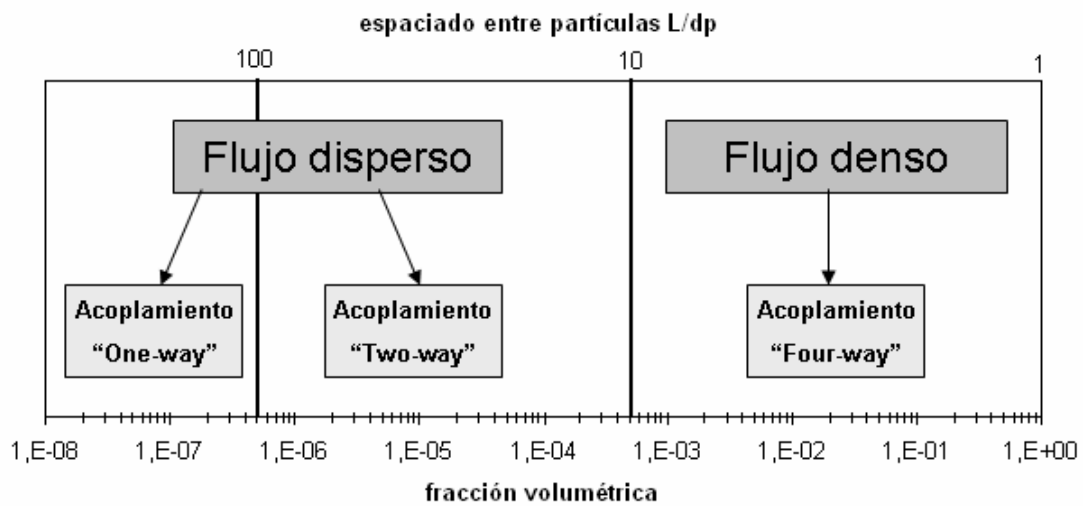


Fig. 3.4 Tipos de regímenes en flujos de dos fases en función de la fracción volumétrica de partículas (Sommerfeld, 2000)

El movimiento de las partículas en el fluido se describe resolviendo las ecuaciones diferenciales a lo largo de la trayectoria de la partícula, para calcular el cambio en su posición y en su velocidad (Ecs. 3.36 y 3.37).

$$m_p \cdot \frac{d\vec{u}_i}{dt} = \sum \vec{F}_i \tag{Ec. 3.36}$$

$$\frac{d\vec{x}_p}{dt} = \vec{u}_p \tag{Ec. 3.37}$$

Entre las fuerzas que actúan sobre la partícula, la mayor contribución es debida a la fuerza de arrastre que ejerce el fluido sobre la partícula (Ec. 3.38).

$$F_D = \frac{1}{8} \cdot \pi \cdot d_p^2 \cdot \rho \cdot C_D \cdot |v_R| \cdot v_R \quad (\text{Ec. 3.38})$$

Donde, v_R representa la velocidad relativa entre el fluido y la partícula, y C_D es el coeficiente de arrastre, definido para distintos regímenes según:

$$C_D = \frac{24}{\text{Re}} \quad \text{si } \text{Re} < 0.5 \quad (\text{Ec. 3.39})$$

$$C_D = 24(1 + 0.15 \cdot \text{Re}^{0.687}) / \text{Re} \quad \text{si } 0.5 < \text{Re} < 1000 \quad (\text{Ec. 3.40})$$

$$C_D = 0.44 \quad \text{si } \text{Re} > 1000 \quad (\text{Ec. 3.41})$$

Otras fuerzas que se consideran en el problema aunque su contribución es menor son:

- Fuerza del gradiente de presión: $F_p = -\frac{1}{4} \cdot \pi \cdot d_p^3 \cdot (\nabla P)$ (Ec. 3.42)

- Fuerza de masa añadida: $F_A = -\frac{1}{12} \cdot \pi \cdot d_p^3 \cdot \rho \cdot \frac{du}{dt}$ (Ec. 3.43)

Otra consideración relevante en problemas que involucran flujo turbulento, es que el movimiento de las partículas, especialmente de las más pequeñas, se ve influenciado por las fluctuaciones que provocan los torbellinos del flujo (Cortés y Gil, 2007). Estas fluctuaciones introducen un término adicional en el cálculo de la velocidad de las partículas. Este fenómeno es conocido como dispersión turbulenta de partículas. Mientras que algunos autores (Fan et al., 2001; Belosevic et al., 2006; Coimbra et al., 1994) incluyen este fenómeno en la simulación de calderas de carbón pulverizado, la mayoría prefiere omitirlo ya que exige aumentar el número de partículas a simular hasta en un orden de magnitud, incrementando considerablemente el tiempo de cálculo. Además, algunos autores (Chen y Shuen, 1993) también apuntan que al incluir este efecto, la convergencia es mucho más difícil de alcanzar, especialmente en problemas con combustión y radiación. En este trabajo, siguiendo la metodología habitual en la simulación de calderas, se ha omitido esta contribución por los motivos expuestos con anterioridad, y por la propia utilización final de los resultados del código CFD en el sistema de predicción de inquemados. Como se verá en los capítulos siguientes, más que las trayectoria de las partículas, lo que interesa aproximar es la temperatura y presión parcial de oxígeno local que encontrara cada partícula en su tránsito por el hogar. De manera que parece razonable presumir

que la dispersión turbulenta sí que modificará ligeramente el movimiento de las partículas, pero no lo suficiente para alterar sensiblemente los valores de temperaturas y presiones parciales de oxígeno en las celdas del dominio. Finalmente, dado que la aproximación langrangiana se realiza simulando un número representativo, y en general no muy grande, de la totalidad de las partículas, y que las trayectorias de éstas son especialmente caóticas, la omisión del fenómeno de la dispersión turbulenta en el problema no resulta determinante en los resultados finales del modelo.

Por otro lado, por tratarse de un problema de combustión, y no de mero arrastre neumático, se debe considerar el cambio de temperatura en la partícula. Éste está gobernado por tres procesos: convección, reacción y radiación.

- Transferencia de calor por convección

$$Q_C = 4 \cdot \pi \cdot d_p \cdot \lambda \cdot Nu \cdot (T_g - T_p) \quad (\text{Ec. 3.44})$$

Donde,

$$Nu = 2 + 0.6 \cdot Re^{0.5} \left(\mu \cdot \frac{C_p}{\lambda} \right)^{1/3} \quad (\text{Ec. 3.45})$$

- Generación de calor por reacción

Como se detalla más adelante, la transferencia de calor debida al proceso de combustión de la partícula tiene lugar en dos etapas, devolatilización y oxidación del residuo carbonoso. La transferencia de calor durante el proceso de devolatilización se describe según la Ec. 3.46.

$$Q_M = \frac{dm_p}{dt} \cdot \Delta H_{dev} \quad (\text{Ec. 3.46})$$

Donde, la variación de la masa de la partícula se corresponde con el contenido volátil liberado por la partícula a alta temperatura, y ΔH_{dev} es el calor consumido durante la devolatilización.

Por otro lado, la transferencia de calor durante el proceso de oxidación del residuo carbonoso se expresa según la Ec. 3.47.

$$Q_M = f_h \cdot \frac{dm_p}{dt} \cdot \Delta H_{react} \quad (\text{Ec. 3.47})$$

Donde, ΔH_{react} es el calor de reacción durante el proceso de oxidación del residuo, y f_h representa la fracción de calor absorbido por la partícula.

- Transferencia de calor por radiación

Por último, también se ha considerado el intercambio radiativo entre la partícula y el medio, y viceversa, según la Ec. 3.48.

$$Q_R = \varepsilon_p \cdot \pi \cdot d_p^2 \cdot (I - \sigma_B \cdot T_p^4) \quad (\text{Ec. 3.48})$$

La emisividad ε_p se estima que varía linealmente entre dos valores definidos, correspondientes a la emisividad del residuo carbonoso ($\varepsilon_{char} = 0.6$) y la emisividad del carbón ($\varepsilon_{coal} = 1$), según la Ec. 3.49.

$$\varepsilon_p = (1 - V_f) \cdot \varepsilon_{coal} + V_f \cdot \varepsilon_{char} \quad (\text{Ec. 3.49})$$

Sumando las tres contribuciones a la transferencia de calor (Ecs. 3.44, 3.46, 3.47 y 3.48), se obtiene la siguiente ecuación diferencial (Ec. 3.50) que resuelve el cambio de temperatura en la partícula.

$$\sum (m_p \cdot C_p) \frac{dT}{dt} = Q_C + Q_M + Q_R \quad (\text{Ec. 3.50})$$

Cada transferencia de cantidad de movimiento, masa o calor desde las partículas, genera una fuente de cantidad de movimiento, masa o calor en la fase continua (two-way coupling), a través de los términos fuente de las ecuaciones de conservación, según el modelo PSI-cell (Crowe et al., 1977).

3. Modelo de combustión de carbón

La combustión del carbón se calcula combinando los cálculos de transporte de las partículas con los cálculos de la combustión de los productos volátiles en la fase gas. El transporte de partículas ha sido tratado en el apartado anterior. La combustión de los productos volátiles se describe en el punto 4, centrándonos aquí, en los mecanismos y modelos que rigen el proceso de devolatilización, y la posterior oxidación del residuo carbonoso.

- Devolatilización (Badzioch y Hawskey, 1970)

Al principio del proceso, los volátiles son liberados y su combustión tiene lugar “lejos” de la partícula. Para modelar matemáticamente este proceso se asume que el diámetro de la partícula permanece constante, mientras su densidad decrece. Se ha utilizado el modelo de una reacción de Badzioch y Hawskey (1970) (Ec. 3.51).

$$\frac{dV}{dt} = k_v (V_f - V_{fi}) \quad (\text{Ec. 3.51})$$

Donde, V_{fi} es la fracción de volátiles obtenida a través del análisis inmediato del carbón, y k_v es la velocidad de la reacción expresada en la forma de Arrhenius (Ec. 3.52).

$$k_v = A_v \cdot e^{\left(\frac{E_{vT}}{T_p}\right)} \quad (\text{Ec. 3.52})$$

- Oxidación del residuo carbonoso

Después de la devolatilización, el residuo carbonoso está formado por carbono y ceniza. La oxidación de este residuo es mucho más lenta que la devolatilización, determinando por tanto, el tiempo necesario para la combustión completa del carbón.

El código CFX-4 incluye el clásico modelo de una película (Field et al., 1967; Baum y Street, 1971). Sin embargo, como se explica a lo largo del Capítulo 2, para mejorar las prestaciones predictivas del modelo de combustión, se han implementado dentro del código comercial algunos elementos del modelo CBK (Pallarés et al., 2005). Así pues, el efecto de la composición del carbón en la velocidad de reacción, se ha introducido a través de correlaciones dependientes del rango del carbón para el factor preexponencial y la energía de activación. Y finalmente, para tener en cuenta la resistencia a la difusión del oxidante que opone la capa de ceniza que recubre la partícula según avanza el proceso de combustión, se ha implementado un submodelo de inhibición de la capa de ceniza. Los elementos del modelo matemático están explicados con detalle en el Capítulo 2, de manera que aquí tan solo se resumen las ecuaciones más características.

La velocidad de reacción por unidad de superficie se determina según la Ec. 3.53.

$$q_c = \frac{P_g^{0.5}}{\frac{1}{k_d} + \frac{1}{k_c}} \quad (\text{Ec. 3.53})$$

La velocidad de difusión se calcula según la Ec. 3.54 (Hurt et al., 1998).

$$k_d = \frac{Sh \cdot D_{O_2} \cdot d_p \cdot \theta_{af}^{2.5}}{R \cdot T_m (Sh \cdot \delta \cdot d_c + \theta_{af}^{2.5} \cdot d_c^{2.5})} \quad (\text{Ec. 3.54})$$

La velocidad de reacción se calcula según la Ec. 3.55.

$$k_c = A_a \cdot e^{\left(\frac{-E_a}{R \cdot T_p}\right)} \quad (\text{Ec. 3.55})$$

La energía de activación E_a , y el factor preexponencial A_a se estiman a partir del análisis inmediato y elemental del carbón según las Ecs. 3.56 y 3.57 (Hurt y Mitchell, 1992).

$$E_a = (-5.94 + 35.5 \cdot \%C) \cdot 4.1869 \cdot 10^3 \quad (\text{Ec. 3.56})$$

$$A_a = \exp(\ln(k_{c,1750K}) + \frac{E_a}{1750 \cdot R}) \cdot \frac{10}{101325^{1/2}} \quad (\text{Ec. 3.57})$$

4. Modelo de combustión de los productos volátiles

Una vez liberados los productos volátiles de la partícula de carbón, éstos pasan a la fase gas, donde se produce su combustión. El modelo elegido, *mixed-in-burnt* (Warnatz et al., 1996), es adecuado para llamas de difusión con números de Damköhler suficientemente altos ($D_a \gg 1$). Este modelo asume la hipótesis de que combustible y oxidante reaccionan instantáneamente (velocidad de reacción química infinitamente rápida comparada con la mezcla molecular). Para obtener las fracciones másicas de los productos, oxidante y combustible, se resuelven las ecuaciones de transporte del promedio de la fracción de mezcla f (Ec. 3.58) y su varianza G (Ec. 3.59).

$$\rho \frac{\partial f}{\partial t} + \rho u_j \frac{\partial f}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\frac{\mu_T}{\sigma_T} + \frac{\mu}{\sigma_L} \right) \frac{\partial f}{\partial x_j} \right) \quad (\text{Ec. 3.58})$$

$$\rho \frac{\partial G}{\partial t} + \rho u_j \frac{\partial G}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\frac{\mu_T}{\sigma_T} + \frac{\mu}{\sigma_L} \right) \frac{\partial G}{\partial x_j} \right) + C_{g1} \mu_T \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial G}{\partial x_j} \right) - C_{g2} \rho \frac{\varepsilon}{k} G \quad (\text{Ec. 3.59})$$

La fracción de mezcla de la reacción se define a partir de las Ecs. 3.60 y 3.61.

$$f = \frac{\chi - \chi_o}{\chi_F - \chi_o} \quad (\text{Ec. 3.60})$$

$$\chi = m_F - \frac{m_O}{\varphi} \quad (\text{Ec. 3.61})$$

Además, se define una fracción de mezcla estequiométrica F_{st} según la Ec. 3.62.

$$F_{st} = \frac{1}{1 + \varphi} \quad (\text{Ec. 3.62})$$

Como combustible y oxidante no pueden coexistir, ya que la reacción es instantánea, las fracciones máxicas de éstos, se determinan en función de la fracción de mezcla promedio y su varianza, utilizando una función de densidad de probabilidad (PDF) tipo beta $p(f)$ (Ecs. 3.63 y 3.64).

$$m_F = \int_0^1 \max \left[\frac{f - F_{st} \cdot (1 - m_{PC})}{1 - F_{st}}, 0 \right] \cdot p(f) \cdot df \quad (\text{Ec. 3.63})$$

$$m_O = \int_0^1 \max \left[1 - m_{PC} - \frac{f}{F_{st}}, 0 \right] \cdot p(f) \cdot df \quad (\text{Ec. 3.64})$$

Finalmente, la fracción máxica de los productos m_{PR} , se calcula como diferencia de las anteriores (oxidante y combustible) y la correspondiente a los productos de la combustión del char m_{PC} (Ec. 3.65).

$$m_{PR} = 1 - m_F - m_O - m_{PC} \quad (\text{Ec. 3.65})$$

5. Modelo de Radiación

La transferencia de calor por radiación en el hogar es muy importante, dado que el medio está constituido por una mezcla de gases, algunos de ellos participativos, a alta temperatura. Los gases absorben y emiten radiación térmica dependiente de la temperatura y de la longitud de onda. Las partículas también intervienen en el intercambio por radiación. Para resolver el problema del intercambio radiativo, se ha empleado el método aproximado de transferencia discreta (Lockwood y Shah, 1981). La técnica se basa en discretizar la ecuación de transferencia a lo largo de rayos. La trayectoria a lo largo de un rayo, es discretizada seccionando ésta en cada volumen finito del problema. Las propiedades físicas de cada volumen se consideran constantes. Realizando un balance de la energía radiativa a lo largo de una dirección s , el cambio de intensidad radiativa, se determina sumando las contribuciones correspondientes a la emisión, absorción, dispersión entrante en la dirección s y dispersión saliente en la dirección s , de forma que se obtiene una ecuación para la intensidad de la radiación (Ec. 3.66) (Hottel y Sarofim, 1967; Modest, 1993).

$$\frac{dI_\lambda}{ds} = \varepsilon \cdot I_{b\lambda} - (k_a + k_s) \cdot I_\lambda + \frac{k_s}{4\pi} \int_{4\pi} I_\lambda(\hat{s}_i) \cdot \Phi_\lambda(\hat{s}_i, \hat{s}) \cdot d\Omega_i \quad (\text{Ec. 3.66})$$

De acuerdo con la ley de Planck, la intensidad de cuerpo negro I_b , se obtiene integrando en todo el espectro la intensidad en cada longitud de onda λ (Ecs. 3.67 y 3.68).

$$I_b(T) = \int_0^\infty I_{b\lambda}(T) \cdot d\lambda = \sigma_B \cdot T^4 \quad \text{y} \quad I_{b\lambda}(T) = \frac{C_1}{\lambda^5 (e^{C_2/\lambda T} - 1)} \quad (\text{Ecs. 3.67 y 3.68})$$

Por la ley de radiación de Kirchhoff, la emisividad espectral $\varepsilon(\lambda)$ y el coeficiente de absorción espectral $k_a(\lambda)$ tomarán el mismo valor. Este valor se puede estimar aplicando un modelo de gases grises, descomponiendo el gas real, en uno claro y varios grises. De esta manera, se puede caracterizar la emisión y absorción de un gas real, como el sumatorio de las emisividades de la descomposición de gases considerada, siendo éstas, función de la temperatura, y el producto de la presión parcial de los gases participativos p y una longitud característica L_c (Ec. 3.69) (Taylor y Foster, 1974).

$$\varepsilon = \sum_{i=1}^{N_g} a_{ni}(T) \cdot [1 - e^{-k_i \cdot p \cdot L_c}] \quad (\text{Ec. 3.69})$$

Donde,

$$\sum_{i=1}^{N_g} a_{ni}(T) = 1 \tag{Ec. 3.70}$$

Existen muchos gráficos de la emisividad (Hadvig, 1970; Leckner, 1972; Beer, Foster y Siddall, 1971), para distintas proporciones de mezclas de H₂O-CO₂. Éstos últimos (Beer et al., 1971), además incluyen en el modelo la contribución del CO y otros hidrocarburos quemados, dando lugar a la Ec. 3.71 para el cálculo de la emisión del gas real.

$$\varepsilon = \sum_{i=1}^{N_g} a_{ni}(T) \cdot \left[1 - e^{-(k_i \cdot (p_w + p_c) + k_{HCi} \cdot p_{HC}) \cdot L_c} \right] \tag{Ec. 3.71}$$

Donde,

$$a_{ni} = b_{1i} + 10^{-5} \cdot b_{2i} \cdot T \tag{Ec. 3.72}$$

En la Tabla 3.1 se muestran los valores de las constantes experimentales b_{1i} , b_{2i} (K⁻¹), k_i (m⁻¹atm⁻¹) y k_{HCi} (m⁻¹atm⁻¹) (Beer et al., 1971).

Nº Gas	p_w/p_c=2				p_w/p_c=1			
	b_{1i}	b_{2i}	k_i	k_{HCi}	b_{1i}	b_{2i}	k_i	k_{HCi}
1	0.437	7.13	0	3.85	0.486	8.97	0	3.41
2	0.39	-0.52	1.88	0	0.381	-3.96	2.5	0
3	1.173	-6.61	68.83	0	0.133	-5.01	109	0

Tabla 3.1 Constantes experimentales para un modelo de un gas claro y dos grises (Modest 1993)

Por simplicidad, para evaluar las propiedades del gas se ha optado por un modelo de gas gris, con un valor de absortividad constante para todo el espectro de frecuencias.

En cuanto a la dispersión; ésta se asume isótropa en todo el medio, simplificándose así el último término de la ecuación de transporte de la intensidad de la radiación (Ec. 3.66), $\Phi_{\lambda}(\hat{s}_i, \hat{s}) = 1$.

Definiendo q_R como la potencia radiativa por unidad de superficie, obtenida al integrar la intensidad radiativa I_{λ} sobre el ángulo sólido en todo el espectro de frecuencias (Ec. 3.73), e integrando la ecuación de transporte de la intensidad radiativa (Ec. 3.66) sobre el ángulo sólido, se obtiene la ecuación general de conservación de la energía radiativa (Ec. 3.74).

$$q_R = \int_0^\infty q_{R\lambda} \cdot d\lambda = \int_0^\infty \int_{4\pi} I_\lambda(\hat{s}) \cdot d\Omega \cdot d\lambda \quad (\text{Ec. 3.73})$$

$$\nabla q_R = \nabla \int_0^\infty q_{R\lambda} \cdot d\lambda = -4 \cdot \pi \cdot (k_a + k_s) \cdot J + \int_{4\pi} Q \cdot d\Omega_s \quad (\text{Ec. 3.74})$$

Donde,

$$J = \frac{1}{4\pi} \int I \cdot d\Omega_s \quad \text{y} \quad \int Q \cdot d\Omega_s = 4 \cdot k_a \cdot I_b + 4 \cdot \pi \cdot k_s \cdot J \quad (\text{Ec. 3.75 y 3.76})$$

Esta ecuación de transporte permite determinar en cada celda el término fuente (o sumidero) de radiación del medio q_R , que se introduce a continuación, en la ecuación de conservación de la energía del fluido principal (Ec. 3.21, término S_R).

En la Tabla 3.2 se listan los modelos empleados en las simulaciones.

Problema	Modelo	Referencia
Campo fluido	RANS	
Cierre turbulencia	k-ε estándar	Launder y Spalding, 1971
Devolatilización	Devolatilización en una etapa	Badzioch y Hawksley, 1970
Combustión volátiles	Mixed is burnt	Wartnatz et al., 1996
Oxidación del residuo carbonoso	Simple de una película + Correlaciones con el análisis elem.+ Inhibición de la ceniza (CBK)	Field et al., 1967 Hurt y Mitchell, 1992 Hurt et al., 1998
Radiación	Transferencia discreta	Lockwood y Shah, 1981
Transporte partículas	Aproximación Lagrangiana	

Tabla 3.2 Resumen de los modelos empleados en las simulaciones

3.3 Condiciones de Contorno

Una vez planteados todos los modelos, es necesario imponer las condiciones de contorno para poder resolver las ecuaciones que describen el proceso (Versteed y Malalasekera, 1995):

1. En contornos abiertos:

- Entradas:

Normalmente, en las entradas se especifican todas las variables. Además, si se conocen bien las condiciones en las entradas, es muy útil alejar lo más posible la zona de entrada de la región de interés en el estudio. En el caso concreto de este estudio, para la fase continua (gas) se definen las componentes normal y angular de la velocidad. La componente normal se calcula a partir del caudal, sección de entrada y temperatura del aire, bajo la hipótesis de gas ideal. La componente angular se calcula a través de la geometría del quemador (Basu et al., 2000). También se definen la temperatura del flujo a la entrada, la intensidad de la turbulencia, y la longitud de escala de la disipación viscosa. Las condiciones de contorno relativas a la radiación se definen en términos de la emisividad, la radiación difusa y la temperatura de radiación.

Para la fase de partículas, se define el caudal másico de combustible, su distribución granulométrica (Rosin Rammler) (Ec. 3.77), y la velocidad inicial, que al estar diluida en la fase gas, coincidirá con la velocidad inicial del flujo principal.

$$FV(d_p > d) = 100 \cdot \exp\left(-\left(\frac{d}{d_{pm}}\right)^{n_{rr}}\right) \quad (\text{Ec. 3.77})$$

Donde, FV es el porcentaje en masa de partículas de diámetro d_p que quedan retenidas en un tamiz de luz de malla d , d_{pm} es la luz de malla del tamiz a través del cual pasa el 62.5 % del total, y n_{rr} es una constante característica de la distribución.

- Salidas:

En la salida habitualmente se conoce poco sobre el flujo. Por esta razón, es recomendable situar las salidas lo más lejos posible de la zona de interés, ya que de otra manera se podrían propagar los errores. Tanto los flujos convectivos como los difusivos se expresan en función de los nodos interiores. En la salida, en el plenum de gases, se aplica condición libre: $\frac{\partial u_n}{\partial n} = 0$ y

$\frac{\partial T}{\partial n} = 0$. En cuanto a las condiciones de radiación, éstas se definen de nuevo, en términos de la emisividad promedio, radiación difusa y temperatura de radiación.

2. En las paredes:

En las paredes se define la condición de no deslizamiento para la velocidad y perfil logarítmico de velocidades para representar adecuadamente la turbulencia en la zona cercana a la pared. Las condiciones de contorno para la radiación se definen también en términos de la emisividad promedio, radiación difusa y temperatura de radiación.

3.4 Verificación y validación

El último paso en el proceso de resolución de un problema con herramientas CFD es determinar si la solución obtenida es suficientemente precisa, y si los resultados obtenidos con la simulación numérica reproducen adecuadamente los procesos reales. Es lo que habitualmente se conoce como verificación y validación de una simulación numérica.

Al igual que con cualquier técnica experimental que se utilice para describir un proceso real, es necesario llevar a cabo una validación tanto del método como de los resultados obtenidos por ese método. Por lo tanto, de la misma manera que existen unas incertidumbres asociadas al método experimental utilizado, existen unas incertidumbres asociadas al método numérico. Como consecuencia de la rápida expansión en la utilización de herramientas computacionales han surgido aproximaciones estándar de cuantificación de los errores de computación y técnicas de validación de las simulaciones CFD a partir de datos experimentales (Velilla, 2004). Sin embargo, como también recuerda Velilla (2004), todavía no existe una metodología única internacionalmente aceptada.

Generalmente, en la mayoría de los trabajos publicados sobre CFD, el método más utilizado para validar los resultados consiste en comparar los resultados de las simulaciones con los resultados experimentales. Sin embargo, de manera más rigurosa, que los resultados de una simulación reproduzcan perfectamente los valores obtenidos experimentalmente no asegura que el modelo numérico reproduzca adecuadamente el proceso real. También, hay que determinar los errores numéricos asociados al método. Por ello, es preciso distinguir dos etapas diferenciadas en el proceso de aprobación de una simulación: la verificación, que contabiliza los errores numéricos del método, y la validación, que suma a los anteriores los errores característicos del modelado de los procesos reales.

- Verificación

La etapa de verificación consiste en determinar los errores numéricos del método computacional utilizado. Es decir, está relacionado con la buena o mala resolución numérica de las ecuaciones diferenciales. Son errores relacionados con la incertidumbre numérica de la simulación. Los errores numéricos que se suelen considerar son:

- Errores debidos al método iterativo de resolución de las ecuaciones numéricas: Estos errores están asociados a la convergencia global del método. Cuanto mejor sea la convergencia de la solución, los residuos se sitúen en valores muy bajos ($< 1E-4$) y se cumpla la conservación de la masa en el dominio, menor será la contribución de este error. En

general, utilizando códigos comerciales, dada la robustez de éstos, este error se suele considerar despreciable, y se puede estimar a partir de métodos gráficos u otras aproximaciones teóricas.

- Errores asociados a la discretización espacial: Estos errores están asociados al tamaño de la malla. Dentro de los errores numéricos son los más importantes. Podría decirse que la resolución de malla en un modelo computacional, es el equivalente a la precisión de un instrumento en el campo experimental. Por ello, resulta importante determinar este error. El método utilizado para ello, es llevar a cabo estudios de convergencia que incluyen refinamientos progresivos de los elementos de discretización, hasta alcanzar una solución que sea independiente del mallado, o que su error esté dentro de la tolerancia del problema.
- Errores asociados a la discretización temporal: Estos errores están asociados al tamaño del paso temporal en problemas transitorios. Al igual que los errores asociados a la discretización espacial para determinar este error, se llevan a cabo estudios paramétricos de convergencia consistente en el refinamiento del paso temporal hasta que se alcanza una solución independiente de éste o dentro de la tolerancia del problema.

- Validación

La etapa de validación consiste en determinar los errores de modelado del método computacional utilizado. Es decir, está relacionado con los errores derivados de las aproximaciones, hipótesis y simplificaciones realizadas en la representación matemática del proceso real. El error de validación está compuesto por:

- Errores asociados al método numérico: Es decir, los errores determinados en la etapa de verificación.
- Errores asociados a los datos experimentales sobre los que se va a validar la simulación: Es decir, los errores derivados del proceso de medida experimental y la precisión del aparato de medida. Esta incertidumbre se suele determinar a través de procesos de calibración de los instrumentos, y siguiendo algún procedimiento standard de medida que tenga prefijadas unas incertidumbres del método.
- Errores asociados a las aproximaciones, hipótesis y simplificaciones de los modelos matemáticos: No existe una aproximación conocida para obtener una estimación de este error, así que se determina indirectamente, una vez determinados todos los errores anteriores.

3.5 Resumen

La fluidodinámica computacional, gracias a la continua evolución de los ordenadores, ha conseguido asentarse como herramienta indispensable de cálculo. Su expansión ha sobrepasado el campo de la investigación, penetrando de lleno en la industria a través de numerosos códigos comerciales. La mayor ventaja es que estas herramientas representan un complemento económico y preciso a los tradicionales modelos experimentales. El otro punto fuerte de los códigos CFD es que hoy en día, pueden resolver una gran variedad de problemas involucrando turbulencia, flujos multifásicos, flujos reactivos, etc.

Los códigos CFD se basan en la resolución numérica de las ecuaciones diferenciales que describen un flujo. Para llevar a cabo esta tarea es necesario discretizar el dominio objeto del estudio, y elegir una aproximación para discretizar las ecuaciones que rigen el proceso. El dominio se divide en una serie de elementos de control denominados celdas. Posteriormente, para determinar las variables del fluido, las ecuaciones de conservación se aplican en puntos discretos de las celdas, denominados nodos. Los métodos de discretización habituales son tres: método de elementos finitos, método de volúmenes finitos y método de diferencias finitas. En este trabajo de tesis se ha empleado un código comercial (CFX-4) basado en el método de volúmenes finitos. Este método resuelve numéricamente la forma integral de las ecuaciones de conservación, utilizando algoritmos de distinto orden de precisión como se ha descrito a lo largo del capítulo. La otra característica importante de estos códigos, son los modelos matemáticos que describen los procesos físicos y químicos que experimenta el fluido. En el capítulo se ha dedicado un apartado a describir como se implementan en el código los modelos necesarios para resolver el problema de la combustión de carbón pulverizado (turbulencia, flujo multifásico, combustión homogénea, combustión heterogénea y radiación), así como las condiciones de contorno del problema. Finalmente, en el último apartado se ha presentado la importancia y la metodología necesaria para validar una simulación CFD. Para ello, se han descrito todas las incertidumbres asociadas al método numérico de discretización de las ecuaciones, y las asociadas con el modelado de los procesos que se quieran describir, mostrando como estimar cada una de estas contribuciones.

Nomenclatura

a_{ni}	coeficiente de participación gas i
A	superficie (m^2)
A_a	factor preexponencial ($g C/cm^2 s$)
A_v	factor preexponencial proceso de devolatilización (s^{-1})
b_{1i}	constante experimental modelo gases grises
b_{2i}	constante experimental modelo gases grises
C_D	coeficiente de arrastre
C_{g1}	coeficiente de transporte fracción de mezcla
C_{g2}	coeficiente de transporte fracción de mezcla
C_p	calor específico ($kJ / kg K$)
C_1	coeficiente de cierre turbulencia modelo $k-\varepsilon$
C_2	coeficiente de cierre turbulencia modelo $k-\varepsilon$
C_{I1}	constante de radiación ($3.7415 W/m^2$)
C_{I2}	constante de radiación ($1.4388 m^2K$)
C_μ	coeficiente de cierre turbulencia modelo $k-\varepsilon$
d	diámetro malla del tamiz (m)
d_c	diámetro del núcleo de la partícula de char (cm)
d_p	diámetro de la partícula (m)
d_{pm}	diámetro medio distribución Rosin Rammler (m)
D	coeficiente de difusión (m^2 / s)
D_a	número adimensional de Damköhler ($D_a = \tau_t / \tau_c$)
D_{O_2}	coeficiente de difusión molecular del O_2 en N_2 (cm^2 / s)
E^+	constante adimensional ley de pared (11.225)
E_a	energía de activación (J/mol)
E_{vT}	temperatura de activación proceso de devolatilización (K)
f	fracción de mezcla
f_c	integrando término convectivo ecuación de transporte
f_d	integrando término difusivo ecuación de transporte
f_h	fracción de calor absorbido por la partícula
f_v	integrando término fuerzas de volumen ecuación de transporte
F_A	fuerza sobre la partícula debida a su masa (N)
F_i	componente i de la fuerza F (N)
F_D	fuerza de arrastre del fluido sobre la partícula (N)
F_P	fuerza sobre la partícula debida al gradiente de presión (N)

F_{st}	fracción de mezcla estequiométrica
FV	porcentaje en volumen de partícula distribución Rosin Rammler
G	varianza de la fracción de mezcla
h	entalpía (kJ/kg)
h_c	coeficiente de convección (W/m K)
h_T	entalpía total (kJ/kg)
I	intensidad de radiación por unidad de ángulo sólido (W/m ² sr)
I_b	intensidad de radiación de cuerpo negro por unidad de ángulo sólido (W/m ² sr)
I_λ	intensidad de radiación en la longitud de onda λ por unidad de ángulo sólido (W/m ² μ m sr)
$I_{b\lambda}$	intensidad de radiación de cuerpo negro en la longitud de onda λ por unidad de ángulo sólido (W/m ² μ m sr)
J	radiosidad (W/m ²)
J_ϕ	flujo de la variable genérica ϕ (W/m ²)
k	energía cinética turbulenta (m ² s ⁻²)
k_a	coeficiente de absorción
k_c	constante cinética de reacción (g C/cm ² s atm ⁿ)
k_d	constante de cinética de difusión (g C/cm ² s atm)
k_i	constante experimental modelo gases grises
k_{HCi}	constante experimental modelo gases grises
k_s	coeficiente de dispersión
k_m	coeficiente de transferencia de masa (m/s)
k_v	constante cinética de reacción proceso de devolatilización (s ⁻¹)
L_c	longitud característica (m)
Ma	número adimensional de Mach ($Ma = v/v_s$)
m_F	fracción másica combustible
m_O	fracción másica oxidante
m_{PC}	fracción másica productos de char
m_{PR}	fracción másica productos
m_p	masa de la partícula (g)
n	vector unitario normal
n_c	número de caras del volumen de control
n_{rr}	factor de dispersión distribución Rosin Rammler
N_g	número de gases participativos
N_R	número de reacciones
Nu	número adimensional de Nusselt ($Nu = h_c L_c / \lambda$)

p	presión (N / m^2)
p_c	presión parcial dióxido de carbono (atm)
p_{HC}	presión parcial monóxido de carbono e hidrocarburo inquemados (atm)
p_w	presión parcial vapor de agua (atm)
p^m	presión iteración m (N / m^2)
p'	corrección de la presión (N / m^2)
P_g	presión parcial del oxidante en la fase gas (atm)
PM	peso molecular (kg/kmol)
Pr	número adimensional de Prandtl ($Pr = \mu C_p / \lambda$)
P_0	presión (N/m^2)
q_c	velocidad de combustión ($\text{g C}/\text{cm}^2 \text{ s}$)
q_R	calor transferido por radiación (W/m^2)
$q_{R\lambda}$	calor transferido por radiación en la longitud de onda λ ($\text{W}/\text{m}^2 \mu\text{m}$)
Q_c	intercambio de calor por convección partícula-medio (W)
Q_M	intercambio de calor asociado a la transferencia de masa de la partícula (W)
Q_R	intercambio de calor por radiación partícula-medio (W)
R	constante universal de gas ideal, ($8.3145 \text{ J}/\text{mol K}$)
Re	número adimensional de Reynolds ($Re = \rho v L_c / \mu$)
s	dirección de la radiación I_λ
Sh	número adimensional de Sherwood ($Sh = k_m L_c / D$)
Sc	número adimensional de Schimdt ($Sc = \mu / \rho D$)
S_i	término fuente ecuación de transporte de especie química
S_M	término fuente ecuación de cantidad de movimiento
S_R	término fuente ecuación de la energía
S_ϕ	término fuente de la ecuación de transporte de la variable genérica ϕ
t	tiempo (s)
T	temperatura (K)
T_g	temperatura en la fase gas (K)
T_m	temperatura media (K)
T_p	temperatura partícula (K)
u	velocidad de fricción (m/s)
u_i	componente i de la velocidad (m/s)
u_i^m	componente i de la velocidad en la iteración m (m/s)
u_p	componente u de la velocidad de la partícula (m/s)
u^+	velocidad adimensional ley de pared

u'	corrección de la velocidad (m/s)
v	velocidad (m/s)
v_R	velocidad relativa fluido-partícula (m/s)
v_s	velocidad del sonido (m/s)
V	Volumen de la celda (m ³)
V_{fi}	fracción instantánea de volátiles
V_f	fracción de volátiles liberados
x_i	coordenada espacial i (m)
x_p	coordenada espacial x de la partícula (m)
y^+	distancia adimensional ley de pared
Y_i	fracción másica especie i
%C	% en peso de carbono en el análisis elemental en base seca y sin cenizas
ΔH_{dev}	calor liberado proceso devolatilización (kJ)
ΔH_{react}	calor liberado proceso oxidación residuo carbonoso (kJ)
δ_{ij}	delta de Dirac
δ	espesor de la capa de ceniza (cm)
ε	disipación viscosa (m ² s ⁻³)
ε_p	emisividad de la partícula
ε_{coal}	emisividad carbón
ε_{char}	emisividad char
κ	constante de Von Karman (0.419)
φ	relación estequiométrica de la reacción
λ	coeficiente del tensor de esfuerzos viscosos de Reynolds
	conductividad térmica (W/m K)
	longitud de onda (m)
ϕ	variable genérica
Φ	dispersión de la radiación
Φ_v	fracción volumétrica de partículas en el gas
θ_{af}	porosidad de la capa de ceniza
ρ	densidad (g/cm ³)
τ_w	esfuerzo cortante en la pared
τ_{ij}	tensor de esfuerzos
τ_{ij}'	tensor de esfuerzos viscosos
Ω	ángulo sólido (rad)

Γ	difusividad efectiva (m^2/s)
σ_B	constante de Stephan Boltzman ($5.67 \text{ E-}12 \text{ W/cm}^2 \text{ K}^4$)
σ_H	número adimensional de Prandtl turbulento ($\sigma_H = \mu_T C_p / \lambda$)
σ_i	número adimensional de Prandtl turbulento ($\sigma_i = \mu_T C_p / \lambda$)
σ_k	coeficiente de cierre turbulencia modelo k- ϵ
σ_L	número adimensional de Prandtl ($\sigma_L = \mu C_p / \lambda$)
σ_T	número adimensional de Prandtl turbulento ($\sigma_T = \mu_T C_p / \lambda$)
σ_ϵ	coeficiente de cierre turbulencia modelo k- ϵ
σ_ϕ	número adimensional de Prandtl turbulento ($\sigma_\phi = \mu_T C_p / \lambda$)
τ_c	tiempo característico de reacción química
τ_t	tiempo característico de la turbulencia
μ	viscosidad (kg/m s)
μ_{eff}	viscosidad efectiva (kg/m s)
μ_ν	viscosidad cinemática (kg/m s)
μ_T	viscosidad turbulenta (kg/m s)
χ	fracción molar
χ_F	fracción molar de combustible
χ_O	fracción molar de oxidante

Acrónimos

CBK	carbon burnout kinetic
CDS	central differences scheme
CFD	computational fluid dynamics
MVF	método de volúmenes finitos
PDF	probability density function
PSI-cell	particle-source-in cell
RANS	Reynold's averaged Navier Stokes equations
UDS	upwind differential scheme

4 **EVALUACIÓN DE SENSIBILIDAD DE LOS PARÁMETROS QUE AFECTAN A LA PRODUCCIÓN DE INQUEMADOS**

En el Capítulo 1 se describieron los factores más influyentes en la formación de inquemados sólidos. Éstos se clasificaban en tres categorías correspondientes a las propiedades inherentes del carbón y del residuo carbonoso; al acondicionamiento, preparación y molienda del carbón; y por último, a las características del diseño y operación de los quemadores y del hogar.

Sin embargo, no todos ellos resultan relevantes en la operación diaria de una planta. Por ejemplo, el tipo de carbón, su composición y sus propiedades intrínsecas, tienen una gran influencia sobre la combustión. Sin embargo, la elección del carbón se realiza previamente teniendo en cuenta factores como su rango, composición, PCS, disponibilidad de suministro, precio, etc. Es decir, las características del combustible no suponen un parámetro de decisión que se pueda variar en la operación diaria de la planta. Por el contrario, otros factores como la molienda, que determina el tamaño de las partículas, o como las condiciones estequiométricas de la combustión, son ajustables a través de parámetros de operación de la planta, y nos permiten actuar sobre el nivel de inquemados que se obtiene en el hogar.

En este capítulo, se lleva a cabo un análisis de sensibilidad de los parámetros más influyentes en la formación de inquemados, sobre los que directa o indirectamente, el operario de una planta

tiene capacidad de maniobra. Para ello, se realiza un doble estudio de estos parámetros. Por un lado, se evalúa, dentro del rango habitual de variación, su contribución individual a la formación de inquemados. Es decir, manteniendo el resto de variables constantes. Por otro lado, se evalúa su interacción con el resto de los parámetros. Este último estudio, para el que se han utilizado técnicas estadísticas de diseño de experimentos, tiene el valor añadido de dar un enfoque más realista del problema, donde la variación de un parámetro puede contribuir en mayor o menor medida a la formación de inquemados, dependiendo de las condiciones del resto de variables.

Para llevar a cabo este estudio, se han realizado simulaciones CFD de una planta real (ASM Brescia, Italia) bajo diferentes escenarios. El capítulo se divide en tres bloques. En el primero, se presenta la información general de la central ASM Brescia, incluyendo las características geométricas y de operación básicas, necesarias para llevar a cabo las simulaciones. En un segundo bloque, se describe brevemente las particularidades de la simulación CFD: descripción de la geometría, modelos matemáticos utilizados, condiciones de contorno y proceso de validación. Por último, el tercer bloque recoge la descripción de los escenarios estudiados, y el análisis de sensibilidad de los parámetros, presentándose las conclusiones más notables.

4.1 Descripción de la central ASM Brescia

La central térmica de carbón pulverizado Lamarmora (ASM Brescia), que genera una potencia neta de 139 MWe, consta de tres grupos con fuegos frontales, circulación natural y recalentamiento simple. El grupo utilizado en el estudio, con una potencia neta de 63 MWe a carga nominal, está equipado con cuatro quemadores de prerrotación (swirl) dispuestos en dos niveles. Dos molinos verticales de rodillos en planetario alimentan, cada uno, a los quemadores de un mismo nivel. Los combustibles que se han venido quemando habitualmente durante los últimos cinco años, son dos carbones bituminosos de Centroamérica ('Guasare' de Venezuela y 'Carbonandes' de Colombia). Además, recientemente se ha quemado también un carbón procedente de Rusia para evaluar su comportamiento y adecuación a la instalación. En la Tabla 4.1 se recogen los análisis inmediato y elemental típicos de los carbones.

Análisis inmediato (en recepción)	Guasare	Carboandes	Russian
Humedad (%)	6.91	9.6	9.56
Ceniza (%)	5.75	6.44	7.14
Volátiles (%)	35	34.17	36.09
Carbono fijo (%)	52.34	49.79	47.21
Análisis elemental (en recepción)			
Carbono (%)	72.75	69.21	65.62
Hidrógeno (%)	4.93	4.38	4.66
Oxígeno (%)	7.75	8.38	10.74
Nitrógeno (%)	1.27	1.36	1.9
Azúfre (%)	0.64	0.64	0.38
Poder calorífico			
PCS (kcal/kg)	7220	6715	6725

Tabla 4.1 Análisis inmediato y elemental de los tres carbones de estudio
(carbono fijo calculado por diferencia)

Las Figuras 4.1 y 4.2, muestran la geometría de la caldera y el esquema de distribución de aire primario y secundario respectivamente.

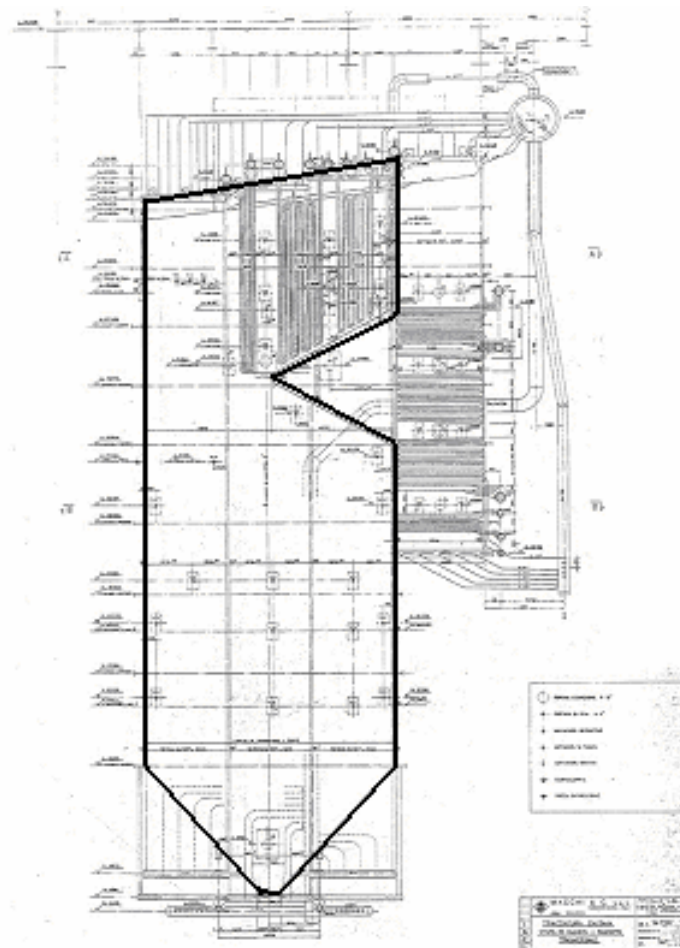


Fig. 4.1 Esquema de la caldera ASM Brescia

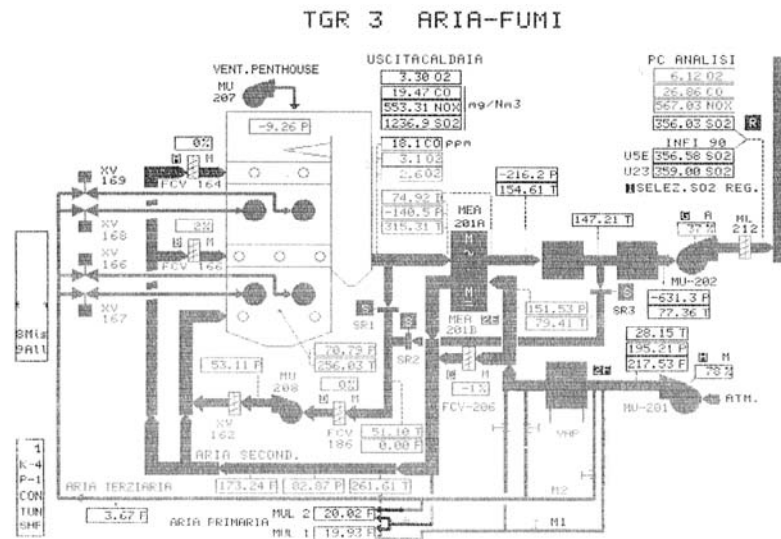


Fig. 4.2 Distribución aire primario y secundario (ASM Brescia)

4.2 Modelo CFD de la caldera ASM Brescia

Para realizar las simulaciones se ha utilizado un código CFD comercial, CFX 4.4, en un ordenador Pentium IV X-dual con doble procesador a 2.8 GHz, y con 2 GB de memoria RAM cada uno. La información sobre el código y los métodos de discretización que utiliza CFX-4, se abordan en el Capítulo 3.

4.2.1 Descripción de la geometría

El dominio de la simulación incluye la caldera completa hasta el plenum, justo antes de la zona convectiva (ver el contorno grueso en la Figura 4.1). De esta manera, resulta más sencillo definir las condiciones de contorno en la salida. La malla, de tipo estructurada, está formada por 129864 elementos (Figura 4.3). Su estructura, se ha refinado en la zona de quemadores para simular con mayor detalle los procesos a alta temperatura que tienen lugar en esta región, y poco a poco, se ha ido aumentando progresivamente el tamaño de la celda, hasta alcanzar la cota superior de la caldera. En la Figura 4.4, se muestra un detalle del mallado en el cinturón de quemadores, donde se pueden distinguir en cada entrada, tres áreas distintas correspondientes al ignitor, aire primario y carbón, y aire secundario.

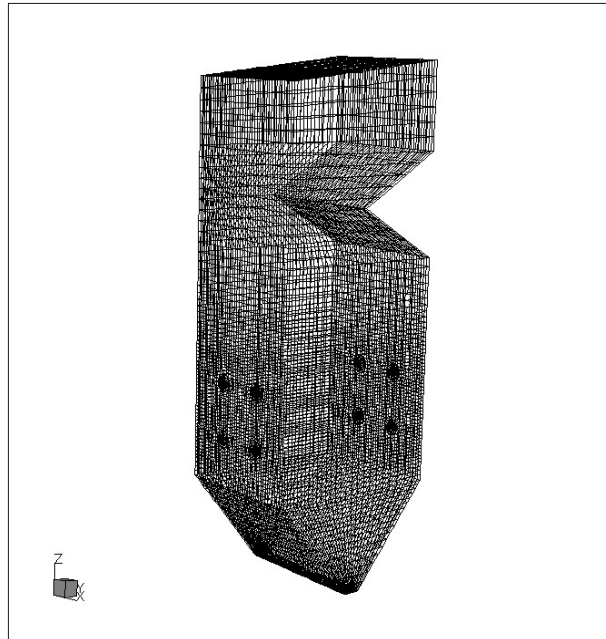


Fig. 4.3 Geometría mallada

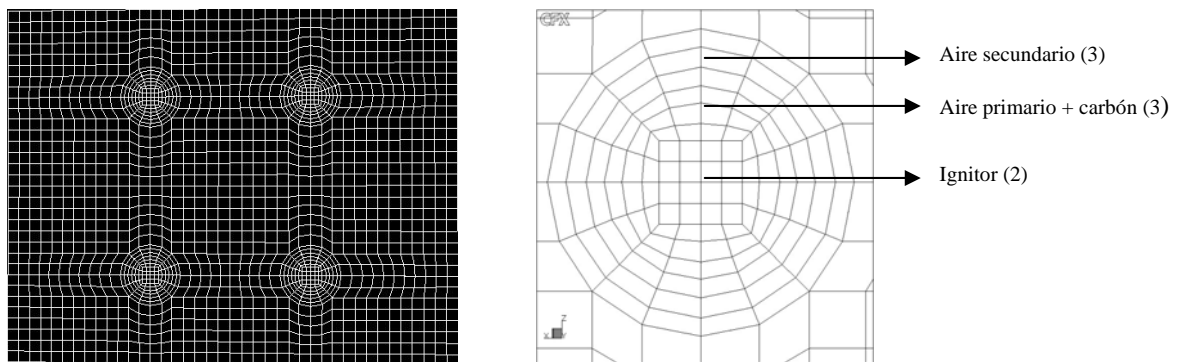


Fig. 4.4 Detalle de la geometría de la malla en el cinturón de quemadores

4.2.2 Modelos matemáticos

La resolución numérica de las ecuaciones del problema, implica el modelado de todos los procesos que tienen lugar en el hogar:

- Turbulencia
- Combustión del carbón: homogénea y heterogénea
- Transporte de partículas
- Radiación

El campo fluido se ha modelado, bajo la hipótesis euleriana, resolviendo las ecuaciones promediadas de Navier Stokes (RANS) a lo largo del dominio computacional. Dado que el flujo es turbulento, se ha utilizado el modelo estándar $k-\epsilon$ para cerrar el problema de turbulencia (Launder y Spalding, 1974). El flujo se presume débilmente compresible, haciendo que la

densidad solo dependa de la presión a través de la presión de referencia ($\rho = \rho(T, P_{ref.})$). Esta hipótesis representa una buena aproximación para problemas con número de Mach inferiores a 0.3. En las celdas cercanas a la pared, se toman perfiles logarítmicos para los campos de velocidad y otros escalares (temperatura, concentración de las especies) (Versteeg y Malasekera, 1995).

El modelo de partícula utilizado resuelve la combustión en tres etapas independientes: primero, la devolatilización; a continuación, la combustión de los volátiles dando lugar a los productos de combustión de la fase gaseosa; y finalmente la oxidación del residuo carbonoso. La devolatilización se modela mediante un mecanismo de una sola etapa (Badzioch y Hawksley, 1970), donde la tasa de liberación de los volátiles viene dada por una reacción tipo Arrhenius de primer orden. La posterior combustión de los volátiles, se modela bajo la hipótesis de combustión infinitamente rápida, de tal forma que, combustible y oxidante no pueden coexistir en la misma celda, ya que la reacción química es mucho más rápida que la mezcla molecular. Las fracciones máscas instantáneas de las especies se dan en términos de la fracción de mezcla instantánea; y las fracciones máscas promediadas de combustible, oxidante y productos, se obtienen a partir de la fracción de mezcla promedio y su varianza, considerando una función de densidad de probabilidad tipo β (Probability density function, PDF). Finalmente, la oxidación del residuo carbonoso, se modela combinando el modelo simple de una película (Baum y Street, 1971), con correlaciones de las propiedades del carbón, a través de la energía de activación y el factor preexponencial (Hurt y Mitchell, 1992), y un submodelo que describe la resistencia adicional de la ceniza a la difusión del oxidante hasta la superficie de la partícula (Hurt y Sun, 1998). Más detalles sobre el modelo de combustión pueden encontrarse en los Capítulos 2 y 3.

El modelo de combustión, se combina con el cálculo del transporte de las partículas. En este caso, se utiliza un planteamiento lagrangiano, asumiendo que la fase de las partículas está dispersa en el flujo principal, pero considerando su influencia en éste (two-way coupling). Se ignoran las interacciones entre partículas (Sommerfeld, 2000). El flujo másico de carbón, se modela simulando las trayectorias de una muestra de partículas (1920 trayectorias) que representa a la totalidad de las mismas. El número de trayectorias se corresponde con el número de celdas, cuyas caras definen las superficies de entradas del combustible (Fig. 4.4), multiplicado por diez tamaños de partícula, considerados para caracterizar la distribución granulométrica facilitada por la central ASM Brescia. De manera que, de cada nodo situado en las entradas (aire primario + carbón) de los cuatro quemadores, parten diez trayectorias correspondientes a los diez tamaños que representan la distribución.

Finalmente, la transferencia de calor por radiación, se simula con el método de transferencia discreta (Lockwood y Shah, 1981), que resuelve la ecuación de transporte de la intensidad radiativa a lo largo de trayectorias entre las paredes del dominio. Para evaluar las propiedades del gas, se considera un modelo de gas gris, con un valor de absorptividad constante para todo el espectro de frecuencias. La influencia de las partículas en la transferencia de calor por radiación, se incluye a través del término fuente en la ecuación de conservación de la energía.

La descripción detallada de los modelos empleados en las simulaciones, y una tabla resumen de los mismos (Tabla 3.2), se puede consultar en el Capítulo 3.

4.2.3 Condiciones de Contorno

Una vez planteados todos los modelos, se imponen las condiciones de contorno para resolver las ecuaciones que describen el problema (Versteeg y Malasekera, 1995):

1. En contornos abiertos:

- Entradas:

Para la fase continua (gas) se definen las componentes normal y angular de la velocidad. La componente normal se calcula a partir del caudal, sección de entrada y temperatura del aire, bajo la hipótesis de gas ideal. La componente angular se calcula a través de la geometría del quemador (Basu et al., 2000). También se definen la temperatura del flujo a la entrada, la intensidad de la turbulencia, y la longitud de escala de la disipación viscosa. Las condiciones de contorno relativas a la radiación se definen en términos de la emisividad, la radiación difusa y la temperatura de radiación. Para la fase de partículas, se define el caudal másico de combustible, su distribución granulométrica (Rosin Rammler), y la velocidad inicial, que al estar diluida en la fase gas, coincidirá con la velocidad inicial del flujo principal.

- Salidas:

En la salida, en el plenum de gases, se aplica condición libre: $\frac{\partial u_n}{\partial n} = 0$ y $\frac{\partial T}{\partial n} = 0$. En cuanto a las condiciones de radiación, éstas se definen de nuevo, en términos de la emisividad promedio, radiación difusa y temperatura de radiación.

2. En las paredes:

En las paredes se define la condición de no deslizamiento para la velocidad, y perfil logarítmico de velocidades para representar adecuadamente la turbulencia en la zona cercana a la pared. Las condiciones de contorno para la radiación se obtienen considerando una temperatura de pared

50 K superior a la temperatura de saturación del vapor que circula por el interior de los tubos de la caldera, y estableciendo un valor de emisividad de 0.8. Se considera radiación difusa en todas las paredes.

4.2.4 Verificación y Validación

La verificación y validación de la simulación numérica se ha llevado a cabo siguiendo el procedimiento descrito en el Capítulo 3. En primer lugar se realiza el proceso de verificación, que consiste en determinar los errores numéricos asociados a la simulación. El error numérico δ_{SN} se puede descomponer en tres componentes: error debido al método iterativo δ_I , error de discretización espacial δ_M , y error de discretización temporal δ_T (Ec. 4.1).

$$\delta_{SN} = \delta_I + \delta_M + \delta_T \tag{Ec. 4.1}$$

- Error debido al método iterativo δ_I : A través del propio proceso de resolución se han impuesto como condiciones mínimas de convergencia las siguientes premisas:

- Residuos de las ecuaciones de transporte < 1 E-4
- Error ecuación de continuidad < 1 E-2
- Variación puntual variable de control < 1 E-2

De esta manera, este error queda acotado, y puede considerarse despreciable ($\delta_I \approx 0$).

- Error debido a la discretización espacial δ_M : Para determinar el tamaño de malla adecuado se realizó un refinamiento progresivo, analizando la convergencia de la solución. Para ello, se consideraron tres tamaños de malla (Tabla 4.2) con una relación de tamaños $r_k = \sqrt{2}$ definida por la Ec. 4.2.

$$r_k = \Delta x_{ki} / \Delta x_{kj} \tag{Ec. 4.2}$$

Mallado	x	y	z
Fino	56	38	46
Medio	40	26	32
Grueso	28	19	24

Tabla 4.2 Número de elementos en cada dirección para los tres mallados considerados en el cinturón de quemadores

Habitualmente, como variable de control de la convergencia suele elegirse una variable directa de interés (velocidad, temperatura, etc.) determinada en un punto o en una región del dominio. En este caso, se ha utilizado como variable de control, el porcentaje de combustión alcanzado (base carbón) para un caso base considerado, estableciendo un criterio de convergencia para la variación de la variable de 0.1 %. De esta forma, se eligió un tamaño de malla intermedio, adecuado para el objeto de cálculo del problema.

- Error debido a la discretización temporal δ_T : Por tratarse de un problema estacionario, no procede su consideración.

Una vez acotado el error numérico de la simulación, se realiza el proceso de validación, que consiste en determinar los errores de modelado δ_S . El error de modelado δ_S se puede descomponer en tres componentes: error debido al método numérico δ_{SN} , error asociado a los datos experimentales δ_{SDP} , y error asociado a las hipótesis y simplificaciones de los modelos matemáticos δ_{SMA} (Ec. 4.3).

$$\delta_S = \delta_{SMA} + \delta_{SDP} + \delta_{SN} \quad (\text{Ec. 4.3})$$

El error asociado al método numérico δ_{SN} se ha acotado en la etapa de verificación. En cuanto a las otras contribuciones, la correspondiente al error de los datos experimentales se determinaría a partir de la precisión del método de medición y de los aparatos de medida, y la correspondiente al error de los modelos, se determinaría comparando los resultados experimentales y los obtenidos con el método computacional, teniendo en cuenta los errores calculados anteriormente.

Por tratarse de un estudio de sensibilidad, en el cual se analizan tendencias de los inquemados debidas a la variación de las condiciones de entradas, la comparación de los datos experimentales y de la simulación, es suficiente para validar la simulación. Aparte de la validación principal del contenido en inquemados o la eficiencia de la combustión, es deseable incluir la validación de alguna variable adicional. Desafortunadamente, la instrumentación disponible en la caldera de estudio no permite una validación detallada, limitando esta predicción al contenido en oxígeno de los gases a la salida de la caldera. De hecho, esta suele ser la situación habitual en calderas de potencia que están únicamente instrumentadas para el control y seguridad de la operación, pero no para llevar a cabo cálculos térmicos precisos. Además, la atmósfera agresiva a altas temperaturas y las partículas de ceniza en el hogar, hacen imposible la inserción de sondas de larga duración, limitando la información disponible en

tiempo real, a unas pocas medidas de la temperatura y concentración de oxígeno de los gases a la salida de la zona convectiva de la caldera.

4.3 Descripción de escenarios y estudio de sensibilidad

El objeto del estudio de sensibilidad, es determinar la influencia real de los parámetros que afectan a la formación de inquemados. De esta manera, será posible establecer unas pautas de actuación que permitan corregir y minimizar estas pérdidas. Y, por otro lado, para el desarrollo del sistema de predicción de inquemados, permite identificar qué parámetros, por su relevancia, se deberán incluir en el modelo final.

Los principales parámetros analizados en este estudio son:

1. Relación aire primario/carbón (manteniendo constante el caudal másico de aire total): Esta relación se establece variando la operación del sistema de molienda. El aire primario es el primer responsable de comenzar la combustión, creando una zona de recirculación, delante de los quemadores, que proporciona una fuente constante de ignición para la mezcla aire-combustible.
2. Nivel de exceso de aire (estequiometría): El exceso de oxígeno a la salida del hogar es una consigna de control habitual en todas las centrales térmicas. Se puede actuar sobre ella, modificando el caudal de aire impulsado por los ventiladores de tiro forzado. La combustión del carbón depende directamente de la presión parcial del oxidante en las inmediaciones de la partícula. Su influencia representa, como se verá, la contribución más importante.
3. Tamaño de las partículas: El tamaño de las partículas también viene determinado por el sistema de molienda, a través de la presión de molienda, del estado de las piezas de molienda y de la posición del clasificador. Las partículas con mayores tamaños, en general, necesitan más tiempo para completar la combustión.
4. Intensidad de rotación del aire secundario (swirl): La intensidad de rotación se modifica variando la posición de los álabes del quemador que dan entrada al aire secundario desde la caja de vientos. Una mayor intensidad en la rotación del aire secundario provoca un aumento en la rapidez y eficiencia de la mezcla entre el aire primario y secundario, acelerando la combustión. Además, sirve para estabilizar la llama. El índice de rotación n_{sw} , también conocido como número de swirl, se define como el cociente entre el momento

angular M experimentado por el fluido, y el momento axial K por una longitud característica L_c (p.ej. el diámetro hidráulico) (Basu et al., 2000) (Ec. 4.4).

$$n_{sw} = \frac{M}{K \cdot L_c} = \frac{U_t \cdot r}{U_k \cdot L_c} \quad (\text{Ec. 4.4})$$

5. Desigualdades en el reparto aire/combustible entre quemadores: Este efecto suele responder a una consigna de operación, o bien a un diseño inadecuado de los conductos que comunican los molinos y los quemadores. Esto, da lugar a patrones de flujos que pueden provocar la interacción entre los distintos fuegos de la caldera, y en consecuencia, alterar las trayectorias descritas por las partículas, influyendo de una manera notable en su combustión (Lockwood y Parodi, 1998).

Para estudiar la influencia de estos parámetros se han realizado 64 simulaciones con los datos facilitados por la central ASM Brescia. Algunas de las simulaciones no se corresponden con las condiciones habituales de operación de la central. Con ellas, se pretende analizar la influencia de estos parámetros en situaciones de operación distintas a las del punto de diseño (caso base). Las primeras 32 simulaciones evalúan variaciones aisladas de un parámetro, manteniendo el resto de los parámetros constantes. A continuación, con los parámetros más influyentes, se realiza un análisis factorial de experimentos, simulando otros 32 escenarios, para determinar las interacciones entre ellos.

Una vez realizadas las simulaciones, la cantidad de inquemados en cenizas, se determina a partir de las trayectorias de las partículas calculadas con el código CFD. El código genera un archivo que contiene para cada una de las partículas su posición, velocidad, tiempo, temperatura, diámetro, masa, etc., cada vez que atraviesan una celda. Al mismo tiempo, el programa, una vez realizada una iteración completa (flujo y partículas), devuelve la cantidad de volátiles y productos del residuo carbonoso transferidos a la fase gas. Como los volátiles se transfieren completamente a la fase gas antes de que las partículas abandonen el dominio, las pérdidas por carbono inquemado pueden estimarse sumando la masa final de las partículas que abandonan el dominio, considerando que están formadas exclusivamente por carbono y cenizas.

4.3.1 Análisis de parámetros aislados

Para llevar a cabo el análisis de parámetros aislados, se ha establecido una simulación base (Caso 1), que corresponde a las condiciones nominales de operación de la unidad de estudio (carga nominal, distribución aire/carbón idéntica en todos los quemadores, condiciones de

caldera limpia). El combustible de referencia utilizado en todo el estudio de sensibilidad ha sido el carbón Guasare (Tabla 4.1). En la Tabla 4.3 se resumen las condiciones de la simulación del caso base (Caso 1).

Condiciones de operación		
Aporte de gas natural	0	m ³ /s
Consumo de carbón	<i>Total</i>	7.08
	<i>Por molino / por quemador</i>	3.61/1.805
Caudal másico total de aire en el hogar	93.119	kg/s
Aire primario + Aire de atemperación	14.319	kg/s
Aire secundario	78.8	kg/s
% Distribución del carbón por quem. frente al total	25	%
Relación Aire primario / Carbón	1.98	kg aire/kg carbón
Exc. de aire a la salida de la caldera (estimado)	37	%
Exc. de oxígeno a la salida de la caldera (estimado)	5.5	% (w.b.)
Temperatura aire primario	80	°C
Temperatura aire secundario	260	°C

Tabla 4.3 Datos de la simulación del Caso 1 (Caso Base)

Para caracterizar las fracciones por tamaños facilitadas por la central ASM Brescia, se ha utilizado una distribución Rosin Rammler de parámetros $d_{pm} = 50 \mu\text{m}$ y $n_{rr} = 1.02$. La distribución, se ha dividido en diez intervalos que contienen el mismo caudal másico de carbón. El diámetro medio que caracteriza cada intervalo se muestra en la Tabla 4.4.

El resto de simulaciones son variaciones de algún parámetro respecto al caso base. Las condiciones de las simulaciones 2 - 32 se resumen en la Tabla 4.5.

Intervalo	% Acumul.	Diámetro caract. (μm)
0 – 10 %	5 %	2.5
10 – 20 %	15 %	7.7
20 – 30 %	25 %	13.6
30 – 40 %	35 %	20.1
40 – 50 %	45 %	27.9
50 – 60 %	55 %	36.9
60 – 70 %	65 %	48.3
70 – 80 %	75 %	63.4
80 – 90 %	85 %	86.2
90 – 100 %	95 %	134.9

Tabla 4.4 Distribución tamaños de partícula (Caso 1)

Caso nº	Descripción	Incidencia	Caso Base
2	Relación Caudal aire primario/carbón	$Q_{prim}/Q_{carbón} = 3$	$Q_{prim}/Q_{carbón} = 2$
3		$Q_{prim}/Q_{carbón} = 2.5$	
4		$Q_{prim}/Q_{carbón} = 2.25$	
5		$Q_{prim}/Q_{carbón} = 1.75$	
6		$Q_{prim}/Q_{carbón} = 1.5$	
7		Exceso de oxígeno	
8	$\%O_2 = 5$		
9	$\%O_2 = 4.5$		
10	$\%O_2 = 4$		
11	$\%O_2 = 3$		
12	Tamaño de partícula medio	Diámetro característico ² = $60\mu m$	Diámetro carac. = $50\mu m$
13		Diámetro característico ² = $80\mu m$	
14		Diámetro característico ² = $100\mu m$	
15	Intensidad de rotación del aire secundario (swirl)	Swirl = 2	Swirl = 1
16		Swirl = 3	
17	Distribución desigual del aire primario entre los quemadores de una misma fila; es decir entre los quemadores que han sido alimentados por un mismo molino.	Quem. 1, 4 = 47.5%, Quem. 2,3 = 52.5%	Quem. 1, 2, 3, 4 = 25%
18		Quem. 1, 4 = 45%, Quem. 2,3 = 55%	
19		Quem. 1, 4 = 42.5%, Quem. 2,3 = 57.5%	
20		Quem. 1, 4 = 40%, Quem. 2,3 = 60%	
21		Quem. 1, 3 = 47.5%, Quem. 2,4 = 52.5%	
22		Quem. 1, 3 = 45%, Quem. 2,4 = 55%	
23		Quem. 1, 3 = 42.5%, Quem. 2,4 = 57.5%	
24		Quem. 1, 3 = 40%, Quem. 2,4 = 60%	
25	Distribución desigual del aire primario entre los molinos, pero idéntica entre los quemadores alimentados por el mismo molino.	Molino 1 = 60%, Molino 2 = 40%	Molino 1, 2 = 50%
26		Molino 1 = 40%, Molino 2 = 60%	
27		Molino 1 = 57.5%, Molino 2 = 42.5%	
28		Molino 1 = 42.5%, Molino 2 = 57.5%	
29		Molino 1 = 55%, Molino 2 = 45%	
30		Molino 1 = 45%, Molino 2 = 55%	
31		Molino 1 = 52.5%, Molino 2 = 47.5%	
32		Molino 1 = 47.5%, Molino 2 = 52.5%	

Tabla 4.5 Plan de simulaciones análisis de sensibilidad

La Figura 4.5 muestra un esquema de la disposición de los molinos y los quemadores en la caldera utilizando la numeración seguida en este trabajo. El molino 1 alimenta los quemadores de la fila superior, quedando, si se mira frontalmente el hogar desde el exterior, el quemador 1 a la izquierda, y el quemador 2 a la derecha. De igual manera, el molino 2 alimenta los quemadores de la fila inferior, quedando el quemador 3 a la izquierda, y el quemador 4 a la derecha.

² Distribución Rosin Rammler

d_{pm}	n_{rr}	$< 75 \mu m$ (%)	$75 - 150 \mu m$ (%)	$150 - 300 \mu m$ (%)	$> 300 \mu m$ (%)
60	1.02	71.51	20.65	7.27	0.57
80	1.02	60.79	24.23	12.86	2.13
100	1.02	52.56	25.40	17.38	4.66

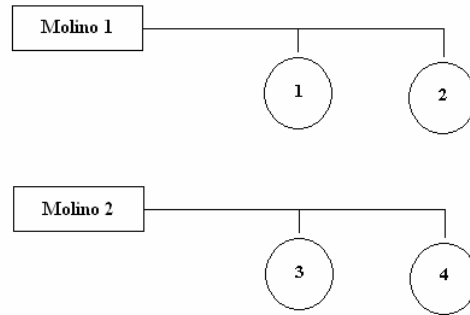


Fig. 4.5 Esquema de la disposición de molinos y quemadores (ASM, Brescia)

La validación de las simulaciones se ha llevado a cabo según la metodología explicada en la sección 4.2.4. Para ello, una vez realizado el proceso de verificación de la resolución numérica de las simulaciones, se ha procedido a su validación, contrastando los valores de la concentración de oxígeno predeterminados para cada caso, con los obtenidos en las simulaciones en la salida del hogar. La Figura 4.6 muestra los resultados obtenidos, y permite aceptar la validez de las simulaciones.

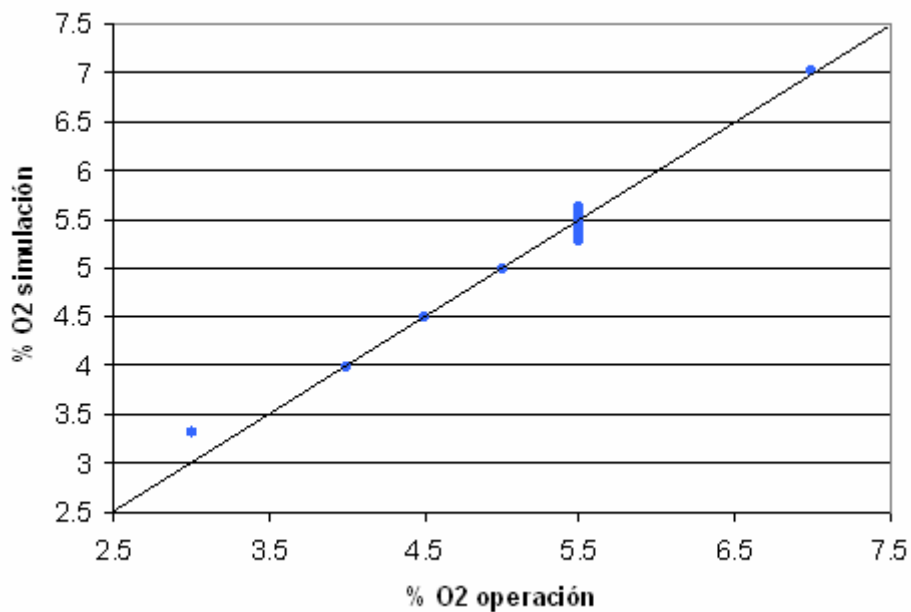


Fig. 4.6 % O₂ operación vs. % O₂ simulación

Tras resolver el Caso 1 (Caso Base), se obtuvo un porcentaje de inquemados en cenizas volantes del 7.08 %. Este resultado, por sí solo, no aporta demasiada información. Además, no puede ser comparado directamente con una medida puntual de inquemados en la planta ya que se han utilizado valores promedio en la construcción de la simulación. Hay que recordar que el objetivo en esta etapa del estudio, es determinar la sensibilidad de los diferentes parámetros que afectan a la formación de inquemados, y no su obtención directa para unas condiciones

particulares de operación. Esa tarea se llevará a cabo en los Capítulos 6 y 7, en la validación del modelo de combustión y del sistema global de predicción, respectivamente. Sin embargo, si se analizan en conjunto los resultados de todas las simulaciones, se puede determinar el rango de variación de los parámetros y evaluar comparativamente su importancia relativa en la formación de inquemados. A continuación, se presentan los resultados, analizando individualmente cada uno de los factores (Caso Base representado por un círculo):

1. Relación aire primario/carbón (manteniendo constante el caudal másico de aire total):
 En los Casos 2-6, se analiza la variación de la relación aire primario/carbón, cuando el caudal total de aire –aire primario mas aire secundario– permanece constante. La Figura 4.7, muestra como el resultado en inquemados más favorable, se obtiene para una relación aire/combustible de dos, que coincide con el Caso Base (círculo). Este resultado es el esperado, ya que, en condiciones nominales de operación, ésta es la relación de diseño. Para relaciones por debajo de este valor, se produce un aumento de las pérdidas por inquemados. Esto es debido a que al disminuir la cantidad de aire primario en favor del aire secundario, se obtiene una estequiometría más pobre en la zona próxima a los quemadores, donde tiene lugar el inicio de la combustión.

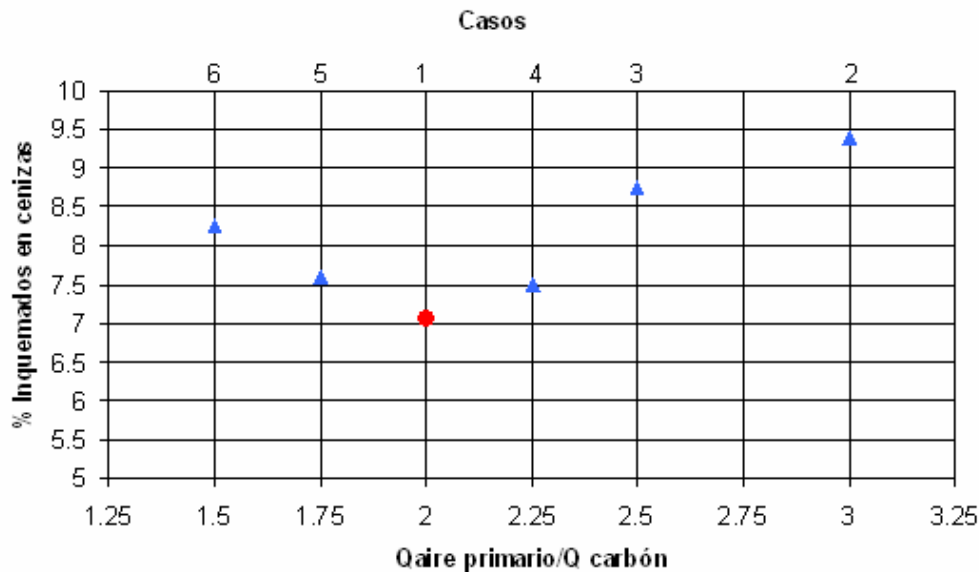


Fig. 4.7 % de inquemados en cenizas vs. Relación aire primario/carbón

Para relaciones por encima del valor de diseño, de nuevo se obtiene un aumento de las pérdidas por inquemados, debido a que, al reducir el flujo de aire secundario, disminuye la intensidad de la recirculación exterior. Esto provoca una disminución en la eficacia del mezclado del aire primario y secundario, y en consecuencia una disminución de la temperatura máxima alcanzada en la combustión. Sin embargo, como se verá más adelante, a partir del análisis factorial

multiparámetro, este factor está muy relacionado con el exceso de oxígeno, y su importancia, bajo ciertas condiciones de operación, puede ser superior a la de otros factores a priori más determinantes.

2. Nivel de exceso de aire (Estequiometría):

La influencia del nivel de exceso de aire, se analiza en los Casos 7-11. En general, en las plantas de generación, este valor, que se mide normalmente en la salida de caldera, sirve de consigna para ajustar los caudales de aire para una carga de carbón determinada, actuando sobre el aire primario, secundario, o ambos. En las simulaciones, mantener constante la relación aire primario/carbón, implica fijar la admisión a los alimentadores de los molinos para un caudal de carbón fijo, de manera que la variación del aire introducido en el hogar, se consigue a través de la variación del caudal de aire secundario. En la Figura 4.8 se muestra la gran influencia que tiene este factor, especialmente con valores inferiores al 4 %, donde los inquemados aumentan significativamente, debido a la disminución de la concentración de oxidante. Sin duda, es el factor más determinante.

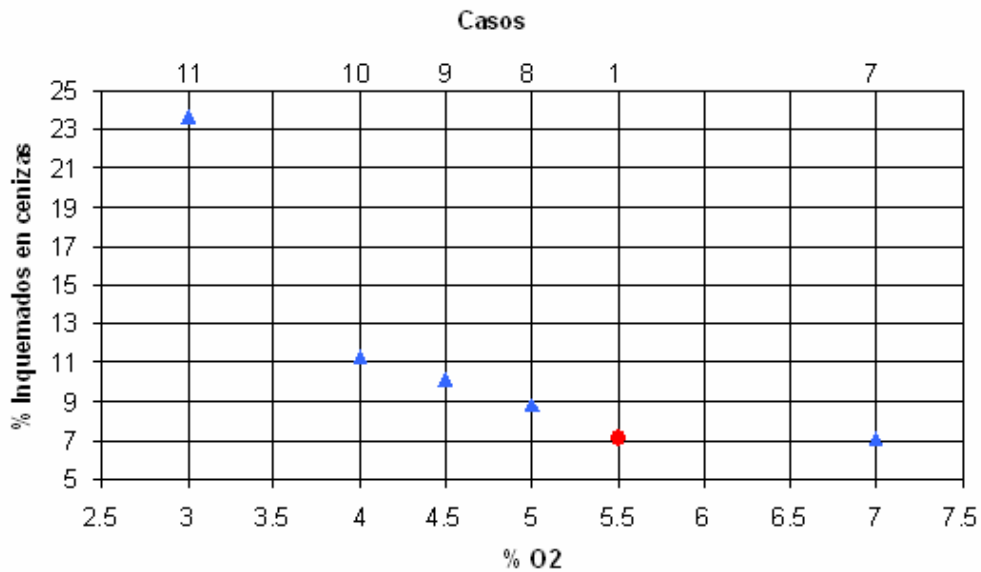


Fig. 4.8 % de inquemados en cenizas vs. Exceso de O₂

3. Tamaño de las partículas:

La influencia del tamaño de las partículas en las pérdidas por inquemados se analiza en los Casos 12-14. En general, dado un caudal másico de carbón, aumentando el tamaño de las partículas, se disminuye el área superficial total expuesta al oxidante requiriendo más tiempo para completar la combustión, y por lo tanto, aumentando los inquemados. El tamaño de partícula deseado, se consigue variando la acción mecánica de las piezas de molienda y

ajustando la posición del clasificador. En la Figura 4.9 se muestra un incremento casi lineal de los inquemados con el tamaño de la partícula. También, se puede observar, una influencia más notable que en el caso de la relación aire primario/carbón, pero todavía lejos del efecto provocado por la modificación de las condiciones de exceso de oxígeno. Sin embargo, como se verá en el análisis factorial, su importancia queda enmascarada por otros factores más influyentes, no siendo en la mayoría de los casos, un factor determinante en la formación de inquemados en los rangos habituales de operación de las centrales ($d_{pm} < 100 \mu\text{m}$).

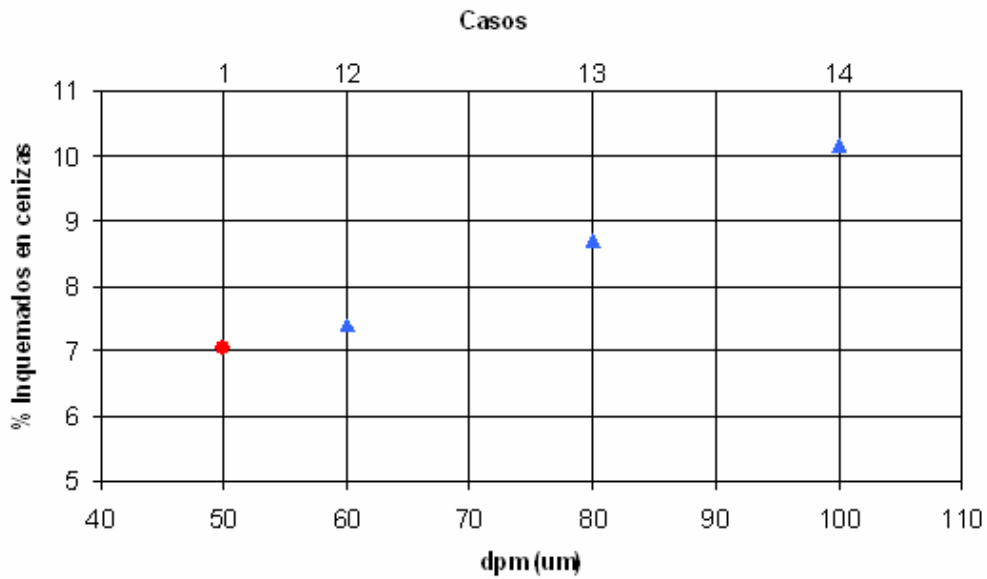


Fig. 4.9 % de inquemados en cenizas vs. Diámetro medio distribución Rosin Rammler (μm)

4. Intensidad de rotación del aire secundario (swirl):

La influencia de la intensidad de rotación del aire secundario se analiza en los Casos 15-16. Aumentar ésta, genera una mayor intensidad en el lazo de recirculación que rodea la entrada del aire primario, favoreciendo la combustión y la estabilidad de la llama. Sin embargo, existe un límite; si esta rotación es muy intensa, el aire secundario puede distorsionar la recirculación interna que se forma frente al quemador, afectando a la estabilidad de la llama y al mezclado del aire primario y secundario. En la Figura 4.10, se muestra como disminuyen mínimamente los inquemados al aumentar la intensidad de rotación. Por último, hay que reparar también en que, así como en un principio los quemadores se diseñaban para alcanzar grandes intensidades de mezcla manteniendo la estabilidad de la llama, los últimos diseños buscan el efecto contrario, conseguir una mezcla mas escalonada que disminuya la formación de NO_x , aun a costa de aumentar, en principio, la producción de inquemados.

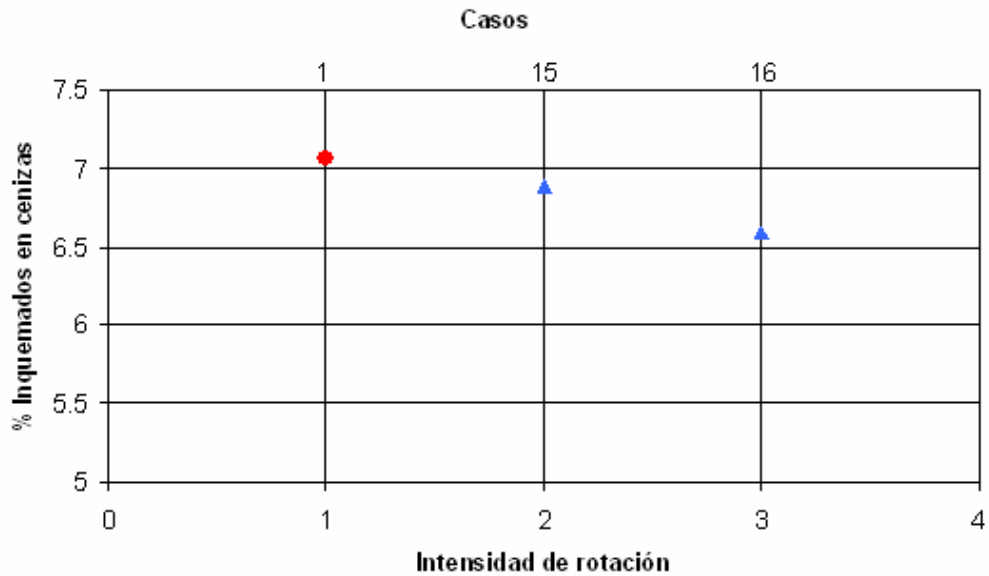


Fig. 4.10 % de inquemados en cenizas vs. Factor de rotación (número de swirl)

5. Desigualdades en el reparto aire/combustible entre quemadores:

El efecto sobre los inquemados derivado de un reparto desigual del caudal aire/combustible entre los distintos quemadores se simula en los Casos 17-32:

- Desigualdades entre quemadores alimentados desde distintos molinos (configuraciones 1 y 2, Casos 25-32): Este tipo de configuraciones se pueden dar como consecuencia de:
 - Una estrategia de operación a plena carga (configuración tipo 1), para reducir NO_x , al crear en el nivel inferior una atmósfera más reductora, y en el superior una atmósfera más oxidante.
 - Una estrategia de operación a bajas cargas (configuración tipo 2), para alcanzar temperaturas suficientemente altas en la zona superior de la caldera que permitan una producción de vapor adecuada.

Este efecto, también puede ser causado por algún problema en la operación de alguno de los molinos.

- Desigualdades entre quemadores alimentados desde el mismo molino (configuraciones 3 y 4, Casos 17-24): Este tipo de configuraciones se pueden dar como consecuencia de:

- Un mal diseño –inicial o como consecuencia de alguna modificación en la planta, deterioro, etc.– en los conductos que transportan el aire primario y el carbón desde los molinos a los quemadores.

En cada una de las dos situaciones, se han considerado dos configuraciones posibles, y se han simulados desigualdades en caudal másico del 2.5 %, 5 %, 7.5 % y 10 %. En la Figura 4.11 se muestran las 4 configuraciones simuladas, donde el signo “+” indica que el caudal mayor entra por esos quemadores, y el caudal menor por los quemadores señalados con un signo “-”. Por ejemplo, suponiendo un caudal másico de carbón de 10 kg/s y una desigualdad del 10 %; en el caso de simular la configuración 1, el reparto entre los cuatro quemadores sería el siguiente: como la desigualdad tiene lugar entre los molinos, en lugar de alimentar cada uno el 50 % del total, el molino que alimenta la fila superior –ver quemadores con signo “-”– aporta el 40 % del total, y el molino que alimenta la fila inferior –ver quemadores con signo “+”– el 60 % restante. Como en este caso, la distribución entre quemadores alimentados por el mismo molino se considera idéntica, tenemos unos caudales para los quemadores 1 y 2 (ver Figura 4.5) de 2 kg/s cada uno, y de 3 kg/s cada uno para los quemadores 3 y 4. De manera análoga, se obtienen los caudales de carbón para el resto de configuraciones (ver Tabla 4.5).

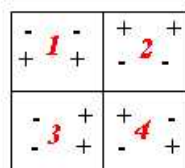


Fig. 4.11 Configuración de las distintas desigualdades simuladas

La Figura 4.12 analiza las configuraciones 1 y 2. El primer resultado llamativo es que aumentando el porcentaje de desequilibrio, se produce un incremento de los inquemados comparable al que se obtenía aumentando el tamaño de partícula por encima de las 100 µm. Este resultado viene a mostrar la importancia de estas asimetrías en la operación de la caldera. Otro resultado interesante, y que en principio parece sorprendente, es que se obtienen más inquemados en la configuración tipo 1 que en la tipo 2. Siendo que en la segunda configuración, se introduce mayor caudal de carbón por las filas superiores, donde el tiempo de residencia de las partículas en el hogar es menor, se esperaría el resultado contrario. Para poder explicar este resultado hay que recurrir al comportamiento especial de la última fila de quemadores en el hogar, donde la trayectoria de las partículas se ve muy influenciada por la presencia de la tolva (ver Figura 4.13), donde se forma un lazo de recirculación, que aleja a las partículas de la zona céntrica del quemador, que es donde se alcanzan las mayores temperaturas. Sin embargo, como se verá a partir del análisis factorial, combinando la influencia de todos los

factores, este comportamiento solo se manifiesta en el caso de operar la caldera con valores de alto exceso de oxígeno. En el caso de operar la caldera con valores de bajo exceso de oxígeno, a pesar de la distorsión en el flujo de las filas inferiores producida por la tolva, el tiempo de residencia resulta más determinante en la formación de inquemados, y por lo tanto, se dan valores de inquemados mayores para una configuración tipo 2.

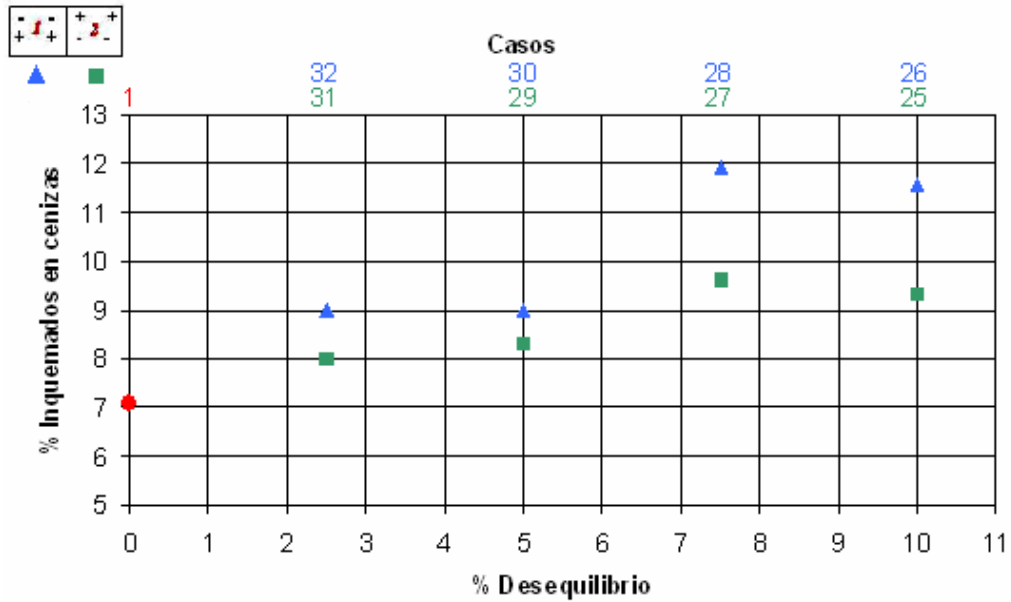
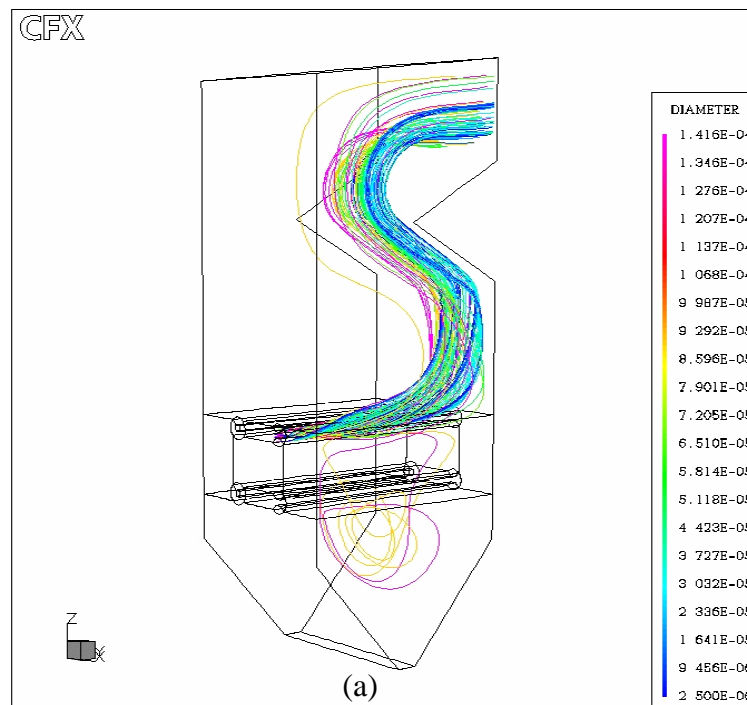


Fig. 4.12 % de inquemados en cenizas vs. % Desequilibrio (Config. 1 y 2)



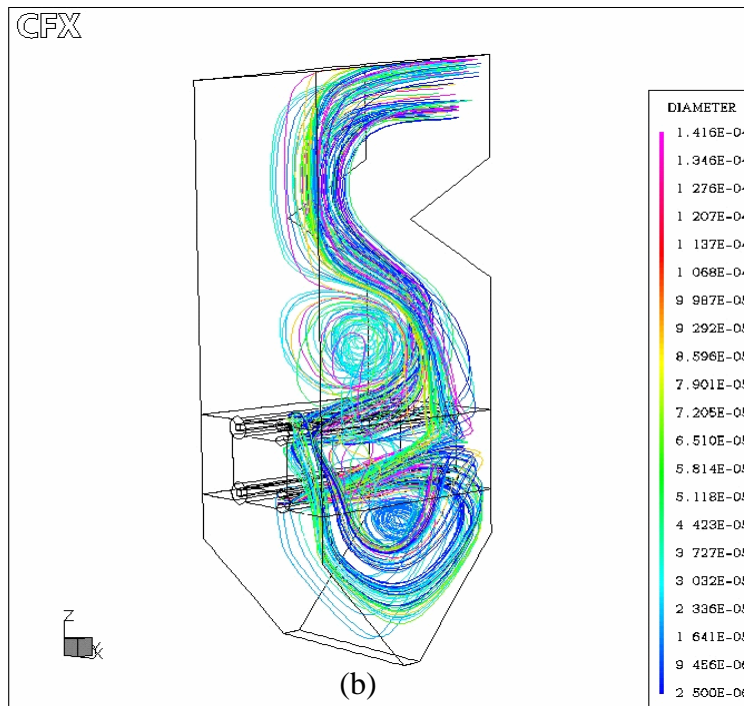


Fig. 4.13 Comparación de las trayectorias seguidas por las partículas dependiendo de la fila de quemadores por la que son inyectadas: fila superior (a) y fila inferior (b)

La Figura 4.14 muestra los resultados obtenidos para las configuraciones 3 y 4. Estos resultados revelan un incremento muy importante en los inquemados conforme aumenta la asimetría entre quemadores. Este hecho se acentúa en el caso de la configuración 3, donde la asimetría es completa en todo el hogar.

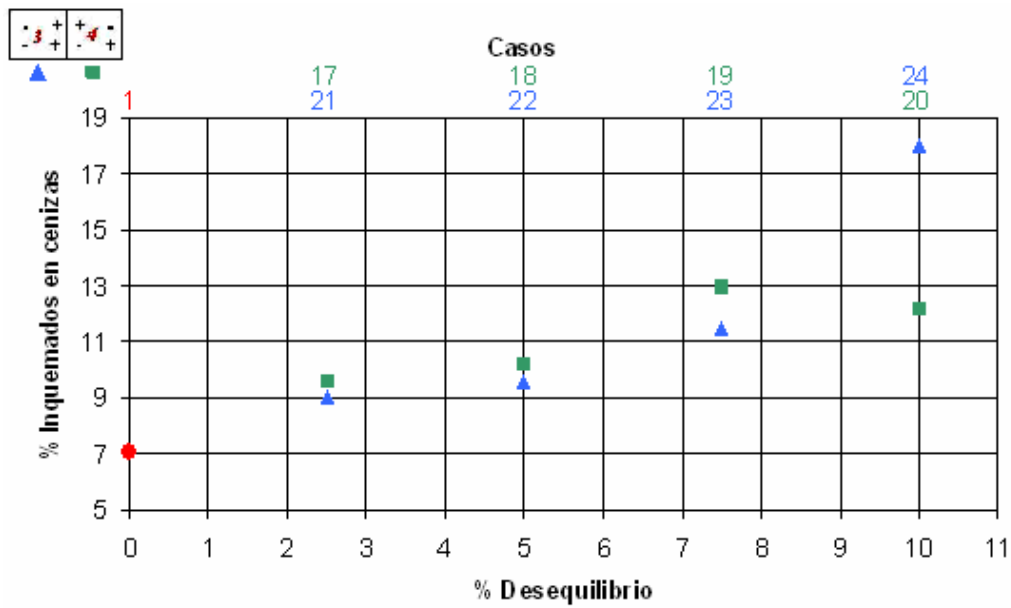


Fig. 4.14 % de inquemados en cenizas vs. % Desequilibrio (Config. 3 y 4)

De momento, se han analizado todos los parámetros aisladamente. Para poder comparar la influencia entre los distintos parámetros estudiados, la Figura 4.15, los representa conjuntamente. La línea de trazos muestra el resultado obtenido en el Caso Base.

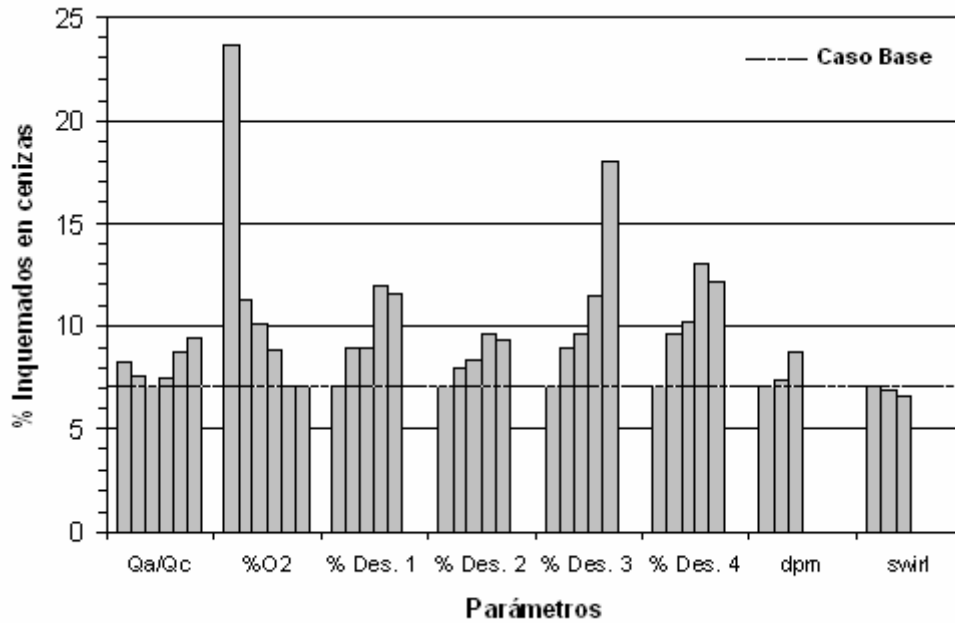


Fig. 4.15. Cantidad de inquemados para todos los parámetros del estudio

Se observa como el valor de exceso de oxígeno es el factor más influyente en la formación de inquemados, especialmente con niveles por debajo del 4 % de exceso de oxígeno. El resto de factores, tales como las asimetrías de caudales entre quemadores, el tamaño de partícula, y la relación de caudal de aire primario y carbón, pueden ser comparables en influencia al exceso de oxígeno cuando éste se mueve por encima del 4 %. Sin embargo, en una planta real, todos estos efectos ocurren al mismo tiempo, y no de una manera aislada. Por ello, la siguiente parte del estudio se centra en analizar las interacciones entre estos factores, y cuantificar su contribución a la formación de inquemados en condiciones normales y anómalas de operación.

4.3.2 Análisis multiparámetro

Se ha visto como existen muchos factores que afectan a la formación de inquemados en una caldera de carbón pulverizado, y por lo tanto, no es fácil diferenciar las contribuciones individuales y las interacciones entre ellos. Un diseño eficiente de experimentos reduce el número de pruebas necesario para completar el estudio. El uso de técnicas estadísticas puede ayudar en esta tarea, a través del análisis factorial. Un diseño de experimentos factorial, extrae información de los factores de interés implicados en un problema más eficientemente de lo que se obtendría con un diseño tradicional. Los diseños factoriales son especialmente útiles cuando

se da la variación simultánea de distintos factores en un problema. En este caso, la varianza de las observaciones es la suma de las varianzas de las distintas fuentes. Con este método, la variación total de un experimento puede dividirse en variaciones debidas a factores individuales o a interacciones de éstos. El uso de un análisis factorial tiene numerosas ventajas. En primer lugar, minimiza el número de experimentos a realizar, y tiene una gran flexibilidad. En segundo lugar, los diseños factoriales son muy eficientes. En lugar de realizar estudios individuales, se pueden combinar en un único estudio. Finalmente, la utilización de un diseño factorial es la única herramienta eficiente para examinar el efecto de las interacciones (Lipson y Sheth, 1977; Montgomery, 1991).

Para la realización del diseño de experimentos, se han seleccionado dos niveles de los factores más influyentes en la producción de inquemados. A la vista del estudio individual de factores de la Sección 4.3.1 (Figura 4.15), se ha excluido del estudio multiparámetro la influencia del factor de rotación –swirl–, quedando agrupados los restantes, en 5 grupos (ver Figura 4.16):

- A – Relación caudal aire primario/carbón.
- B – Exceso de O₂.
- C – Tamaño de partícula.
- D – Desigualdad de caudal másico entre quemadores (%).
- E,F – Cuatro configuraciones para las desigualdades de caudal másico entre quemadores.

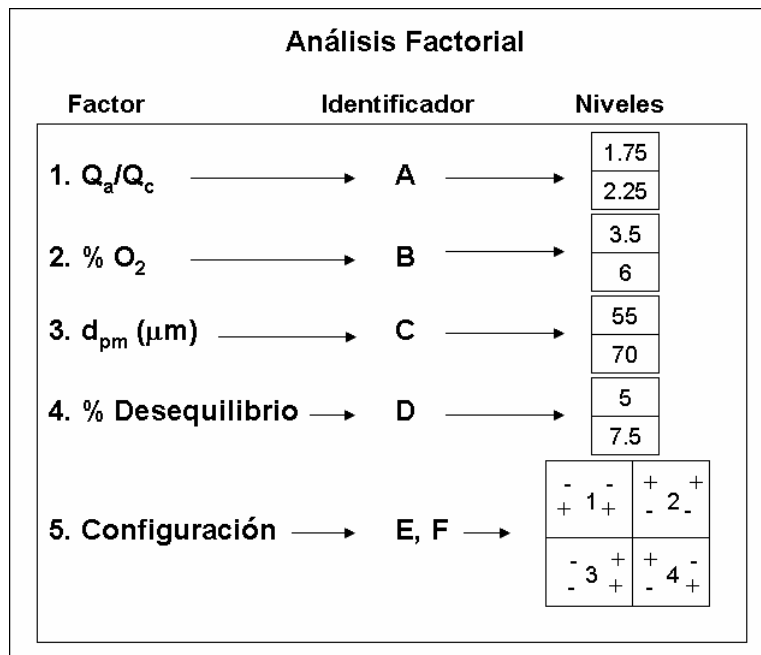


Fig. 4.16 Diseño del análisis multiparámetro

Para caracterizar completamente este diseño, se necesitan 64 simulaciones ($2 \times 2 \times 2 \times 2 \times 4 \rightarrow 64$). Sin embargo, para reducir el número de simulaciones, y por lo tanto, el tiempo de calculo necesario, se ha aplicado un análisis factorial fraccionado. De esta manera, sólo se realiza una fracción del número total de posibles combinaciones. Esta fracción se elige adecuadamente para que los resultados sean representativos del experimento completo. Esta reducción, consiste en considerar despreciables las interacciones de mayor orden entre los factores. Posteriormente, si se viera que alguna de las interacciones inicialmente desestimada adquiere una relevancia mayor al realizar las simulaciones, basta ir completando con escenarios adicionales hasta alcanzar, si fuera necesario, el estudio factorial completo. En este caso, se ha diseñado un estudio factorial fraccionado en dos niveles llevándose a cabo 32 simulaciones ($2^{4-1} \times 4 \rightarrow 32$). Para obtener un diseño de máxima resolución se ha elegido un generador $I = ABCD$ (Montgomery, 1991). A continuación, se construye el diseño básico correspondiente a la configuración 2^3 con los factores A, B y C, donde la etiqueta “-1” indica el nivel inferior del factor considerado y la etiqueta “+1” su nivel superior. El cuarto factor D, se despeja de la función de generación $I = ABCD$, obteniéndose $D = ABC$. Así, el nivel de D es el producto de los signos más y menos en las columnas A, B y C. Por último, se incluyen dos factores adicionales E y F cuyas combinaciones “-1 -1”, “+1 -1”, “-1 +1” y “+1 +1” corresponden con las configuraciones 1, 2, 3 y 4 respectivamente (factor X). En la Tabla 4.6 se resume el desarrollo del diseño fraccionado.

Simulación	Tratamiento	A	B	C	D	E	F	X = E x F
1	(1)	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1
2	e	-1	-1	-1	-1	1	-1	-1
3	f	-1	-1	-1	-1	-1	1	-1
4	ef	-1	-1	-1	-1	1	1	1
5	ab	1	1	-1	-1	-1	-1	1
6	abe	1	1	-1	-1	1	-1	-1
7	abf	1	1	-1	-1	-1	1	-1
8	abef	1	1	-1	-1	1	1	1
9	ac	1	-1	1	-1	-1	-1	1
10	ace	1	-1	1	-1	1	-1	-1
11	acf	1	-1	1	-1	-1	1	-1
12	acef	1	-1	1	-1	1	1	1
13	ad	1	-1	-1	1	-1	-1	1
14	ade	1	-1	-1	1	1	-1	-1
15	adf	1	-1	-1	1	-1	1	-1
16	adef	1	-1	-1	1	1	1	1
17	bc	-1	1	1	-1	-1	-1	1
18	bce	-1	1	1	-1	1	-1	-1
19	bcf	-1	1	1	-1	-1	1	-1
20	bcef	-1	1	1	-1	1	1	1
21	bd	-1	1	-1	1	-1	-1	1
22	bde	-1	1	-1	1	1	-1	-1
23	bdf	-1	1	-1	1	-1	1	-1
24	bdef	-1	1	-1	1	1	1	1
25	cd	-1	-1	1	1	-1	-1	1
26	cde	-1	-1	1	1	1	-1	-1
27	cdf	-1	-1	1	1	-1	1	-1
28	cdef	-1	-1	1	1	1	1	1
29	abcd	1	1	1	1	-1	-1	1
30	abcde	1	1	1	1	1	-1	-1
31	abcdf	1	1	1	1	-1	1	-1
32	abcdef	1	1	1	1	1	1	1

Tabla 4.6 Diseño de experimentos factorial $2^{4-1} \times 4$

De la interpretación de los identificadores y de los niveles asignados a cada factor de la Tabla 4.6, se obtiene la Tabla 4.7, que resume las condiciones de las simulaciones (sombreado) y los resultados de inquemados obtenido para cada una de las simulaciones.

	Qa/Qc		%O2		dp (µm)		% Desequilibrio		Configuración				% Inq.
	1.75	2.25	3.5	6	55	70	5	7.5	1	2	3	4	
1													13.02
2													28.29
3													27.57
4													16.69
5													8.01
6													7.13
7													10.19
8													6.78
9													22.51
10													32.02
11													27.03
12													23.56
13													23.81
14													40.73
15													34.78
16													27.38
17													14.89
18													8.72
19													8.67
20													13.01
21													11.43
22													6.57
23													10.73
24													8.95
25													15.06
26													25.01
27													29.93
28													16.19
29													6.99
30													6.46
31													11.26
32													6.16
MC	Qa/Qc = 2		% O2 = 5.5		dp = 50 µm		% Desequ. = 0						7.08

Tabla 4.7 Descripción de las simulaciones del análisis factorial. (MC → Caso Base)

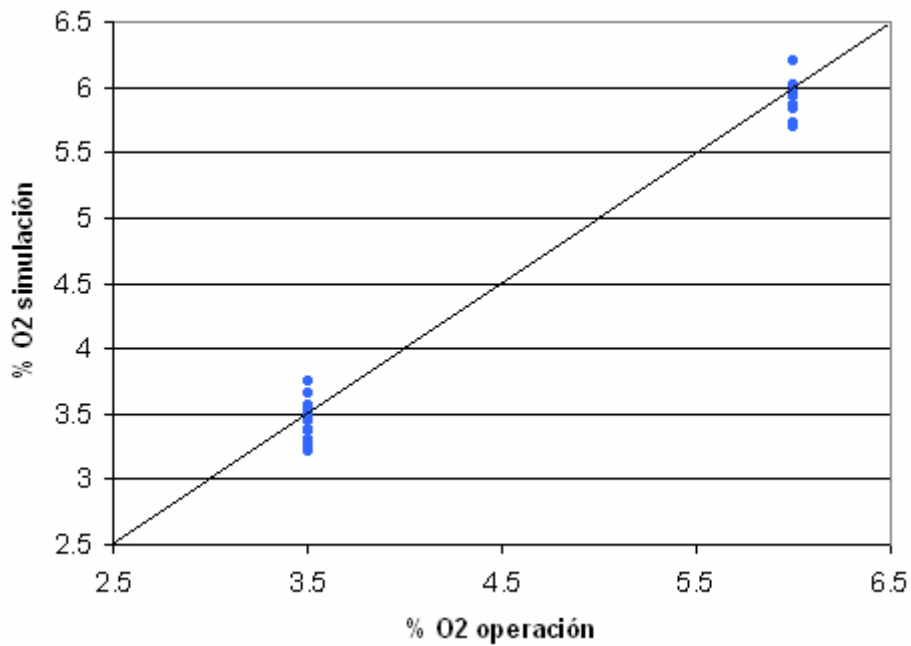


Fig. 4.17 % O₂ operación vs. % O₂ simulación

Al igual que con las 32 simulaciones del análisis individual de factores, una vez realizado el proceso de verificación de la resolución numérica de las simulaciones, se ha procedido a su validación contrastando los valores de la concentración de oxígeno predeterminados para cada caso, con los obtenidos en las simulaciones en la salida del hogar. La Figura 4.17 muestra los resultados obtenidos, y permite aceptar la validez de las simulaciones.

Para analizar el efecto de los distintos parámetros considerados en el estudio, se lleva a cabo el análisis de la varianza. Un estimador insesgado de la varianza de los datos de la muestra es la media de cuadrados (SSi). Por tratarse de un diseño factorial fraccionado, los efectos obtenidos a partir del diseño son los efectos principales más una combinación lineal de las observaciones asociadas con ese efecto, que puede considerarse despreciable (Tabla 4.8).

Efecto	Efecto Real
A	A + BCD \approx A
B	B + ACD \approx B
C	C + ABD \approx C
D	D + ABC \approx D
AB	AB + CD
AC	AC + BD
BC	BC + AD

Tabla 4.8 Efecto reales en un análisis fraccionado 2⁴⁻¹

De los resultados obtenidos, la primera conclusión, evidente a partir de las simulaciones individuales, es que el nivel de exceso de oxígeno es el factor más influyente independientemente de los otros factores. Realizando el estudio de la varianza, para el total de las simulaciones, se confirma este resultado (Tabla 4.9).

Tratamientos	A (Qa/Qc)	B (%O2)	C (dpm)	D (% Desq.)	AB + CD	AC + BD	BC + AD
SSi	200.7	8296.7	26.6	22.3	801.0	120.5	93.4

Tabla 4.9 Análisis de la varianza par el total de las simulaciones

En el análisis individual de factores se mostró como la relación aire primario/carbón influía en la formación de inquemados en menor proporción que otros factores como el tamaño de partícula o el grado de desequilibrio entre quemadores. Sin embargo, observando la Tabla 4.9, se ve como este factor, cuando lo analizamos variando el resto de condiciones, muestra una importancia –nueve veces mayor que los otros dos factores– que quedaba oculta en el análisis individual de factores. Además, del análisis de interacciones, se ve como la interacción de éste con el nivel de oxígeno (AB) es bastante mayor que las acciones individuales de los otros

factores. Las otras interacciones, aunque menores, muestran una variación mayor, dependiendo del nivel de oxígeno, que las que se obtienen individualmente.

Para obtener la influencia de las cuatro configuraciones propuestas, y ver como influyen en la variación del resto de factores, el problema se ha dividido en cuatro bloques, realizando un análisis de la varianza para cada una de ellas. Las dos primeras configuraciones, analizan situaciones habituales en la operación de las calderas de carbón pulverizado en función del régimen de carga en que estén trabajando. Generalmente, una configuración tipo 1 se suele dar en condiciones de carga nominal, mientras que la configuración tipo 2 es más propia de cargas parciales. Las otras dos configuraciones –3 y 4–, analizan situaciones que se pueden dar en la caldera como consecuencia de alguna situación anómala en el funcionamiento de algún equipo, como puede ser un fallo en un molino, o como consecuencia de un mal diseño de los conductos de reparto aire/combustible. A continuación, se pasa a analizar los cuatro tipos de configuraciones:

- **Configuración 1:** En esta configuración, el mayor porcentaje del flujo primario, penetra en la caldera a través de los quemadores de las filas inferiores del hogar. Los resultados que aparecen en la Tabla 4.10 muestran que la interacción de la relación aire primario/carbón es casi tan importante como la contribución del nivel de oxígeno.

Tratamientos	A (Qa/Qc)	B (%O2)	C (dpm)	D (% Desq.)	AB + CD	AC + BD	BC + AD
SSi	6.0	136.8	1.3	0.2	109.2	7.6	0.4

Tabla 4.10 Análisis de la varianza Configuración 1

Otro resultado importante, a la vista de los resultados de las otras configuraciones (Tablas 4.10-4.13), es que en este caso, el nivel de exceso de oxígeno no es tan crítico en la formación de inquemados como en otras configuraciones. Esto es debido, a que al entrar un flujo mayor de partículas por los quemadores inferiores, el tiempo promedio de residencia para el conjunto de las partículas aumenta, y aunque exista un exceso de oxígeno menor, las partículas tienen más tiempo para completar la combustión. En la Figura 4.18 se resumen los resultados obtenidos en las simulaciones. Se pueden destacar dos comentarios. En primer lugar, se ve como en este tipo de configuración, pese a ser el nivel de exceso de oxígeno el factor más importante, al variar otros factores, se han obtenido valores de inquemados pequeños con bajo exceso de oxígeno. Este efecto solo se manifiesta con este tipo de configuración. Por último, y fijándonos en un nivel u otro de oxígeno, se ve como las variaciones en los inquemados responden a variaciones en la relación aire

primario/carbón, como se ha obtenido en el análisis de la varianza. Los otros factores apenas tienen efecto en el rango de variación seleccionado.

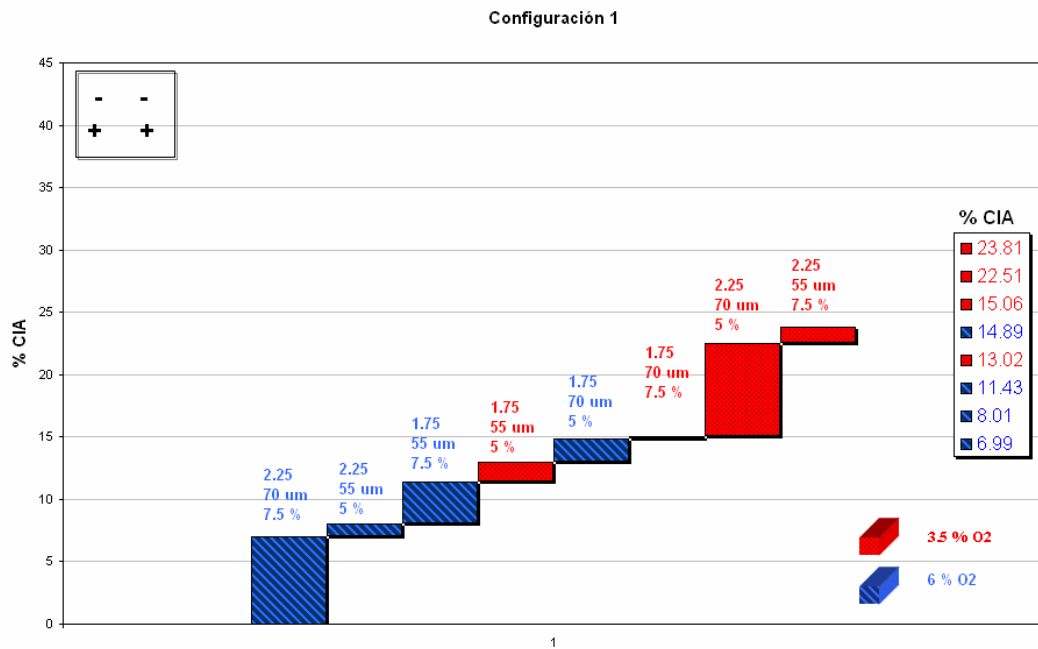


Fig. 4.18 Análisis experimentos Configuración 1

- Configuración 2:** En esta configuración el mayor porcentaje de caudal másico primario, penetra en la caldera a través de los quemadores de las filas superiores del hogar. Los resultados del análisis factorial (Tabla 4.11), muestran como en este caso el nivel de exceso de oxígeno sí que tiene una influencia sobresaliente frente al resto de parámetros. El efecto de las interacciones, en esta configuración, apenas tiene importancia, y solo la relación aire primario/carbón se destaca mínimamente frente al resto de parámetros.

Tratamientos	A (Qa/Qc)	B (%O ₂)	C (dpm)	D (% Desq.)	AB + CD	AC + BD	BC + AD
SSi	39.4	1180.3	13.8	0.9	55.9	8.5	22.7

Tabla 4.11 Análisis de la varianza Configuración 2

Este tipo de configuración, resulta ser la más desfavorable con niveles bajos de exceso de oxígeno. Fijándonos en la Figura 4.19, se ve el salto abrupto que se produce al variar el nivel de concentración de oxígeno. También se observa una variación de los inquemados en función de la relación aire primario/carbón en condiciones de bajo nivel de oxígeno, como se había obtenido del análisis de la varianza. Sin embargo, en condiciones de alto nivel de oxígeno, esta relación desaparece, y en general bajo cualquier condición, los inquemados que se obtienen son prácticamente iguales.

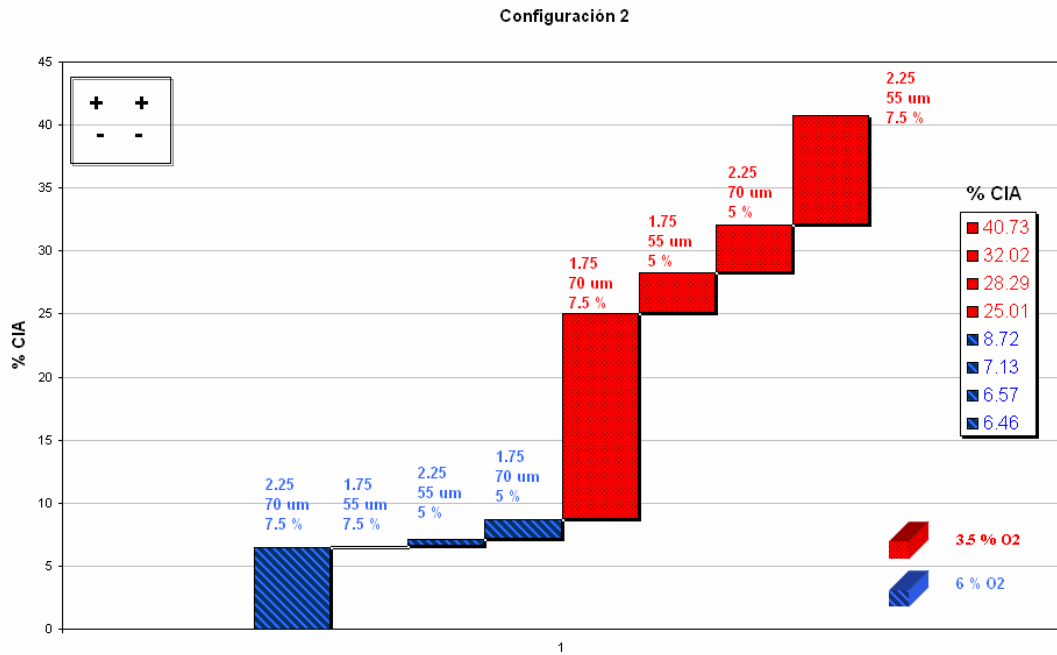


Fig. 4.19 Análisis experimentos Configuración 2

Por último, volveremos sobre los resultados que se obtuvieron en el análisis individual de factores, donde se encontraron valores de inquemados menores en el caso de la configuración 2 que en el caso de la configuración 1. A la vista de los resultados del análisis factorial, se ve como efectivamente eso ocurre bajo condiciones de alto exceso de oxígeno, ya que las trayectorias de las partículas de las filas superiores no se ven distorsionadas por la presencia de la tolva y se mantienen en las zonas donde se alcanzan las mayores temperaturas. Comparando las Figuras 4.18 y 4.19, vemos como en la zona de alto nivel de oxígeno los inquemados son mayores para el caso de la configuración 1. Sin embargo, si nos movemos a la zona con menor exceso de oxígeno, es la configuración 2 la que da lugar, con diferencia, a la mayor cantidad de inquemados.

- **Configuración 3:** Este tipo de configuración provoca una asimetría en el caudal que entra a través de los quemadores de la misma fila, y a su vez, provoca una asimetría en el flujo obtenido dentro del hogar. Los resultados del análisis factorial (Tabla 4.12), muestran como en este caso, la influencia del exceso de oxígeno destaca sobre los otros factores en una proporción semejante a la encontrada en la configuración 2.

Tratamientos	A (Qa/Qc)	B (%O ₂)	C (dpm)	D (% Desq.)	AB + CD	AC + BD	BC + AD
SSi	5.1	769.5	5.1	21.9	0.6	6.1	2.4

Tabla 4.12 Análisis de la varianza Configuración 3

La mayor diferencia frente a la anterior configuración, es que en este caso, el porcentaje de desigualdad en el reparto del combustible, se convierte en el segundo factor en importancia, al influir directamente en las trayectorias de las partículas en el hogar. En la Figura 4.20 se puede ver este efecto, ya que las variaciones en inquemados, para un mismo nivel de oxígeno, responden a variaciones en el porcentaje de reparto de combustible.

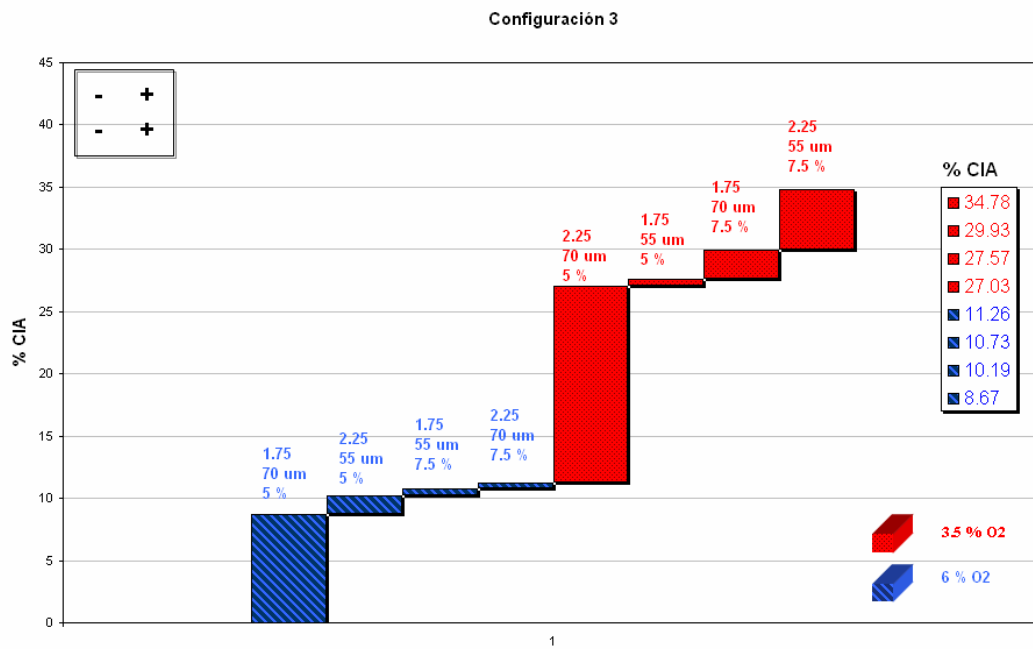


Fig. 4.20 Análisis experimentos Configuración 3

- **Configuración 4:** Este tipo de configuración provoca una asimetría en el caudal que entra a través de los quemadores de la misma fila, pero se mantiene una simetría global del flujo en la caldera. Los resultados del análisis factorial (ver Tabla 4.13), muestran como, en comparación con la configuración anterior, una mayor simetría en la caldera disminuye en gran medida los inquemados, y provoca una menor dependencia respecto del nivel de exceso de oxígeno empleado.

Tratamientos	A (Qa/Qc)	B (%O2)	C (dpm)	D (% Desq.)	AB + CD	AC + BD	BC + AD
SSi	10.2	299.1	0.1	0.2	91.7	8.0	7.5

Tabla 4.13 Análisis de la varianza Configuración 4

Por último, en la Figura 4.21, se puede ver como para un mismo nivel de oxígeno, los inquemados varían con la relación aire/combustible, al igual que se deduce del análisis de la varianza.

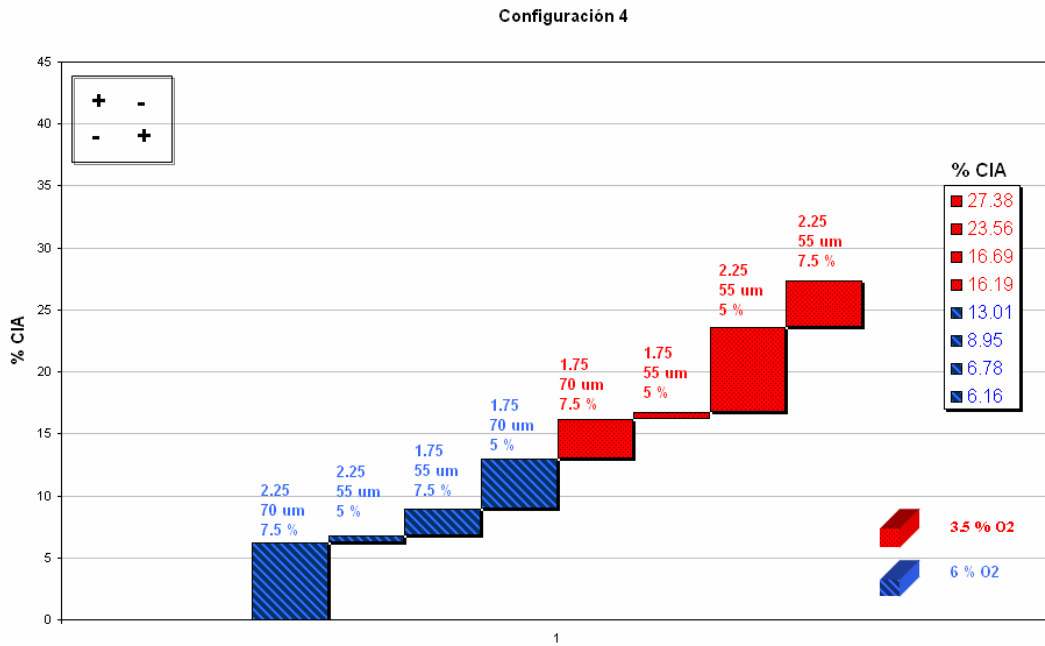


Fig. 4.21 Análisis experimentos Configuración 4

4.4 Conclusiones

El punto de partida para la construcción de un sistema de predicción de inquemados es determinar qué factores son los más relevantes en la formación de inquemados y cuantificar su influencia. Con este motivo, se ha realizado una revisión bibliográfica de un gran número de trabajos, que señalan la estequiometría de la reacción y la granulometría del carbón como los factores más influyentes en la eficiencia de la combustión. Sin embargo, la mayoría de estos estudios se realizan en quemadores experimentales, donde por las propias características de la instalación y de los experimentos, otros factores como la distribución de aire primario y secundario, el índice de rotación del aire secundario, o las asimetrías de caudales existentes entre quemadores, quedan en un segundo plano, o simplemente, no es posible estudiarlas. Por esta razón, ya que en este estudio se utilizan herramientas CFD y no existen este tipo de limitaciones, se han querido incluir todos los parámetros que pueden afectar a la combustión, y realizar una serie de simulaciones para analizar su influencia. En este sentido, se han realizado dos estudios de sensibilidad de los factores más destacados en la formación de inquemados (el nivel de exceso de oxígeno, la relación aire primario-carbón, la distribución granulométrica, el índice de rotación del aire secundario y la asimetrías existentes entre los caudales de los quemadores). El primer estudio analiza la influencia individual de cada uno de los factores. Los resultados del estudio muestran, como era previsible, que el valor de exceso de oxígeno es el factor más determinante en la formación de inquemados, especialmente con niveles de exceso de oxígeno por debajo del 4 %. Sin embargo, se obtiene un primer resultado interesante al

encontrar, que el resto de factores, tales como las asimetrías de caudales entre quemadores, el tamaño de partícula, y la relación de caudal de aire primario y carbón, pueden ser comparables en influencia al exceso de oxígeno cuando éste toma valores por encima del 4 %. El segundo estudio atiende a la necesidad de aproximarnos más a las condiciones reales que se dan en una planta, donde todos estos efectos ocurren al mismo tiempo, y no de una manera aislada. Por lo tanto, no es fácil diferenciar las contribuciones individuales y las interacciones entre ellos. Para reducir el número de simulaciones necesarias para completar el estudio, se ha recurrido al uso de técnicas estadísticas de análisis factorial. Los resultados más significativos del segundo estudio vienen a reafirmar lo que se empezaba a intuir con el primer estudio; es decir, que factores que individualmente no tienen una gran relevancia, pueden resultar importantes en la determinación global de inquemados cuando se dan las condiciones adecuadas o interactúan con otros factores.

A partir de los resultados obtenidos en los estudios de sensibilidad de parámetros, es posible establecer unas bases de actuación que permitan al operario de una central identificar las posibles causas de un aumento en los inquemados y buscar las condiciones más propicias para disminuirlo. Como ya se comentó en la introducción, el objetivo principal, es identificar las causas que provocan los inquemados, y minimizar estas pérdidas a través de la operación de la caldera, o en el caso más extremo, recurriendo al rediseño de algún elemento de la planta. Algunas actuaciones posibles, su posibilidad de aplicación, y los costes asociados se resumen en la Tabla 4.14.

Factor	Posibilidad de actuación	Costes asociados a determinar
Qa/Qc	Inmediata	Potencia impulsión ventilador de aire primario Erosión en conductos por mayor velocidad de la mezcla aire-carbón
%O ₂	Inmediata	Potencia impulsión ventilador aire y ventilador gases Disminución de rendimiento del precipitador, por tener la ceniza menor tiempo de residencia Aumento de las pérdidas por calor sensible en gases, pues, en general, el caudal aumenta más de lo que disminuye la temperatura de salida de gases
d _{pm}	Con clasificador ajustable: inmediata. Sin clasificador ajustable: complicada (a través de Qa/Qc (AD))	Potencia requerida para molienda (menor que la del ventilador)
%deseq. 1 y 2	Inmediata (alimentadores), a no ser que haya problemas de mantenimiento en alguno de los molinos	Variación del calor absorbido en el hogar y probablemente de la producción de NO _x
%deseq. 3 y 4	Complicada (rediseño de conductos)	Ingeniería de la reforma e incertidumbre del resultado

Tabla 4.14 Actuación sobre los factores de estudio y costes asociados

Nomenclatura

d_{pm}	diámetro medio distribución Rosin Ramler (m)
K	momento axial (kg m/s^2)
L_c	longitud característica (m)
M	momento angular ($\text{kg m}^2/\text{s}^2$)
n	vector unitario normal
n_{rr}	factor de dispersión distribución Rosin Ramler
n_{sw}	número de swirl
r	radio de giro (m)
r_k	relación de tamaño
SS_i	suma de cuadrados
T	temperatura (K)
u_i	componente i de la velocidad (m/s)
U_k	velocidad axial (m/s)
U_t	velocidad tangencial (m/s)
Δx_{ki}	longitud en la dirección x_k de la malla i (cm)
δ_I	error método iterativo
δ_M	error discretización espacial
δ_T	error discretización temporal
δ_S	error de modelado
δ_{SDP}	error datos experimentales
δ_{SN}	error numérico
δ_{SMA}	error modelos matemáticos

Acrónimos

CIA	carbon in ash
CFD	computational fluid dynamics
PDF	probability density function
PCS	poder calorífico superior
RANS	Reynold's averaged Navier Stokes equations

5 **MODELO DE CONDICIONES LOCALES DE COMBUSTIÓN**

Existen múltiples aproximaciones, tanto experimentales como computacionales, para desarrollar un sistema de predicción de inquemados. Las aproximaciones experimentales son muy útiles en estudios de diseño. Sin embargo, para el seguimiento diario de una planta real, los métodos computacionales ofrecen una flexibilidad, además de un ahorro de tiempo y dinero, fuera del alcance de cualquier instalación experimental. Dentro de los métodos computacionales habitualmente empleados, los códigos CFD caracterizan con detalle los procesos que tienen lugar dentro del hogar. A pesar de ello, para el estudio de inquemados en calderas de potencia, estos códigos poseen dos inconvenientes notables. El primero, referido en el Capítulo 3, es que, para la modelización de la combustión heterogénea de las partículas, cuentan con modelos sencillos que resultan insuficientes para la obtención de valores cuantitativos del proceso de combustión. Para solventar este problema, en el Capítulo 6 se presenta una metodología basada en la obtención de perfiles de temperatura y presión parcial de oxígeno para un número representativo de partículas en el hogar por medio del código CFD, que a continuación, son introducidos en un modelo de combustión avanzado. El segundo inconveniente, característico de todos los códigos CFD hasta el momento, es su elevado coste computacional. De manera que resolver una simulación nueva puede durar días, lo que imposibilita la utilización de este tipo de herramientas para tomar decisiones inmediatas en una planta. Por ello, en el desarrollo de sistemas predictivos de la combustión, numerosos autores prefieren sacrificar parte de la información del problema, y utilizar aproximaciones zonales para resolver la fluidodinámica

(Fiveland et al., 1992; Severin et al., 2005). No obstante, estos modelos zonales también presentan serias limitaciones, como la imposibilidad de caracterizar adecuadamente muchos factores relevantes que afectan a la combustión, según se vio en el Capítulo 4. Por esta razón, en este trabajo de investigación, se ha optado por mantener la utilización del código CFD como herramienta de caracterización del campo fluido. Para solucionar el problema del coste computacional, se propone la utilización de un sistema de redes neuronales que genere los perfiles de oxígeno y de temperaturas, y el tiempo de residencia de las partículas, para unas condiciones de operación determinadas. De manera que se lleva a cabo un conjunto de simulaciones CFD que sean representativas de los factores que influyen en la formación de inquemados dentro del rango de operación de la planta. A continuación, con estas simulaciones se entrena un sistema de redes neuronales, de manera que este sistema sea capaz de reproducir las soluciones del código CFD. Como en el caso del código CFD, las soluciones de la red neuronal también se obtienen en forma de perfiles de presión parcial de oxígeno, temperatura y tiempo de residencia de las partículas para a continuación, aplicar un modelo de combustión avanzado. La ventaja del nuevo sistema es que permite realizar los cálculos con un tiempo de respuesta muy bajo (del orden de segundos), y por lo tanto, se puede utilizar en la construcción de un sistema predictivo en tiempo real. Otra ventaja es que, si el sistema de redes neuronales es entrenado adecuadamente, considerando las variaciones e interacciones de todos los parámetros que afectan a la formación de inquemados, este sistema permite interpolar dentro del rango de variación para el que ha sido entrenado, y por lo tanto, obtener un sistema predictivo completo del rango de operación de la planta. En adelante, nos referiremos a este sistema de redes neuronales como modelo de condiciones locales de combustión.

Para el desarrollo del modelo se ha utilizado el código comercial MatLab Neural Network Toolbox 4.0. A lo largo del capítulo, se introducen las características generales de las redes neuronales y sus aplicaciones, y se describe el desarrollo del modelo de condiciones locales de combustión: diseño de la estructura del sistema de redes, entrenamiento de las redes a partir de un conjunto de simulaciones CFD de la planta, y validación del mismo.

5.1 Redes neuronales

Las redes neuronales constituyen un conjunto de técnicas de programación y control dentro de la Inteligencia Artificial, que permiten a un sistema aprender; es decir, reconocer patrones y predecir comportamientos a partir de un conjunto de datos de entrenamiento (Bishop, 1995). El desarrollo de las redes neuronales se inició a principios de los años 40, cuando McCullogh y Pitts inventaron el concepto de “neurona artificial” a partir de un dispositivo eléctrico de

múltiples entradas, que tras ponderarlas y aplicarles una función no lineal, el sistema devolvía una respuesta de tipo afirmativa o negativa. En 1958, Rosenblatt fue el primero en definir el concepto de red neuronal combinando el uso de varias neuronas artificiales. Esta primera red era capaz de generalizar resultados después de haber aprendido un número suficiente de patrones. Al mismo tiempo, otros investigadores como Widrow y Hoff desarrollaron los primeros algoritmos de entrenamiento. Sin embargo, al utilizar neuronas de respuesta binaria, pronto se encontraron limitaciones en el desarrollo de sistemas neuronales más complejos, y en los años 70 se detuvo temporalmente el avance de estas técnicas. Tan sólo una década más tarde, gracias a las aportaciones de Hopfield y al desarrollo de los ordenadores, se recuperó el interés por estos algoritmos. La introducción de estructuras y algoritmos más elaborados permitió controlar sistemas cada vez más complejos con múltiples entradas y salidas, y con ello el despegue definitivo de estas técnicas. Hoy en día, las redes neuronales se aplican en innumerables campos científicos y tecnológicos. Dentro del campo de la generación de energía y de la combustión, también son habituales este tipo de modelos. Ejemplos de ello son los trabajos de Zhu et al. (1999) que realizan predicciones de la combustión del residuo carbonoso, Carsky y Kuwornoo (2000) que estudian la pirólisis, Hao et al. (2001) que utilizan la combinación de redes neuronales y algoritmos genéticos para la optimización de la combustión de carbón reduciendo las emisiones de NO_x , o Romeo y Garetta (2006) y Teruel et al. (2006) que evalúan el comportamiento del hogar para minimizar el efecto del ensuciamiento.

Su utilización frente a otras técnicas ofrece múltiples ventajas. En primer lugar utilizan cálculos matemáticos sencillos, reduciendo al mínimo el coste computacional, lo que permite su utilización en aplicaciones que funcionan en tiempo real. Además, son sistemas muy robustos y tolerantes a los fallos; es decir, que un error puntual en una entrada no produce un error en la salida.

Las redes neuronales funcionan como modelos de “caja negra” ya que no responden a principios físicos, y la relación entre las entradas y las salidas se establece por las variaciones que se observan durante el entrenamiento. Por ello, es necesario disponer de un conjunto de datos amplio que proporcionen, a través del entrenamiento de la red, el conocimiento necesario para relacionar las entradas con las correspondientes salidas. Así, su entrenamiento consiste en modificar unos parámetros denominados pesos hasta que la salida simulada y la real se parezcan suficientemente entre sí.

La estructura de una red neuronal está formada por varias capas de neuronas: una capa de entradas donde se introducen las entradas al sistema, una serie de capas intermedias u ocultas donde se ajustan los pesos y bias (términos constantes), y una capa de salida donde se obtienen

las soluciones de la red (Figura 5.1). Cada neurona recibe información a través de una serie de entradas (p_i). Estos valores de entrada se combinan a través de una función de transferencia ($f(w_p+b)$) que devuelve un valor de entrada (n) al núcleo de la neurona. Esta función, que depende del tipo de neurona, combina los valores de entrada (p_i) y los pesos (w_i) añadiendo un margen de error (b). Finalmente, se aplica una función de activación al valor de entrada al núcleo (n), devolviendo un valor de salida de la neurona (a) que se transmite a la capa siguiente o a la salida del sistema, en función de la posición que ocupe la neurona en la red. Existen varios tipos de funciones de activación (Demuth y Beale, 2002):

- Función escalón: Devuelve 0 ó 1 dependiendo de si el argumento n es mayor o menor que 0 respectivamente. Se usan en sistemas de clasificación o toma de decisiones.
- Función lineal: Devuelve el valor de entrada corregido.
- Función sigmoideal: Transforma valores desde $-\infty$ a $+\infty$ en valores entre -1 y 1 (sigmoideal tangente) ó entre 0 y 1 (sigmoideal logarítmica). Se usan habitualmente en redes tipo Feedforward.

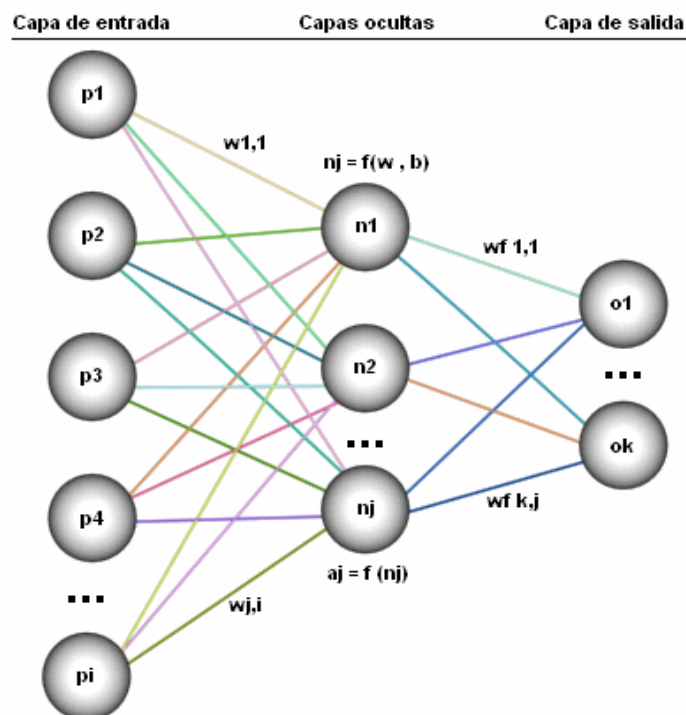


Fig. 5.1 Esquema general de una red neuronal con una capa oculta

La arquitectura de la red depende del tipo de neuronas seleccionado y de la conexión entre éstas. La elección de un tipo u otro dependerá de la finalidad para la que se diseñe la red.

A pesar de las innumerables ventajas que presentan este tipo de sistemas, también existen algunas limitaciones que deben tenerse en cuenta para interpretar correctamente los resultados obtenidos (Russell y Dobbins, 1990; Gareta, 2004):

- No obedecen a principios físicos. Constituyen una alternativa a otras técnicas matemáticas, como las correlaciones o los métodos estadísticos.
- Funcionan como “cajas negras”. Toda la información de la red se almacena en los parámetros de la red. Por lo tanto, no se pueden extraer conclusiones lógicas de su estructura, ni ser validado desde un punto de vista físico.
- Se consume mucho tiempo en seleccionar adecuadamente los datos de entrenamiento, y en desarrollar el diseño definitivo de la estructura, para lograr una buena generalización de la red entrenada.
- No se pueden extrapolar resultados fuera del rango de entradas utilizadas para el entrenamiento.
- No son capaces de identificar errores cuando se les proporciona información con relaciones falsas.

Antes de iniciar la elaboración del modelo, conviene conocer los fundamentos físicos del problema y recopilar toda la información disponible sobre el mismo (datos de operación, datos de diseño, experiencias anteriores). Tener el conocimiento físico del problema ayuda a identificar qué parámetros intervienen en el problema, como están relacionados entre sí, y en qué medida contribuyen al resultado final. Este tipo de modelos en los que se tiene un conocimiento del problema, aunque no se planteen las ecuaciones como tales, se denominan modelos de “caja gris”. A veces, también es conveniente realizar un filtrado de datos para evitar datos erróneos o superfluos que ralenticen y alteren el entrenamiento de la red.

Una vez tenidas en cuenta estas consideraciones, la elaboración de un modelo de redes neuronales se divide en tres fases:

- Diseño de la estructura: Se selecciona el método de resolución y el tipo de red neuronal más adecuado para cada aplicación. Además se establecen las entradas y salidas de la red, el número de capas ocultas, el número de neuronas de cada capa oculta, las funciones de activación y la arquitectura de la red (es decir las conexiones).

- Entrenamiento de la red: Se utiliza un conjunto parcial de los datos disponibles para que la red aprenda como están relacionadas las entradas y las salidas.
- Validación de la red: Se verifica que la red neuronal cumple el objetivo para el que ha sido diseñada.

Entre las tres fases anteriores se establece un proceso iterativo de revisión que termina cuando se alcanza una red definitiva que responde a las premisas para la que ha sido diseñada.

5.2 Estructura del sistema de redes neuronales

La selección de la arquitectura de la red neuronal es una de las fases más importantes en el diseño del sistema. El primer paso consiste en seleccionar el tipo de red neuronal más adecuado para nuestra aplicación. Se ha elegido una red tipo Feedforward ya que, frente a otros diseños, tienen una gran capacidad de generalización, y produce respuestas razonables frente a entradas que no han sido definidas explícitamente durante el entrenamiento (Demuth y Beale, 2002). Así, se utilizan para la simulación de sistemas complejos con relaciones no lineales entre entradas y salidas. En este tipo de diseño, la estructura básica está formada por una capa con las entradas, una zona oculta que puede incluir varias capas de neuronas sigmoidales, y una capa de salida con neuronas lineales. Además, las conexiones entre capas siempre se establecen hacia delante en la red; es decir, que no existen conexiones entre neuronas de una misma capa ni tampoco desde las capas posteriores hacia las anteriores.

La Figura 5.2 muestra el esquema de una neurona Feedforward. La capa oculta está formada por neuronas sigmoidales porque permiten simular sistemas lineales y no lineales (Ecs. 5.1 y 5.2). La capa de salida se construye con neuronas lineales para permitir a la red simular cualquier función sin discontinuidades (Ecs. 5.1 y 5.3).

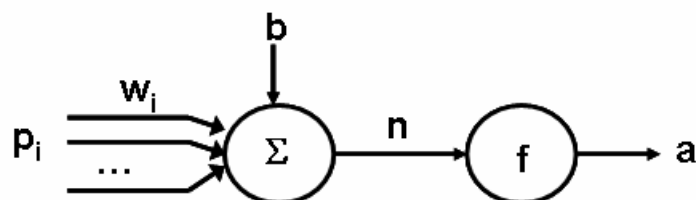


Fig. 5.2 Esquema de una neurona Feedforward

$$n_j = \left(\sum_i p_i \cdot w_{j,i} \right) + b_j \quad (\text{Ec. 5.1})$$

$$a_j = 1 / (1 + e^{-n_j}) \quad (\text{Ec. 5.2})$$

$$a_j = n_j \quad (\text{Ec. 5.3})$$

Una vez definido el tipo de red, es necesario definir las salidas de la red, las entradas y el número de capas ocultas y de neuronas necesarias en cada capa oculta en función de la no linealidad entre entradas y salidas.

Las salidas de nuestro sistema de redes neuronales son la presión parcial de oxígeno, la temperatura y el tiempo de residencia de cada partícula. Se pueden diseñar varias arquitecturas utilizando redes de varias salidas (MIMO multi input-multi output) o de una única salida (MISO multi input-single output). Las primeras pueden reducir el trabajo global de diseño al utilizar una única red para producir varias salidas. Sin embargo, al compartir los mismos pesos de la red, la convergencia de una salida condiciona la convergencia de la otra, complicando el proceso. Por ello, es aconsejable utilizar redes MIMO cuando la relación que guardan las salidas simuladas con las entradas es parecida y dependen de parámetros similares. En este trabajo se ha optado por utilizar dos redes neuronales independientes: una red MISO para la obtención del tiempo de residencia de las partículas, y redes MIMO de dos salidas para obtener los perfiles de presión parcial de oxígeno y temperatura.

La elección de las entradas debe contribuir a la construcción de un modelo lo más sencillo posible. Por ello, se deben excluir entradas irrelevantes que no afecten a las salidas, mejorando así la convergencia del problema. Por lo tanto, conocer los fundamentos físicos del problema simplifica enormemente la elección de las entradas. A partir del análisis factorial desarrollado en el Capítulo 4, que establecía los factores más influyentes en la formación de inquemados, se han elegido las entradas de las dos redes neuronales:

1. Red de tiempo de residencia (1 red MISO):

- Carga (plena o carga parcial): 1 entrada
- Exceso de O₂: 1 entrada
- Relación caudal aire primario/carbón: 1 entrada
- Tamaño de la partícula: 1 entrada

- Desigualdad de caudal másico entre quemadores: 4 entradas
- Número de quemador (fila superior o inferior): 1 entrada

2. Red de presiones parciales de oxígeno y temperatura (4 redes MIMO: Carga plena/Fila superior de quemadores, Carga plena/Fila inferior de quemadores, Carga parcial/Fila superior de quemadores, Carga parcial/Fila inferior de quemadores):

- Exceso de O₂: 1 entrada
- Relación caudal aire primario/carbón: 1 entrada
- Tamaño de la partícula: 1 entrada
- Desigualdad de caudal másico entre quemadores: 4 entradas
- Posición inicial de la partícula en el quemador: 1 entrada
- Tiempo: 1 entrada

Como se comentó anteriormente, la elaboración de las redes se lleva a cabo mediante un proceso iterativo entre las fases de diseño de la estructura, aprendizaje y validación. Así, el diseño inicial de la red de perfiles de temperatura y la presión parcial de oxígeno, se construyó en base a una única red MIMO para todo el rango de operación de la planta. Sin embargo, las grandes diferencias en el comportamiento de los perfiles entre carga parcial y plena carga hicieron modificar este diseño y optar por redes distintas. Análogamente, la diferencia existente entre los perfiles generados en la fila inferior de quemadores y los generados en la fila superior obligó a variar de nuevo el diseño, y construir dos redes independientes para mejorar la convergencia y los resultados obtenidos. Como consecuencia de estas modificaciones, el diseño final de la red de perfiles está formado por cuatro redes MIMO. En cuanto a la red de tiempos de residencia, el buen ajuste de los resultados con una red única hizo innecesario utilizar redes diferenciadas.

Del mismo modo, siguiendo el proceso iterativo de diseño, en el último desarrollo de las redes se consideró la incorporación de un nuevo parámetro: la posición inicial de la partícula en el quemador. Las trayectorias y los perfiles de temperatura y de oxígeno de las partículas pueden variar considerablemente dependiendo de su punto de inyección. Así, las partículas más próximas al eje del quemador se ven afectadas por una recirculación interna, mientras que las más alejadas se ven afectadas por el aire secundario y la recirculación externa de los productos de la combustión (Capítulo 1, Figura 1.1). Dado que en cada quemador existen 48 nodos de entrada de partículas, obtener una generalización adecuada en la red incluyendo todos los nodos resulta imposible debido a la cantidad de factores y condiciones abordadas en el estudio. Para acotar el problema se optó por dividir cada quemador en seis zonas en función del radio y la

posición relativa con el eje del quemador (Figura 5.3), de manera que a cada partícula en su posición inicial se le asigna una zona del quemador. Este factor de zona es el que se introduce en la red neuronal, consiguiendo una mejora considerable en los resultados finales de combustión. La estructura final del sistema de redes neuronales se resume en la Figura 5.4.

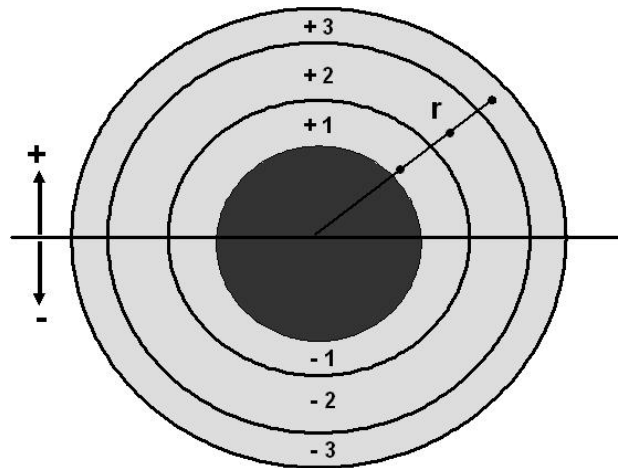


Fig. 5.3 Detalle de la división en seis zonas de la entrada de aire primario y combustible

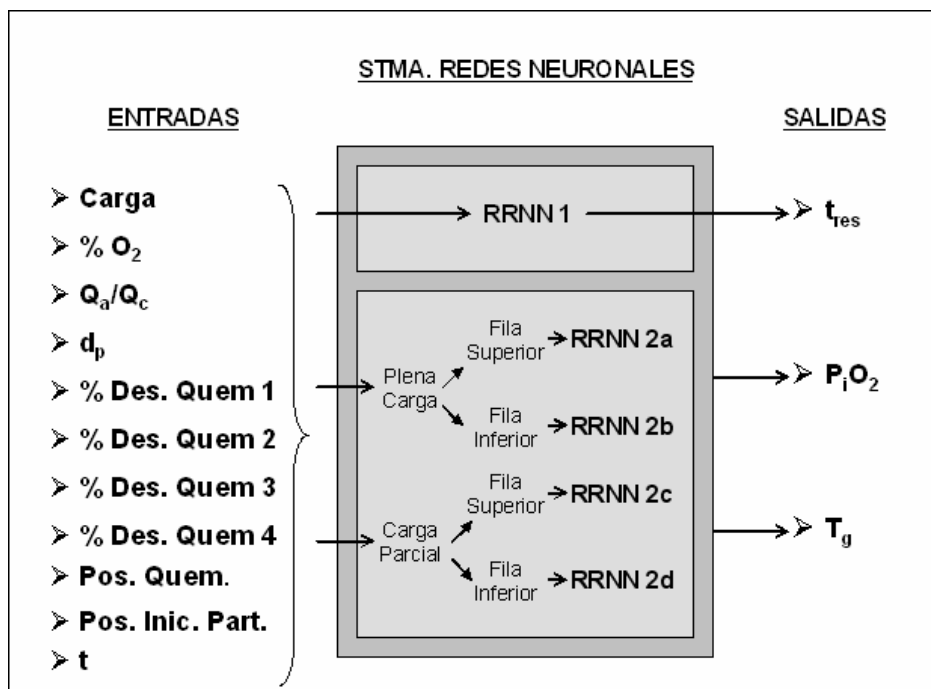


Fig. 5.4 Esquema del modelo de condiciones locales de combustión

Una vez definidas las capas de salida y de entrada de la red neuronal, queda por fijar la estructura de las capas intermedias. La capa oculta es el elemento que dota a la red de capacidad para reproducir fenómenos no lineales. Como en la estructura de red Feedforward, la capa oculta está formada por funciones de activación sigmoideas, que ya de por sí tienen la

capacidad de reproducir efectos no lineales, basta con incluir una única capa oculta, evitando una mayor complejidad de la red (Gareta, 2004).

A continuación, queda por determinar el número de neuronas que van a constituir la capa oculta. Incrementar el número de neuronas de la red, equivale a aumentar los grados de libertad de ésta; y esto significa que la red es capaz de simular de manera más precisa los datos de entrenamiento. Sin embargo, se debe evitar que un exceso de neuronas provoque una situación de sobreentrenamiento. El sobreentrenamiento se produce cuando la red memoriza los ejemplos con los que ha sido entrenada y responde erróneamente ante otras entradas. Por el contrario, reducir el número de neuronas de la red aumenta su capacidad de generalizar, a costa de una menor precisión. Es necesario encontrar un equilibrio entre ambas situaciones. Por lo general, se fija un número de neuronas de acuerdo a la propia experiencia, y a continuación, a partir de la solución se lleva a cabo un proceso iterativo de selección del número de neuronas más adecuado para cada problema. En general, es preferible partir de un número de neuronas bajo y se va aumentando el número hasta que añadir una nueva neurona no mejore los resultados de convergencia del entrenamiento.

En el diseño final de nuestro modelo, la capa oculta tiene las siguientes neuronas:

1. Red de tiempos de residencia (RRNN 1): 20 neuronas
2. Redes de perfiles de temperatura y presión parcial de oxígeno (RRNN 2a, RRNN 2b, RRNN 2c, RRNN 2d): 15 neuronas.

5.3 Entrenamiento del sistema de redes neuronales

Antes de comenzar el entrenamiento de la red, resulta interesante llevar a cabo un tratamiento de los datos de entrada con el fin de facilitar el aprendizaje. Habitualmente, se suelen filtrar los datos donde existen vacíos de información o errores. Además, es necesario normalizar los datos de entrada y salida, por ejemplo para que tomen valores entre -1 y 1. La ventaja de la normalización es que se iguala el rango de valores de todas las entradas, y como consecuencia, el entrenamiento es más rápido y se evitan problemas de precisión en las variables de menor valor.

Para la obtención de los datos con los que se ha llevado a cabo el entrenamiento de la red, se ha realizado un nuevo diseño de experimentos basado en el análisis factorial, de manera que se

incluyan al menos tres niveles de los factores más relevantes, diferenciando entre condiciones de plena carga y carga parcial (Figura 5.5). Respecto al análisis factorial llevado a cabo en el Capítulo 4, se ha ampliado de dos a tres el número de niveles de cada factor, excepto en el caso de la distribución de tamaños de partículas. En este caso, es suficiente utilizar una única distribución de partículas, ya que ésta de por sí, ya contiene distintos tamaños para que la red aprenda variaciones con respecto a este factor. En concreto se han considerado diez tamaños de partículas para representar la distribución, igual que en el modelo CFD.

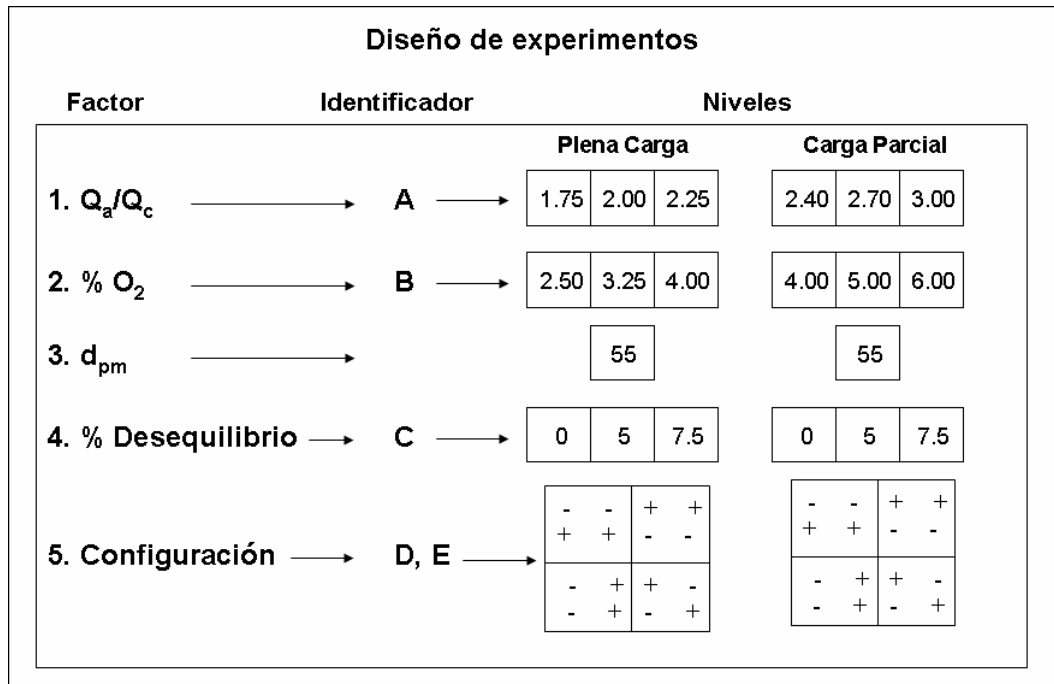


Fig. 5.5 Diseño de experimentos

Para caracterizar completamente este diseño se necesitan realizar 256 simulaciones ($3 \times 3 \times 1 \times 3 \times 4 \times 2$ diseños $\rightarrow 256$). Sin embargo, al igual que en el Capítulo 4, para reducir el número de simulaciones se ha aplicado un análisis factorial fraccionado. De esta manera, sólo es necesario realizar una fracción del número total de posibles combinaciones. Esta fracción se elige para que los resultados sean representativos del experimento completo; es decir del rango de operación de la planta. Para ello, se ha realizado un diseño factorial fraccionado en tres niveles $3^{3-1} \times 4$, de manera que deberán resolverse 36 simulaciones para cada nivel de carga. En total 72 simulaciones. Para construir este diseño se selecciona un componente de la interacción ABC de dos grados de libertad. El diseño 3^3 completo se divide en tres bloques, cada uno correspondiente a un diseño fraccionado 3^{3-1} . Existen doce fracciones un tercio diferentes del diseño 3^3 definidas por la Ec. 5.4 (Montgomery, 1991).

$$x_1 + \alpha_2 \cdot x_2 + \alpha_3 \cdot x_3 = u(\text{mod } 3) \quad \text{con } u = 0, 1, 2. \quad (\text{Ec. 5.4})$$

Donde, $\alpha_i = 1$ ó 2 son los exponentes de los factores dentro de la relación de definición I.

Seleccionando un generador de máxima resolución $I = AB^2C^2$, es decir $\alpha_2 = 2$ y $\alpha_3 = 2$, nuestra fracción del diseño resultante 3^{3-1} está compuesta exactamente por 3^2 combinaciones de tratamientos que satisfacen la Ec. 5.5 (Tabla 5.1, para $u = 0$).

$$x_1 + 2 \cdot x_2 + 2 \cdot x_3 = u(\text{mod } 3) \quad \text{con } u = 0, 1, 2. \quad (\text{Ec. 5.5})$$

A	B	C
0	0	0
0	1	2
1	0	1
2	0	2
0	2	1
1	1	0
1	2	2
2	1	1
2	2	0

Tabla 5.1 Fracción un tercio $u = 0$ del diseño 3^3 con relación de definición $I = AB^2C^2$

Asignando los valores 0, 1 y 2 a los niveles inferior, medio y alto respectivamente, se construye el diseño de experimentos. De la interpretación de los identificadores y de los niveles asignados a cada factor, se obtiene la Tabla 5.2, que resume las condiciones de las simulaciones realizadas (sombreado). El resto de las condiciones, modelos e hipótesis, son las mismas que las descritas para las simulaciones del hogar de la central Lamarmora (ASM Brescia) en el Capítulo 4.

Carga Plena	Oa/Oc			%O2			dp (µm)	% Desequilibrio			Configuración			
	1.75	2	2.25	2.5	3.25	4		0	5	7.5	1	2	3	4
1														
2														
3														
4														
5														
6														
7														
8														
9														
10														
11														
12														
13														
14														
15														
16														
17														
18														
19														
20														
21														
22														
23														
24														
25														
26														
27														
28														
29														
30														
31														
32														
33														
34														
35														
36														
Carga Parc.	2.4	2.7	3	4	5	6	55	0	5	7.5	1	2	3	4
37														
38														
39														
40														
41														
42														
43														
44														
45														
46														
47														
48														
49														
50														
51														
52														
53														
54														
55														
56														
57														
58														
59														
60														
61														
62														
63														
64														
65														
66														
67														
68														
69														
70														
71														
72														

Tabla 5.2 Descripción de las simulaciones del diseño de experimentos

Al igual que con las simulaciones CFD de los capítulos anteriores, una vez realizadas éstas y el proceso de verificación de la resolución numérica, se ha procedido a su validación contrastando los valores de la concentración de oxígeno predeterminados para cada caso, con los obtenidos en las simulaciones a la salida del hogar. Las Figuras 5.6 y 5.7 muestran los resultados obtenidos, y permiten aceptar la validez de las simulaciones.

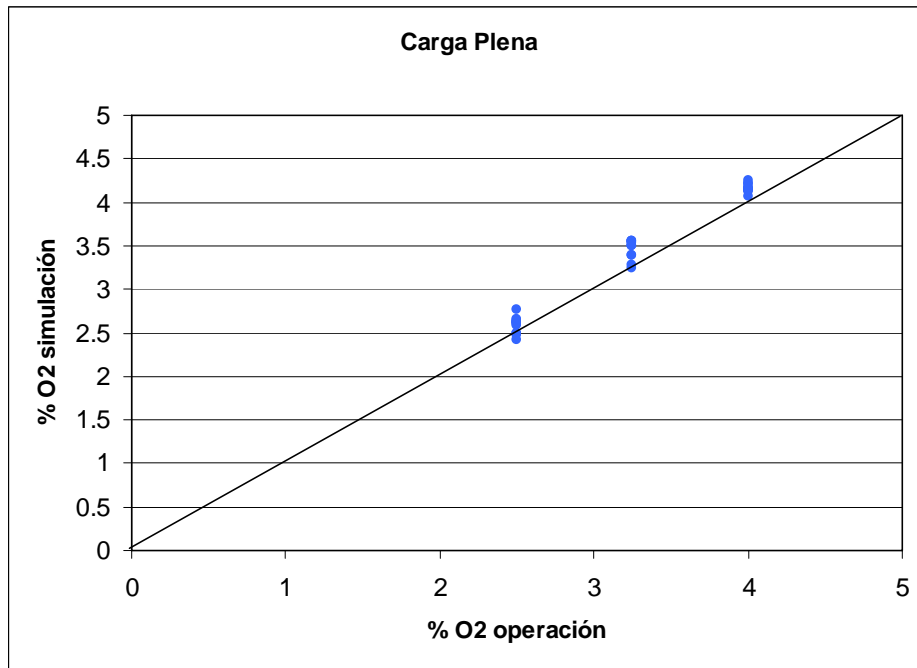


Fig. 5.6 % O₂ operación vs. % O₂ simulación. Carga plena

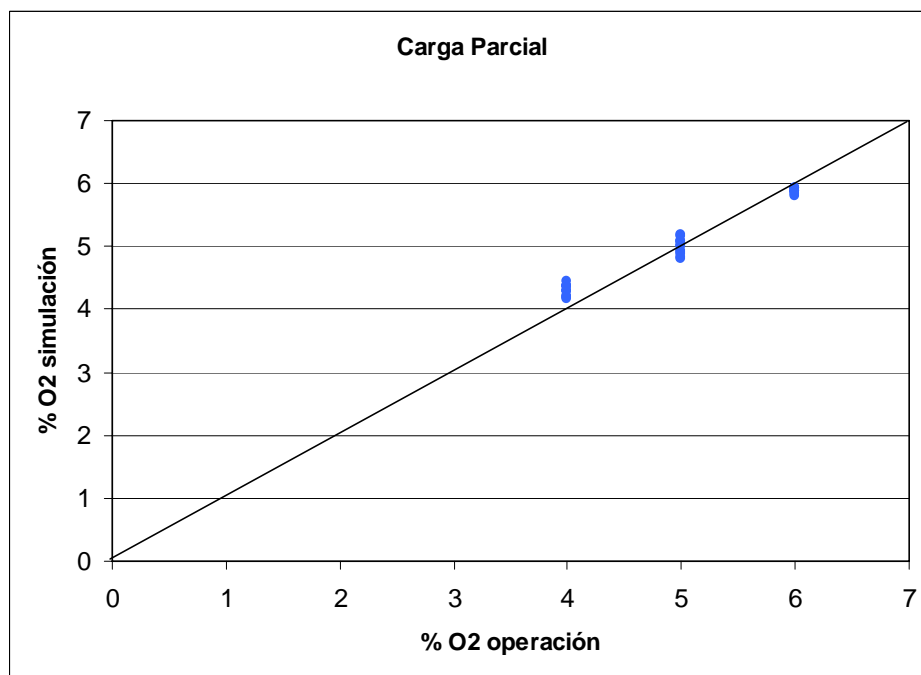


Fig. 5.7 % O₂ operación vs. % O₂ simulación. Carga parcial

El algoritmo de entrenamiento utilizado ha sido el de Levenberg-Marquardt con regularización bayesiana implementado en MatLab (trainbr). El algoritmo Levenberg-Marquardt utiliza una técnica de aproximación basado en el método de Newton (Ec. 5.6). Así, mediante la modificación del vector de parámetros w de cada neurona, la red va aprendiendo.

$$w_{k+1} = w_k - [J^T \cdot J + \mu \cdot I_d]^{-1} \cdot J^T \cdot e \quad (\text{Ec. 5.6})$$

Donde, w_{k+1} es el vector de pesos y términos constantes en la siguiente iteración, w_k es el vector de peso y términos constantes en la iteración actual, J es la matriz Jacobiana que contiene las derivadas primeras de los errores de la red respecto a los pesos y a los términos constantes, I_d la matriz identidad, e es el vector de errores de la red y μ un coeficiente de convergencia.

Comparado con otros métodos, el algoritmo Levenberg-Marquardt proporciona la máxima rapidez obteniendo el menor error de convergencia. Además, la regularización bayesiana añade al algoritmo de entrenamiento una mayor capacidad de generalización. Esta técnica modifica la función de optimización añadiendo a la suma de errores cuadráticos, la suma de cuadrados de los parámetros de la red. Así, además de disminuir el error, se consigue una disminución de los parámetros de la red, y en consecuencia, respuestas más suaves que evitan el sobreentrenamiento (Demuth y Beale, 2002). Como criterio de parada del entrenamiento se controla que la suma de errores cuadráticos y de pesos sea relativamente constante.

La cantidad de datos que se utilizan en la fase de entrenamiento, se varía dependiendo del número de datos disponibles. Habitualmente cuando existe un número de datos importante, como en el caso de las redes de perfiles, éstos se dividen en dos subconjuntos: entrenamiento y test. Adicionalmente, dependiendo del tipo de validación que se lleve a cabo, se puede añadir un tercer subconjunto para la fase de validación. En el aprendizaje se utilizan los datos de entrenamiento, y en paralelo se efectúan simulaciones con los datos de test, comparando sus valores de salida con los reales. En un entrenamiento correcto, la evolución del error calculado sobre los datos de test ha de ser similar a la del entrenamiento; una disminución del error de entrenamiento que no conlleva una disminución del error de test (o incluso éste aumenta) es signo claro de sobreentrenamiento.

5.4 Validación del sistema de redes neuronales

Una vez que ha terminado el proceso de aprendizaje y han sido calculados los pesos de la red, se debe validar la calidad del modelo resultante. El proceso de validación consiste en verificar la capacidad de correlar de la red. También se mide su capacidad de generalización, entendida como la capacidad de responder satisfactoriamente a entradas no presentadas al sistema durante la etapa de aprendizaje. Existen diversos métodos de validación, utilizándose en la mayoría de casos comparaciones significativas, preferentemente gráficas, entre los datos reales y los

simulados por la red, más allá de la mera evaluación de los errores (diferencia entre valor simulado y objetivo, en la que se basa el entrenamiento). También puede resultar interesante comprobar que las salidas que produce la red frente a determinadas entradas tienen sentido físico. En la fase de validación no sólo se evalúa el funcionamiento de la red, sino que también se evalúa la calidad de los datos y de la estructura propuesta para la red neuronal. De esta manera, en función de los resultados obtenidos en la validación, puede ser necesario revisar las fases anteriores, modificando la estructura de la red o seleccionando de forma más adecuada los datos de entrenamiento. Este proceso iterativo entre las distintas fases de construcción del modelo termina cuando la red cumple la función para la que ha sido diseñada y se alcanza el nivel de detalle requerido.

Comparando las salidas que la red produce con las salidas reales, el error obtenido se puede clasificar en tres categorías:

- Error por sobreentrenamiento: Se produce cuando el error obtenido al simular los datos de entrenamiento es muy pequeño comparado con el error obtenido al simular los datos de validación. Este error se debe a un número excesivo de neuronas en la capa oculta, que potencia la capacidad de memorizar de la red. Ésta se aprende muy bien los datos de entrenamiento pero pierde la capacidad de generalizar.
- Error de generalización: Se produce cuando la función reproducida por la red neuronal tiende a suavizarse, apareciendo un error alto tanto al simular datos de entrenamiento como de validación. Este error es el contrario al del caso anterior, y aparece cuando el número de neuronas en la capa oculta es muy reducido.
- Error de los datos: Existe un error asociado a los propios datos utilizados en el modelo, denominado ruido.

Los métodos de validación más extendidos entre los investigadores se basan en técnicas gráficas. El tipo de técnicas también varía en función del tipo de salida que se quiere validar. Por ello, en este trabajo se han utilizado dos técnicas gráficas distintas para validar la red de tiempos de residencia y las redes de perfiles. Para la red de tiempos de residencia se ha optado por utilizar una gráfica de correlación que represente los tiempos de residencia simulados por la red frente a los reales (Figura 5.8). De esta manera, es posible comprobar no sólo el ajuste, sino también el rango de valores en los que se producen los mejores ajustes.

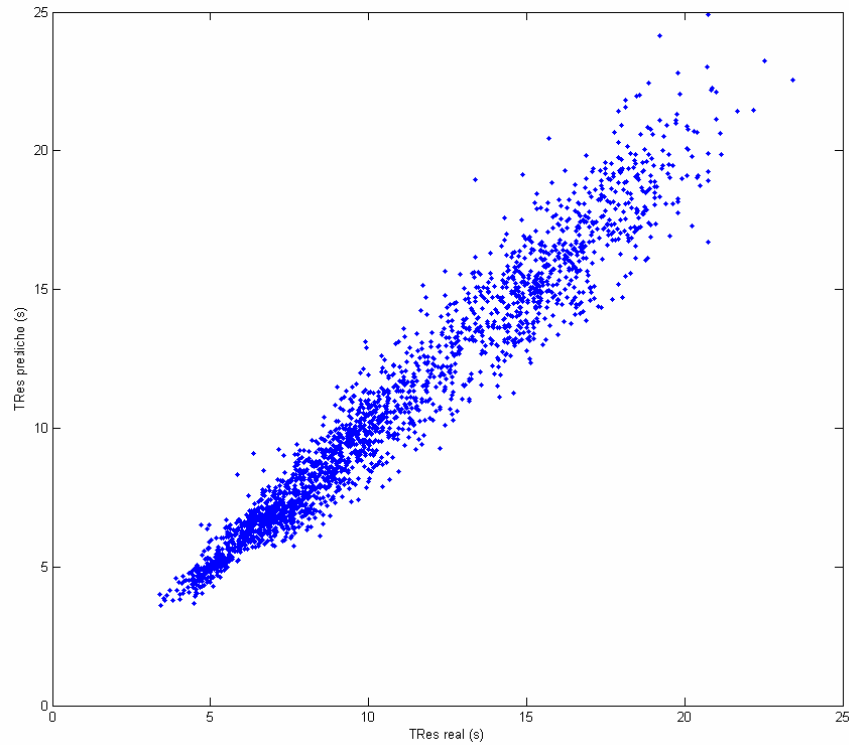


Fig. 5.8 Correlación entre el tiempo de residencia real y de la red

La Figura 5.8 muestra el buen ajuste de los tiempos de residencia generados por la red neuronal en un amplio rango de valores (4 s – 25 s), que cubre la variación más probable de este parámetro. Debido a que la mayoría de las partículas en el hogar tienen tiempos de residencia por debajo de los 15 segundos, el ajuste es mucho mejor en esta zona. No obstante, la generalización calculada para tiempos superiores, normalmente debidos a que parte de las partículas, mayoritariamente procedentes de la fila inferior de quemadores, quedan atrapadas en algún lazo de recirculación del hogar, es suficientemente buena si consideramos el sesgo existente en los datos de estas características.

En cuanto a la validación de las redes de perfiles, el método gráfico de validación más apropiado es representar los valores reales (o promediando varios casos) y simulados en función del tiempo. Aunque la red neuronal genera datos individuales para cada instante temporal considerado, dado que la aplicación final de la red consiste en generar perfiles de temperatura y presión parcial de oxígeno en función del tiempo, para unas condiciones determinadas de operación, parece adecuado representar, para un conjunto amplio de condiciones, si estos perfiles generados por la red se ajustan a los reales, es decir a los generados por el código CFD. Como existen un gran número de datos (72 simulaciones x 1920 partículas = 138240 perfiles), la validación resulta una tarea tediosa y costosa. En primer lugar, se comprobó que las salidas generadas por la red al variar las condiciones de entrada tenían sentido físico. A continuación, se llevó a cabo la comparación de los perfiles simulados con la red y los reales del código CFD.

Para facilitar la interpretación de los resultados se representaron, para cada una de las simulaciones realizadas, y para un conjunto de veinte simulaciones adicionales con parámetros dentro del rango de variación de la planta, los perfiles promedios de temperatura y presión parcial de oxígeno por quemador y tamaño de partícula. Dentro de la única distribución Rosin Rammler considerada en las simulaciones ($d_{pm} = 55$, $n_{rr} = 1.02$), se seleccionaron cinco fracciones de tamaños de partícula para efectuar los promedios ($< 30 \mu\text{m}$, $30 - 60 \mu\text{m}$, $60 - 90 \mu\text{m}$, $90 - 120 \mu\text{m}$, $> 120 \mu\text{m}$). En las Figuras 5.9 y 5.10 se representan dos ejemplos de estos perfiles promedio, cuyo comportamiento general se caracteriza por un aumento brusco de la temperatura en los primeros instantes hasta alcanzar un máximo denominado temperatura pico, debido a que la mayor parte de la combustión tiene lugar en las proximidades de los quemadores. Seguidamente, conforme la partícula se aleja de la llama, la temperatura decrece hasta alcanzar un valor relativamente constante en el resto del hogar. De forma paralela, la presión parcial de oxígeno presenta el comportamiento opuesto. En los primeros instantes, dado que el oxígeno se consume en la combustión, sus perfiles decrecen hasta valores cercanos a cero, y posteriormente, la concentración de éste comienza a aumentar hasta alcanzar un valor relativamente constante. A partir de estas figuras, se observa que el ajuste promedio de la red a los valores promedios obtenidos por el código CFD es considerablemente bueno. De igual manera se han obtenido perfiles promedio para cada fracción de tamaño de cada quemador de un conjunto amplio de simulaciones obteniéndose unos resultados muy parecidos en relación al ajuste de las curvas.

Como el objetivo final de la generación de estos perfiles es su introducción en un modelo de combustión avanzado para determinar la eficiencia de la combustión en el hogar, antes de cerrar el capítulo, resulta importante destacar la escala temporal de las Figuras 5.8 y 5.9 (y del resto de perfiles obtenidos en la validación) para valorar el nivel de detalle de estos perfiles, y en qué medida pueden influir en los posteriores cálculos de combustión. Sólo durante los primeros 500 ms, cuando se produce la mayor parte de la combustión se han obtenido datos de las redes cada 5 ms; es decir que se obtienen 100 puntos de discretización. A partir del medio segundo, aunque se puede mantener este paso temporal (5 ms), debido al gran número de datos de entrenamiento de las simulaciones CFD (conviene recordar que el sistema de redes neuronales se ha entrenado con los datos obtenidos del código CFD, y que, haciendo cuentas rápidas, el número total de datos está cercano a los 100 millones), progresivamente se ha aumentado este paso temporal para evitar un número excesivo de datos y un mayor tiempo de cálculo, dado que los gradientes de temperatura y presión parcial de oxígeno son muy inferiores, y ya se ha completado más del 90 % de la combustión. Evidentemente, este nivel de detalle que permite obtener valores muy precisos cada 5 ms en la zona cercana a los quemadores, además de la

exactitud de los mismos como se aprecia en la figuras, es lo que convierte a la combinación de técnicas CFD y redes neuronales en una herramienta muy potente y mucho más precisa que cualquier modelo zonal.

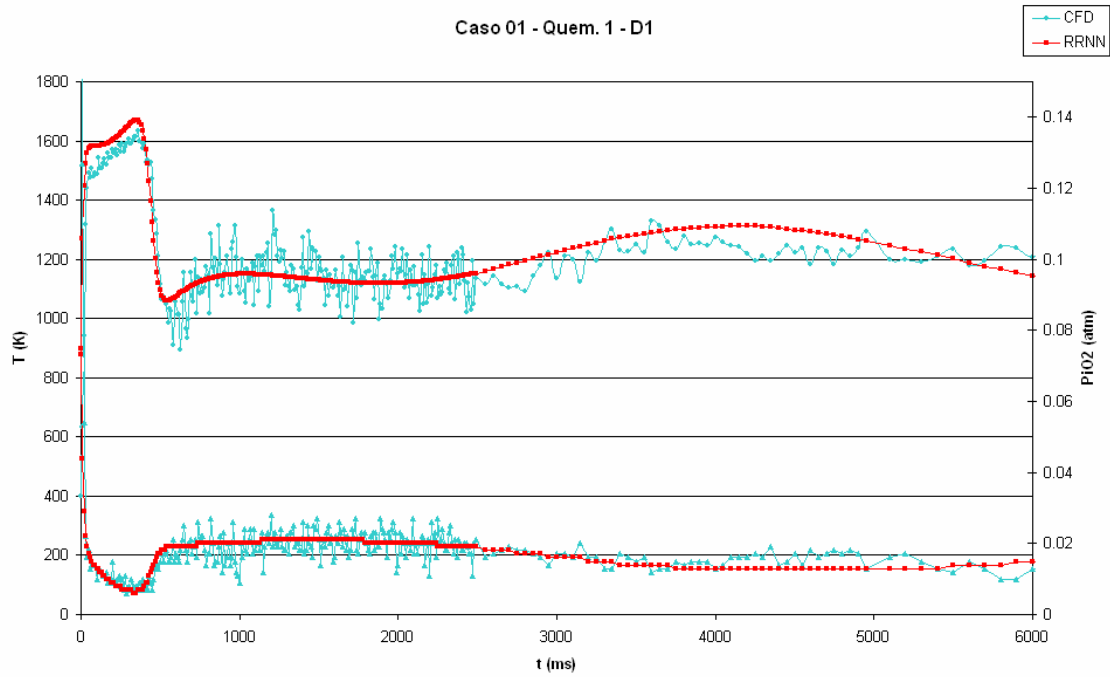


Fig. 5.9 Perfiles promedio de T^a y P_{iO_2} reales (CFD) y de las redes (RRNN): Caso 1, Quemador 1, Tamaño partícula D1 ($< 30 \mu\text{m}$)

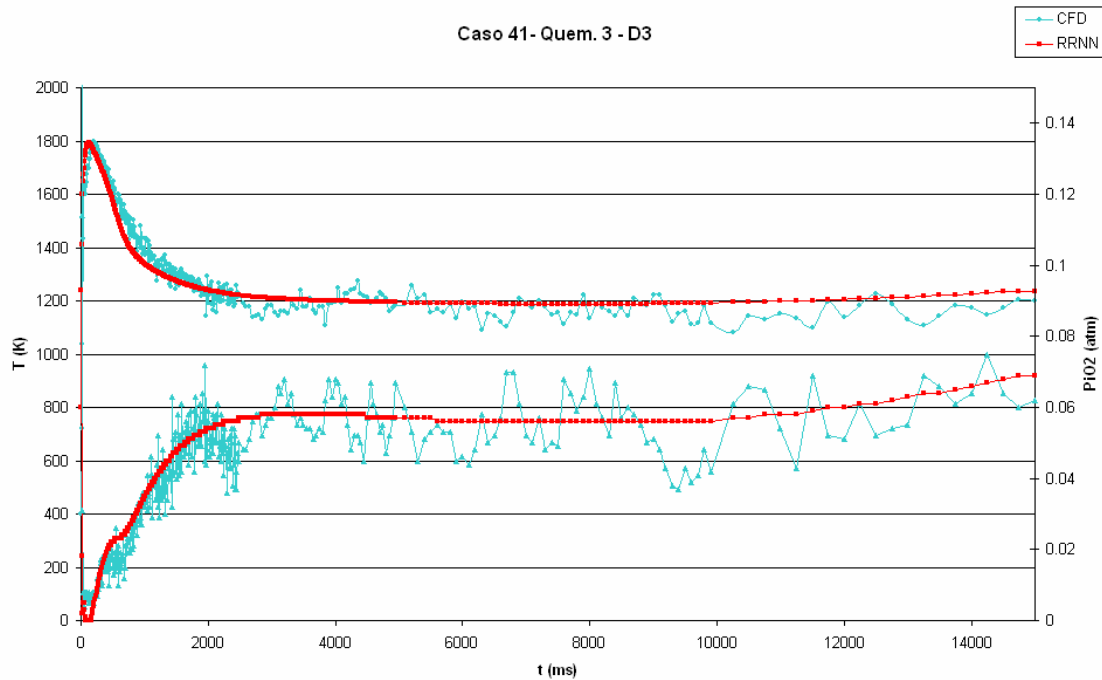


Fig. 5.10 Perfiles promedio de T^a y P_{iO_2} reales (CFD) y de las redes (RRNN): Caso 41, Quemador 3, Tamaño part. D3 ($60 - 90 \mu\text{m}$)

5.5 Conclusiones

Uno de los inconvenientes más acentuados en la incorporación de los códigos CFD a un sistema predictivo es su alto coste computacional. En consecuencia, no es posible desarrollar un sistema que trabaje en tiempo real utilizando este tipo de herramientas. Sin embargo, prescindir de la precisión y el detalle de sus soluciones resulta privativo, especialmente en problemas de predicción de la combustión, en los que es necesaria una caracterización muy precisa de los gradientes de temperatura y presión parcial de oxígeno en los primeros instantes de la combustión. Desde hace un par de décadas las redes neuronales se han asentado dentro del campo científico y tecnológico resolviendo todo tipo de problemas basados en el reconocimiento de patrones y/o almacenamiento y utilización de un conocimiento experimental previo. Además, las redes neuronales ofrecen múltiples ventajas frente a otras técnicas, ya que son sistemas robustos, tolerantes a los fallos, rápidos, sencillos y baratos.

Aprovechando estas cualidades, en este trabajo se ha desarrollado un sistema de redes neuronales que aprende, reproduce e interpola los resultados (en forma de perfiles de temperatura y presión parcial de oxígeno, y tiempo de residencia de las partículas) obtenidos con el código CFD para unas condiciones determinadas. Para ello, se han realizado un conjunto de simulaciones CFD cubriendo el rango completo de operación de la planta, y a partir de sus resultados se ha desarrollado, entrenado y validado el sistema de redes neuronales. Los resultados obtenidos permiten concluir que el sistema de redes neuronales, llamado modelo de condiciones locales de combustión, reproduce con gran precisión y detalle los resultados que generaría el código CFD. Además, gracias a la capacidad de generalización de las redes neuronales, es posible encontrar soluciones para otras condiciones distintas a las del entrenamiento, siempre que las variables de estudio se encuentren dentro del rango de variación utilizado durante el entrenamiento. Si a estas características, se añade que el nivel de detalle del campo fluido supera con creces la mejor precisión que se podría obtener con cualquier modelo zonal, y todo ello, con un coste computacional despreciable, podemos concluir que la combinación de técnicas CFD y redes neuronales es la herramienta idónea para el desarrollo de un sistema predictivo de la combustión como el que se plantea en este trabajo.

Nomenclatura

a	función de activación
b	bias
d_p	diámetro de la partícula (m)
d_{pm}	diámetro medio distribución Rosin Rammler (m)
e	vector de errores de la red neuronal
n	función de transferencia
n_{rr}	factor de dispersión distribución Rosin Rammler
p	entrada a la red neuronal
P_{iO_2}	presión parcial de oxígeno (N/m ²)
Q_a	caudal másico de aire primario (kg/s)
Q_c	caudal másico de carbón (kg/s)
t	tiempo (s)
t_{res}	tiempo de residencia (s)
T_g	temperatura del gas (K)
w	vector de parámetros (pesos y bias) de la red neuronal
x	nivel del análisis factorial
α_i	exponentes del análisis factorial
μ	coeficiente de convergencia

Acrónimos

CFD	computational fluid dynamics
MIMO	multi input multi output
MISO	multi input single output
RRNN	redes neuronales

6 MODELO DE COMBUSTIÓN

Predecir la formación de inquemados en grandes calderas de potencia exige tratar con gran detalle tanto el campo fluido y térmico del problema, como el proceso de combustión. No es suficiente calcular de manera precisa la fluidodinámica y la transferencia de calor del problema por medio de códigos CFD, como se ha visto en los Capítulos 3 y 4, si finalmente se utiliza un modelo sencillo para describir la combustión. Ésta es la mayor carencia que presentan los códigos CFD, cuyos modelos de combustión de partículas son muy básicos. Para la resolución de otro tipo de problemas cuyo resultado final esté poco vinculado con la cinética de la combustión, obtener una primera aproximación, o determinar tendencias generales, este tipo de modelos sencillos es suficiente y se utiliza habitualmente (Stopford, 2002). Sin embargo, en problemas más específicos que requieren un tratamiento riguroso de la combustión, como por ejemplo, un sistema de predicción de inquemados, estos modelos resultan insuficientes. Para ello, es necesario recurrir a modelos de combustión más detallados, como los que se describen a lo largo del Capítulo 2 (FLASCHAIN, FG-DVC o CPD para la devolatilización; CBK o CBK8 para la oxidación del residuo carbonoso).

Como se vió en el Capítulo 1, dentro del campo computacional, se utilizan mayoritariamente dos aproximaciones para resolver problemas de combustión en calderas de carbón pulverizado:

- Códigos CFD: Proporcionan una descripción detallada de los fenómenos de transporte del problema, pero utilizan modelos sencillos para describir la combustión.

-
- Modelos cinéticos de combustión avanzados: Describen con detalle el proceso de combustión. Se trata de modelos independientes que no calculan el campo fluido y térmico del problema, sino que éste es una entrada del modelo que habitualmente se obtiene a partir de aproximaciones zonales (Pallarés et al., 2007).

En este trabajo de tesis se desarrolla una nueva metodología que adopta las ventajas de las dos aproximaciones: la descripción detallada del campo fluido y térmico a partir de un código CFD, y la descripción detallada de la combustión a partir de un modelo cinético de combustión avanzado. Para llevar a cabo este objetivo se han contemplado dos posibilidades:

1. Implementar completamente un modelo de combustión avanzado en el código CFD.
2. Utilizar las soluciones del código CFD, en forma de perfiles de oxígeno y temperatura, para describir la historia de cada una de las partículas simuladas. A continuación, utilizar estos perfiles, junto con las propiedades del combustible, como entradas de un modelo de combustión avanzado.

La primera posibilidad fue descartada por la imposibilidad de acoplar todas las ecuaciones dentro de un código comercial con licencia y copyright. En esta línea, se llevaron a cabo pequeñas modificaciones en el modelo de combustión del código comercial CFX-4, incluyendo correlaciones de las propiedades del carbón, a través de la energía de activación y el factor preexponencial (Hurt y Mitchell, 1992), y un submodelo que describe la resistencia adicional de la ceniza a la difusión del oxidante hasta la superficie de la partícula (Hurt y Sun, 1998) (ver Capítulos 2, 3 y 4). De esta manera, se consiguieron mejorar considerablemente las predicciones de inquemados, respecto a las obtenidas con el modelo de una película implementado en el código CFX, describiendo adecuadamente las tendencias generales observadas en la planta ASM Brescia para tres carbones de distinta procedencia (Figura 6.1) (Pallarés et al., 2005).

Sin embargo, estas modificaciones, al no tener en cuenta la variación con el proceso de combustión de la reactividad y de la estructura porosa del residuo carbonoso, predicen adecuadamente tendencias generales, pero no así valores cuantitativos de inquemados (Pallarés et al., 2005, 2007). Otra ventaja de adoptar la segunda estrategia en detrimento de la primera, es que permite independizar el campo fluido del modelo de combustión. De esta manera, se pueden separar las variables que afectan exclusivamente al proceso de combustión, como las

propiedades del carbón. Así, ante cambios moderados en éstas no será necesario volver a calcular la simulación CFD para las nuevas condiciones, con el consiguiente ahorro de tiempo.

Esta hipótesis de desacoplamiento, por tratarse de un problema estacionario, se cumple si durante el post-proceso se utiliza el mismo modelo de combustión que el empleado dentro del código CFD para obtener los perfiles de presión parcial de oxígeno y temperatura. No así, si durante el post-proceso se utiliza un modelo de combustión distinto, ya que las variaciones en la cinética de reacción y en el calor generado (respecto a los calculados con el código CFD para obtener los perfiles), modifican el propio campo de temperaturas y de presiones parciales de oxígeno, introduciendo una fuente de error en la predicción. Pese a que la estrategia de solución planteada se enmarca en el segundo supuesto, este error se puede considerar despreciable en este trabajo por tres motivos. En primer lugar, porque la diferencia entre los modelos de combustión, el del CFD (Capítulo 3) y el del post-proceso (Capítulo 6), aunque importante en la descripción de los fenómenos intrínsecos y morfológicos que tienen lugar a nivel de la partícula durante la combustión, no es suficiente como para alterar significativamente el campo de temperatura y presión parcial de oxígeno en el hogar. En segundo lugar, porque este error se consigue minimizar exportando los perfiles correspondientes a la descripción euleriana de la fase gas (en las celdas), en lugar de exportar directamente los perfiles de la descripción lagrangiana de las partículas, ya que la variación provocada por el modelo de combustión en los primeros es mucho menor que en los últimos. Como se verá en el capítulo, es durante el post-proceso, dentro del propio modelo de combustión, cuando se lleva a cabo un balance de energía en la partícula para determinar su temperatura y presión parcial de oxígeno en la superficie, a partir de los valores de la fase gas. Y finalmente, porque la validación llevada a cabo en la Sección 6.3, pone de manifiesto la bondad de la aproximación mejorando ostensiblemente los resultados obtenidos exclusivamente con el código CFD.

Por último, y también como consecuencia de esta independencia, resulta más fácil e intuitivo desarrollar un modelo de redes neuronales, como el descrito en el Capítulo 5, que sustituya únicamente el cálculo CFD del campo fluido, generando los perfiles de oxígeno y temperatura necesarios para usarlos como entradas en el modelo de combustión avanzado (ver Capítulo 7).

El presente capítulo se centra en la definición del modelo de combustión. La descripción y el desarrollo del modelo se limita a las reacciones que ocurren en la superficie de la partícula, devolatilización y oxidación del residuo carbonoso. Por lo tanto, el modelo de combustión está compuesto por dos submodelos correspondientes a cada una de estas etapas. Se considera que primero tiene lugar la etapa de devolatilización, y una vez que ésta se ha completado, se produce

la oxidación del residuo carbonoso. Esta suposición es la habitual en la modelización de la combustión de carbón, aunque existen excepciones que tienen en cuenta el posible solapamiento entre ambos procesos (devolatilización y oxidación del residuo carbonoso) cuando el oxígeno consigue difundir hasta la superficie de la partícula en condiciones de máxima velocidad de reacción (Gurgel et al., 1999). Para el proceso de devolatilización se ha optado por el modelo FG-DVC. Para la oxidación del residuo carbonoso se ha desarrollado y programado en Fortran, un modelo intrínseco, que basado en el modelo CBK8 (Sun y Hurt, 2000), incluye los efectos de la variación de la estructura porosa de la partícula, efectos de desactivación térmica, efectos de la materia mineral y efectos debidos a la composición maceral del carbón.

Finalmente y para cerrar el capítulo, se lleva a cabo la validación del modelo. Para ello, se han utilizado nueve escenarios de operación de la central térmica de estudio Lamarmora (ASM Brescia), comparando satisfactoriamente los resultados obtenidos en la planta con los obtenidos con el modelo de combustión.

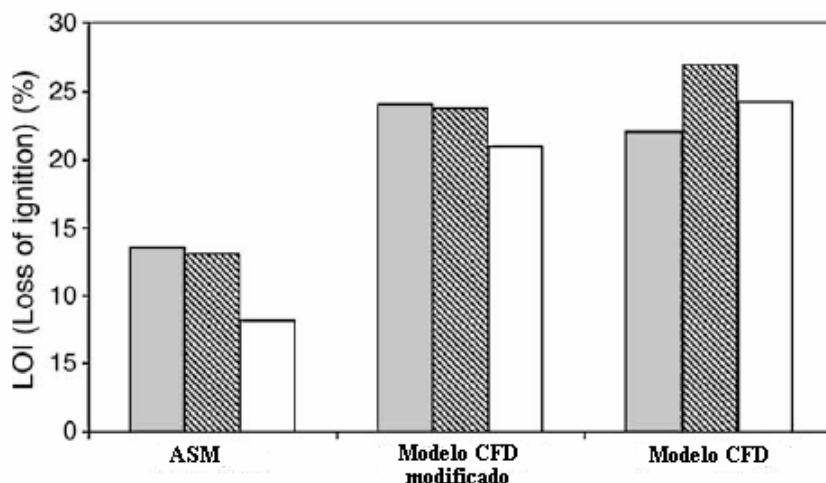


Fig. 6.1 Comparación de los resultados de pérdida de ignición (LOI %) obtenidos en la planta ASM Brescia, frente a los calculados con el modelo CFD (modelo sencillo) y con el modelo CFD modificado (Pallarés et al., 2005)

6.1 Modelo de devolatilización

En el Capítulo 2 se realizó un breve repaso de los modelos de devolatilización más divulgados en trabajos e investigaciones de combustión. Ahora, el objetivo se centra en determinar qué modelo resulta más adecuado para formar parte del sistema de predicción de inquemados. Por un lado, se tienen los modelos de pérdida de peso (SFOR, DAEM, 2CSM), utilizados

mayoritariamente en problemas generales de combustión. Estos modelos, ventajosos por su sencillez, resultan inadecuados en el desarrollo de un sistema de predicción de inquemados, ya que la devolatilización influye directamente sobre la formación del char y determina sus propiedades reactivas y estructurales. Por esta razón, se debe recurrir a modelos más complejos, como los de redes: FG-DVC (Solomon et al., 1988), CPD (Fletcher et al., 1992) y FLASHCHAIN (Niksa, 1991). Para ilustrar con un ejemplo la importancia de una buena elección del modelo de devolatilización en la predicción de los inquemados en cenizas, se va a suponer que para un mismo carbón, se determina su proceso de devolatilización utilizando un modelo de pérdida de peso y un modelo de redes, obteniendo una diferencia entre métodos de tan sólo un 5 % en la cantidad de materia volátil liberada. En estudios térmicos de calderas, o de diseño de los intercambiadores de calor, o de deposición en los tubos por ejemplo, este porcentaje apenas va a modificar la transferencia de calor en el hogar de manera que afecte a la resolución del problema. Sin embargo, en el caso del estudio de inquemados en cenizas, un 5 % de diferencia en la predicción de la devolatilización en un carbón con un contenido medio en cenizas del 6 %, puede suponer una variación en la predicción cercana al 2 %. Este margen puede resultar crítico, sobre todo teniendo en cuenta que las centrales, especialmente con la incorporación de nuevas estrategias para reducir las emisiones contaminantes, se mueven en la frontera cercana al límite del contenido de inquemados en cenizas que les permiten vender éstas a las industrias cementeras.

Dentro de los modelos de devolatilización de redes, la capacidad de cálculo y las prestaciones de los tres modelos son muy similares. Tan sólo existen pequeñas diferencias que se citan a continuación (Backreedy, 2002):

- Todos ellos proporcionan la liberación y distribución en peso de gas, tar y char. Aunque, sólo el modelo FG-DVC presenta la liberación de volátiles en forma de tar y gas por grupos funcionales.
- Tanto el modelo FG-DVC como el FLASHCHAIN predicen la tasa de liberación de volátiles para el tar, gas y otras especies volátiles. No así, el código CPD.

Estas características, por sí mismas, no clarifican qué modelo resulta más apropiado para nuestro sistema. Por ello, se debe estudiar qué modelo determina de manera más realista, para un rango amplio de carbones, el proceso de devolatilización en las condiciones típicas en una caldera de carbón pulverizado. Dos parámetros fácilmente medibles, que caracterizan la devolatilización, son la cantidad final de volátiles liberados y las constantes cinéticas del

proceso (E_v , A_v). En el trabajo de Backreedy (2002) se realizan una serie de pruebas experimentales de devolatilización con DTF y HWM para velocidades de calentamiento propias de calderas de carbón pulverizado (10^5 K/s), comparando los resultados experimentales con los obtenidos por los tres modelos de redes (FG-DVC, FLASHCHAIN y CPD).

A continuación se resumen los resultados más notables:

1. En general, los tres modelos predicen adecuadamente la cantidad de volátiles liberados. No obstante, se debe tener en cuenta que puede existir una diferencia significativa, hasta un orden de magnitud, entre los valores de la velocidad de calentamiento en una caldera convencional de combustión y la obtenida en un quemador experimental. Sólo en el caso específico de la liberación de especies de nitrógeno (interesante para predicciones de NO_x) el modelo CPD proporciona mejores resultados, ya que en éste, la modelización de la liberación de nitrógeno está directamente ligada a la evolución de la estructura química del carbón durante la pirólisis.
2. En cuanto a los parámetros cinéticos (E_v , A_v), los modelos FG-DVC y CPD ajustan mejor los resultados obtenidos con el DTF, mientras que el modelo FLASHCHAIN es el que más se aproxima a los obtenidos con el HWM. Este resultado se puede explicar a partir de la propia construcción de los modelos, ya que los datos utilizados para desarrollar el modelo FG-DVC fueron determinados a partir de experimentos con un TGA, los del modelo CPD con un FFB, y los del modelo FLASHCHAIN con un HWM.

Como con el modelo de devolatilización determinamos la cantidad de materia volátil liberada, y por lo tanto, el residuo carbonoso resultante al que le aplicaremos el modelo de oxidación; a partir de lo expuesto en el punto uno, cualquiera de los modelos puede ser adecuado para este propósito. Sin embargo, a partir de las conclusiones del segundo punto, parece lógico utilizar un modelo que además nos proporcione unos valores cinéticos próximos a los que obtendríamos con un estudio experimental del proceso de devolatilización. Mayoritariamente los estudios cinéticos de la combustión de carbón pulverizado en calderas de potencia se llevan a cabo en TGA y DTF (Jones et al., 1999). En consecuencia, el modelo FG-DVC ha sido elegido para formar parte del modelo de combustión del sistema de predicción de inquemados.

6.2 Modelo de oxidación del residuo carbonoso

Al igual que con los modelos de devolatilización, en el Capítulo 2 se realizó un breve repaso de los modelos de oxidación del residuo carbonoso más divulgados en trabajos e investigaciones de combustión. La oxidación del residuo carbonoso es la etapa más lenta del proceso de combustión, y por lo tanto, la que finalmente condiciona el grado de combustión alcanzado. Por esta razón, y como ya se ha mencionado en la introducción del capítulo, en esta etapa resulta especialmente importante llevar a cabo una descripción del proceso lo más detallada posible. Éste es el punto débil de los códigos CFD que tan sólo incorporan modelos sencillos (globales o intrínsecos) como el de una película de Field (1967), el de Baum y Street (1970) o el de Smith (1978, 1982). Estos modelos ignoran efectos de gran influencia en la determinación del grado de combustión alcanzado, como por ejemplo la variación de la estructura porosa y de las propiedades reactivas del residuo carbonoso. Así pues, estos modelos predicen adecuadamente tendencias generales de la combustión, pero fallan cuando es necesario proporcionar resultados cuantitativos.

Describir adecuadamente la variación de la estructura porosa influye notablemente en los resultados obtenidos. Por ello, en cálculos de combustión rigurosos, es preferible utilizar modelos intrínsecos en lugar de modelos globales. A su vez, estos modelos intrínsecos, dependiendo del nivel de detalle alcanzado en la descripción del proceso de difusión a través de la estructura porosa, se clasifican en modelos de poro macroscópicos y microscópicos. Los primeros, utilizan un coeficiente de difusión efectivo para un tamaño característico de poro de la partícula. Los segundos emplean distribuciones estadísticas para caracterizar la variedad de tamaños de poro en la partícula y el proceso de difusión a través de ellos. Como la contribución de los microporos y mesoporos al proceso de difusión de oxidante es muy pequeña comparada con las vías que proporcionan los poros de mayor tamaño (Sun y Hurt, 2000), una caracterización macroscópica es suficientemente precisa para nuestro trabajo.

Otra consideración de gran relevancia en estudios de combustión en calderas de potencia, y especialmente en la determinación de los quemados sólidos, es la variación de la reactividad a lo largo del proceso de combustión. Este fenómeno se hace más significativo hacia el final de la combustión, donde se produce una disminución importante de la reactividad, provocando un tránsito desde la Zona II de la combustión hasta la Zona I (Abd El-Samed, 1990; Hurt et al., 1993, 1999; Essenhigh, 1999). Este comportamiento es conocido como desactivación térmica del residuo carbonoso. No incluir este fenómeno en los cálculos de combustión explica por qué muchos modelos predicen adecuadamente el nivel de combustión obtenido en un quemador

experimental o DTF, donde habitualmente no se estudia más allá del 70 % de la conversión del carbón, y sin embargo, predicen erróneamente los inquemados sólidos producidos en calderas convencionales, donde el grado de combustión supera habitualmente el 90 % (Hurt et al., 1998).

Otra característica que juega un papel importante en la oxidación del residuo carbonoso, y que por lo tanto, conviene incluir en el modelo, es la influencia de la materia mineral (Hampartsoumian et al., 1989; Unsworth et al., 1991). A bajas temperaturas de oxidación (< 600 °C), la materia mineral puede tener un efecto catalítico sobre la reactividad del char. Sin embargo, a temperaturas mayores (> 600 °C) no se evidencia ese efecto catalítico, sino que al contrario, la presencia de materia mineral en la superficie de la partícula dificulta la difusión del oxidante hasta los sitios activos donde tiene lugar la reacción (Chan et al., 1999). Como el primer efecto ocurre a temperaturas menos características de la combustión del carbón pulverizado en calderas de potencia (> 900 °C), y no están claros los mecanismos que provocan este efecto catalítico (Backreedy, 2002), en el presente trabajo, sólo se ha considerado la resistencia a la difusión que provoca la ceniza, especialmente importante en las últimas etapas de la combustión donde la ceniza suele cubrir toda la superficie de la partícula.

Finalmente, otra característica importante en la reactividad del carbón es la composición maceral del mismo (Unsworth et al., 1991). Habitualmente, la reactividad se expresa en función del análisis elemental del carbón. Sin embargo, distintos estudios (Hampartsoumian et al., 1989; Unsworth et al., 1991; Cloke et al., 2003) muestran que, debido a la influencia de la composición maceral del carbón sobre la reactividad del residuo carbonoso, desarrollar expresiones de la reactividad en función de las características petrográficas del carbón, mejora notablemente las predicciones de la combustión.

Teniendo en cuenta todas estas características, en este trabajo de tesis se ha desarrollado y programado en Fortran un modelo intrínseco que basado en el modelo CBK8 (Sun y Hurt, 2000), utiliza varias subrutinas para incluir todos los efectos descritos en los párrafos anteriores:

- El proceso de desactivación térmica.
- La estructura porosa de la partícula y su evolución durante el proceso de combustión.
- El efecto inhibitor de la ceniza en la difusión del oxidante.
- El efecto de la composición maceral del carbón en la reactividad del char.

El modelo calcula en cada instante la cantidad de carbono que ha reaccionado, es decir, el porcentaje de combustión completado, o complementariamente, el porcentaje de carbono

inquemado. La Ec. 6.1 muestra como la masa de carbono presente en la partícula en un instante determinado, se calcula a partir de la masa de carbono en el instante anterior menos la cantidad de carbono que ha reaccionado según la velocidad de reacción q_c en el intervalo de tiempo comprendido entre los dos instantes considerados.

$$m_c(t + \delta t) = m_c(t) - q_c \cdot (\pi \cdot d_p^2) \cdot dt \quad (\text{Ec. 6.1})$$

Como se verá a lo largo de la exposición del modelo, existen gradientes muy elevados de las variables que rigen el proceso de combustión, de manera que el intervalo de tiempo dt se debe elegir lo suficientemente pequeño para captar todos estos cambios y asegurar la convergencia del modelo.

Comenzaremos la descripción del modelo, por los datos de entrada del programa:

- Propiedades del carbón: Análisis inmediato, análisis elemental, análisis petrográfico, densidad inicial del carbono (ρ_c) y de la ceniza (ρ_{at}), calores específicos (Cp_c , Cp_a), conductividad térmica de la ceniza (λ_{at}), etc.
- Constantes de los modelos: factor de hinchamiento ($Swell$), porosidad crítica de la capa de ceniza (θ_{taf}), espesor mínimo de la capa de ceniza (δ_m), tortuosidad de los poros (τ), orden de reacción (n), energía de activación (E_e), parámetros de la distribución de energías de activación del proceso de desactivación térmica (E_d , A_d , σ_{nEd}), parámetros de la relación de formación CO/CO₂ (E_c , A_c), etc.
- Perfiles de las partículas (obtenidos con el código CFD): Masa inicial de la partícula (m_{p0}), tiempo de residencia (t_{res}), y temperatura (T_g) y presión parcial de oxígeno (P_g) en las celdas por las que pasan cada una de las partículas.
- Resultados del proceso de devolatilización: Cantidad de volátiles liberados en condiciones de alta temperatura (HTVM), residuo carbonoso resultante.
- Condiciones de operación: Presión en el hogar (P_{boiler}), configuración de quemadores, asimetrías en los caudales máxicos entre quemadores, distribución granulométrica de la partículas (d_{pm} , n_{tr}), temperatura de las paredes del hogar (T_w), etc.

La velocidad de reacción por unidad de superficie q_c se determina combinando los efectos del transporte de oxígeno hasta la superficie activa de la partícula y de la reactividad del char. Como se vio en el Capítulo 2, en un modelo intrínseco, q_c se expresa en función de la masa de carbono en la partícula m_c , de un factor de eficacia η , de la reactividad intrínseca R_i , de la temperatura de la partícula T_p , de la presión parcial de oxidante en la superficie de la partícula P_s y del orden de reacción n (Ec. 6.2). Adicionalmente, se ha incorporado en esta expresión un factor de corrección maceral f_{mac} para incluir la influencia de la composición petrográfica del carbón en la reactividad.

$$q_c = m_c \cdot \eta \cdot R_i \cdot \left(\frac{P_s}{R \cdot T_p} \right)^n \cdot f_{mac} \quad (\text{Ec. 6.2})$$

Para calcular la velocidad de reacción q_c a lo largo del tiempo de residencia de una partícula, deberemos determinar, en cada intervalo temporal dt considerado, todos los términos situados a la derecha de la Ec. 6.2.

La reactividad intrínseca del residuo carbonoso R_i , se especifica con una expresión tipo Arrhenius de parámetros cinéticos A_i y E_e (Ec. 6.3).

$$R_i = A_i \cdot \exp(-E_e/R \cdot T_p) \quad (\text{Ec. 6.3})$$

En la bibliografía se encuentran valores de la energía de activación E_e , en el rango de 105 – 200 kJ/mol (Smith, 1982; Mitchell y McLean, 1982; Charpenay et al., 1982; Sun y Hurt, 2000; Backreedy et al., 1999, 2002, 2006; etc.). Cada autor determina un valor o un rango de valores (para varios carbones) de E_e , de manera que, de acuerdo al modelo de combustión empleado, describa de forma correcta el proceso de combustión. Sin embargo, como se expone a continuación, el modelo desarrollado en este trabajo permite utilizar indistintamente diferentes modelos de desactivación térmica, de manera que no es posible asignar un único valor de E_e para todos ellos. Por esta razón, dependiendo del modelo elegido para realizar los cálculos y de las propiedades del carbón, se define un rango de valores de E_e para cada caso concreto. Se volverá sobre esta discusión una vez definidos los modelos de desactivación térmica.

Volviendo a la Ec. 6.3, queda patente que si ésta se define a partir de parámetros cinéticos constantes (E_e , A_i), se estaría considerando una reactividad invariable durante todo el proceso. Con una definición de estas características se obviaría la disminución de la reactividad que tiene

lugar durante el proceso de combustión, y se obtendría una predicción sobreestimada del nivel de combustión real. Por ello, se introduce en el modelo, a través del factor preexponencial A_i , una función de desactivación para expresar la pérdida de reactividad del residuo carbonoso. En el modelo desarrollado en este trabajo, se han incorporado tres submodelos de desactivación distintos (Hurt et al., 1998; Van der Lans et al., 1998; Backreedy et al., 2006), de manera que es posible utilizar indistintamente cualquiera de ellos. La razón de incorporar las tres opciones es que permite flexibilizar el uso del modelo dependiendo de las características del problema. En este sentido, cabe mencionar que el modelo de desactivación de Hurt et al. (1998) reproduce adecuadamente el fenómeno de pérdida de reactividad en los experimentos llevados a cabo en DTF, como se puede ver en la Figura 2.8 (Capítulo 2). Sin embargo, debido a que las condiciones que se dan en una caldera real no son exactamente las mismas que las de un quemador experimental, este modelo tiende a sobrevalorar el efecto de la pérdida de reactividad. Por esta razón, se han incluido otros dos modelos, que amortiguan este efecto, proporcionando unos resultados bastante parecidos, entre sí y con los datos obtenidos experimentalmente en la planta. En el apartado de la validación del modelo se retomará esta discusión. A continuación, se describe la formulación de los tres submodelos.

La formulación del proceso de desactivación térmica de Hurt et al. (1998) se desarrolla a partir del modelo de Suuberg (1991), que describía el mismo efecto de pérdida de reactividad. El modelo de Hurt et al. (1998) utiliza una función de desactivación $f_E(E_d(t))$ que representa la disminución de sitios activos –emplazamientos locales donde puede tener lugar la reacción de oxidación– dentro de la matriz del residuo carbonoso.

$$A_i = k \cdot S = k_0 \cdot S_0 \cdot \int_0^{\infty} f_E(E_d(t)) dE_d \quad (\text{Ec. 6.4})$$

Donde, el producto kS representa una reactividad intrínseca específica y k_0S_0 la reactividad intrínseca específica inicial, definida en función de la composición elemental del carbón original en recepción según la Ec. 6.5 (Sun et al., 2000).

$$\text{Log}_{10}(k_0 \cdot S_0) = 14,97 - 0.0764 \cdot \% C \quad (\text{Ec. 6.5})$$

La variación de la función de distribución $f_E(E_d(t))$ respecto al tiempo, responde a un proceso térmico de primer orden según la Ec. 6.6.

$$\frac{\delta f_E(E_d(t))}{\delta t} = -f_E(E_d(t)) \cdot A_d \exp\left(-\frac{E_d(t)}{R \cdot T_p}\right) \quad (\text{Ec. 6.6})$$

Sustituyendo la Ec. 6.6 en la Ec. 6.4, y a continuación, discretizando en E_d la integral de la Ec. 6.4 en un número (30) de intervalos equivalentes (Hurt et al., 1998), se llega a la expresión general del proceso de desactivación térmica (Ec. 6.7) que incluiremos en nuestro modelo a través de la Ec. 6.3.

$$A_{i(t+\Delta t)} = k \cdot S = k_0 \cdot S_0 \cdot \sum_{i=1}^{30} \left[f_{Ei(t)} \cdot \left(\exp\left(-\Delta t \cdot A_d \cdot \exp\left(\frac{-E_{di}}{R \cdot T_p}\right)\right) \right) \right] \quad (\text{Ec. 6.7})$$

Donde, $f_{Ei(t)}$ es el valor de la función de distribución para una energía de activación E_{di} en el instante inicial t del intervalo considerado. A tiempo cero, la función de distribución $f_{Ei(t=0)}$ se define como una distribución logarítmica normal (Ec. 6.8) de parámetros $E_{dm}=16.44$ kcal/mol, $\sigma_{\ln Ed}=0.46$ ln kcal/mol y $A_d=8.863E+7$ s⁻¹ (Sun y Hurt, 2000) (Figura 6.2).

$$f_{Ei(t=0)}(E_d) = \frac{1}{\sigma_{\ln Ed} \cdot \sqrt{2 \cdot \pi}} \exp\left[\frac{-(E_d - E_{dm})^2}{2 \cdot \sigma_{\ln Ed}^2}\right] \quad (\text{Ec. 6.8})$$

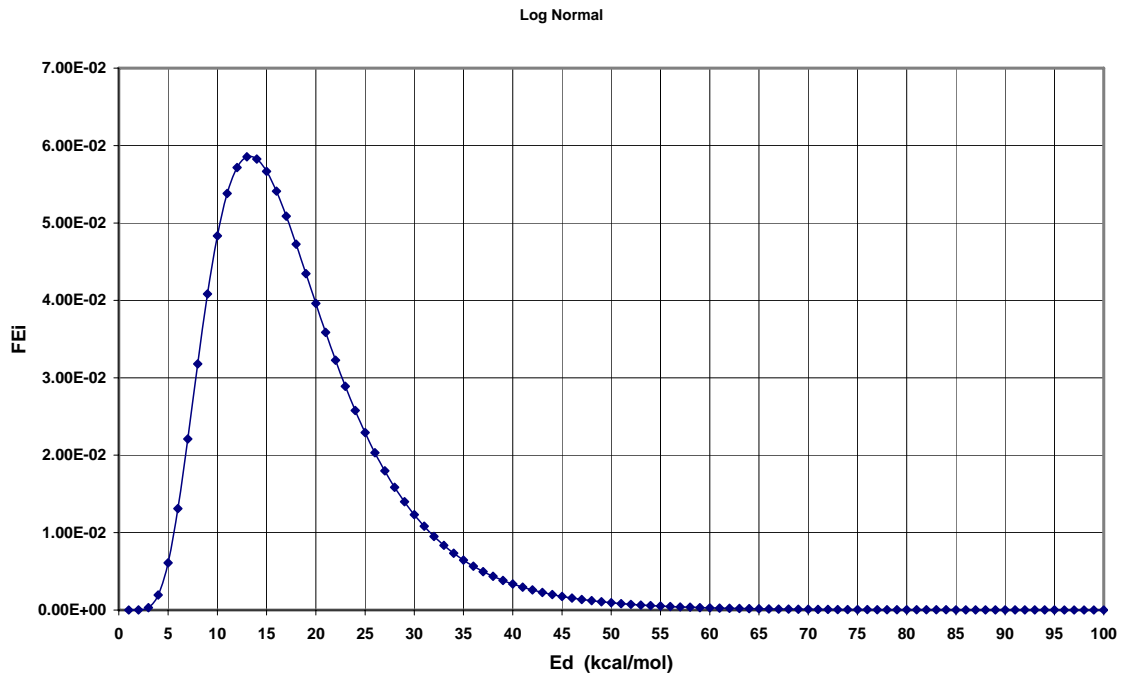


Fig. 6.2 Función logarítmica normal de la energía de activación E_d del proceso de desactivación térmica a tiempo cero

Para la discretización de la función de distribución en treinta intervalos, los valores iniciales de las energías de activación distribuidas E_{di} , se han elegido de forma que la probabilidad de que existan sitios activos con energía de activación E_{di} en el instante $t = 0$ sea superior a 0.0001. (Tabla 6.1).

$E_{d1}=5$	$f_{E1}=0.01$	$E_{d16}=34$	$f_{E16}=0.01502$
$E_{d2}=6$	$f_{E2}=0.02144$	$E_{d17}=36$	$f_{E17}=0.0113$
$E_{d3}=8$	$f_{E3}=0.0636$	$E_{d18}=38$	$f_{E18}=0.00915$
$E_{d4}=10$	$f_{E4}=0.0971$	$E_{d19}=40$	$f_{E19}=0.00675$
$E_{d5}=12$	$f_{E5}=0.1128$	$E_{d20}=42$	$f_{E20}=0.005$
$E_{d6}=14$	$f_{E6}=0.1197$	$E_{d21}=44$	$f_{E21}=0.004$
$E_{d7}=16$	$f_{E7}=0.10256$	$E_{d22}=46$	$f_{E22}=0.003$
$E_{d8}=18$	$f_{E8}=0.0938$	$E_{d23}=48$	$f_{E23}=0.003$
$E_{d9}=20$	$f_{E9}=0.0802$	$E_{d24}=50$	$f_{E24}=0.002$
$E_{d10}=22$	$f_{E10}=0.0654$	$E_{d25}=52$	$f_{E25}=0.002$
$E_{d11}=24$	$f_{E11}=0.0513$	$E_{d26}=54$	$f_{E26}=0.001$
$E_{d12}=26$	$f_{E12}=0.0413$	$E_{d27}=56$	$f_{E27}=0.001$
$E_{d13}=28$	$f_{E13}=0.0308$	$E_{d28}=58$	$f_{E28}=0.001$
$E_{d14}=30$	$f_{E14}=0.02551$	$E_{d29}=60$	$f_{E29}=0.001$
$E_{d15}=32$	$f_{E15}=0.01827$	$E_{d30}=61$	$f_{E30}=0.001$

Tabla 6.1 Valores de la discretización, en treinta intervalos, de la energía de activación E_{di} del proceso de desactivación térmica, y los valores de la función de distribución correspondientes a estas energías de activación $f_{Ei}(E_d)$ en el instante $t = 0$

Para cualquier otro instante, la función de distribución se calcula a partir del valor obtenido en el instante anterior según la Ec. 6.9.

$$f_{Ei(t+\delta t)} = f_{Ei(t)} \cdot \left(\exp \left(-dt \cdot A_d \cdot \exp \left(\frac{-E_{di}}{R \cdot T_p} \right) \right) \right) \quad (\text{Ec. 6.9})$$

Otros autores han preferido desarrollar otras expresiones alternativas de la desactivación térmica. Tal es el caso de Van der Lans et al. (1998) o Backreedy et al. (2006) que expresan la variación de la reactividad directamente en función del grado de combustión alcanzado m_c/m_{c0} (Ecs. 6.10 y 6.11-6.13 respectivamente).

$$A_i = k \cdot S = k_0 \cdot S_0 \cdot \left(1 - \left(\frac{m_c}{m_{c0}} \right) \right)^{0.5} \quad (\text{Ec. 6.10})$$

$$A_i = f_{ann} \cdot \alpha_D \cdot A_0 \quad (\text{Ec. 6.11})$$

$$\alpha_D = 0.3 \cdot \left(-28.44 \cdot \left(\frac{m_c}{m_{c0}} \right)^4 + 85.33 \cdot \left(\frac{m_c}{m_{c0}} \right)^3 - 85.33 \cdot \left(\frac{m_c}{m_{c0}} \right)^2 + 28.44 \cdot \left(\frac{m_c}{m_{c0}} \right) + 1 \right) \quad (\text{Ec. 6.12})$$

$$f_{am} = 0.9 \quad \text{si } 70 \% < \%C < 90\%, 20 \mu\text{m} < d_p < 100 \mu\text{m}, T_p > 1400 \text{ }^\circ\text{C} \quad (\text{Ec. 6.13})$$

Volviendo a la discusión planteada en la Ec. 6.3 acerca de la elección de la energía de activación E_e ; a partir de la validación del modelo, utilizando los tres modelos de desactivación, se definen los siguientes valores para el rango de carbones utilizados en el estudio:

- $E_e = 162 \pm 10$ kJ/mol en el caso de utilizar el modelo de desactivación térmica de Van der Lans et al. (1998) o de Backreedy et al. (2006).
- $E_e = 140 \pm 10$ kJ/mol en el caso de utilizar el modelo de Hurt et al. (1998).

La eficiencia en el proceso de difusión a través de la estructura porosa del char, se refleja por medio del factor de eficacia η . Éste se obtiene por integración del balance de materia en una partícula esférica, y se expresa en función del modulo de Thiele (Ec. 6.14).

$$\eta = \frac{3}{\phi} \left[\frac{1}{\tanh(\phi)} - \frac{1}{\phi} \right] \quad (\text{Ec. 6.14})$$

Donde, el modulo de Thiele combina los fenómenos de reacción y difusión en la partícula según la Ec. 6.15.

$$\phi = \frac{d_p}{6} \cdot \left[\frac{(n+1) \cdot \rho \cdot R_i \cdot (P_s / R \cdot T_p)^{n-1}}{2 \cdot D_{eff}} \right]^{0.5} \quad (\text{Ec. 6.15})$$

Así, un valor del factor de eficacia η cercano a la unidad, indica que la reacción se encuentra dentro de la Zona I, en donde la velocidad global de la reacción es aproximadamente igual a la velocidad de la reacción química intrínseca. Valores de η mucho menores que la unidad, indican que la reacción se encuentra dentro de la Zona II, donde la velocidad global de la reacción es mucho menor que la correspondiente a la velocidad de la reacción química intrínseca, debido a la disminución de la velocidad de difusión (Sun y Hurt, 2000).

Para incluir la naturaleza porosa del residuo carbonoso, y el hecho de que el oxígeno penetra esta estructura, y reacciona en el área superficial externa e interna de la partícula, en cada iteración temporal se determina un coeficiente efectivo de difusión D_{eff} en función de la porosidad de la partícula θ y de un factor geométrico de poro $\tau/f = 6$, según el modelo de poro macroscópico dado por la Ec. 6.16.

$$D_{eff} = D_{O_2} \cdot \frac{\theta \cdot f}{\tau} \quad (\text{Ec. 6.16})$$

Donde, la difusividad efectiva se expresa en función de la difusividad molecular (Ec. 6.17) bajo la simplificación de que son los poros de gran tamaño los que contribuyen de forma mayoritaria a la difusión del oxidante, mientras que los microporos y mesoporos ($< 1 \mu\text{m}$), en los que cabría esperar una difusión tipo Knudsen, apenas contribuyen al transporte del oxidante (Gale et al., 1996; Sun y Hurt, 2000).

$$D_{O_2} = 1.543 \cdot \frac{T_m^{1.67}}{P_{boiler}} \quad (\text{Ec. 6.17})$$

La transición en las últimas etapas de la combustión desde la Zona II de reacción hasta la Zona I es el resultado de un fenómeno denominado extinción, provocado por el efecto de la pérdida de reactividad del char y por el efecto de la aparición de una capa de ceniza cubriendo la superficie de la partícula, que añade una resistencia adicional a la difusión del oxidante. El proceso de desactivación térmica ya ha sido introducido en los párrafos anteriores; a continuación, se describe la incorporación al modelo, del efecto de la capa de ceniza. Para ello, consideraremos una expresión alternativa a la Ec. 6.2, en la que la velocidad de reacción q_c se expresa en función de una constante cinética de difusión k_d (Ec. 6.18).

$$q_c = k_d (P_g - P_s) \quad (\text{Ec. 6.18})$$

Si únicamente se considera la difusión del oxidante a través de la capa limitante imaginaria que rodea a la partícula, entonces k_d se puede expresar, por ejemplo, según la expresión de Field (1967), o la de Baum y Street (1970) (Ec. 6.19 y Ec. 6.20 respectivamente).

$$k_d = \frac{24 \cdot \varphi \cdot D_{O_2}}{d_p \cdot R \cdot T_m} \quad (\text{Ec. 6.19})$$

$$k_d = \frac{2.53E-7 \cdot \varphi}{d_p} \cdot \left(\frac{T_p + T_g}{2} \right)^{0.75} \cdot \left(\frac{1}{10} \right) \quad (\text{Ec. 6.20})$$

Sin embargo, si se quiere incluir el efecto de la ceniza, se deberá considerar, en la constante cinética de difusión k_d , una resistencia adicional debida a la capa de ceniza que se va formando alrededor de la partícula (Hurt et al., 1998) (Ec. 6.21).

$$k_d = \frac{Sh \cdot D_{O_2} \cdot d_p \cdot \theta_{af}^{2.5}}{R \cdot T_m \cdot (Sh \cdot \delta \cdot d_c + \theta_{af}^{2.5} \cdot d_c^{2.5})} \quad (\text{Ec. 6.21})$$

Donde, Sh es el número de Sherwood (para tamaños característicos de partículas pulverizadas, $Sh = 2$), θ_{af} es la porosidad de la película de ceniza, δ es el espesor de la película de ceniza y d_c es el diámetro de la partícula sin contar la película de ceniza (Ec. 6.22).

$$d_p = d_c + 2 \cdot \delta \quad (\text{Ec. 6.22})$$

Al igual que el resto de características del modelo, la descripción de la capa de ceniza (d_p , d_c , δ , θ_{af} , ρ_c , ρ_a) no permanece invariable durante el proceso de combustión. Al principio, cuando la conversión del carbón es todavía pequeña, la capa de ceniza está dispersa en forma de granos sobre la superficie de la partícula ocupando un espesor mínimo δ_m . Conforme va avanzando el proceso de conversión, se añaden más granos a la película, disminuyendo con ello su porosidad. A partir de un determinado momento, los granos comienzan a agolparse, aumentando el espesor de la película, y manteniéndose una porosidad constante denominada porosidad crítica de la capa de ceniza θ_{iaf} . De manera que se pueden definir dos estados: primero, un estado en el que se tiene un espesor de capa mínimo constante, y es la porosidad la que va disminuyendo paulatinamente conforme se van añadiendo más partículas de ceniza; y segundo, un estado en el que a partir de que se alcanza una porosidad crítica, ésta permanece constante, y es el espesor de la capa de ceniza el que empieza a aumentar. Para definir la transición entre los dos estados, Hurt et al. (1998) proponen calcular, en cada intervalo de tiempo considerado, el espesor de la capa de ceniza correspondiente a la porosidad crítica ($\theta_{af} = \theta_{iaf} = 0.16 - 0.25$), a partir de las Ecs. 6.22 y 6.23.

$$d_c = d_p \cdot \left(\frac{(X_a \cdot \rho - \rho_{at} \cdot (1 - \theta_{iaf}))}{(X_{a0} \cdot \rho_c - \rho_{at} \cdot (1 - \theta_{iaf}))} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (\text{Ec. 6.23})$$

$$\theta_{af} = 1 - \left(\frac{X_a \cdot \rho - X_{a0} \cdot \rho_0 \cdot \left(1 - \frac{2 \cdot \delta_m}{d_p}\right)^3}{\rho_{at} - \rho_{at} \cdot \left(1 - \frac{2 \cdot \delta_m}{d_p}\right)^3} \right) \quad (\text{Ec. 6.24})$$

Si el espesor calculado, correspondiente a la porosidad crítica, es inferior a un espesor mínimo considerado (5 μm), correspondiente al tamaño medio de grano, entonces se considera $\delta = \delta_m$, y se recalcula la porosidad θ_{af} y el diámetro de la partícula d_p , con las Ecs. 6.22 y 6.24. Si por el contrario, el espesor de la capa de ceniza calculado es mayor que el espesor mínimo, entonces se mantiene la suposición inicial de que se ha alcanzado la porosidad crítica $\theta_{af} = \theta_{af}$, y se mantienen los valores calculados para d_p , d_c y δ .

De nuevo, para permitir una mayor flexibilidad en el modelo, se deja la opción de incluir el efecto de la capa de ceniza a través de la Ec. 6.21, o por el contrario obviarlo, utilizando en su defecto la Ec. 6.20.

La mayor parte de las expresiones presentadas hasta el momento dependen, de una u otra manera, de las propiedades del residuo carbonoso (d_p , d_c , δ , θ , ρ_c , ρ_a , X_a). Por tratarse de un proceso dinámico, es necesario recalcularse en cada intervalo de tiempo considerado, cómo varían la densidad y el diámetro de la partícula conforme se va desarrollando el proceso de combustión. Considerando un modelo de densidad y diámetro decreciente con el grado de combustión, Hurt et al. (1998) postulan una disminución de la densidad del núcleo de carbono de la partícula según la Ec. 6.25.

$$\frac{\rho_c}{\rho_{c0}} = \left(\frac{m_c}{m_{c0}} \right)^{0.2} \quad (\text{Ec. 6.25})$$

$$\rho_a = \rho_{at} \cdot (1 - \theta_{af}) \quad (\text{Ec. 6.26})$$

A partir de la densidad del núcleo de carbono ρ_c (correspondiente al diámetro d_c) y de la densidad de la capa de ceniza ρ_a (calculada en función de la densidad propia de la ceniza $\rho_{at} = 2.65 \text{ g/cm}^3$ y la porosidad existente en la capa θ_{af} , según la Ec. 6.26), es posible calcular la densidad global de la partícula (Ec. 6.27).

$$\frac{1}{\rho} = \frac{(1 - X_a)}{\rho_c} + \frac{X_a}{\rho_a} \quad (\text{Ec. 6.27})$$

Finalmente, por consideraciones geométricas, se obtiene el diámetro de la partícula en cada instante (Ec. 6.28).

$$\frac{d_p}{d_{p0}} = \left(\frac{m_p}{m_{p0}} \cdot \frac{\rho_0}{\rho} \right)^{1/3} \quad (\text{Ec. 6.28})$$

Adicionalmente, durante la primera iteración temporal de cada partícula, se ha incluido una función *Swell*, que reproduce el hinchamiento (aumenta el diámetro y disminuye por tanto la densidad) que habitualmente sufren las partículas al inicio de la oxidación. Este factor de hinchamiento es un dato del modelo y debe determinarse experimentalmente para cada tipo de carbón.

Volviendo a la ecuación inicial Ec. 6.2, todavía queda por definir el factor maceral f_{mac} , a través del cual se introduce la influencia de la composición petrográfica del carbón sobre la reactividad. Según Hampartsoumian et al. (1989), la introducción de este término resulta especialmente importante con carbones provenientes del hemisferio Sur, ya que éstos generalmente tienen un contenido en inertinita bastante mayor que los del hemisferio Norte, y la inertinita necesita mayores tiempos de combustión que la vitrinita (Unsworth et al., 1991). Este término se ha incluido a partir del trabajo de Hampartsoumian et al. (1989), donde f_{mac} se describe en función del contenido de vitrinita, pseudovitrinita, inertinita y fusinita del carbón original según la Ec. 6.29.

$$f_{mac} = [1.4 \cdot (Vit_M + 0.83 \cdot Vit_{PS})] - [0.6 \cdot (In_R + 1.6 \cdot In_{LR})] \quad (\text{Ec. 6.29})$$

Como habitualmente en las centrales térmicas no se suelen llevar a cabo este tipo de análisis petrográficos, puede resultar útil utilizar una forma abreviada de la Ec. 6.29 (Backreedy et al., 2006), donde el factor f_{mac} aparezca exclusivamente en función del contenido en vitrinita e inertinita (Ec. 6.30), los cuales pueden encontrarse, para un gran número de carbones, catalogados en bases de datos.

$$f_{mac} = 1.68 \cdot Vit - 0.6 \cdot In \quad (\text{Ec. 6.30})$$

Un detalle que todavía no se ha comentado, y que como se vio a lo largo del Capítulo 2 sigue ocupando la mayor parte de los esfuerzos en el desarrollo de modelos de combustión, se refiere a la determinación del orden de reacción. En este trabajo, y dado que la base del modelo es el CBK8 desarrollado por Sun y Hurt (2000), se ha optado por utilizar un orden de reacción $n = 0.5$.

Una vez definidas las características principales del modelo, se pasa a explicar el método de resolución empleado. La Ec. 6.2 se define en función de la presión parcial de oxidante en la superficie de la partícula P_s y de la temperatura de la partícula T_p (suponiendo una temperatura constante en toda la partícula). Sin embargo, los perfiles de presión parcial de oxígeno y de temperatura que se obtienen a partir del código CFD, corresponden a los valores en cada una de las celdas por las que pasa la partícula (T_g, P_g), pero no en la superficie de la partícula (T_p, P_s). Para resolver esta situación se recurre a un método iterativo, esquematizado en la Figura 6.3. A partir de las Ecs. 6.2 y 6.18, y de una presión parcial de oxígeno inicial, el programa aplica el método de Newton-Raphson en un bucle interno para determinar la presión parcial de oxígeno en la partícula, comparando las velocidades de reacción q_c en un proceso iterativo hasta que el error se aproxima a cero ($\text{Error } P_s < 0.001 \text{ atm}$). De manera análoga, a partir de la Ec. 6.2 y un balance de energía en la partícula (Ec. 6.31), y suponiendo una temperatura inicial de la partícula, el programa aplica el método de Newton-Raphson en un bucle externo, que engloba al anterior, para calcular la temperatura de la partícula, comparando las velocidades de reacción q_c en un proceso iterativo hasta que el error se aproxima a cero ($\text{Error } T_p < 0.1 \text{ K}$).

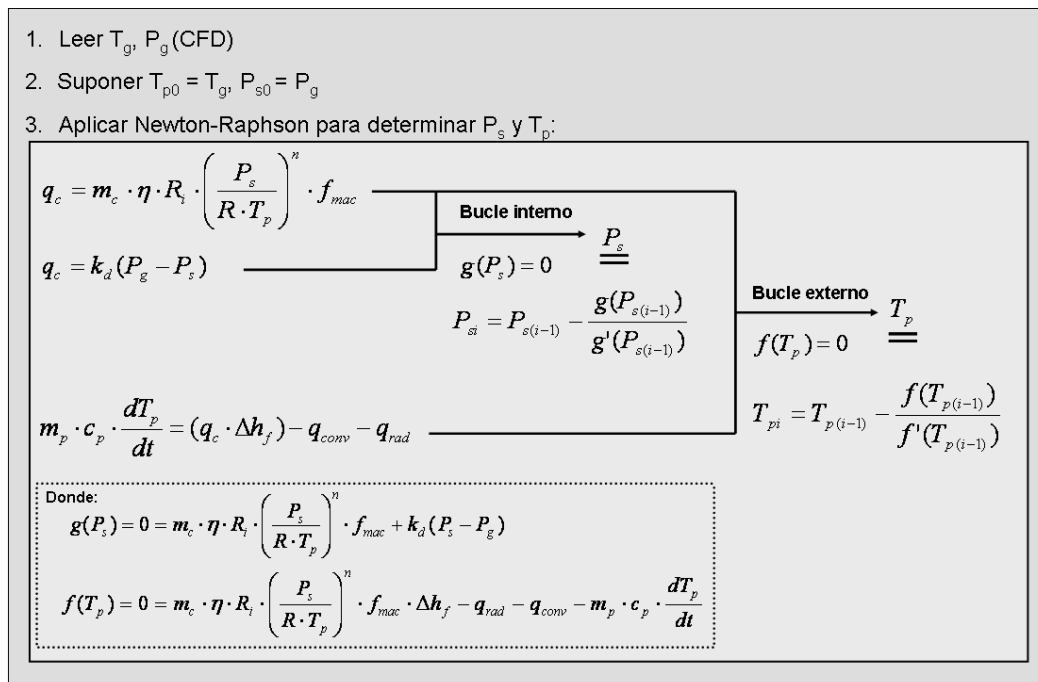


Fig. 6.3 Esquema método numérico de resolución de T_p y P_s

En general, la convergencia se alcanza rápidamente utilizando como valores iniciales de T_p y P_s los correspondientes a la fase gas (T_g y P_g), y evaluando las propiedades en mitad del intervalo temporal ($t + \delta t/2$). Sin embargo, durante los primeros milisegundos de la combustión, en la zona cercana a los quemadores, existe un gradiente muy fuerte de temperatura y de presión parcial de oxígeno. Por este motivo, estos primeros instantes de la combustión resultan críticos en la convergencia del método. Para facilitar la convergencia se han llevado a cabo dos medidas. La primera, proviene del propio código CFD, donde se ha llevado a cabo una discretización muy fina de la malla en la zona cercana a los quemadores. De esta manera, se obtiene información de las celdas por las que pasa la partícula en intervalos de tiempo inferiores a 10 ms, para evitar saltos muy grandes de temperatura que dificulten la convergencia. Si aún así, el salto de temperatura entre dos celdas contiguas fuera superior a 100 K, la rutina de combustión subdivide el intervalo en intervalos todavía más pequeños, estableciendo una linealización de las variables. La Figura 6.4 muestra la diferencia al evaluar q_c en un intervalo en el que existe un elevado gradiente de temperatura (400 – 2000 K). Considerando un único intervalo, dado que la velocidad de reacción se calcula con los valores de las variables en el punto medio del intervalo, q_c viene dado por la línea de trazos en el área cuadrada de la Figura 6.4. Por el contrario, si se subdivide éste en intervalos más pequeños, la velocidad de reacción calculada q_c viene dada por la línea de puntos en el área lisa, obteniéndose así una descripción más aproximada al proceso real.

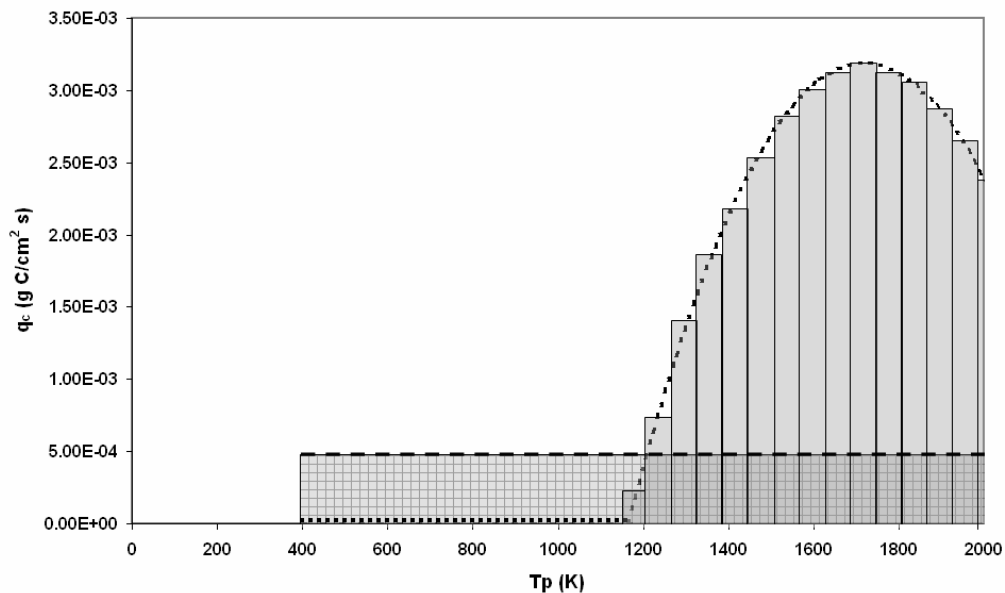


Fig. 6.4 Comparación al evaluar la velocidad de reacción q_c en un intervalo en que el gradiente de temperatura es muy alto considerando un único intervalo (línea de trazos en el área de cuadros) y subdividiendo éste en intervalos más pequeños (línea de puntos en el área lisa)

En la resolución iterativa de la temperatura y la presión parcial de oxígeno en la superficie de la partícula, se ha realizado un balance de energía en la partícula, definido según la Ec. 6.31.

$$m_p \cdot c_p \cdot \frac{dT_p}{dt} = (q_c \cdot \Delta h_f) - q_{conv} - q_{rad} \quad (\text{Ec. 6.31})$$

Según este balance, la variación de temperatura en la partícula se debe a la contribución de tres fuentes: el calor de reacción, el calor transferido por convección y el calor transferido por radiación. El desarrollo de cada uno de estos términos se presenta a continuación.

En primer lugar, al considerar intervalos de tiempo Δt suficientemente pequeños, se puede aproximar linealmente la variación temporal de la temperatura en el intervalo (Ec. 6.32).

$$\frac{dT_p}{dt} \approx \frac{T_p - T_{pant}}{\Delta t} \quad (\text{Ec. 6.32})$$

El término de convección se calcula a través de un coeficiente global de transferencia U definido en función de la dimensiones de la partícula, de la capa de ceniza y de dos coeficientes de transferencia (Ecs. 6.33 – 6.37) (Sun y Hurt, 2000).

$$q_{conv} = U \cdot (T_p - T_g) \quad (\text{Ec. 6.33})$$

$$U = \frac{\left(\frac{d_p}{d_c}\right)^2}{\left(\frac{1}{h_{ext}} + \frac{1}{h_{int}}\right)} \quad (\text{Ec. 6.34})$$

$$h_{ext} = \frac{\lambda_g \cdot Nu}{d_p} \quad (\text{Ec. 6.35})$$

$$h_{int} = \frac{2 \cdot \lambda_a \cdot d_c}{\delta \cdot d_p} \quad (\text{Ec. 6.36})$$

$$\lambda_a = \theta_{af} \cdot \lambda_g + (1 - \theta_{af}) \cdot \lambda_{at} \quad (\text{Ec. 6.37})$$

El término de radiación se calcula según la Ec. 6.38, donde T_w representa la temperatura de las paredes del hogar.

$$q_{rad} = \sigma_B \cdot \varepsilon \cdot (T_p^4 - T_w^4) \quad (\text{Ec. 6.38})$$

Finalmente el término Δh_f representa el calor de reacción liberado en la oxidación del carbono a CO_2 y CO (Ec. 6.39). El calor liberado en la formación de CO_2 es tres veces y media mayor que el liberado en la formación de CO , de manera que la temperatura de la partícula depende fuertemente de la relación de formación CO/CO_2 (Longwell et al., 1993).

$$\Delta h_f = \Delta h_{\text{CO}_2} \cdot f_{\text{CO}_2} + \Delta h_{\text{CO}} \cdot (1 - f_{\text{CO}_2}) \quad (\text{Ec. 6.39})$$

Donde, f_{CO_2} representa la fracción de carbono que se oxida dando como producto CO_2 , y que se calcula en función de la temperatura de la partícula según las Ecs. 6.40 y 6.41.

$$f_{\text{CO}_2} = \frac{1}{1 + \text{CO}/\text{CO}_2} \quad (\text{Ec. 6.40})$$

$$\text{CO}/\text{CO}_2 = A_c \cdot \exp(-E_c / R \cdot T_p) \quad (\text{Ec. 6.41})$$

Para finalizar este apartado y cómo resumen del mismo, en la Figura 6.5 se muestra el esquema de resolución completo del submodelo de oxidación del residuo carbonoso, donde se muestran los pasos que realiza el programa para determinar los inquemados sólidos o la eficiencia del proceso de combustión.

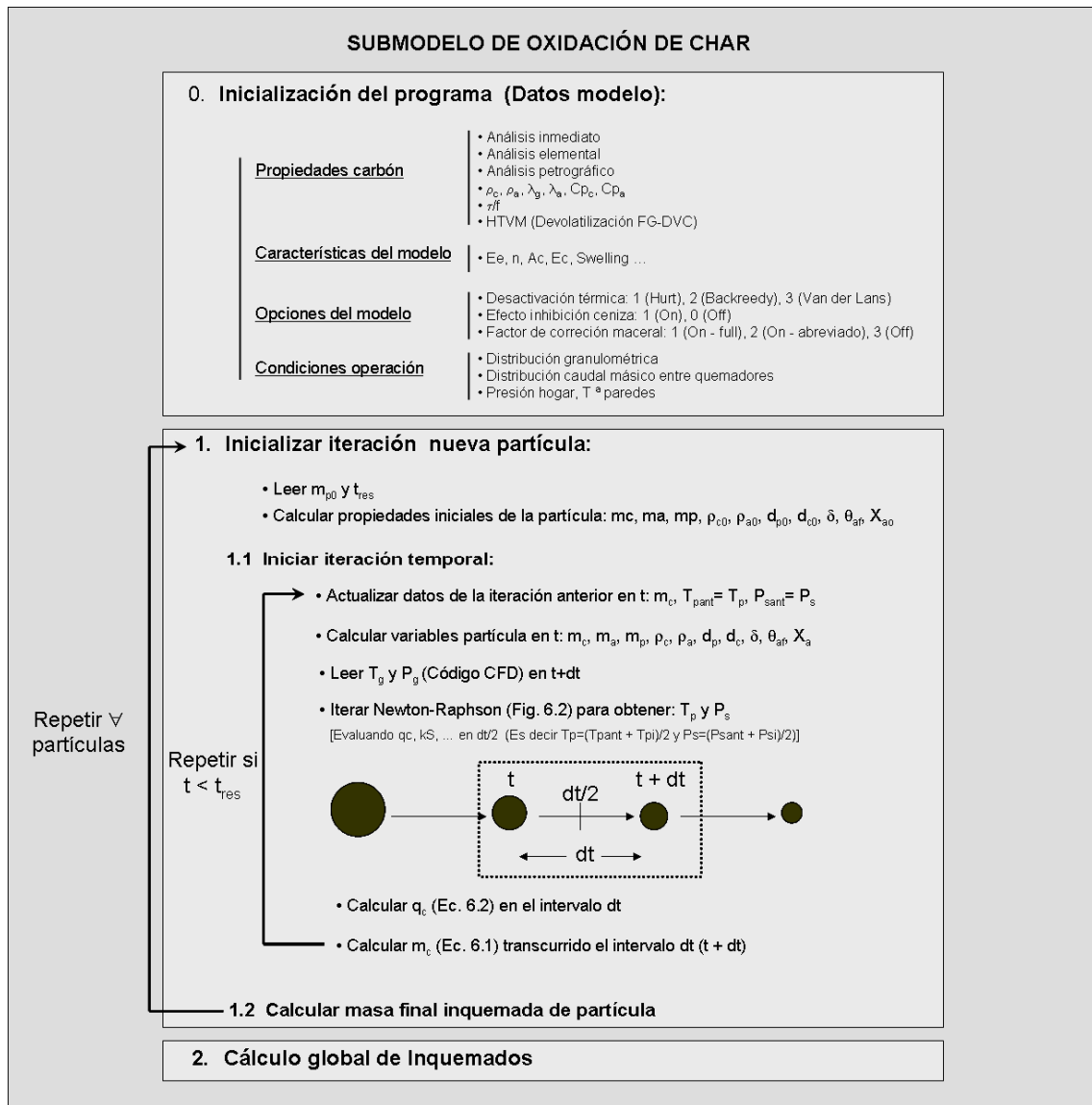


Fig. 6.5 Esquema de resolución del submodelo de oxidación del residuo carbonoso

6.3 Validación del modelo avanzado de combustión

Para validar el modelo de combustión, se ha llevado a cabo un estudio comparativo del grado de combustión alcanzado en la central térmica Lamarmora ASM Brescia (ver descripción de la planta en el Capítulo 4) bajo nueve escenarios distintos en condiciones de plena carga. La Tabla 6.3, resume las condiciones de operación de los casos considerados. Las diferencias entre los nueve escenarios corresponden a la operación habitual central, donde se producen ligeras variaciones en las condiciones, y desequilibrios en el caudal másico suministrado por ambos molinos. Durante las pruebas realizadas entre enero y marzo de 2005, se alimentaron independientemente en la caldera tres carbones de distinta procedencia. Dos de ellos, procedentes de América Central ('Guasare' de Venezuela y 'Carboandes' de Colombia), se han venido quemando habitualmente en los últimos cinco años. El último, procedente de Rusia, se adquirió en 2005 para evaluar su adecuación a la instalación.

En la Tabla 6.2 se muestran los análisis inmediato, elemental y petrográfico (cuando existe) de los tres carbones. Habitualmente no se llevan a cabo el análisis petrográfico del carbón en los laboratorios de las centrales. En estos casos se puede recurrir a bases de datos (Ej. Penn State Coal Data Bank), donde aparecen catalogados carbones procedentes de todo el mundo. En este trabajo, tan sólo se dispone del análisis de Guasare, obtenido del artículo de Barranco et al. (2003).

Análisis inmediato (en recepción)	Guasare	Carboandes	Russian
Humedad (%)	6.91	9.6	9.56
Ceniza (%)	5.75	6.44	7.14
Volátiles (%)	35	34.17	36.09
Carbono fijo (%)	52.34	49.79	47.21
Análisis elemental (en recepción)			
Carbono (%)	72.75	69.21	65.62
Hidrógeno (%)	4.93	4.38	4.66
Oxígeno (%)	7.75	8.38	10.74
Nitrógeno (%)	1.27	1.36	1.9
Azúfre (%)	0.64	0.64	0.38
Análisis petrográfico			
Inertinita (%)	0.24	N/A	N/A
Vitrinita (%)	0.76	N/A	N/A
Poder calorífico			
PCS (kcal/kg)	7220	6715	6725

Tabla 6.2 Análisis inmediato, elemental y petrográfico de los tres carbones de estudio (carbono fijo calculado por diferencia)

Escenarios	Caso 1	Caso 2	Caso 3	Caso 4	Caso 5	Caso 6	Caso 7	Caso 8	Caso 9
Carbón	Guasare	Guasare	Guasare	Carboandes	Carboandes	Carboandes	Russian	Russian	Russian
Carga Molino 1 (t/h)	12.4	12.53	10.43	13.28	13.06	12.93	13.4	13.44	13.41
Carga Molino 2 (t/h)	12.44	12.6	10.46	13.3	13.01	13.04	13.27	13.42	13.48
Caudal aire total (kNm³/h)	208.03	218.45	181.41	218.29	215.11	209.39	219.11	218.68	216.73
Caudal aire prim. Molino 1 (kNm³/h)	25.28	25.39	23.60	26.03	25.85	25.73	26.14	26.17	26.14
Caudal aire prim. Molino 2 (kNm³/h)	25.32	25.45	23.63	26.05	25.80	25.83	26.02	26.15	26.21
Tª aire primario (°C)	80	80	80	80	80	80	80	80	80
Caudal aire secundario (kNm³/h)	157.43	167.61	134.19	166.21	163.46	157.83	166.95	166.36	164.38
Tª aire secundario (°C)	249.9	257	254.39	256.48	254.99	257.29	254.21	254.9	254.18
Tamaño medio de partícula (µm) *	55	55	55	55	55	55	55	55	55
% O2 (salida caldera)	3.18	3.91	3.52	3.81	3.48	3.45	3.31	3.06	2.97

Tabla 6.3 Escenarios para la validación del modelo de combustión

* Distribución Rosin Rammler ($d_{pm} = 55 \mu\text{m}$, $n_{rr} = 1.02$)

Se realizaron nueve simulaciones CFD correspondientes a cada uno de los escenarios, obteniendo soluciones en forma de perfiles de temperatura y presión parcial de oxígeno a lo largo de la trayectoria de todas las partículas simuladas. La Figura 6.6 muestra un ejemplo de la variación que existe en los perfiles de oxígeno y temperatura entre partículas, debido a la complejidad fluidodinámica del problema. Este ejemplo, a su vez, da una idea de por qué es tan importante llevar a cabo una descripción detallada del campo fluido. Además, muestra cómo este tipo de tratamiento (CFD + modelo avanzado de combustión), proporciona al modelo de una sensibilidad adicional para detectar pequeños cambios en las condiciones de operación y desequilibrios en el funcionamiento de los molinos, que afectan notablemente en la predicción de la combustión alcanzada. Esta característica representa una ventaja frente a otros sistemas predictivos basados en modelos zonales, que al considerar un número reducido de zonas y de trayectorias de partículas, no resuelven situaciones como las descritas con anterioridad.

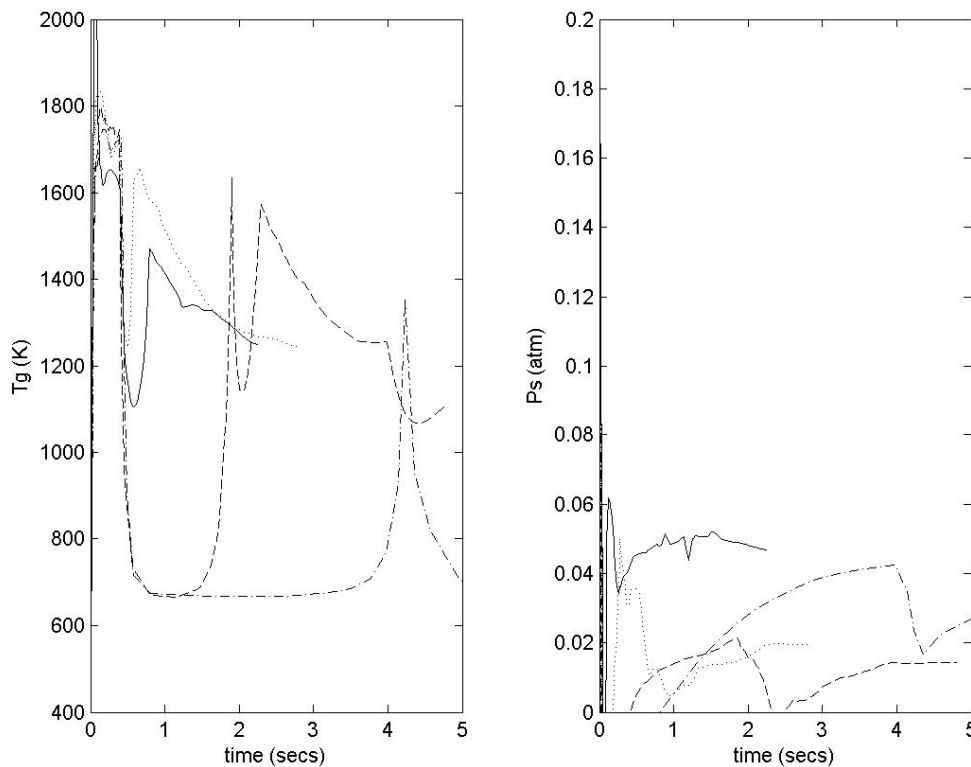


Fig. 6.6 Perfiles CFD de temperatura y presión parcial de oxígeno para un número de partículas representativas del mismo tamaño ($103 \mu\text{m}$) alimentadas en distintas posiciones del mismo quemador (Quemador 1) en las condiciones de operación del Caso 1

Una vez realizado el proceso de verificación de la resolución numérica de las simulaciones, según el método descrito en los Capítulos 3 y 4, se ha procedido a la validación de las simulaciones comparando las predicciones del contenido en oxígeno en los gases de salida de la caldera con las medidas realizadas en la planta. La Tabla 6.4, junto con las predicciones de combustión que se discuten a continuación, permite aceptar la validez de las simulaciones para los escenarios propuestos.

Escenarios	Caso 1	Caso 2	Caso 3	Caso 4	Caso 5	Caso 6	Caso 7	Caso 8	Caso 9
% O ₂ (medido en planta)	2.63	3.57	3.1	3.63	3.21	3.37	3.31	3.02	2.89
% O ₂ (predicción CFD)	3.18	3.91	3.52	3.81	3.48	3.45	3.31	3.06	2.97

Tabla 6.4 Valor medido en planta y determinado por el código CFD del contenido en oxígeno en los gases a la salida del hogar para los nueve escenarios de estudio

Una vez realizadas y validadas las simulaciones CFD, el siguiente paso consiste en aplicar el modelo de combustión, dividido en las subrutinas de devolatilización y oxidación del residuo carbonoso.

Para calcular el proceso de devolatilización aplicando el modelo FG-DVC, es necesario especificar las propiedades físicas y químicas del carbón a estudiar y las condiciones en las que tiene lugar el proceso. Para definir las propiedades morfológicas y cinéticas del carbón, el programa utiliza una base de datos interna para interpolar estas propiedades a partir del análisis elemental del carbón. En cuanto a las condiciones en las que tiene lugar el proceso, a partir de las simulaciones CFD, se encuentran temperaturas típicas en la región próxima a los quemadores cercanas a 1750 K y velocidades de calentamiento del orden de 10^5 K/s.

Las Tablas 6.5 y 6.6 muestran los resultados de las predicciones de cantidad y composición de char, tar, gas y parafinas y oleofinas liberadas en el proceso de devolatilización.

Carbón	char (%)	tar (%)	gas (%)	P-O (%)
Guasare	49	34.8	13.4	2.8
Carboandes	45.7	38	13.4	2.9
Russian	51.9	26.4	18.1	3.7

Tabla 6.5 Predicción de la cantidad de char, tar, gas y parafinas y oleofinas (%) para los carbones de estudio con el modelo FG-DVC (10^5 K/s – 1750 K – 150 ms)

Guasare	%	c	h	o	n	s
char	49	96.5	1.34	0	1.68	0.49
tar	34.8	83.96	5.48	8.4	1.47	0.69
gas	13.4	41.74	19.12	36.81	0.71	1.62
o + p	2.8	84.53	15.47	0	0	0

Carbonandes	%	c	h	o	n	s
char	45.7	97.22	0.39	0	1.88	0.51
tar	38	83.25	5.01	9.39	1.64	0.72
gas	13.4	39.05	19.21	39.4	0.78	1.57
o + p	2.9	84.56	15.44	0	0	0

Russian	%	c	h	o	n	s
char	51.9	95.94	1.02	0	2.71	0.32
tar	26.4	80.23	5.37	11.64	2.35	0.41
gas	18.1	36.17	16.73	45.08	1.18	0.85
o + p	3.7	84.64	15.36	0	0	0

Tabla 6.6 Predicción de la composición elemental de char, tar, gas y parafinas y oleofinas (%) para los carbones de estudio con el modelo FG-DVC (10^5 K/s – 1750 K – 150 ms)

Finalmente, las Figuras 6.7 y 6.8 muestran la tasa de liberación de volátiles frente al tiempo y la temperatura para los tres carbones de estudio. Un resultado interesante, a partir de estas figuras, es el comportamiento distinto que muestra el carbón procedente de Rusia. Éste, a pesar de que en el análisis inmediato ASTM muestra un mayor contenido en volátiles que los otros dos carbones, en el estudio de devolatización presenta la menor cantidad de volátiles liberados y la menor tasa de liberación. Este comportamiento se puede explicar en términos de la competencia existente entre ruptura de puentes de la estructura y la recombinación de estos. En general, en carbones de bajo rango la recombinación de enlaces se produce incluso antes de empezar los mecanismos de ruptura, aumentando el número de coordinación de la molécula hipotética de carbón, y por tanto, disminuyendo la liberación de productos volátiles.

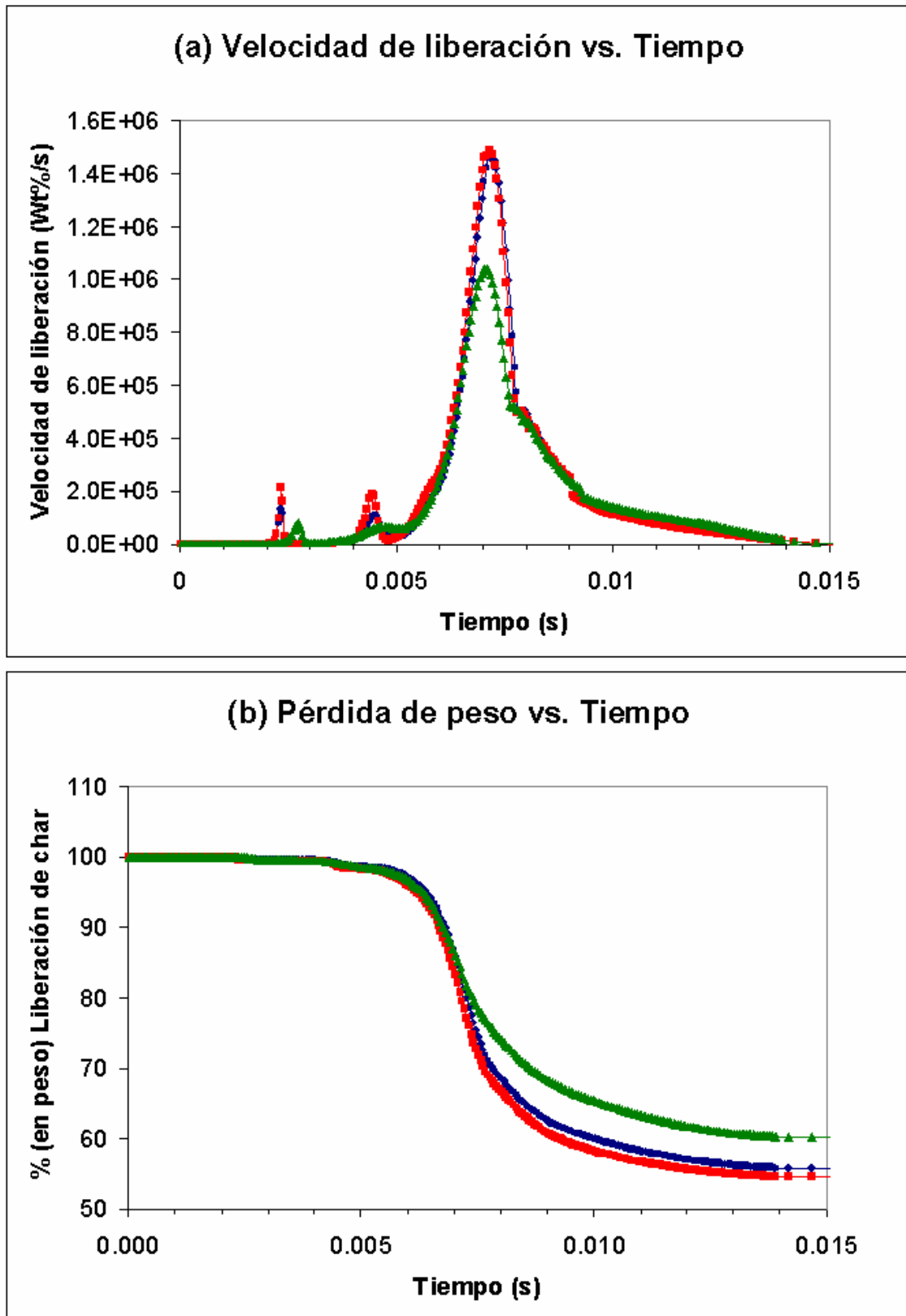


Fig. 6.7 FG-DVC (10^5 K/s – 1750 K – 150 ms). (a) Velocidad de liberación vs. Tiempo (b) Pérdida de peso vs. Tiempo, para ● Guasare, ■ Carboandes y ▲ Russian.

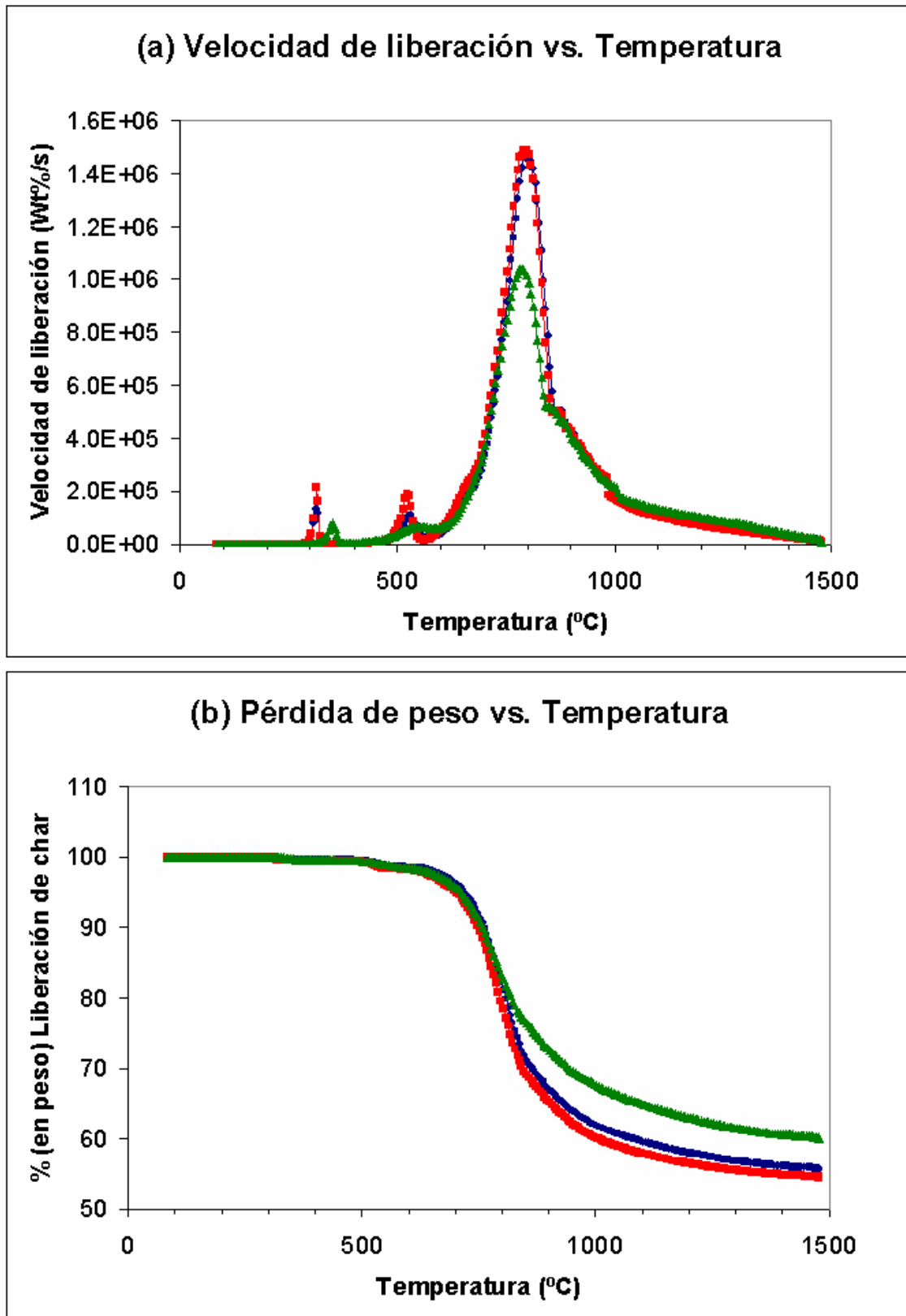


Fig. 6.8 FG-DVC (10^5 K/s – 1750 K – 150 ms). (a) Velocidad de liberación vs. Temperatura (b) Pérdida de peso vs. Temperatura, para ● Guasare, ■ Carboandes y ▲ Russian.

Finalmente, se calcula la oxidación del residuo carbonoso utilizando el modelo intrínseco presentado en la sección 6.2, y utilizando como entradas:

- Distribución granulométrica (Tabla 6.3): $d_{pm} = 55$, $n_{rr} = 1.02$ (Rosin Rammler)
- Análisis de los carbones (Tabla 6.2)
- Liberación de volátiles y char (Tabla 6.6)
- Perfiles de presión parcial de oxígeno y temperatura (simulaciones CFD)
- Parámetros del modelo (Sección 6.2):
 - o $E_e = 162 \pm 10$ kJ/mol, $n = 0.5$
 - o $E_c = 9$ kcal/mol, $A_c = 200$
 - o $\delta_m = 5$ μm , $\theta_{af} = 0.21$
 - o $Swell = 1.14$
- Submodelos (Sección 6.2):
 - o Desactivación térmica: Van der Lans et al. (1998)
 - o Inhibición de la ceniza: Activado
 - o Corrección Maceral: Abreviado (Guasare)

Los resultados obtenidos del nivel de combustión alcanzado (base char) se presentan en la Figura 6.9, comparándolos con los obtenidos experimentalmente en la planta, y con los obtenidos, como primera aproximación a la solución del problema, directamente de las simulaciones CFD. Se puede apreciar, cómo los resultados preliminares obtenidos a partir de las simulaciones CFD, claramente determinan un valor global de la combustión inferior al que muestran los resultados recogidos en la planta. Recordemos que el modelo de oxidación de char empleado en el código CFD, es el modelo de Baum y Street (1967) con las modificaciones introducidas en los Capítulos 3 y 4. Por el contrario, los resultados obtenidos con el modelo de combustión desarrollado en este capítulo, que utiliza los perfiles solución del código CFD, presenta unos resultados muy similares a los recogidos en la planta tanto a nivel cualitativo, describiendo correctamente las tendencias generales, como a nivel cuantitativo, proporcionando unos valores parecidos a los experimentales. Tan sólo se observan pequeñas discrepancias en los valores obtenidos para el carbón Carboandes, casos 5 y 6. Este resultado se puede explicar parcialmente, por el hecho de que, tratándose de un carbón proveniente del hemisferio Sur, no se dispone de su información petrográfica, y por lo tanto, no se ha aplicado la correspondiente corrección maceral. No obstante, al igual que en el resto de los casos, también se deben considerar como posibles causas, las incertidumbres asociadas a los procesos de medición en la planta, a las aproximaciones introducidas en los modelos, a la elección adecuada de los parámetros cinéticos, etc. En cualquier caso, a partir de los resultados obtenidos, se puede

concluir que el modelo, mejora notablemente los resultados obtenidos exclusivamente con el código CFD, y además proporciona unos resultados muy satisfactorios en la predicción del grado de combustión alcanzado. La otra característica, consecuencia de la propia filosofía del modelo al combinar las ventajas de los códigos CFD y de los modelos avanzados de combustión, es que permite detectar variaciones muy pequeñas de las condiciones de operación de la planta, convirtiéndose en un modelo predictivo de gran sensibilidad.

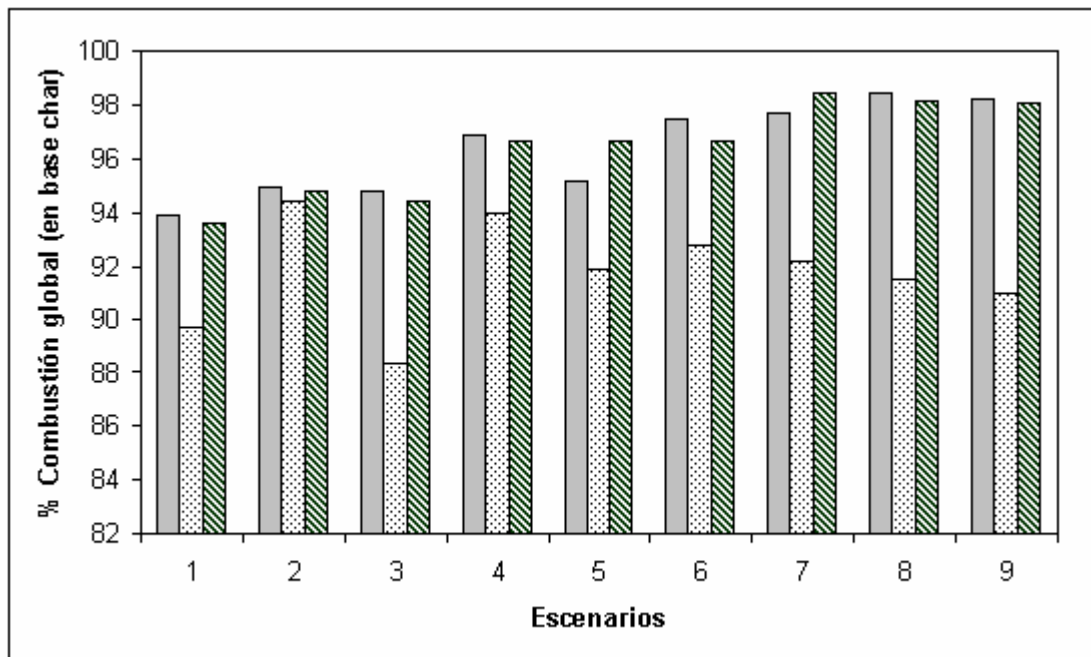


Fig. 6.9 Resultados del % de combustión alcanzado (en base de char) para:

■ ASM, ▨ Predicción CFD, ▩ Predicción del modelo avanzado

6.4 Conclusiones

A lo largo del capítulo se ha desarrollado una metodología que permite combinar las ventajas de los códigos CFD (fluidodinámica detallada) y de los modelos avanzados de combustión (cinética de combustión detallada) para mejorar las predicciones de la eficiencia de la combustión en centrales térmicas. Esta metodología consiste en utilizar las soluciones del código CFD, que describen la historia de cada una de las partículas simuladas en forma de perfiles de oxígeno y temperatura, para a continuación, introducir estos perfiles junto con las propiedades del combustible, como entradas de un modelo de combustión avanzado.

Como la descripción del código CFD, y la modelización de la central de estudio se llevaron a cabo en los Capítulos 3 y 4; este capítulo se centra en la descripción del modelo de combustión

y en su validación. El modelo de combustión se divide en dos subrutinas autónomas correspondientes a las etapas de devolatilización y oxidación del residuo carbonoso. Para la etapa de devolatilización, después de estudiar y comparar las características de varios modelos, se ha optado por utilizar el código FG-DVC, ya que reproduce con mayor precisión el proceso de devolatilización en las condiciones características de una caldera de combustión convencional. Para la oxidación del residuo carbonoso se ha desarrollado y programado en Fortran, un modelo intrínseco avanzado que permita mejorar la predicción de la combustión de otros modelos convencionales. Para ello, este modelo incorpora subrutinas que incluyen los efectos de la variación de la estructura porosa, el efecto de la disminución de la reactividad del residuo carbonoso, el efecto de la ceniza en la difusión del oxidante y la influencia de la composición maceral en la reactividad del carbón. Finalmente, la validación del modelo completo se ha llevado a cabo para nueve escenarios de operación de la central térmica de estudio Lamarmora (ASM Brescia). Los resultados obtenidos con el modelo son muy similares a los recogidos en la planta, tanto a nivel cualitativo, describiendo correctamente las tendencias generales, como a nivel cuantitativo, presentando unos valores parecidos a los experimentales. Con todo ello, se puede concluir que la combinación de los códigos CFD y de los modelos avanzados de combustión, ha permitido desarrollar un sistema predictivo de combustión de gran sensibilidad y precisión.

Nomenclatura

A_c	factor preexponencial relación de formación CO/CO ₂
A_d	factor preexponencial proceso de desactivación térmica (s ⁻¹)
A_i	factor preexponencial de la cinética de reacción (g C/cm ² s atm ⁿ)
d_c	diámetro del núcleo de la partícula de char (cm)
C_p	calor específico del residuo carbonoso (J/g K)
C_{pa}	calor específico ceniza (J/g K)
C_{pc}	calor específico carbono (J/g K)
D	coeficiente de difusión (m ² /s)
D_{eff}	coeficiente de difusión efectivo (cm ² /s)
D_{O_2}	coeficiente de difusión molecular del O ₂ en N ₂ (cm ² /s)
d_p	diámetro de la partícula de char (cm)
d_{p0}	diámetro inicial de la partícula de char (cm)
d_{pm}	diámetro medio distribución Rossin Ramler (μm)
E_e	energía de activación (kJ/mol)
E_c	energía de activación relación de formación CO/CO ₂ (kcal/mol)
E_d	energía de activación proceso de desactivación térmica (kJ/mol)
E_{dm}	energía de activación media proceso de desactivación térmica (kJ/mol)
f_{ann}	factor de desactivación térmica
$f_E(E_d)$	función de distribución estadística de energías de activación proceso desactivación térmica
f_{mac}	factor maceral de corrección
f_{CO_2}	fracción de carbono que se oxida a CO ₂
h_{ext}	coeficiente de convección (W/cm ² K)
h_{int}	coeficiente de convección (W/cm ² K)
h_c	coeficiente de convección (W/m ² K)
HTVM	% en peso de volátiles liberados a alta temperatura
In	inertinita
In _{LR}	fusinita
In _R	semi-fusinita
k_d	constante de cinética de difusión (g C/cm ² s atm)
k_m	coeficiente de transferencia de masa (m/s)
k_S	reactividad intrínseca específica (1/s atm ⁿ)
k_0S_0	reactividad intrínseca específica inicial (1/s atm ⁿ)
L_c	longitud característica (m)
m_c	masa de carbono en la partícula de char (g C)

m_{c0}	masa inicial de carbono en la partícula de char (g C)
m_p	masa de la partícula de char (g)
m_{p0}	masa inicial de la partícula de char (g)
n	orden de reacción aparente
n_{rr}	factor de dispersión distribución Rosin Rammler
Nu	número adimensional de Nusselt ($Nu = h_c L_c / \lambda$)
P_{boiler}	presión del hogar (Pa)
P_g	presión parcial del oxidante en la fase gas (atm)
P_s	presión parcial de oxidante en la superficie de la partícula (atm)
q_c	velocidad de combustión (g C/cm ² s)
q_{conv}	calor transferido por convección (W/cm ²)
q_{rad}	calor transferido por radiación (W/cm ²)
R	constante universal de gas ideal (8.3145 J/mol K)
R_i	coeficiente de reacción intrínseco (g C/cm ² s atm ⁿ)
Sh	número adimensional de Sherwood ($Sh = k_m L_c / D$)
$Swell$	factor de hinchamiento
t	tiempo (s)
t_{res}	tiempo de residencia (s)
T_g	temperatura en la fase gas (K)
T_m	temperatura media (K)
T_p	temperatura partícula (K)
T_{pant}	temperatura partícula instante anterior (K)
T_w	temperatura paredes hogar (K)
U	coeficiente global de transferencia de calor (W/cm ² K)
Vit	vitritina y pseudo-vitritina
Vit_M	vitritina
Vit_{ps}	pseudo-vitritina
X_a	fracción másica de ceniza
X_{a0}	fracción másica inicial de ceniza
%C	% en peso de carbono en el análisis elemental en base seca y sin cenizas
Δh_f	calor de reacción de oxidación del carbono (J/g)
Δh_{CO_2}	calor de reacción de oxidación del carbono a CO ₂ (J/g)
Δh_{CO}	calor de reacción de oxidación del carbono a CO (J/g)
α_D	factor de desactivación
δ	espesor de la capa de ceniza (cm)

δ_m	espesor mínimo de la capa de ceniza (cm)
ε	emisividad residuo carbonoso
φ	coeficiente estequiométrico
ϕ	modulo de Thiele
λ	conductividad térmica (W/m K)
λ_{at}	conductividad térmica de ceniza (W/cm K)
λ_g	conductividad térmica gas (W/cm K)
η	factor de eficacia
θ_{af}	porosidad de la capa de ceniza
θ_{taf}	porosidad crítica de la capa de ceniza
θ	porosidad de la partícula
ρ	densidad de la partícula de char (g/cm ³)
ρ_{at}	densidad de la ceniza (g/cm ³)
ρ_a	densidad de la ceniza en la partícula (g/cm ³)
ρ_c	densidad del carbono (g/cm ³)
ρ_{c0}	densidad inicial del carbono (g/cm ³)
ρ_0	densidad inicial de la partícula de char (g/cm ³)
τ	tortuosidad
$\sigma_{In Ed}$	desviación típica proceso de desactivación térmica (kJ/mol)
σ_B	constante de Stephan Boltzman (5.67 E-12 W/cm ² K ⁴)

Acrónimos

CBK	carbon burnout kinetics
CFD	computational fluid dynamics
DAEM	distributed activation energy models
DTF	drop tube furnace
HTVM	high temperature volatile matter
HWM	heated wire mesh
FFB	flat flame burner
FG-DVC	functional group depolymerization vaporization cross-linking
LOI	lost of ignition
PCS	poder calorífico superior
SFOR	single first order reaction

TGA thermo-gravimetric analyzer
2CSM two-competing step model

7 SISTEMA DE PREDICCIÓN DE INQUEMADOS

La construcción del sistema de predicción de inquemados (SPI) a partir de los elementos presentados en los capítulos precedentes, supone la culminación del objetivo central de esta tesis; es decir, desarrollar un sistema predictivo de la combustión, que proporcione en tiempo real, una medida del contenido de carbono inquemado en cenizas para unas condiciones de combustión determinadas.

La combinación de métodos de predicción, que habitualmente se utilizan de una manera aislada, permite aunar, en un único sistema, las virtudes de cada uno: la fluidodinámica y transferencia de calor de los códigos CFD, la cinética química de los modelos avanzados de combustión, y la velocidad de cálculo y capacidad de interpolación de las redes neuronales.

A lo largo del capítulo se describe el acoplamiento entre el modelo de condiciones locales de combustión (Capítulo 5) y el modelo de combustión (Capítulo 6) para componer el sistema de predicción de inquemados, y se lleva a cabo la validación del sistema utilizando datos de planta de la central Lamarmora obtenidos durante un período de tres meses, bajo distintas condiciones de operación. A partir de los resultados se hace una valoración del modelo, apuntando las conclusiones más significativas, y estableciendo comparaciones con otros modelos de predicción de inquemados.

7.1 Descripción del sistema de predicción de inquemados

El sistema de predicción de inquemados aparece en este último capítulo como suma del trabajo expuesto en los capítulos anteriores. Sin embargo, antes de realizar la elección y el desarrollo de los distintos submodelos que componen el sistema final, se establecieron las condiciones de diseño del mismo, atendiendo a los requerimientos de personal especializado de varias centrales térmicas. Esta reflexión pretende desechar una interpretación del sistema final de predicción de inquemados como un simple proceso de adición de modelos. En términos generales, la cronología del diseño se puede resumir en cuatro etapas:

1. Definición del problema de los inquemados
2. Establecimiento de las condiciones de diseño requeridas en el sistema predictivo final
3. Elección de los submodelos
4. Construcción del sistema predictivo a partir de los submodelos

Además, la trayectoria del proceso constructivo no ha seguido una evolución estrictamente lineal de estas fases, sino que entre las etapas 3 y 4 se ha establecido una interacción permanente con continuas modificaciones en los submodelos hasta alcanzar el diseño definitivo. Ejemplos significativos de ello son la modificación de la geometría de los quemadores y la adecuación de la malla en las simulaciones CFD, la adecuación del paso temporal de cálculo para asegurar la convergencia en el modelo de combustión, o la continua modificación de la estructura del sistema de redes neuronales (red única, red por filas, red por carga, etc.) y de sus parámetros de entrada (inclusión de zonas diferenciadas para establecer la posición inicial de la partícula) para capturar suficientemente la fluidodinámica del problema.

Para enfocar la elección de los submodelos que conforman el sistema de predicción conviene recordar las dos características de diseño en base a las cuales se ha construido el sistema: precisión y rapidez en la respuesta. Es decir, obtener un sistema predictivo que permita establecer una estrategia adecuada de operación de la planta o la actuación inmediata de un operario ante una situación anormal de funcionamiento. En cuanto a la precisión se refiere, en todo problema que involucre combustión de flujos turbulentos, aparecen dos aspectos, fluidodinámica y cinética de reacción, que condicionan la solución final del modelo. De esta manera, cuanto mayor sea la exactitud en la caracterización de estos aspectos, mejor será la predicción del modelo. Tradicionalmente, los códigos CFD proporcionan una descripción muy precisa de los fenómenos de transporte (Capítulo 4), pero se caracterizan por la utilización de modelos poco detallados de la combustión. Para compensar esta carencia, se ha desarrollado un

modelo de combustión avanzado (Capítulo 6) que se aplica, como post-proceso a los resultados obtenidos con el código CFD, en forma de perfiles de temperatura y presión parcial de oxígeno de las partículas simuladas en el hogar. En cuanto a la rapidez en la respuesta, un sistema que incluya un código CFD en su estructura se ve seriamente limitado en esta parcela. Para suplir esta limitación sin prescindir de la precisión en el campo fluido que proporcionan las herramientas CFD, se ha desarrollado un sistema de redes neuronales que entrenado a partir de las simulaciones CFD, reproduce los perfiles de temperatura y presión parcial de oxígeno que obteníamos inicialmente con el código CFD (Capítulo 5).

El sistema final consiste en la unión del sistema de redes neuronales llamado modelo de condiciones locales de combustión y el modelo de combustión avanzado. La Figura 7.1 muestra el esquema final del sistema.

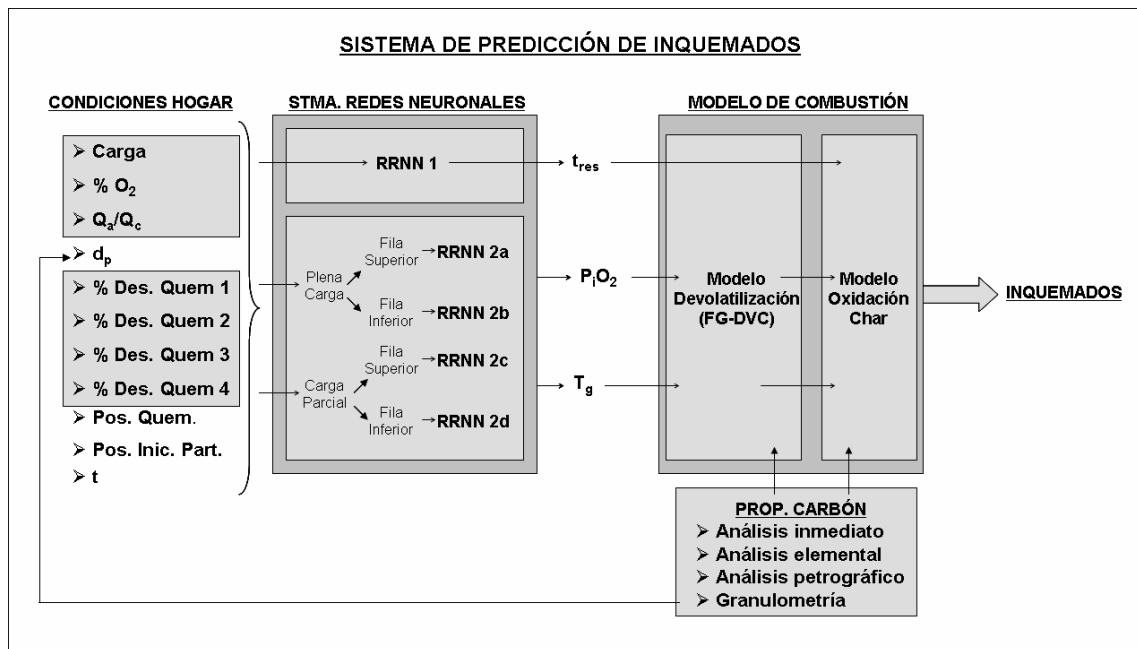


Fig. 7.1 Diagrama de bloques del sistema de predicción de inquemados

La secuencia de acciones del sistema es sencilla: El sistema a partir de unas condiciones de operación del hogar, inicia el modelo de condiciones locales de combustión (sistema de redes neuronales) y genera un archivo que contiene la información de los perfiles de presión parcial de oxígeno y temperatura, seguidos por las partículas en el hogar, así como su tiempo de residencia. A continuación, sobre este archivo, junto con las propiedades del carbón, se aplica el modelo de combustión para determinar el contenido de inquemados en cenizas.

El modelo de combustión está dividido en dos subrutinas correspondientes con las etapas de devolatilización y oxidación del residuo carbonoso. Con la primera, se determina la cantidad de materia volátil liberada, y por lo tanto, el residuo carbonoso resultante al que se le aplica el modelo de oxidación intrínseco.

Una de las ventajas del sistema de predicción es el reducido número de entradas (condiciones del hogar y propiedades del carbón) que posee, y la disponibilidad habitual de éstas en las centrales:

- Carga: El consumo de combustible es una consigna de operación habitual en todas las centrales térmicas.
- % Oxígeno en la salida del hogar: Es una consigna de operación habitual en todas las centrales térmicas.
- Relación aire primario-combustible: Se determina fácilmente a partir de la curva de operación y la capacidad de carga de cada molino.
- Desequilibrios en el hogar: Este factor es el único que no suele estar disponible de forma individualizada por quemadores. Sin embargo sí suele ser habitual controlar el caudal que circula por cada molino, de manera que se pueden calcular diferencias entre quemadores alimentados por distintos molinos. Además, el diseño del sistema permite adecuar esta entrada a la información disponible en la planta.
- Análisis inmediato y elemental del carbón: Se realizan de forma habitual en todas las centrales térmicas.
- Análisis petrográfico del carbón: No es común llevar a cabo este tipo de análisis en las centrales térmicas. De manera que se incluirá en el modelo sólo si se dispone de él. En caso contrario, que suele ser lo habitual, se obviará esta entrada.
- Distribución granulométrica del combustible pulverizado: Se determina de forma habitual en todas las centrales térmicas.

En esta relación de entradas se han excluido los parámetros cinéticos del modelo de combustión. Como se comentó a lo largo del Capítulo 6, estos parámetros bien se pueden determinar experimentalmente para cada carbón a partir de ensayos en DTF o bien aproximarlos a partir de correlaciones o bases de datos, de manera que el modelo describa de manera correcta el proceso de combustión. En cualquier caso, estos parámetros forman parte de un tercer grupo de entradas que se introducen directamente en el modelo de combustión (ver Capítulo 6), donde se definen también qué tipo de submodelos se van a considerar en la combustión (desactivación térmica, inhibición de la ceniza, corrección maceral).

7.2 Validación del sistema de predicción de inquemados

Para la validación del sistema de predicción de inquemados, se han utilizado datos de planta recogidos en la central térmica Lamarmora ASM Brescia (ver descripción de la planta en el Capítulo 4) durante tres meses de pruebas (Enero – Marzo 2005), en los que el grupo de estudio de 63 MWe fue alimentado independientemente con tres carbones de distinta procedencia en condiciones dentro del rango habitual de operación:

- Tabla 7.1: Guasare (plena carga)
- Tabla 7.2: Guasare (carga parcial)
- Tabla 7.3: Carboandes (plena carga)
- Tabla 7.4: Carboandes (carga parcial)
- Tabla 7.5: Russian (plena carga)
- Tabla 7.6: Russian (carga parcial)

Los carbones utilizados en el estudio son los mismos que se recogen en el Capítulo 4. Dos de ellos, procedentes de América Central ('Guasare' de Venezuela y 'Carbonandes' de Colombia), se han venido quemando habitualmente en los últimos cinco años. El último, procedente de Rusia, se adquirió en 2005 para evaluar su adecuación a la instalación. Los análisis inmediato, elemental y petrográfico (cuando existe) de los tres carbones se muestran en la Tabla 6.2 (Capítulo 6). Habitualmente, no se lleva a cabo el análisis petrográfico del carbón en los laboratorios de las centrales. En estos casos se puede recurrir a bases de datos (Ej. Penn State Coal Data Bank), donde aparecen catalogados carbones procedentes de todo el mundo. En este trabajo, tan sólo se dispone del análisis de Guasare, obtenido del artículo de Barranco et al. (2003).

Número Caso	Fecha Adquisición	CIA (550 °C)	Carga Total de Carbón a Molinos	Desviación Aire Primario Molino 1	Desviación Aire Primario Molino 2	O ₂ (salida hogar)	Caudal Total Aire	Carga de Carbón a Molino 1	Carga de Carbón a Molino 2
		%	t/h	km ³ N/h	km ³ N/h	%	km ³ N/h	t/h	t/h
1	10-feb-05	17.9	24.84	0	0	3.08	214.09	12.33	12.36
2	11-feb-05	31.2	24.83	0	0	2.63	208.03	12.4	12.44
3	12-feb-05	27	24.88	0.2	0.35	3.03	214.05	12.43	12.45
4	13-feb-05	23.8	25.03	0.4	0.2	3.19	218.47	12.5	12.55
5	14-feb-05	26.6	24.95	5	5	2.98	215.14	12.45	12.51
6	15-feb-05	33.5	23.91	0	0	2.97	214.93	11.89	11.98
7	16-feb-05	17.7	24.58	0	0	3.09	214.97	12.26	12.32
8	17-feb-05	24.4	24.68	0	0	3.01	212.21	12.31	12.4
9	18-feb-05	23.1	24.94	0	0	2.93	212.87	12.44	12.51
10	19-feb-05	25.7	24.95	0	0	2.95	213.09	12.45	12.51
11	20-feb-05	26	25.07	0	0	2.63	213.03	12.47	12.58
12	21-feb-05	18	25.52	0	0	2.66	214.07	12.74	12.81
13	22-feb-05	25.5	24.9	0.2	0.7	2.83	218.06	12.45	12.44
14	24-feb-05	22.5	25.8	0	0	3	217.28	12.84	12.92
15	26-feb-05	28.5	25.3	1	0	3.12	214.75	12.65	12.72
16	27-feb-05	21.8	25.4	0.5	0	3.25	213.89	12.63	12.72
17	28-feb-05	21.2	25.5	0.5	0	3.44	214.66	12.77	12.74
18	01-mar-05	24.6	25.17	0	0	3.31	214.76	12.58	12.64
19	02-mar-05	29.4	25.4	0	0	3.21	215.94	12.67	12.71
20	03-mar-05	27.4	25.16	0	0	3.57	218.45	12.53	12.6
21	04-mar-05	23.8	25.86	1	0	3.37	217.04	12.9	12.95
22	05-mar-05	24.7	25.22	1	0	3.56	217.24	12.57	12.63
23	06-mar-05	24.5	25.69	1	0	3.34	218.19	12.54	13
24	07-mar-05	24.6	25.52	0.2	0	3.29	215.83	12.71	12.82
25	08-mar-05	27.2	25.85	0	0	3.1	215.92	12.91	12.94
26	09-mar-05	26	25.39	0	0	3.17	212.1	12.64	12.76
27	10-mar-05	25.1	24.69	0	0	3.19	212.61	12.37	12.32
28	14-mar-05	27.9	20.91	1.5	0	3.1	181.41	10.43	10.46
PROMEDIO		25	25	0.4	0.2	3.1	213.7	12.5	12.5
INQUEMADOS EN CENIZAS RECOGIDOS EN LA TOLVA DEL PRIMER PRECIPITADOR ELECTR.									

Tabla 7.1 Datos de planta: Guasare – plena carga (Lamarmora ASM Brescia 2005)

Número Caso	Fecha Adquisición	CIA (550 °C)	Carga Total de Carbón a Molinos	Desviación Aire Primario Molino 1	Desviación Aire Primario Molino 2	O2 (salida hogar)	Caudal Total Aire	Carga de Carbón a Molino 1	Carga de Carbón a Molino 2
		%	t/h	km ³ N/h	km ³ N/h	%	km ³ N/h	t/h	t/h
29	10-feb-05	14	16.66	1	0	5.27	167	8.33	8.34
30	11-feb-05	14.7	16.58	0	0	5.36	160.88	8.26	8.31
31	12-feb-05	12.6	15.27	0.04	0.1	6.1	158.17	7.54	7.57
32	13-feb-05	12.1	15.34	0.32	0.04	6.36	162.17	7.61	7.63
33	14-feb-05	18.4	15.72	0	0	5.58	155.42	7.72	7.73
34	15-feb-05	15.1	15.15	0	0	5	150.91	7.61	7.64
35	16-feb-05	8.7	15.97	0.5	0	5.18	159.15	8.07	7.9
36	17-feb-05	19.7	15.55	0.5	0	5.17	153.57	7.86	7.87
37	18-feb-05	13.9	16.95	0.5	0	4.72	161.63	8.47	8.48
38	19-feb-05	16.4	15.33	0.3	0	5.17	147.93	7.65	7.69
39	20-feb-05	14.6	14.9	1.1	0	5.93	155.16	7.43	7.47
40	21-feb-05	11.8	16.25	1	0	5.29	160.26	8.25	8.14
41	22-feb-05	16.5	16.2	1	0	5.04	155.95	8.12	8.06
42	23-feb-05	15.5	15.9	0.5	0	4.9	152.56	7.99	8.01
43	24-feb-05	8.8	16.5	1.1	0	5.78	165.63	8.27	8.28
44	25-feb-05	9.6	16.2	1.2	0	5.52	164.46	8.07	8.09
45	26-feb-05	14.8	17	0	0	5.52	166.51	8.48	8.48
46	27-feb-05	16.4	17.4	1.1	0	5.56	169.92	8.68	8.68
47	28-feb-05	12.5	16.6	1.01	0.07	5.64	163.43	8.39	8.4
48	01-mar-05	16.9	16.47	0.9	0.4	5.6	168.33	8.88	8
49	04-mar-05	14.7	17.56	1.5	0.3	5.26	167.8	8.79	8.77
50	06-mar-05	18.4	17.15	1.6	0	4.96	164.61	9.07	8.08
51	07-mar-05	15.3	16.28	2	0.4	5.23	156.86	8.2	8.25
52	08-mar-05	17.6	17.79	1.5	0	4.69	166.59	9.08	9.02
53	09-mar-05	15.8	17.08	1	0.5	4.93	161.03	8.74	8.33
54	10-mar-05	18.2	16.33	1.7	0	4.8	152.92	8.16	8.15
55	13-mar-05	21.7	14.71	2.15	0.5	6.04	150.16	7.47	7.32
56	14-mar-05	16.4	16.3	1	0.1	4.52	150.88	8.21	8.22
57	15-mar-05	21.8	14.61	1	0	5.3	145.97	7.28	7.32
58	16-mar-05	16.9	14.52	1.23	0	5.87	150.32	7.26	7.27
59	17-mar-05	15.7	14.32	0.63	0	5.48	141.24	7.19	7.19
PROMEDIO		15.3	16.1	0.9	0.1	5.3	158.3	8.1	8

INQUEMADOS EN CENIZAS RECOGIDOS EN LA TOLVA DEL PRIMER PRECIPITADOR ELECTR.

Tabla 7.2 Datos de planta: Guasare – carga parcial (Lamarmora ASM Brescia 2005)

Número Caso	Fecha Adquisición	CIA (550 °C)	Carga Total de Carbón a Molinos	Desviación Aire Primario Molino 1	Desviación Aire Primario Molino 2	O2 (salida hogar)	Caudal Total Aire	Carga de Carbón a Molino 1	Carga de Carbón a Molino 2
		%	t/h	km ³ N/h	km ³ N/h	%	km ³ N/h	t/h	t/h
60	23-ene-05	10.5	26.41	2.01	0.7	2.93	210.51	13.18	13.23
61	24-ene-05	15.1	26.4	1.7	1.3	2.79	210.17	13.19	13.23
62	25-ene-05	15.9	26.66	2	1.3	3.25	210.59	13.3	13.35
63	25-ene-05	13.9	26.51	2	1.5	2.98	209.03	13.22	13.29
64	26-ene-05	15.7	26.33	2	2	3.63	218.29	13.28	13.3
65	27-ene-05	22.3	26.05	2.21	1.32	3.21	215.11	13.06	13.01
66	28-ene-05	18.6	26.03	1.36	0.51	3.24	215.84	12.99	13.02
67	29-ene-05	15.8	26.37	2.2	1.7	3.19	217.22	13.14	13.22
68	30-ene-05	12.4	26.59	2.2	1	3.28	216.91	13.29	13.32
69	31-ene-05	13.2	26.01	1.5	1	3.37	209.39	12.93	13.04
70	31-ene-05	15	26.57	1.7	0.7	2.98	214.59		
PROMEDIO		15.3	26.4	1.9	1.2	3.2	213.4	13.2	13.2
INQUEMADOS EN CENIZAS RECOGIDOS EN LA TOLVA DEL PRIMER PRECIPITADOR ELECTR.									

Tabla 7.3 Datos de planta: Carboandes – plena carga (Lamarmora ASM Brescia 2005)

Número Caso	Fecha Adquisición	CIA (550 °C)	Carga Total de Carbón a Molinos	Desviación Aire Primario Molino 1	Desviación Aire Primario Molino 2	O2 (salida hogar)	Caudal Total Aire	Carga de Carbón a Molino 1	Carga de Carbón a Molino 2
		%	t/h	km ³ N/h	km ³ N/h	%	km ³ N/h	t/h	t/h
71	24-ene-05	6.8	17.78	2	0.7	4.85	154.99	8.9	8.91
72	25-ene-05	11.4	17.36	2	1.5	5.02	161.76	9.29	9.3
73	26-ene-05	16.5	18.56	1	0.4	4.67	162.84	9.26	9.3
74	27-ene-05	15.6	18.14	2	0.5	4.98	159.89	9.12	9.24
75	28-ene-05	16.9	18.33	1.2	0.3	4.48	162.99	9.18	9.14
76	29-ene-05	11	17.89	1.6	0	5.19	165.04	8.97	8.97
77	30-ene-05	8.2	19	2	1.3	4.78	168.45	9.68	9.67
78	31-ene-05	7.7	18.46	1	1	5.2	164.57	9.28	9.29
PROMEDIO		11.8	18.2	1.6	0.7	4.9	162.6	9.2	9.2
INQUEMADOS EN CENIZAS RECOGIDOS EN LA TOLVA DEL PRIMER PRECIPITADOR ELECTR.									

Tabla 7.4 Datos de planta: Carboandes – carga parcial (Lamarmora ASM Brescia 2005)

Número Caso	Fecha Adquisición	CIA (550 °C)	Carga Total de Carbón a Molinos	Desviación Aire Primario Molino 1	Desviación Aire Primario Molino 2	O2 (salida hogar)	Caudal Total Aire	Carga de Carbón a Molino 1	Carga de Carbón a Molino 2
		%	t/h	km ³ N/h	km ³ N/h	%	km ³ N/h	t/h	t/h
79	24-mar-05	12.2	26.58	1	0.1	3.31	219.11	13.4	13.27
80	25-mar-05	8.3	27.06	1.5	0	3.12	221.04	13.58	13.58
81	29-mar-05	8.6	26.85	1.1	1.5	3.02	218.68	13.44	13.42
82	30-mar-05	9.7	26.88	1.5	2	2.89	216.73	13.41	13.48
83	31-mar-05	7.5	26.93	1.3	0.9	2.99	218.01	13.41	13.5
PROMEDIO		9.2	26.9	1.3	0.9	3.1	218.7	13.4	13.5
INQUEMADOS EN CENIZAS RECOGIDOS EN LA TOLVA DEL PRIMER PRECIPITADOR ELECTR.									

Tabla 7.5 Datos de planta: Russian – plena carga (Lamarmora ASM Brescia 2005)

Número Caso	Fecha Adquisición	CIA (550 °C)	Carga Total de Carbón a Molinos	Desviación Aire Primario Molino 1	Desviación Aire Primario Molino 2	O ₂ (salida hogar)	Caudal Total Aire	Carga de Carbón a Molino 1	Carga de Carbón a Molino 2
		%	t/h	km ³ N/h	km ³ N/h	%	km ³ N/h	t/h	t/h
84	24-mar-05	7.80	16.79	1.50	0.50	5.32	157.14	8.31	8.68
85	25-mar-05	4.90	17.63	1.50	0.00	4.64	157.53	8.55	9.10
86	26-mar-05	7.60	16.43	1.20	1.80	5.63	158.30	6.87	9.67
87	26-mar-05	6.80	16.74	1.50	0.00	5.48	155.48	7.57	9.14
88	28-mar-05	6.20	16.35	1.35	2.00	4.89	147.58	7.68	8.67
89	29-mar-05	4.00	17.15	1.40	2.00	4.56	153.67	8.25	9.17
90	30-mar-05	4.70	17.24	1.50	2.00	4.50	152.35	7.60	9.67
91	31-mar-05	5.30	18.31	1.50	2.50	4.48	161.21	8.13	10.15
PROMEDIO		5.9	17.1	1.4	1.4	4.9	155.4	7.9	9.3
INQUEMADOS EN CENIZAS RECOGIDOS EN LA TOLVA DEL PRIMER PRECIPITADOR ELECTR.									

Tabla 7.6 Datos de planta: Russian – carga parcial (Lamarmora ASM Brescia 2005)

En relación al sistema de molienda, la Figura 7.2 muestra la curva característica de operación de ambos molinos, que junto a la desviación del aire primario, permite calcular la relación de caudal aire-combustible en cada molino. Además, durante las pruebas se obtuvo en ambos molinos una distribución granulométrica de partículas Rosin Rammler de parámetros ($d_{pm} = 55 \mu\text{m}$, $n_{rr} = 1.02$).

Finalmente, el grupo de entradas relacionadas exclusivamente con el modelo de combustión, se ha elegido en base a la discusión llevada a cabo en el Capítulo 6:

- Parámetros del modelo (Sección 6.2):
 - o $E_e = 162 \pm 10 \text{ kJ/mol}$, $n = 0.5$
 - o $E_c = 9 \text{ kcal/mol}$, $A_c = 200$
 - o $\delta_m = 5 \mu\text{m}$, $\theta_{af} = 0.21$
 - o $Swell = 1.14$
- Submodelos (Sección 6.2):
 - o Desactivación térmica: Van der Lans et al. (1998)
 - o Inhibición de la ceniza: Activado
 - o Corrección Maceral: Abreviado (Guasare)

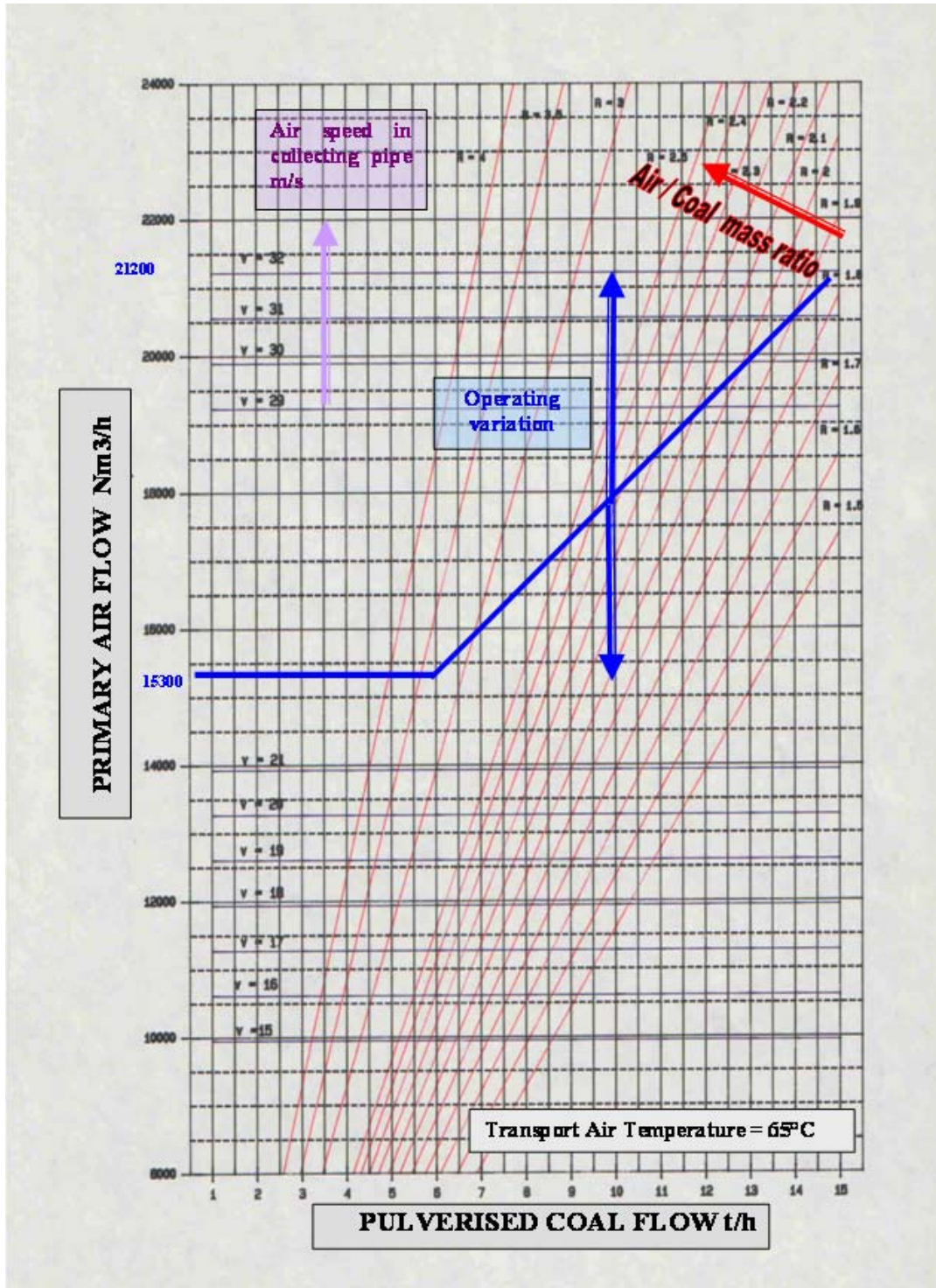


Fig. 7.2 Curva de operación de los molinos planetarios (Lamarmora ASM Brescia 2005)

Una vez definidas las entradas para cada uno de los casos recogidos en las Tablas 7.1-7.6, se ha procedido a aplicar el sistema de predicción de inquemados, obteniendo así los resultados de inquemados en cenizas. Notar que el caso 70 fue excluido del estudio al no estar registrados correctamente todos los datos de operación (ver Tabla 7.3) obtenidos durante la prueba.

El tiempo de calculo promedio, utilizando un equipo Intel Core 2 DUO 6300 (1.86 GHz, 0.86 GB de RAM), no llega a un minuto. La Tabla 7.7 recoge los valores de inquemados en cenizas para los datos de planta, y los resultados obtenidos con el sistema de predicción de inquemados para las mismas condiciones.

CASO	CIA ASM (%)	CIA SPI (%)	CASO	CIA ASM (%)	CIA SPI (%)
1	17.9	25.66	46	16.4	16.52
2	31.2	26.99	47	12.5	17.08
3	27	25.99	48	16.9	16.88
4	23.8	24.62	49	14.7	16.00
5	26.6	25.66	50	18.4	17.39
6	33.5	26.59	51	15.3	14.99
7	17.7	25.45	52	17.6	13.34
8	24.4	25.62	53	15.8	15.57
9	23.1	25.78	54	18.2	13.95
10	25.7	25.70	55	21.7	12.55
11	26	26.79	56	16.4	11.63
12	18	26.39	57	21.8	12.50
13	25.5	26.27	58	16.9	12.10
14	22.5	25.45	59	15.7	12.55
15	28.5	24.62	60	10.5	15.60
16	21.8	23.89	61	15.1	16.15
17	21.2	22.93	62	15.9	14.44
18	24.6	23.76	63	13.9	15.13
19	29.4	24.19	64	15.7	11.27
20	27.4	21.90	65	22.3	15.30
21	23.8	22.80	66	18.6	15.04
22	24.7	22.04	67	15.8	15.00
23	24.5	22.44	68	12.4	14.31
24	24.6	23.37	69	13.2	14.35
25	27.2	24.57	71	6.8	8.91
26	26	24.28	72	11.4	11.41
27	25.1	24.95	73	16.5	9.35
28	27.9	26.35	74	15.6	9.25
29	14	15.31	75	16.9	9.25
30	14.7	15.31	76	11	10.80
31	12.6	12.72	77	8.2	10.46
32	12.1	12.10	78	7.7	10.56
33	18.4	14.50	79	12.2	6.96
34	15.1	13.79	80	8.3	7.43
35	8.7	15.04	81	8.6	8.20
36	19.7	14.39	82	9.7	8.15
37	13.9	12.67	83	7.5	8.15
38	16.4	13.90	84	7.80	7.53
39	14.6	12.61	85	4.90	5.15
40	11.8	15.42	86	7.60	7.59
41	16.5	14.66	87	6.80	8.50
42	15.5	14.12	88	6.20	6.23
43	8.8	16.52	89	4.00	5.32
44	9.6	16.05	90	4.70	5.48
45	14.8	16.05	91	5.30	5.21

Tabla 7.7 Resultados de inquemados en cenizas obtenidos en la planta Lamarmora ASM Brescia y con el SPI (Sistema Predicción Inquemados)

Para realizar el análisis de los resultados de la Tabla 7.7, las Figuras 7.3 y 7.4 muestran el diagrama de dispersión de los datos recogidos en la planta frente a los obtenidos con el sistema de predicción de inquemados, en condiciones de plena carga y carga parcial respectivamente.

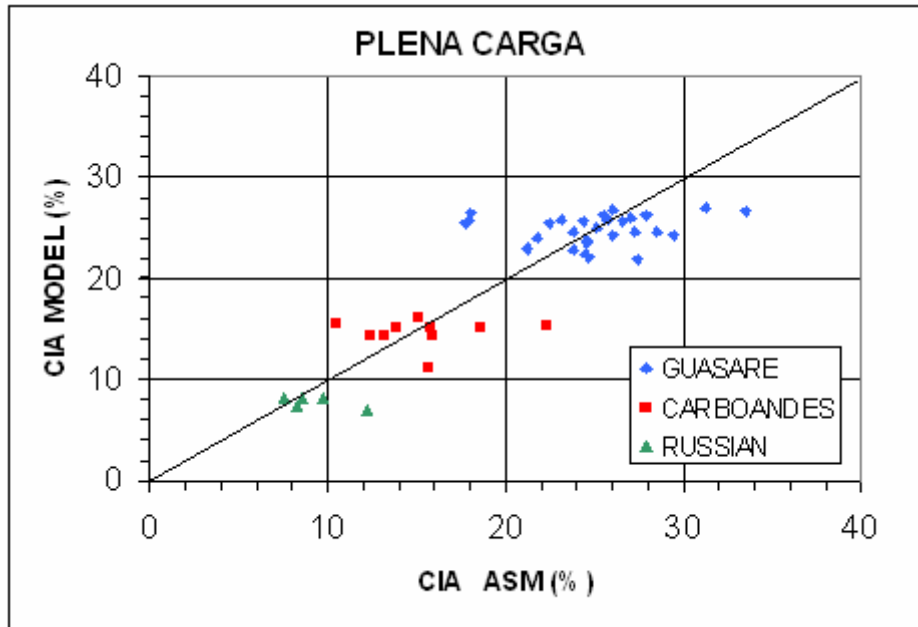


Fig. 7.3 Carbono contenido en cenizas en condiciones de plena carga para los tres carbones utilizados en el estudio: ASM vs. SPI (Sistema Predicción Inquemados)

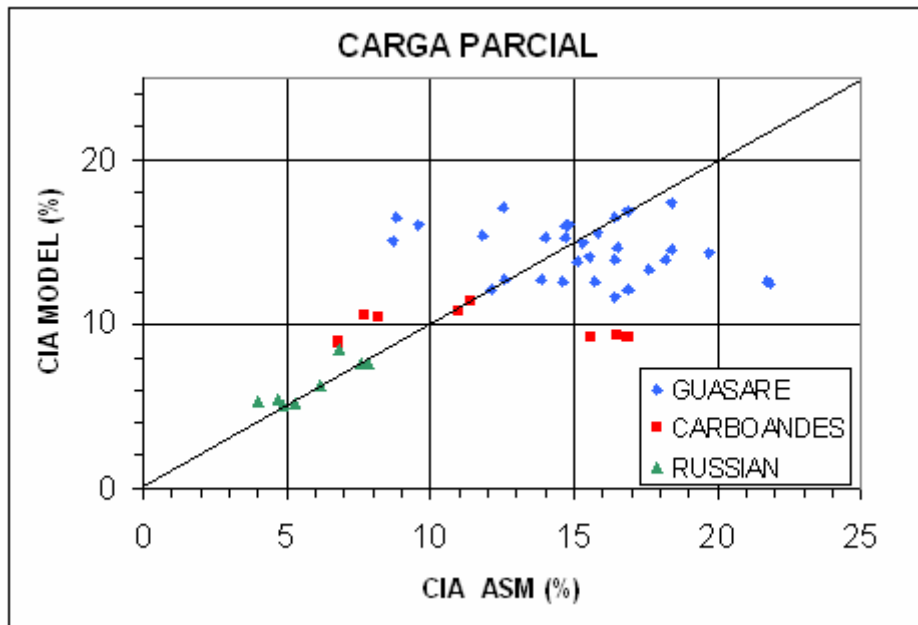


Fig. 7.4 Carbono contenido en cenizas en condiciones de carga parcial para los tres carbones utilizados en el estudio: ASM vs. SPI (Sistema Predicción Inquemados)

A la vista de las Figuras 7.3 y 7.4, la primera conclusión que se puede extraer es que la nube de puntos de los diagramas de dispersión se aproxima bastante bien a la bisectriz del primer cuadrante, indicando una correspondencia adecuada entre los datos de planta y los resultados obtenidos con el modelo. De nuevo, al igual que se hizo con el diseño del sistema de redes neuronales, es necesario analizar separadamente los resultados obtenidos en condiciones de plena carga, donde las condiciones de operación entre casos varían ligeramente, y los obtenidos en condiciones de carga parcial, donde el rango de variación de las condiciones de operación es mucho mayor. Por esta misma razón, el ajuste del modelo, en condiciones de plena carga (Figura 7.3), muestra unos resultados muy satisfactorios para los tres carbones estudiados. Analizando de forma individualizada los puntos más alejados de la bisectriz, no se encuentra una razón aparente para identificar cuales son las causas de este “error” ya que las condiciones de operación registradas son muy similares a las de otros casos en los que los inquemados se encuentran dentro del rango “normal” de variación. Así que, bien se deben a errores en la obtención o el registro del valor de los inquemados en la planta, o bien se deben a otros factores fuera de las variables de control instrumentadas en la planta y que por lo tanto, no se han considerado en el desarrollo del modelo. En cualquier caso, estos puntos anómalos representan un porcentaje pequeño, y no afectan a las conclusiones generales del modelo. En el caso de condiciones de carga parcial (Figura 7.4), sí que existe una mayor dispersión entre los datos obtenidos en la planta y los calculados por el modelo. La razón de esta discrepancia se puede explicar desde un punto de vista fluidodinámico. Evidentemente, en condiciones de carga parcial, la estratificación de las condiciones en el hogar es mucho más relevante que en condiciones de carga nominal donde existe una mayor uniformidad en los perfiles de temperatura y de presión parcial de oxígeno. Partiendo de esta base, y teniendo en cuenta que las redes neuronales no hacen sino promediar e interpolar estos valores en el hogar, no resulta extraño el resultado alcanzado. Este hecho supone uno de los mayores retos del problema, y es donde más énfasis se ha puesto en el desarrollo del sistema de redes neuronales explicado en el Capítulo 5. Diseñar una red neuronal con un número mayor de neuronas conseguiría simular de manera más precisa el campo fluido y térmico del hogar. Sin embargo, esto llevaría a una situación de sobreentrenamiento, perdiendo la capacidad de generalizar de la red. Es decir, que se conseguiría una mayor precisión en los casos concretos en los que ha sido entrenada la red, pero se perdería la capacidad de predicción de la red en otras condiciones que no fueran las del entrenamiento. Así que, en la búsqueda del equilibrio entre ambas situaciones, se optó por un diseño de un sistema de redes más complejo, considerando redes diferenciadas para las filas superiores e inferiores, e incluyendo la posición inicial de la partícula en el quemador, y se llevó a cabo un proceso iterativo de selección del número de neuronas más adecuado para el problema. Los detalles de la estructura y la construcción del sistema de redes neuronales se

abordan ampliamente en el Capítulo 5. En cuanto a los puntos más alejados de la bisectriz se puede hacer el mismo análisis que el expuesto para las condiciones de carga nominal.

Otra característica de las Figuras 7.3 y 7.4, es que los resultados obtenidos para los tres carbones de estudio aparecen correctamente diferenciados. Este resultado es el esperado, ya que la estimación de inquemados en cenizas se refleja en base al contenido de materia mineral de cada carbón. De manera que para obtener de manera rigurosa la precisión global del sistema de predicción de inquemados es necesario uniformizar la base de los resultados, y expresar ésta en función del grado de combustión alcanzado. Para ello, la Tabla 7.8 recoge los valores del grado de combustión alcanzado (% , base carbón) para los datos de planta, y los resultados obtenidos con el sistema de predicción para las mismas condiciones.

CASO	Burnout ASM (%)	Burnout SPI (%)	ERROR (%)
1	98.56	97.73	-0.84
2	97.01	97.56	0.55
3	97.56	97.69	0.12
4	97.94	97.85	-0.09
5	97.61	97.73	0.11
6	96.68	97.61	0.93
7	98.58	97.75	-0.83
8	97.87	97.73	-0.14
9	98.02	97.71	-0.31
10	97.72	97.72	0.00
11	97.69	97.59	-0.10
12	98.55	97.64	-0.92
13	97.75	97.65	-0.09
14	98.09	97.75	-0.34
15	97.37	97.85	0.47
16	98.16	97.93	-0.23
17	98.23	98.04	-0.19
18	97.85	97.95	0.10
19	97.26	97.90	0.64
20	97.51	98.15	0.64
21	97.94	98.05	0.11
22	97.84	98.14	0.30
23	97.86	98.09	0.23
24	97.85	97.99	0.14
25	97.54	97.85	0.31
26	97.69	97.89	0.20
27	97.79	97.81	0.02
28	97.45	97.64	0.19
29	98.93	98.81	-0.12
30	98.86	98.81	-0.06
31	99.05	99.04	-0.01
32	99.09	99.09	0.00
33	98.51	98.88	0.37
34	98.83	98.95	0.12
35	99.37	98.83	-0.54
36	98.38	98.89	0.51
37	98.94	99.04	0.11
38	98.71	98.94	0.23
39	98.87	99.05	0.18
40	99.12	98.80	-0.32
41	98.70	98.87	0.17
42	98.79	98.92	0.13
43	99.36	98.70	-0.67
44	99.30	98.74	-0.56
45	98.86	98.74	-0.12
46	98.71	98.70	-0.01
47	99.06	98.64	-0.42
48	98.66	98.66	0.00
49	98.86	98.75	-0.12
50	98.51	98.61	0.10
51	98.81	98.84	0.03
52	98.59	98.99	0.39
53	98.76	98.78	0.02
54	98.53	98.93	0.40
55	98.17	99.05	0.88
56	98.71	99.13	0.42
57	98.16	99.06	0.90
58	98.66	99.09	0.43
59	98.77	99.05	0.28
60	99.10	98.58	-0.52
61	98.64	98.52	-0.11
62	98.55	98.71	0.16
63	98.76	98.63	-0.13
64	98.57	99.03	0.45
65	97.80	98.62	0.82
66	98.25	98.64	0.39
67	98.56	98.65	0.09
68	98.91	98.72	-0.19
69	98.83	98.72	-0.12
71	99.44	99.25	-0.19
72	99.01	99.01	0.00
73	98.49	99.21	0.72
74	98.58	99.22	0.64
75	98.44	99.22	0.78
76	99.05	99.07	0.02
77	99.32	99.10	-0.21
78	99.36	99.10	-0.27
79	98.81	99.36	0.55
80	99.22	99.31	0.09
81	99.19	99.23	0.04
82	99.08	99.24	0.16
83	99.30	99.24	-0.07
84	99.27	99.30	0.03
85	99.56	99.53	-0.02
86	99.29	99.30	0.00
87	99.37	99.20	-0.17
88	99.43	99.43	0.00
89	99.64	99.52	-0.12
90	99.58	99.50	-0.07
91	99.52	99.53	0.01

Tabla 7.8 Grado de combustión alcanzado (% , base carbón) obtenido en la planta Lamarmora ASM Brescia y con el SPI (Sistema Predicción Inquemados)

Antes de determinar la precisión del sistema de predicción, se ha realizado un estudio estadístico para analizar la correspondencia entre los resultados recogidos en la planta y los resultados del modelo. Para ello, se comparan las distribuciones estadísticas de ambos resultados. Dado que el tipo de distribución de los datos es desconocida, se ha llevado a cabo, para cada conjunto de datos, el test de normalidad de Anderson-Darling. En las Figuras 7.5, 7.6 y 7.7, se muestran los diagramas de probabilidad superpuestos (datos ASM y datos del sistema de predicción) para todos los datos, para los datos de plena carga y para los datos de carga parcial respectivamente, determinados según este test e incluyendo los límites marcados por el intervalo de confianza del 95 %.

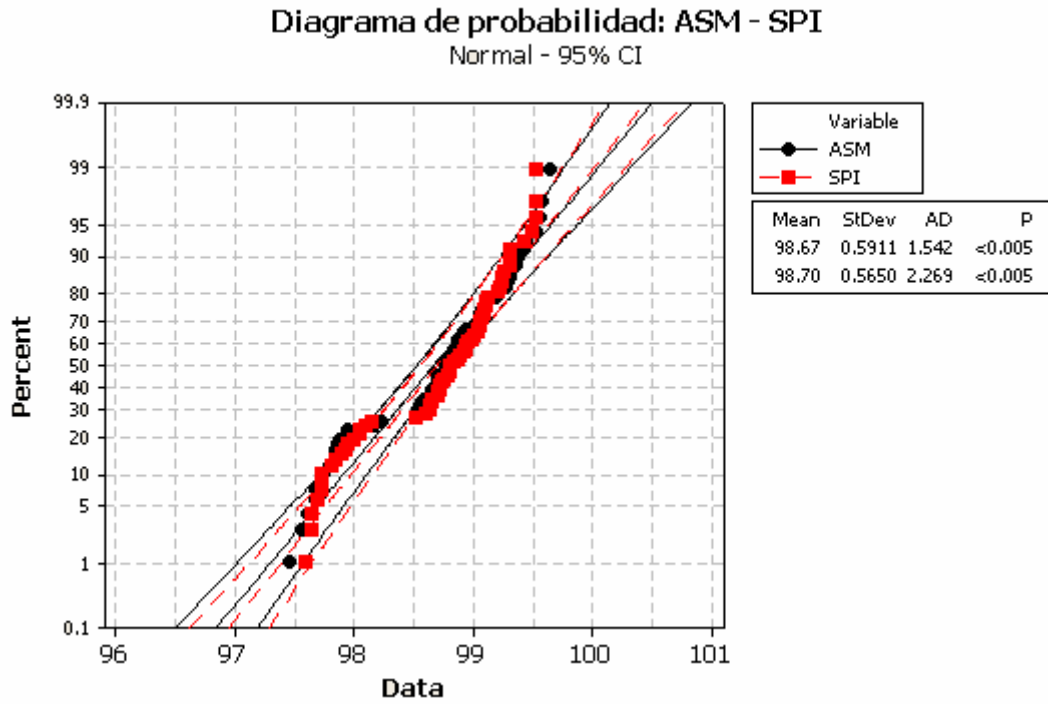


Fig. 7.5 Diagramas de probabilidad superpuestos de las dos series de datos (grado de combustión, % - base carbón): ASM y SPI (Sistema Predicción Inquemados)

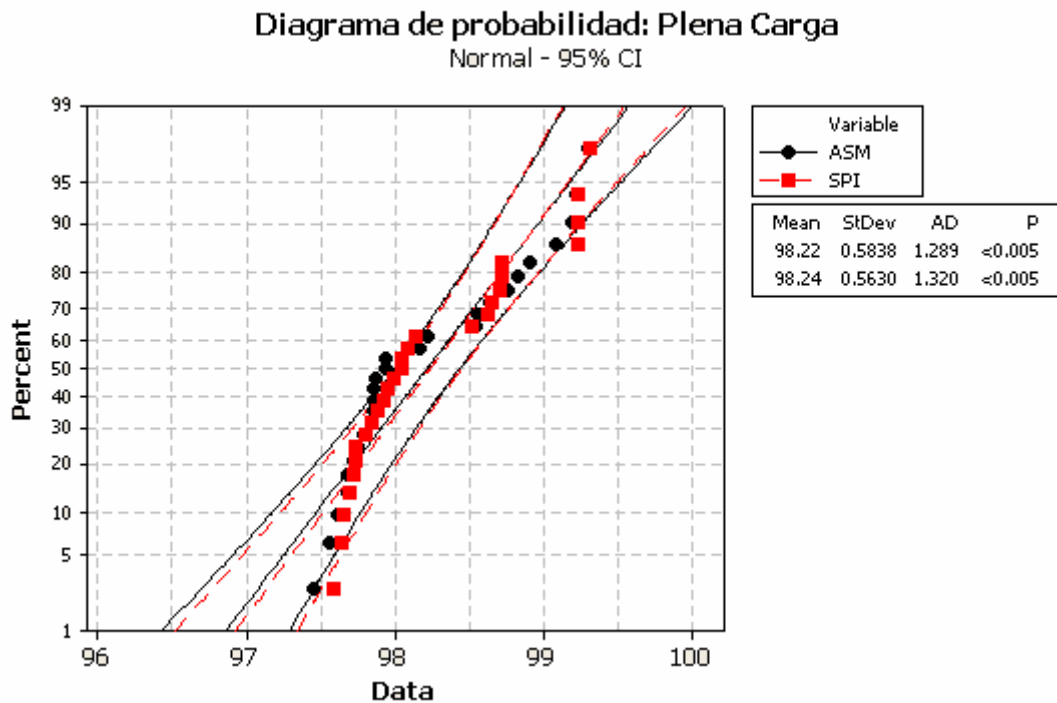


Fig. 7.6 Diagramas de probabilidad superpuestos de las dos series de datos (grado de combustión, % - base carbón) en condiciones de plena carga: ASM y SPI (Sistema Predicción Inquemados)

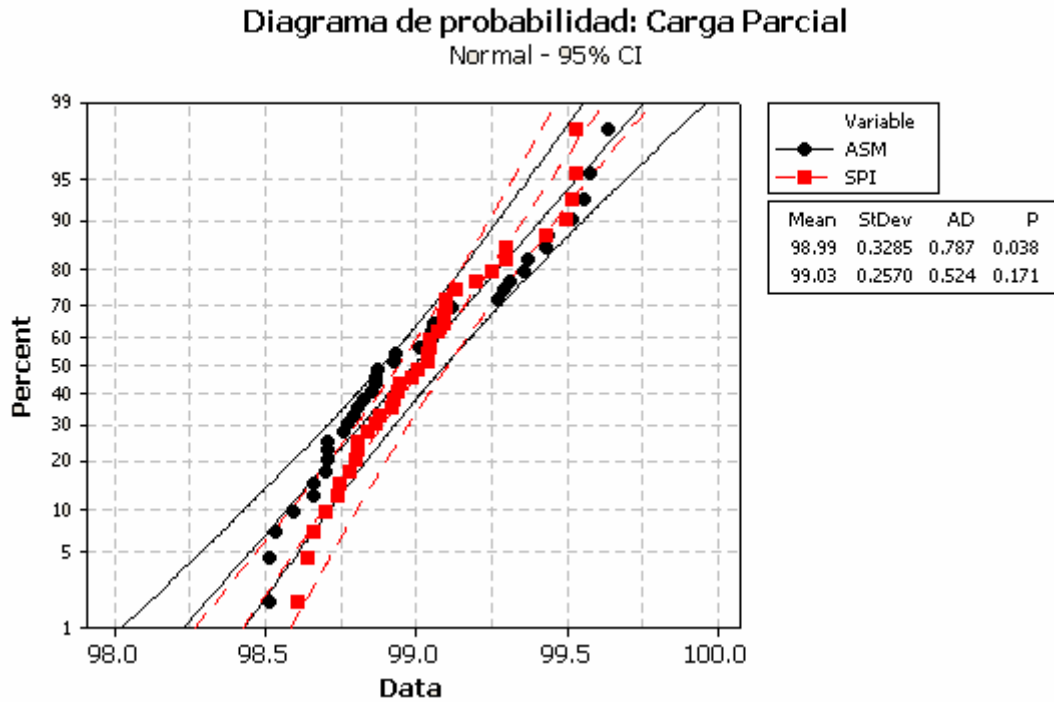


Fig. 7.7 Diagramas de probabilidad superpuestos de las dos series de datos (grado de combustión, % - base carbón) en condiciones de carga parcial: ASM y SPI (Sistema Predicción Inquemados)

La primera valoración de las Figuras 7.5, 7.6 y 7.7 indica que ambas distribuciones (datos ASM y datos del sistema de predicción) no son normales (p -valor < 0.005). Así que para establecer la comparación entre ambas distribuciones, se debe recurrir a los resultados de la media y la desviación típica, y al propio diagrama de probabilidad. La Figura 7.5, que muestra estos resultados para el conjunto total de datos, señala una correspondencia excelente entre ambas muestras, tanto en la distribución de la probabilidad en todo el rango de estudio, como en la media y desviación típica. En cuanto al estudio diferenciado para los datos de plena carga (Figura 7.6) y carga parcial (Figura 7.7), éste refrenda las conclusiones que se obtuvieron al analizar los diagramas de dispersión de las Figuras 7.3 y 7.4. Es decir, que en el caso de plena carga (Figura 7.6), la comparación de la distribuciones de probabilidad sugiere un mejor ajuste, confirmado por la media y la desviación típica, mientras que en el caso de carga parcial, el ajuste con la media es adecuado pero existe una discrepancia en la desviación típica. El análisis de ambos resultados se puede referir a lo explicado anteriormente en las Figuras 7.3 y 7.4. Como conclusión general, y volviendo a la Figura 7.5, se puede destacar que el sistema predice globalmente de forma adecuada en todo el rango de operación de la planta de estudio.

Como último paso en el desarrollo del sistema de predicción, se ha determinado la precisión global del modelo. Para ello se han tomado los datos de la columna “Error” de la Tabla 7.8, y se ha analizado la distribución estadística de estos. De nuevo, se ha aplicado el test de

normalidad de Anderson-Darling arrojando un resultado positivo en este caso (p -valor = 0.012), como puede verse en la Figura 7.8.

Distribución estadística del error

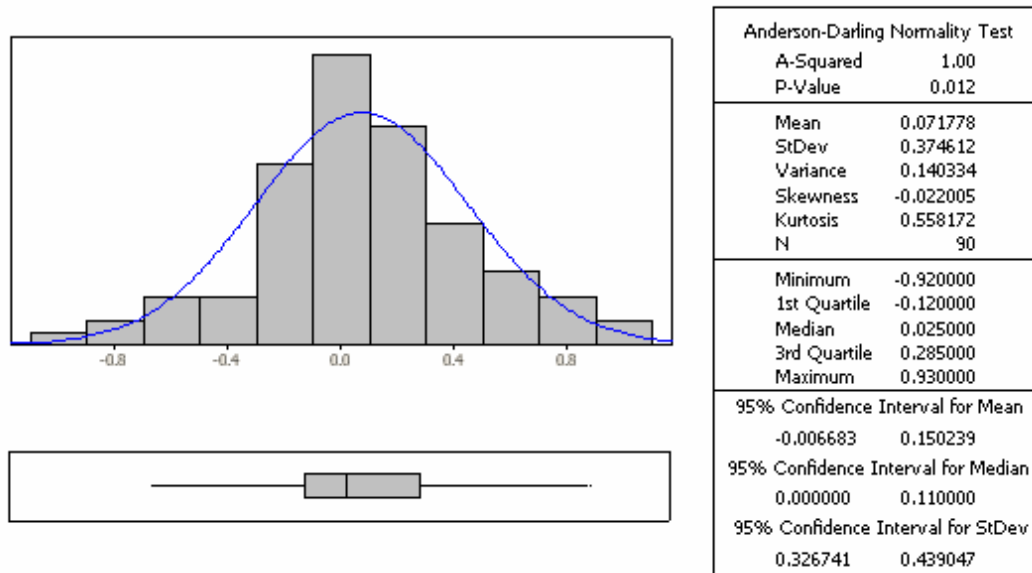


Fig. 7.8 Distribución estadística del error en el grado de combustión (% , base carbón) entre los datos de planta y los resultados del SPI (Sistema Predicción Inquemados)

Es interesante destacar, que a pesar de obtener un p -valor bajo, se obtiene una distribución leptokúrtica ($kurtosis = 0.558172$), es decir más apuntada que la normal, observándose una menor concentración de puntos en las colas y mayor en torno a la media, lo que confiere una seguridad mayor en los resultados que se obtienen al analizar la distribución normal. Otra característica importante es que la media de la distribución está ligeramente desplazada del cero, lo que indica que el modelo sobrepredice ligeramente el nivel de combustión alcanzado. Este resultado, no es preocupante ya que es muy pequeño (0.071778), pero si debe tenerse en cuenta en la construcción de los intervalos de confianza.

Tomando de la Fig. 7.8 los valores de los intervalos de confianza al 95.5 % para la media y la desviación típica, se puede construir el intervalo del error de una estimación puntual también con un nivel de confianza del 95.5 % según la Ec. 7.1.

$$P(\mu - 2 \cdot \sigma \leq X \leq \mu + 2 \cdot \sigma) = 0.955 \tag{Ec. 7.1}$$

Es decir, que dentro del intervalo $[\mu - 2\sigma, \mu + 2\sigma]$ se encuentra el 95.5 % de la masa de probabilidad. Por lo tanto, asumiendo que $(\mu = \bar{x}, \sigma = \hat{\sigma})$, el error de una estimación puntual se puede expresar en porcentaje según la Ec. 7.2.

$$E_{Bnt} = \mu \pm 2 \cdot \sigma \approx \pm 0.82 \% \quad (\text{Ec. 7.2})$$

Dado que la media de la distribución está desplazada del cero, el nivel inferior del intervalo expresado en la Ec. 7.2 es en realidad -0.75 %. Sin embargo, por simplicidad en la interpretación, se ha construido un intervalo de variación del error simétrico en torno al cero a partir del valor máximo obtenido (0.82 %) según la Ec. 7.2. De manera que el nivel de confianza es, en realidad, mayor que 95.5 %.

Por lo tanto, la precisión puntual del modelo con un nivel confianza del 95.5 % se expresa, en términos del grado de combustión (% , base carbón) según la Ec. 7.3.

$$Bnt_{ASM} = Bnt_{SPI} \pm E_{Bnt} = Bnt_{SPI} \pm 0.82 \% \quad (\text{Ec. 7.3})$$

Además de calcular el error de una estimación puntual del modelo, es conveniente proporcionar el error promedio de un conjunto de observaciones aleatorias (m.a.s.), especialmente cuando se busca un funcionamiento del sistema en tiempo real donde la adquisición de datos se realiza cada poco tiempo; y donde generalmente, los resultados, debido a las fluctuaciones de los datos recogidos, se suelen expresar en promedio. Según este análisis, el error del modelo para la media de un conjunto de estimaciones aleatorias ($n_o > 30$) se encuentra dentro del intervalo definido por la Ec. 7.4.

$$\left[\bar{x}_n - \frac{\hat{\sigma}}{\sqrt{n_o}} \cdot z_{1-\alpha/2}, \bar{x}_n + \frac{\hat{\sigma}}{\sqrt{n_o}} \cdot z_{1-\alpha/2} \right] \quad (\text{Ec.7.4})$$

Donde, para un nivel de confianza del 95 % ($\alpha = 0.05$) se obtiene una estimación del error promedio en porcentaje, expresada según la Ec. 7.5.

$$\bar{E}_{Bnt} = \bar{x}_n \pm \frac{\hat{\sigma}}{\sqrt{n_o}} \cdot z_{1-\alpha/2} \approx \pm 0.15 \% \quad (\text{Ec. 7.5})$$

De nuevo, se ha construido un intervalo simétrico, pese a que la media de la distribución está desplazada del cero, y por lo tanto, el nivel inferior del intervalo expresado en la Ec. 7.5 es en realidad -0.07 %.

Por lo tanto, para un conjunto de observaciones aleatorias, la precisión del modelo con un nivel confianza del 95.5 % se expresa, en términos del grado de combustión (% , base carbón) según la Ec. 7.6.

$$Bnt_{ASM} = Bnt_{SPI} \pm \bar{E}_{Bnt} = Bnt_{SPI} \pm 0.15 \% \quad (\text{Ec. 7.6})$$

Para obtener un indicador de la precisión del modelo, en términos del contenido de inquemados en cenizas (%), es preciso recurrir a la expresión de Kurose et al. (2001) (Capítulo 1, Sección 1.4, Ec. 1.1), resultando unas expresiones que dependen del contenido en ceniza del carbón y del grado de combustión alcanzado (Ecs. 7.7-7.10).

$$CIA_{ASM} = CIA_{SPI} \pm E_{CIA} \quad (\text{Ec. 7.7})$$

$$E_{CIA} = abs(CIA_{Bnt} - CIA_{Bnt+e}) \quad (\text{Ec. 7.8})$$

$$CIA_{Bnt} = 100 \cdot \frac{100 - Bnt_{SPI}}{\left(\frac{Z}{1-Z}\right) + (100 - Bnt_{SPI})} \quad (\text{Ec. 7.9})$$

$$CIA_{Bnt+e} = 100 \cdot \frac{100 - Bnt_{SPI} \pm E_{Bnt}}{\left(\frac{Z}{1-Z}\right) + (100 - Bnt_{SPI} \pm E_{Bnt})} \quad (\text{Ec. 7.10})$$

Donde, Z es el contenido (%) de cenizas del carbón a estudio, CIA_{Bnt} representa el valor de inquemados en cenizas correspondiente al grado de combustión Bnt_{SPI} , y CIA_{Bnt+e} el valor de inquemados en cenizas correspondiente a un grado de combustión Bnt_{SPI} considerando un error E_{Bnt} en la estimación.

Dependiendo de si se introduce en la Ec. 7.10 el error puntual o el error de la media de un conjunto de observaciones aleatorias, obtendremos respectivamente, según la Ec. 7.7, sendas expresiones de la precisión del modelo para la predicción de inquemados.

Realizando estas conversiones (Ecs. 7.7-7.10), y particularizando para el caso más desfavorable con los tres carbones de estudio, en la Tabla 7.9 se resumen los errores máximos de inquemados en cenizas al 95 % de confianza para una estimación puntual y una estimación de la media de un conjunto de observaciones aleatorias.

Errores máximos CIA (%)

	Estimación puntual	Estimación media
Guasare	9.48	1.52
Carbonandes	8.44	1.38
Russian	7.73	1.27

Tabla 7.9 Errores máximos de inquemados en cenizas del sistema de predicción con un nivel de confianza del 95 % para los tres carbones de estudio

Aunque la valoración de los resultados y la comparación con otros modelos de predicción de inquemados se lleva a cabo en la siguiente sección, es interesante hacer dos consideraciones de los resultados obtenidos en la Tabla 7.9. En primer lugar, hay que señalar que los valores calculados en la Tabla 7.9, son valores máximos. Es decir que se encontrarían en las colas de la función de distribución (próximas al valor $\alpha/2$ y $1-\alpha/2$). Además, hay que recordar que el mayor apuntamiento de la función de distribución (kurtosis) indica que la mayoría de valores se concentran en torno a la media, de manera que todavía son más excepcionales los valores mostrados en la tabla. En segundo lugar, hay que indicar que en el estudio del error no se ha descartado ninguno de los valores obtenidos en la Tabla 7.8. En todos los estudios estadísticos es habitual desechar los valores más alejados de la media, para los que no existe una interpretación coherente de acuerdo a los datos disponibles en el problema. En el análisis de las Figuras 7.3 y 7.4, se comentó que los puntos más alejados de la bisectriz no respondían a ninguna razón aparente para inferir un error en el modelo. A pesar de ello, en este estudio se ha preferido no excluir estos puntos del análisis, para poder dar una estimación más conservadora, que incluiría también los errores originados del proceso de adquisición de datos.

7.3 Análisis y valoración del sistema de predicción de inquemados

Para comparar la capacidad de predicción del SPI se ha realizado una búsqueda en la bibliografía. Sin embargo, ha sido difícil encontrar referencias sobre sistemas de predicción de inquemados, ya que la mayoría de los estudios relacionados realizados en las dos últimas décadas se han dedicado a la reducción de emisiones de NO_x . La razón principal se debe a que el interés principal de los productores se centró en cumplir nuevas directivas medioambientales con unos límites cada vez más restrictivos para las emisiones contaminantes, quedando la formación de inquemados en un segundo plano. Una vez maduras las tecnologías y estrategias de reducción de emisiones, es cuando se ha generado una preocupación por el fenómeno de los inquemados, que supone una reducción de la eficiencia global de la planta y un coste añadido a la generación.

Es habitual encontrar, en la mayoría de las publicaciones relacionadas con la reducción de NO_x , que la aplicación de este tipo de técnicas incrementa notablemente el carbono inquemado en cenizas. Por el contrario, no aparece ninguna cuantificación del fenómeno. De igual manera, otros artículos relacionados con estudios CFD de centrales térmicas apuntan la dificultad de cuantificar los inquemados con los modelos utilizados comúnmente, con los que tan sólo es posible indicar tendencias generales (Stopford, 2002; Pallarés et al., 2005; Severin et al., 2005).

En el Capítulo 1 se realizó una revisión de los distintos sistemas de predicción de inquemados, clasificándolos en tres grupos según la Tabla 7.10.

Sistemas de predicción	Ventajas	Inconvenientes
1. Experimentos en plantas piloto	Permiten un estudio detallado del proceso de combustión del carbón bajo distintas condiciones	Alto coste Difícil de escalar los resultados a grandes plantas de potencia
2. Modelos cinéticos de combustión	Combustión detallada	Fluidodinámica simplificada
3. Modelos CFD	Fluidodinámica detallada	Combustión simplificada

Tabla 7.10 Sistemas de predicción de inquemados

Dado que los métodos experimentales de determinación de inquemados no pueden ser utilizados en un sistema de predicción que funcione en tiempo real, la siguiente discusión se centra en los otros dos tipos de sistemas: modelos cinéticos avanzados y modelos CFD.

Los modelos cinéticos avanzados, generalmente desarrollados a partir del estudio del proceso real en quemadores experimentales, tienen la virtud de simular de manera bastante realista los fenómenos que ocurren durante la combustión de la partícula. La contrapartida que tienen estos modelos es que necesitan una descripción de las condiciones del hogar, que habitualmente se obtiene de modelos simplificados como los modelos zonales. El otro grupo de modelos, las simulaciones CFD, ofrecen unas prestaciones justamente contrapuestas a los primeros. Es decir, proporcionan una descripción detallada de la fluidodinámica y transferencia de calor en el hogar, pero incluyen modelos de combustión demasiado simplificados para simular de manera realista la combustión de la partícula de carbón, al nivel necesario para la determinación de inquemados. Además, el tiempo de cálculo necesario para completar una simulación del hogar, todavía es demasiado elevado.

El sistema de predicción desarrollado en esta tesis, sigue la misma estructura que los modelos cinéticos de combustión avanzados; es decir, una descripción detallada del proceso de combustión de la partícula, pero introduciendo una descripción detallada de la fluidodinámica y los fenómenos de transporte del problema, obtenida a partir de simulaciones CFD. Para eliminar el hándicap del alto coste computacional de las simulaciones CFD, se introduce un sistema de redes neuronales, que entrenado con datos obtenidos de las simulaciones bajo distintas condiciones de operación, sustituye a todos los efectos a las propias simulaciones CFD.

En principio, parece razonable que las predicciones de los inquemados se mejoren respecto a las obtenidas con otros modelos cinéticos basados en modelos zonales, ya que con este diseño de redes neuronales obtenidas vía simulaciones CFD, se conseguiría una mejora sustancial de la descripción de la fluidodinámica y la transferencia de calor del problema para un conjunto amplio de condiciones de operación. Volviendo a la bibliografía, de nuevo, apenas aparecen publicaciones que hayan realizado un estudio pormenorizado del fenómeno de los inquemados en cenizas. De hecho, tan sólo se ha encontrado una publicación, Severin et al. (2005), que incluya resultados cuantitativos de la predicción de inquemados. El modelo utilizado por Severin et al. (2005), se basa en un modelo cinético avanzado que incluye los fenómenos de la desactivación térmica del char, variación del área superficial durante la combustión y fenómenos de inhibición a la oxidación de la ceniza. La fluidodinámica se introduce en el problema a través de un modelo zonal que divide el dominio en un número suficiente de zonas significativas para caracterizar las interacciones principales del flujo en el hogar. El sistema de predicción se aplica sobre la central térmica de Sines (Portugal) de 300 MWe, bajo tres condiciones de operación distintas en las que se queman mezclas de carbones, obteniendo una desviación del valor de inquemados predicho por el modelo frente a los medidos en planta, por encima del 3.5 %. En las Tablas 7.11 y 7.12, se resumen los análisis inmediato y elemental de las mezclas alimentadas en las tres pruebas, y los resultados de inquemados en ceniza determinados en la planta y con el modelo.

Análisis inmediato (% wt, base seca)	Caso 1	Caso 2	Caso 3	
	Filas 1-5	Filas 1-5	Fila 1	Filas 2-5
Z	13.36	13.36	9.88	10.56
VM	28.85	28.85	34.78	32.4
FC	51.02	51.02	55.34	57.04
Análisis elemental (% wt, base seca)				
C	67.68	67.68	72.85	71.95
H	4.4	4.4	4.75	4.32
O	5.31	5.31	10.33	11.02
N	1.54	1.54	1.4	1.48
S	0.94	0.94	0.79	0.67

Tabla 7.11 Análisis inmediato y elemental Severin et al. (2005)

	CIA Sinnes (%)	CIA Modelo (%)	Error (%)
Caso 1	3.2	6.7	3.5
Caso 2	2.5	6.2	3.7
Caso 3	4	7.7	3.7

Tabla 7.12 Inquemados en cenizas y predicción del modelo Severin et al. (2005)

Como ya se ha referido con anterioridad, para comparar la precisión de ambos modelos, no se pueden confrontar directamente los errores obtenidos en valores de inquemados en cenizas, ya que dependen del contenido en ceniza del carbón original. A partir de los análisis de la Tabla 7.11, con las Ecs. 7.7 – 7.10 se han obtenido los errores en función del grado de combustión del carbón. Los resultados se resumen en la Tabla 7.13.

	E_{bnt} (%)
Caso 1	-0.6
Caso 2	-0.62
Caso 3	-0.49

Tabla 7.13 Error de predicción del modelo (% grado de combustión) Severin et al. (2005)

Con los resultados de la Tabla 7.13 tampoco se puede establecer una comparación rigurosa de la predicción de ambos modelos, ya que en el artículo citado, no se precisa como se ha obtenido esa estimación, si representa un valor puntual o un promedio de distintos valores; y además el número de resultados es muy escaso. Sin embargo, si se pueden hacer dos breves valoraciones. La primera es que en el caso del modelo zonal (Severin et al., 2005), éste sobrepredice los inquemados en todos los casos. Por el contrario, con el SPI se obtiene una distribución de resultados cuya media se sitúa muy cercana al valor cero (ver Figura 7.8). De manera que, el SPI está más compensado y se ajusta mejor a los valores experimentales. En segundo lugar, si se introdujeran dentro de la gráfica de distribución del error de la Figura 7.8, los valores obtenidos con el modelo zonal (Tabla 7.13), quedarían situados fuera del intervalo de confianza del 95 % dado para la media [-0.006683, 0.150239]. Es decir, que aunque dentro del margen del error del SPI, se situarían en una zona de probabilidad muy pequeña. Esta es una razón, por la que se ha considerado importante dar la precisión del sistema de predicción a través de un modelo estadístico del error, facilitando así, la comparación de éste con otros modelos. La otra razón reside en que una única medición del error puede resultar engañosa. Así, si se hubiera dado un único resultado del error del SPI calculado a partir de la media del conjunto completo de los casos analizados, se obtendría un error en grado de combustión de 0.07 %, y un error en inquemados de 1.07 %, 0.92 % y 0.82 % para los carbones Guasare, Carboandes y Russian respectivamente. No obstante, ambos análisis, bien a partir de la distribución estadística del

error, o bien a partir de un valor único del error promedio, indican una mejor precisión en la predicción con el SPI.

Como valoración final de este estudio comparativo, Severin et al. (2005) destacan en sus conclusiones que el error cometido en la estimación se debe a las simplificaciones en la descripción de las trayectorias de las partículas y en la caracterización de la temperatura y presión parcial de oxígeno en el hogar, con el objeto de reducir el tiempo de cálculo. En este sentido, el sistema de predicción desarrollado en este trabajo consigue introducir una descripción más realista de los perfiles de temperatura y presión parcial de oxígeno que encuentra cada partícula en su trayectoria a lo largo del hogar, sin comprometer por ello el tiempo de cálculo. Así, se consigue una predicción global aceptable, que mejora la precisión obtenida con otro tipo de aproximaciones zonales.

Para finalizar, se discute el aspecto más controvertido del SPI propuesto en este trabajo. En primer lugar, hay que decir, que a pesar de las ventajas expuestas a lo largo del capítulo, y aunque la precisión global del modelo es aceptable, la validación de los resultados obtenidos a carga parcial todavía crea ciertas incertidumbres. Como se expuso en la sección anterior, mejorar la capacidad de predicción del sistema de redes neuronales, con el mismo conjunto de simulaciones de entrenamiento, provoca un sobreentrenamiento, y con ello, una pérdida en la generalización de los perfiles obtenidos para distintas condiciones de operación. En definitiva, el sistema se rigidizaría y no sería capaz de detectar pequeñas variaciones en las condiciones del hogar. La solución al problema pasa por aumentar considerablemente el número de simulaciones CFD, y con ello el número de datos de entrenamiento de las redes. De esta forma, se podría aumentar el tamaño de la red sin que se llegara al sobreentrenamiento.

No obstante, y como conclusión final, se puede decir que a pesar de éste y otros problemas expuestos en la memoria del trabajo, el sistema cumple los requisitos de diseño planteados en la tesis.

7.4 Conclusiones

En este capítulo final se ha abordado la culminación del objetivo principal de la tesis, consistente en el desarrollo de un sistema de predicción de inquemados, que proporciona en tiempo real, una medida del contenido de carbono inquemado en cenizas para unas condiciones de combustión determinadas.

El sistema final está formado por un modelo de condiciones locales de combustión (Capítulo 5) y un modelo cinético de combustión avanzado (Capítulo 6). El primero proporciona al sistema la información de los perfiles de temperatura y presión parcial de oxígeno, que encuentran un número representativo de partículas en su trayectoria por el hogar. Este submodelo, basado en un sistema de redes neuronales, reproduce para el rango de operación de la planta de estudio (Lamarmora, Italia), los valores calculados para estos perfiles por medio de simulaciones CFD. La ventaja de este submodelo es que permite además, obtener estos perfiles bajo cualquier condición de la planta dentro del rango definido en el entrenamiento. Por último, requiere un tiempo de cálculo despreciable comparado con el empleado para llevar a cabo una simulación CFD completa del hogar. El otro submodelo, consiste en el propio modelo de combustión dividido en dos subrutinas correspondientes a la devolatilización de la partícula (FG-DVC) y a la oxidación del residuo carbonoso (modelo intrínseco que incorpora los fenómenos de desactivación térmica del char, variación de la estructura porosa del char durante la combustión, efecto de la ceniza en la difusión del oxidante y la influencia de la composición maceral en la reactividad del char).

La validación del sistema de predicción se ha llevado a cabo con datos de planta recogidos en la central térmica Lamarmora ASM Brescia durante tres meses de pruebas (Enero – Marzo 2005) en los que el grupo de estudio de 63 MWe fue alimentado independientemente con tres carbones de distinta procedencia cubriendo el rango habitual de operación de la planta. Los resultados han sido presentados frente a los datos recogidos en la planta, llevándose a cabo un estudio estadístico para la validación de los mismos y para la determinación de la capacidad de predicción del sistema. La comparación de las dos distribuciones de datos (valores recogidos en la central y resultados proporcionados por el sistema de predicción) ha manifestado una correspondencia excelente entre ambas muestras, tanto en la distribución de la probabilidad en todo el rango de estudio, como en la media y desviación típica. Así el error máximo en la predicción del grado de combustión alcanzado se sitúa para una observación puntual en 0.82 % y en 0.15 % para la media de un conjunto de observaciones aleatorias. Finalmente, se establece la comparación con un sistema predictivo basado en un modelo zonal, obteniéndose una mejora sustancial en la precisión global del método desarrollado en este trabajo de tesis.

Como conclusión final se puede destacar que el sistema cumple los requisitos de diseño planteados en la tesis (precisión y tiempo de respuesta), dejando abiertas una serie de propuestas para la mejora futura del modelo.

Finalmente, se presentan de forma esquemática algunas de las ventajas que proporciona este sistema de predicción:

- Incorpora una descripción detallada de los fenómenos de transporte del problema, gracias al sistema de redes neuronales entrenado con simulaciones CFD que cubren el rango de operación de la planta.
- La propia característica del sistema de redes neuronales permite la interpolación en otras condiciones de operación distintas a las del entrenamiento.
- El modelo de combustión avanzado describe de forma detallada tanto la etapa de devolatilización como la etapa de oxidación del residuo carbono.
- El número de entradas del sistema es muy reducido y están disponibles en cualquier central térmica.
- El tiempo de cálculo, inferior a un minuto, permite su utilización en tiempo real en una central térmica.
- La precisión del sistema es suficiente buena para todo el rango de operación de la planta, y mejora los resultados obtenidos por otros sistemas de predicción de inquemados basados en aproximaciones zonales.

Nomenclatura

A_c	factor preexponencial relación de formación CO/CO ₂
$B_{nt_{ASM}}$	grado de combustión medido en planta
$B_{nt_{SPI}}$	grado de combustión obtenido con el SPI
CIA_{ASM}	inquemados en cenizas medido en planta
$CIA_{B_{nt}}$	inquemados en cenizas correspondiente a un grado de combustión B_{nt}
$CIA_{B_{nt+e}}$	inquemados en cenizas correspondiente a un grado de combustión $B_{nt_{SPI}}$ considerando un error $E_{B_{nt}}$ en la estimación
CIA_{SPI}	inquemados en cenizas obtenido con el SPI
d_{pm}	diámetro medio distribución Rosin Rammler (m)
$E_{B_{nt}}$	error del SPI (% de grado de combustión)
E_c	energía de activación relación de formación CO/CO ₂ (kcal/mol)
E_{CIA}	error del SPI (% de inquemados en cenizas)
E_e	energía de activación (kJ/mol)
n	orden de reacción aparente
n_o	tamaño muestral
n_{rr}	factor de dispersión distribución Rosin Rammler
$Swell$	factor de hinchamiento
P_{iO_2}	presión parcial de oxígeno (N/m ²)
Q_a	caudal másico de aire primario (kg/s)
Q_c	caudal másico de carbón (kg/s)
t	tiempo (s)
t_{res}	tiempo de residencia (s)
z_α	percentil con un nivel de significación α
Z	% en peso de cenizas en el análisis elemental
α	nivel de significación de una distribución estadística
δ_m	espesor mínimo de la capa de ceniza (cm)
σ	desviación típica de la distribución estadística
θ_{taf}	porosidad crítica de la capa de ceniza
μ	media de la distribución estadística

Acrónimos

CFD	computational fluid dynamics
CIA	carbon in ash
DTF	drop tube furnace
m.a.s.	muestra aleatoria simple
SPI	sistema de predicción de inquemados

SINTESIS, APORTACIONES Y PERSPECTIVAS

SINTESIS

En las últimas décadas, las centrales termoeléctricas de carbón pulverizado se han visto afectadas progresivamente por exigencias cada vez más estrictas, que reducen los límites permitidos en las emisiones de partículas, SO₂, NO_x y CO₂, causantes de la contaminación atmosférica, lluvia ácida y efecto invernadero. El cumplimiento de la legislación medioambiental ha supuesto un nuevo reto en el desarrollo de nuevas técnicas de reducción de emisiones, y en la implantación de sistemas eficientes de limpieza de gases. Sin embargo, la aplicación de algunas de estas técnicas, como por ejemplo, modificar las condiciones de combustión para reducir la formación de NO_x, provoca una disminución en la eficiencia de la combustión, aumentando significativamente los inquemados a la salida del hogar.

Las partículas inquemadas que abandonan el hogar suponen en primer lugar una pérdida de combustible, reduciendo la eficiencia térmica de la caldera. Considerando que el precio del carbón es el mayor coste variable de una central térmica, un pequeño ahorro en su precio puede suponer una reducción significativa de los gastos de operación. Además, los inquemados aumentan la erosión en los intercambiadores de calor, afectan a la eficiencia de los precipitadores electrostáticos, y pueden hacer inservible la reutilización de la ceniza como sustitutivo del cemento o aditivo al hormigón. En consecuencia, se ha extendido entre los generadores, la necesidad de predecir la eficiencia en la combustión, y de encontrar las

condiciones más adecuadas de operación para llegar a un compromiso que permita cumplir la normativa medioambiental y que maximice la conversión del carbón en la caldera.

Aumentar la eficiencia, controlar las emisiones de gases y partículas, y minimizar los residuos sólidos, se consiguen en gran parte mejorando el proceso de combustión del carbón. Por ello, predecir la eficiencia de la combustión en calderas de potencia, y en particular, determinar los inquemados producidos durante la combustión, es fundamental para alcanzar ambos objetivos.

En este sentido, el objetivo central de esta tesis ha sido desarrollar un sistema predictivo de la combustión, que proporcione a los técnicos de una central, una estimación fiable del contenido de inquemados en cenizas para un rango de condiciones de operación. Paralelamente, un sistema con este planteamiento, permite determinar las condiciones óptimas de operación, y ante unos niveles inadecuados de inquemados, apuntar las actuaciones necesarias para reestablecer una situación de combustión apropiada. Para llevar a cabo este trabajo se eligió como central de estudio, una unidad de la central térmica Lamarmora (ASM Brescia, Italia). Esta elección se tomó en base a la estrecha colaboración establecida entre ASM y la Fundación CIRCE durante el desarrollo del proyecto europeo de investigación 7220-PR-130-CARNO.

El punto de partida para la construcción del sistema de predicción de inquemados fue determinar qué factores son los más relevantes en la formación de inquemados y cuantificar su influencia. Las causas que motivan las pérdidas por inquemados, pueden clasificarse en tres categorías: las propiedades del carbón y del residuo carbonoso; el acondicionamiento, preparación y molienda del carbón; y por último, las características del diseño y operación de los quemadores y del hogar. Sin embargo, no todos estos factores se pueden variar en la operación diaria de la planta, y por lo tanto, no todos permiten actuar sobre la cantidad de inquemados que se obtiene en el hogar.

En la tesis, se ha llevado a cabo un análisis de sensibilidad de los parámetros más influyentes en la formación de inquemados, sobre los que directa o indirectamente, el operario de una planta tiene capacidad de maniobra. Los principales parámetros analizados en este estudio han sido:

- Relación aire primario/carbón
- Nivel de exceso de aire (estequiometría)
- Tamaño de las partículas
- Intensidad de rotación del aire secundario (swirl)
- Desigualdades en el reparto aire/combustible entre quemadores

Para analizar y cuantificar su influencia en la formación de inquemados, se realizó un doble estudio de estos parámetros por medio de simulaciones CFD, utilizando un código comercial (CFX-4, AEA Technology). Primero, se evaluó, dentro del rango habitual de variación, su contribución individual a la formación de inquemados, manteniendo el resto de parámetros constantes. A continuación, con los parámetros más influyentes, se realizó un análisis factorial de experimentos, para determinar las interacciones entre ellos. Este último estudio, permitió dar un enfoque más realista del problema, donde la variación de un parámetro puede contribuir en mayor o menor medida a la formación de inquemados, dependiendo de las condiciones del resto de variables. Los resultados del estudio muestran, como era previsible, que el valor de exceso de oxígeno es el factor más determinante en la formación de inquemados. Sin embargo, otros factores que individualmente no tienen una gran relevancia, pueden resultar importantes en la determinación global de inquemados cuando se dan las condiciones adecuadas o interactúan con otros factores.

Una vez se hubieron definidos los parámetros más relevantes en la formación de inquemados, se procedió a establecer el diseño y la estructura del sistema de predicción de inquemados. En general, el comportamiento de las partículas de carbón pulverizado durante la combustión se establece con plantas piloto escaladas, modelos cinéticos avanzados, o códigos CFD. Las aproximaciones experimentales son muy útiles en estudios de diseño. Sin embargo, en el seguimiento diario de una planta real, los métodos computacionales ofrecen una mayor flexibilidad, además de un ahorro de tiempo y dinero. Dentro de éstos, los modelos cinéticos avanzados de la combustión del carbón, generalmente desarrollados a partir del estudio del proceso real en quemadores experimentales, tienen la virtud de simular de manera bastante realista los fenómenos que ocurren durante la combustión de la partícula. A pesar de ello, estos modelos necesitan una descripción de las condiciones fluidodinámicas y térmicas del hogar, que habitualmente se obtiene de modelos simplificados como las aproximaciones zonales. El otro grupo de modelos, las simulaciones CFD, ofrecen unas características contrapuestas a los primeros. Es decir, proporcionan una descripción detallada de la fluidodinámica y transferencia de calor en el hogar, pero incluyen modelos de combustión demasiado simplificados para simular de manera realista la combustión de la partícula de carbón, al nivel necesario para la determinación de inquemados. Además, el tiempo de cálculo necesario para completar una simulación del hogar, todavía es demasiado elevado.

En este trabajo de tesis se ha desarrollado una nueva metodología que adopta las ventajas de las dos aproximaciones: la descripción detallada del campo fluido a partir de un código CFD, y la descripción detallada de la combustión a partir de un modelo cinético de combustión avanzado.

Para llevar a cabo este objetivo se contemplaron dos posibilidades:

1. Implementar completamente el modelo de combustión avanzado en el código CFD.
2. Utilizar las soluciones del código CFD, en forma de perfiles de oxígeno y temperatura, para describir la historia de cada una de las partículas simuladas. A continuación, utilizar estos perfiles, junto con las propiedades del combustible, como entradas de un modelo de combustión avanzado.

La primera estrategia fue descartada por la imposibilidad de acoplar todas las ecuaciones dentro de un código comercial con licencia y copyright. En esta línea, se llevaron a cabo pequeñas modificaciones en el modelo de combustión del código comercial CFX-4, incluyendo correlaciones de las propiedades del carbón, a través de la energía de activación y el factor preexponencial (Hurt y Mitchell, 1992), y un submodelo que describe la resistencia adicional de la ceniza a la difusión del oxidante hasta la superficie de la partícula (Hurt y Sun, 1998). De esta manera, se consiguió predecir adecuadamente tendencias en la formación de inquemados. Sin embargo, al no tener en cuenta la variación de la reactividad y de la estructura porosa del residuo carbonoso conforme avanza la combustión, fallaba al predecir valores cuantitativos de los inquemados en cenizas

Por esta razón, se optó por la segunda estrategia, manteniendo la utilización del código CFD como herramienta de caracterización del campo fluido y térmico, e introduciendo esta información (evolución de las temperaturas y presiones parciales de oxígeno, a lo largo de las trayectorias de las partículas) dentro de un modelo avanzado de combustión. Para solucionar el problema del coste computacional, se propuso la utilización de un sistema de redes neuronales que, entrenado a partir de las simulaciones CFD, generara los perfiles de oxígeno y de temperaturas, y el tiempo de residencia de las partículas, que se obtenían inicialmente con el código CFD, para unas condiciones de operación determinadas. La ventaja del nuevo sistema es que permitiría realizar los cálculos con un tiempo de respuesta muy bajo (del orden de segundos), y por lo tanto, se podría utilizar en la construcción de un sistema predictivo en tiempo real. Otra ventaja es que, si el sistema de redes neuronales es entrenado adecuadamente, considerando las variaciones e interacciones de todos los parámetros que afectan a la formación de inquemados, este sistema permitiría interpolar dentro del rango de variación para el que ha sido entrenado, y por lo tanto, obtener un sistema predictivo completo del rango de operación de la planta. De esta forma, el sistema de predicción de inquemados consigue agrupar en una misma estructura, la fluidodinámica y transferencia de calor de los códigos CFD, la cinética

química de los modelos avanzados de combustión, y la velocidad de cálculo y capacidad de interpolación de las redes neuronales.

La obtención de los datos para llevar a cabo el desarrollo, entrenamiento y validación del sistema de redes neuronales, se realizó por medio de un conjunto de 72 simulaciones CFD (CFX-4.4), cubriendo el rango de operación de la central de estudio. El plan de simulaciones, de nuevo basado en el análisis factorial de experimentos, incluyó al menos tres niveles de los factores más relevantes en la formación de inquemados en el hogar (nivel de exceso de oxígeno, relación aire primario/carbón, tamaño de las partículas, desigualdades en el reparto aire/combustible entre quemadores), diferenciando entre condiciones de plena carga y carga parcial.

Para el desarrollo del sistema de redes neuronales se empleó el código comercial MatLab Neural Network Toolbox 4.0. El sistema de redes neuronales aprende, reproduce e interpola los resultados (en forma de perfiles de temperatura y presión parcial de oxígeno, y tiempo de residencia de las partículas) obtenidos con el código CFD para unas condiciones determinadas. Los resultados obtenidos permitieron concluir que el sistema de redes neuronales, llamado modelo de condiciones locales de combustión, reproduce con gran precisión y detalle los resultados generados con el código CFD. Además, gracias a la capacidad de generalización de las redes neuronales, es posible encontrar soluciones para otras condiciones distintas a las del entrenamiento, siempre que las variables de estudio se encuentren dentro del rango de variación utilizado durante el entrenamiento.

En cuanto al modelo de combustión, en primer lugar, se llevó a cabo una revisión de la combustión de partículas de carbón, atendiendo a las etapas que la caracterizan (devolatilización, combustión de productos volátiles, y oxidación del residuo carbonoso), los mecanismos que intervienen, y los modelos más característicos disponibles en la bibliografía. A partir de aquí, se construyó un modelo de combustión, basado en las reacciones que ocurren en la superficie de la partícula, es decir, en la devolatilización y la oxidación del residuo carbonoso. Para el proceso de devolatilización se optó por la utilización del modelo FG-DVC. Para la oxidación del residuo carbonoso, se desarrolló y programó en Fortran, un modelo intrínseco, que basado en el modelo CBK8 (Sun y Hurt, 2000), incluyera los efectos de la variación de la estructura porosa de la partícula, efectos de desactivación térmica, efectos de la materia mineral y efectos debidos a la composición maceral del carbón. La validación del modelo se llevó a cabo para nueve escenarios de operación de la central térmica de estudio, comparando satisfactoriamente los resultados obtenidos en la planta con los obtenidos con el modelo de combustión.

Finalmente, la construcción del sistema de predicción de inquemados (SPI) a partir de los elementos anteriores (CFD+Redes neuronales y modelo avanzado de combustión), supuso la culminación del objetivo central de esta tesis; es decir, desarrollar un sistema predictivo de la combustión, que proporcionara en tiempo real, una medida de los inquemados en cenizas para unas condiciones de combustión determinadas.

La validación del sistema de predicción se llevó a cabo con datos de planta recogidos en la central térmica de estudio durante tres meses de pruebas (Enero – Marzo 2005), en los que el grupo de estudio de 63 MWe (a carga nominal) fue alimentado independientemente con tres carbones de distinta procedencia cubriendo el rango habitual de operación de la planta. Los resultados se compararon frente a los datos recogidos en la planta, llevándose a cabo un estudio estadístico para la validación de los mismos, y para la determinación de la capacidad de predicción del sistema. La comparación de las dos distribuciones de datos (valores recogidos en la central y resultados proporcionados por el sistema de predicción) mostró una correspondencia excelente entre ambas muestras, tanto en la distribución de la probabilidad en todo el rango de estudio, como en la media y desviación típica. Mientras que el error máximo obtenido en el grado de combustión alcanzado, se situó para una observación puntual en 0.82 %, y para la media de un conjunto de observaciones aleatorias en 0.15 %. Finalmente, se estableció la comparación con un sistema predictivo basado en un modelo zonal, obteniéndose una mejora sustancial en la precisión global del método desarrollado en este trabajo de tesis.

APORTACIONES

Capítulo 2

Se lleva a cabo una revisión de cada una de las etapas del proceso de combustión de una partícula de carbón (devolatilización, combustión homogénea de productos volátiles, oxidación heterogénea del residuo carbonoso), explicando los mecanismos subyacentes, y los modelos más característicos disponibles en la bibliografía. Evidentemente, resulta muy prolijo hacer una recopilación completa de todos los modelos y submodelos que han sido publicados para describir cada una de las fases del proceso de combustión. Por ello, se ha intentado presentar los modelos más clásicos, para dar una visión general del problema, junto a otros modelos detallados que profundizan en aspectos más particulares de la combustión del carbón pulverizado. El criterio de selección entre los distintos modelos ha respondido a tres premisas básicas:

- La generalidad de su aplicación dentro de las condiciones típicas en las que se desarrolla la combustión del carbón pulverizado.
- Su grado de aceptación dentro de la comunidad científica.
- Que sirviera de referencia y punto de partida para el modelo de combustión desarrollado en este trabajo de tesis en el Capítulo 6.

Capítulo 3

Se lleva a cabo la descripción de las características de los códigos CFD para resolver un problema de combustión en una caldera de potencia de carbón pulverizado, particularizando la exposición para el paquete comercial utilizado en la tesis (CFX 4.4). Para ello, el capítulo se ha dividido en una serie de subcapítulos que abarcan:

- La descripción del método de resolución numérica de los volúmenes finitos: discretización del dominio y de las ecuaciones de transporte que gobiernan el problema.
- La descripción de los modelos matemáticos involucrados en el problema (turbulencia, flujo multifásico, combustión homogénea, combustión heterogénea y radiación).
- La descripción de las condiciones de contorno del problema.
- La validación del método numérico, describiendo todas las incertidumbres asociadas al método numérico de discretización de las ecuaciones, y las asociadas con el modelado de los procesos físicos, mostrando como estimar cada una de estas contribuciones.

Capítulo 4

Se ha realizado una revisión bibliográfica de un gran número de trabajos, que señalan la estequiometría de la reacción y la granulometría del carbón como los factores más influyentes en la eficiencia de la combustión. Sin embargo, la mayoría de estos estudios se realizan en quemadores experimentales, donde por las propias características de la instalación y de los experimentos, otros factores como la distribución de aire primario y secundario, el índice de rotación del aire secundario, o las asimetrías de caudales existentes entre quemadores, quedan en un segundo plano, o simplemente, no es posible estudiarlas. Por esta razón, en este estudio se han utilizado herramientas CFD, que no tienen este tipo de limitaciones, incluyendo todos los parámetros que pueden afectar a la combustión, y realizando una serie de simulaciones para analizar su influencia. En este sentido, se han realizado dos estudios de sensibilidad de los factores más destacados en la formación de inquemados (el nivel de exceso de oxígeno, la relación aire primario-carbón, la distribución granulométrica, el índice de rotación del aire secundario y la asimetrías existentes entre los caudales de los quemadores). El primer estudio analiza la influencia individual de cada uno de los factores. Los resultados del estudio

muestran, como era previsible, que el valor de exceso de oxígeno es el factor más determinante en la formación de inquemados, especialmente con niveles de exceso de oxígeno por debajo del 4 %. Sin embargo, se obtiene un primer resultado interesante al encontrar, que el resto de factores, tales como las asimetrías de caudales entre quemadores, el tamaño de partícula, y la relación de caudal de aire primario y carbón, pueden ser comparables a la influencia del exceso de oxígeno cuando éste toma valores por encima del 4 %. El segundo estudio atiende a la necesidad de aproximarnos más a las condiciones reales que se dan en una planta, donde todos estos efectos ocurren al mismo tiempo, y no de una manera aislada. Por lo tanto, no es fácil diferenciar las contribuciones individuales y las interacciones entre ellos. Para reducir el número de simulaciones necesarias para completar el estudio, se ha recurrido al uso de técnicas estadísticas de análisis factorial. Los resultados más significativos del segundo estudio vienen a reafirmar lo que se empezaba a intuir con el primer estudio; es decir, que factores que individualmente no tienen una gran relevancia, pueden resultar importantes en la determinación global de inquemados cuando se dan las condiciones adecuadas o interactúan con otros factores.

A partir de los resultados obtenidos en los estudios de sensibilidad de parámetros, es posible establecer unas bases de actuación que permitan al operario de una central identificar las posibles causas de un aumento en los inquemados y buscar las condiciones más propicias para disminuirlo.

Capítulo 5

Se ha desarrollado un sistema de redes neuronales que aprende, reproduce e interpola los resultados (en forma de perfiles de temperatura y presión parcial de oxígeno, y tiempo de residencia de las partículas) obtenidos con el código CFD para unas condiciones determinadas. La elaboración del sistema de redes neuronales se ha dividido en tres fases (diseño de la estructura, entrenamiento de la red, y validación), estableciendo un proceso iterativo de revisión entre ellas, que termina cuando se alcanza una red definitiva que responde a las premisas para la que ha sido diseñada. Para ello, se han realizado un conjunto de simulaciones CFD cubriendo el rango completo de operación de la planta. La elección de las condiciones de las simulaciones, se ha realizado en base a un nuevo diseño factorial de experimentos. A partir de sus resultados se ha desarrollado, entrenado y validado el sistema de redes neuronales. Los resultados obtenidos permiten concluir que el sistema de redes neuronales, llamado modelo de condiciones locales de combustión, reproduce con gran precisión y detalle los resultados que generaría el código CFD. Además, gracias a la capacidad de generalización de las redes neuronales, es posible encontrar soluciones para otras condiciones distintas a las del entrenamiento, siempre que las variables de estudio se encuentren dentro del rango de variación utilizado durante el entrenamiento.

Capítulo 6

Se ha desarrollado una metodología que permite combinar las ventajas de los códigos CFD (fluidodinámica detallada) y de los modelos avanzados de combustión (cinética de combustión detallada) para mejorar las predicciones de la eficiencia de la combustión en centrales térmicas. Esta metodología consiste en utilizar las soluciones del código CFD, que describen la historia de cada una de las partículas simuladas en forma de perfiles de oxígeno y temperatura, para a continuación, introducir estos perfiles junto con las propiedades del combustible, como entradas de un modelo de combustión avanzado.

Como la descripción del código CFD, y la modelización de la central de estudio se llevan a cabo en los Capítulos 3 y 4; este capítulo se centra en la descripción del modelo de combustión y en su validación. El modelo de combustión se divide en dos subrutinas autónomas correspondientes a las etapas de devolatilización y oxidación del residuo carbonoso. Para la etapa de devolatilización, después de estudiar y comparar las características de varios modelos, se ha optado por utilizar el código FG-DVC, ya que reproduce con mayor precisión el proceso de devolatilización en las condiciones características de una caldera de combustión convencional. Para la oxidación del residuo carbonoso se ha desarrollado y programado en Fortran, un modelo intrínseco avanzado que permite mejorar la predicción de la combustión de otros modelos convencionales. Para ello, este modelo incorpora subrutinas que incluyen los efectos de la variación de la estructura porosa, el efecto de la disminución de la reactividad del residuo carbonoso, el efecto de la ceniza en la difusión del oxidante y la influencia de la composición maceral en la reactividad del carbón. Finalmente, la validación del modelo completo se ha llevado a cabo para nueve escenarios de operación de la central térmica de estudio Lamarmora (ASM Brescia). Los resultados obtenidos con el modelo son muy similares a los recogidos en la planta, tanto a nivel cualitativo, describiendo correctamente las tendencias generales, como a nivel cuantitativo, presentando unos valores parecidos a los experimentales. Con todo ello, se puede concluir que la combinación de los códigos CFD y de los modelos avanzados de combustión, ha permitido desarrollar un sistema predictivo de combustión de gran sensibilidad y precisión.

Capítulo 7

Se ha abordado la culminación del objetivo principal de la tesis, consistente en el desarrollo de un sistema de predicción de inquemados, que proporciona en tiempo real, una medida del contenido de carbono inquemado en cenizas para unas condiciones de combustión determinadas.

El sistema final está formado por un modelo de condiciones locales de combustión (Capítulo 5) y un modelo de combustión avanzado (Capítulo 6). El primero proporciona al sistema la información de los perfiles de temperatura y presión parcial de oxígeno, que encuentran un número representativo de partículas en su trayectoria por el hogar. Este submodelo, basado en un sistema de redes neuronales, reproduce para el rango de operación de la planta de estudio, los valores calculados para estos perfiles por medio de simulaciones CFD. La ventaja de este submodelo es que permite, además, obtener estos perfiles bajo cualquier condición de la planta dentro del rango definido en el entrenamiento. Por último, requiere un tiempo de cálculo despreciable comparado con el empleado para llevar a cabo una simulación CFD completa del hogar. El otro submodelo, consiste en el propio modelo de combustión dividido en dos subrutinas correspondientes a la devolatilización de la partícula (FG-DVC) y a la oxidación del residuo carbonoso (modelo intrínseco que incorpora los fenómenos de desactivación térmica del char, variación de la estructura porosa del char durante la combustión, efecto de la ceniza en la difusión del oxidante y la influencia de la composición maceral en la reactividad del char).

La validación del sistema de predicción se ha llevado a cabo con datos de planta recogidos en la central térmica de estudio durante tres meses de pruebas (Enero – Marzo 2005) en los que el grupo de estudio de 63 MWe (a carga nominal) fue alimentado independientemente con tres carbones de distinta procedencia cubriendo el rango habitual de operación de la planta. Los resultados han sido presentados frente a los datos recogidos en la planta, llevándose a cabo un estudio estadístico para la validación de los mismos y para la determinación de la capacidad de predicción del sistema. La comparación de las dos distribuciones de datos (valores recogidos en la central y resultados proporcionados por el sistema de predicción) ha manifestado una correspondencia excelente entre ambas muestras, tanto en la distribución de la probabilidad en todo el rango de estudio, como en la media y desviación típica. Así, el error máximo en la predicción del grado de combustión alcanzado se sitúa en 0.82 % para una observación puntual, y en 0.15 % para la media de un conjunto de observaciones aleatorias. Finalmente, se establece la comparación con un sistema predictivo basado en un modelo zonal, obteniéndose una mejora sustancial en la precisión global del método desarrollado en este trabajo de tesis.

Finalmente, se presentan de forma esquemática algunas de las ventajas que proporciona este sistema de predicción:

- Incorpora una descripción detallada de los fenómenos de transporte del problema, gracias al sistema de redes neuronales entrenado con simulaciones CFD que cubren el rango de operación de la planta.
- La propia característica del sistema de redes neuronales permite la interpolación en otras condiciones de operación distintas a las del entrenamiento.

- El modelo de combustión avanzado describe de forma detallada tanto la etapa de devolatilización como la etapa de oxidación del residuo carbono.
- El número de entradas del sistema es muy reducido y están disponibles en cualquier central térmica.
- El tiempo de cálculo, inferior a un minuto, permite su utilización en tiempo real en una central térmica.
- La precisión del sistema es suficiente buena para todo el rango de operación de la planta, y mejora los resultados obtenidos por otros sistemas de predicción de inquemados basados en aproximaciones zonales.

PERSPECTIVAS

Las perspectivas que se abren tras la realización de esta tesis doctoral se pueden clasificar en dos categorías: mejoras en el modelo y mejoras en la interacción con el modelo.

A. Mejoras en el modelo

En el primer grupo se engloban todos los desarrollos que se pueden considerar en un modelo futuro, con el objeto de mejorar las predicciones de la combustión. En muchas ocasiones, estas mejoras suponen una mayor complejidad del modelo, y por lo tanto, una penalización en el tiempo de cálculo del sistema. Así que, en cada caso particular, dependiendo de la aplicación que se le quiera dar al modelo y del nivel de detalle requerido en las soluciones, el diseñador deberá sopesar ambas consideraciones, precisión y tiempo de cálculo.

Por continuidad con la línea descriptiva de la tesis y con la estructura del propio sistema, a continuación, se especifican estas mejoras agrupadas en los bloques que componen el sistema de predicción de inquemados.

1. Mejoras en el modelo CFD

Se apuntan varias sugerencias para mejorar la precisión de los resultados. En este caso, adquiere especial importancia el aumento del tiempo de cálculo al introducir estas mejoras.

- Geometría: La introducción de los sobrecalentadores radiantes en la geometría daría una descripción más precisa del movimiento del flujo en la salida del hogar.
- Mallado: Reduciendo el tamaño de malla, se podrían encontrar valores más precisos de las propiedades locales del flujo, especialmente en la zona cercana a los quemadores donde

tienen lugar los mayores gradientes de temperaturas, velocidades y concentración de especies. No obstante, el mallado elegido en las simulaciones, asegura un error inferior al 0.1 % en la variable de control (grado de combustión) calculada por el propio código (Capítulo 4, Sección 4.2.4).

- Modelo de transporte de partículas: Si se requiere una resolución más detallada, se puede incluir la dispersión turbulenta de las partículas, como resultado de la interacción de éstas y los torbellinos característicos del flujo. Para ello, sería necesario modelar un número mayor de partículas (al menos un orden mayor que en el caso en que no se considera esta dispersión turbulenta), con el correspondiente aumento del coste computacional. Algunos autores también apuntan que al incluir este efecto, la convergencia es mucho más difícil de alcanzar (Chen y Shuen, 1993).
- Modelo de Radiación: Dado que la absorción y la emisión radiativa de un gas es función de la temperatura y la presión parcial del gas en la mezcla, la utilización de un modelo de gases grises representaría mejor el comportamiento real del gas.

2. Mejoras en el sistema de redes neuronales

La mejora del sistema de redes neuronales se puede evaluar desde dos puntos de vista: mayor precisión o mayor generalización. Ambas metas están reñidas, de manera que para el mismo conjunto de datos, obtener una mayor precisión en los resultados supone una disminución en la capacidad de generalización de la red, y viceversa. De hecho, como se describe en los Capítulos 5 y 7, este ha sido uno de los aspectos más controvertido de la tesis, y donde más esfuerzos se han destinado en el desarrollo del sistema de redes neuronales. Especialmente difícil, es encontrar un ajuste adecuado en los casos de carga parcial, ya que la estratificación de las condiciones en el hogar es mucho mayor que en condiciones de carga nominal, donde existe una mayor uniformidad en los perfiles de temperatura y de presión parcial de oxígeno.

Por ello, una solución para mejorar ambos aspectos – precisión y generalización –, consiste en incrementar el número de simulaciones CFD que sirven los datos de entrenamiento para las redes. De esta forma, se podría aumentar el tamaño de la red sin que se llegara al sobreentrenamiento.

Otra solución alternativa, consiste en elaborar un diseño del sistema de redes más complejo. Esta es la solución que se ha tomado en esta tesis, considerando redes diferenciadas para las filas superiores e inferiores, e incluyendo la posición inicial de la partícula en el quemador. De igual manera, se podría pensar en un sistema todavía más complejo que fuera capaz de

introducir más entradas al problema, aumentando y complicando la estructura interna de la red, sin necesidad de aumentar el número de simulaciones CFD.

3. Mejoras en el modelo de combustión avanzado

Para apuntar los posibles avances del modelo de combustión se distingue entre mejoras en su aplicación y mejoras en su desarrollo.

Las primeras vendrían determinadas por la mejora en la información cinética y estructural del carbón en los modelos. El proceso de devolatilización en el modelo FG-DVC se ha descrito a partir de los datos cinéticos extrapolados de una base de datos que incluye el programa. Del mismo modo, las constantes cinéticas del proceso de oxidación del char, las características estructurales (tamaño medio de poro, porosidad crítica, espesor de la capa de ceniza, etc.), las características petrográficas, y la información sobre el comportamiento particular a la combustión del combustible de estudio (hinchamiento, fragmentación, etc.), se han obtenido de estudios previos, recomendaciones de otros autores y bases de datos.

Por lo tanto, una mejora en la aplicación de los modelos se puede conseguir ajustando empíricamente los parámetros del modelo: determinación de la devolatilización a alta temperatura (liberación y parámetros cinéticos), análisis termogravimétricos, test de reactividad en calderas verticales DTF, análisis de las cenizas, determinación de la composición maceral del residuo carbonoso, determinación de la porosidad, etc.

En cuanto a las mejoras en el desarrollo, el modelo de combustión de partícula desarrollado en esta tesis es uno de los más completos que se pueden encontrar en la bibliografía. Sin embargo, una de las líneas de investigación más prometedoras en el campo de la combustión, va en la dirección de desarrollar modelos intrínsecos basados en mecanismos de reacción más complejos que los mecanismos de ley potencial o de la ley de Langmuir-Hinshelwood. Un ejemplo de este tipo de mecanismos complejos, es el mecanismo de cinética semiglobal de tres pasos descrito por Hurt y Calo (2001), detallado en el Capítulo 2 (Sección 2.3.1).

B. Mejoras en la interacción con el modelo

En este grupo se incluyen las mejoras relacionadas con el entorno informático en el que se desarrolla el programa. Actualmente, el núcleo del sistema de predicción de inquemados se ha programado en Fortran dividido en dos bloques. El primero, contiene la descripción del sistema de redes neuronales, y se encarga de generar, en un archivo solución, los perfiles de temperatura, presión parcial de oxígeno y tiempo de residencia de las partículas. El segundo bloque contiene el modelo de combustión, que se aplica sobre el archivo anterior. En general, la

estructura del programa es muy intuitiva, y se facilita su aplicación a través de ventanas que solicitan al usuario los datos que necesitan ser introducidos. Sin embargo, para ponerlo en funcionamiento en una central, y facilitar más aún, su utilización a cualquier operario, se debería incorporar el sistema dentro de un entorno de ventanas más familiar para el usuario.

Anexo

PUBLICACIONES

P.1

**“Numerical prediction of unburned carbon levels in
large pulverized coal boilers”**

Fuel 84 (2005) 2364-2371

J. Pallarés, I. Arauzo, L.I. Díez

Numerical prediction of unburned carbon levels in large pulverized coal utility boilers

Javier Pallarés*, Inmaculada Arauzo¹, Luis Ignacio Díez²

Centre of Research for Energy Resources and Consumptions (CIRCE), Thermal Division, University of Zaragoza, María de Luna 3, 50018 Zaragoza, Spain

Received 6 April 2004; received in revised form 18 March 2005; accepted 10 May 2005

Available online 13 June 2005

Abstract

Advanced combustion kinetics models are of widespread use to predict carbon losses from coal combustion. However, those models cannot completely capture the complexity of the real phenomena affecting the fluid flow in a full-scale utility boiler, such as burner-to-burner interactions and bottom hopper vortices or reversed-flows, and usually underpredict carbon in ash values. The use of CFD codes offers a more detailed treatment of the fluid dynamics involved in the boiler. However, most of them do not incorporate advanced kinetics submodels for char oxidation. In this paper, rank-dependent correlations and ash inhibition submodel have been coupled to a commercial CFD code, significantly improving carbon in ash predictions. Results from the simulation of the ASM Brescia power plant (Italy) for three different South-American coals are compared against plant laboratory values, using either the popular single film combustion model or the modified combustion model discussed in this paper.

© 2005 Elsevier Ltd. All rights reserved.

Keywords: Unburned coal; Coal combustion; CFD

1. Introduction

In the last decades, pulverized coal-fired steam generators have been progressively affected by more restrictive requirements for particulate and gas emissions. Thus, low NO_x techniques and efficient gas cleaning systems have been implemented to meet the environmental legislations. However, some drawbacks may arise when emission reduction techniques are applied. Unburned carbon levels increase when air excess decreases, limiting the reduction in NO_x formation that can be achieved by primary techniques, i.e. by combustion modifications. Unburned char particles that leave the furnace represent a heat loss in the combustion process, reducing the thermal efficiency of the unit. Moreover, they increase heat exchangers erosion, may reduce the efficiency of dust separation/collection equipment and may impede the utilization of fly ash as

a replacement for Portland cement or additive to concrete [1]. Under this perspective, power plant managers are interested in strictly controlling the levels of unburned carbon in ash.

The main factors that influence unburned carbon loss may be classified into three categories: coal inherent characteristics, coal milling and drying process and, finally, combustion conditions themselves. The first category includes pulverized coal and char properties such as heating value, char yield on pyrolysis, char internal structure, char reactivity, ash content and composition. The second category accounts for coal preparation and grinding manoeuvres, affecting particle size distribution and moisture remaining in the pulverized coal entering the furnace. Finally, the third category comprises all the operating strategies affecting the boiler performance, as for the selection of the rows of burners in service, air excess, air flow distributions and position of burner vanes. The selection and combination of these factors determine fuel and air mixing, combustion temperatures and residence times, which ultimately condition the combustion process of the coal particle [1].

The combustion behaviour of pulverized coal can be investigated by means of pilot-scale experiments,

* Corresponding author. Tel.: +34 976 762 562; fax: +34 976 732 078.

E-mail address: jpallare@unizar.es (J. Pallarés).

¹ Tel.: +34 976 761 863; fax: +34 976 732 078.

² Tel.: +34 976 762 564; fax: +34 976 732 078.

Nomenclature

A_a	pre-exponential factor for oxidation ($\text{kg C/m}^2 \text{ s Pa}^{1/2}$)	M	moisture content in coal as received (%)
C	ultimate analysis carbon content in coal as received (%)	P_g	oxygen partial pressure at particle surface (Pa)
d_c	diameter of carbon-rich core (μm)	P	furnace pressure (Pa)
d_p	diameter of the coal particle (μm)	q	burning rate ($\text{kg C/m}^2 \text{ s}$)
D_o	molecular diffusivity of O_2 in N_2 (m^2/s)	R	gas universal constant (J/mol K)
E_a	activation energy for oxidation (J/mol)	Sh	Sherwood number for mass transfer to a spherical particle
k_c	chemical reaction rate coefficient ($\text{kg/m}^2 \text{ Pa s}$)	T_m	average temperature of particle surface and gas free stream (K)
$k_{c,1750}$	chemical reaction rate coefficient at a particle temperature of 1750 K ($\text{kg/m}^2 \text{ Pa s}$)	Z	ash content in coal as received (%)
k_d	diffusion rate coefficient ($\text{kg/m}^2 \text{ Pa s}$)	δ	thickness of the ash film (μm)
		θ_{af}	ash film porosity

mathematical combustion models and CFD codes. Pilot-scale testing suffers from two basic shortcomings. Firstly, the physical processes involved in utility boilers are not completely scalable and, in consequence, small-scale experiments can be only considered as approximations. On the other hand, an experimental rig involves very high investment and maintenance costs.

An alternative method relies on using a detailed mathematical combustion model. The basis of this approach is to separate the influence of fuel properties and combustion conditions on coal burnout behaviour. The fuel-related empirical parameters in the model have to be fitted from laboratory experiments. These data are then used to predict burnout behaviour under full-scale furnace conditions [2]. Coal combustion models are made up of a devolatilization submodel and a char oxidation submodel. Traditional devolatilization submodels like single reaction model [3] or two competing reactions models [4,5] are being progressively substituted by commercial codes that predict major species yield and local concentrations [6–8]. Single film char oxidation models [9,10] have led to other advanced kinetics models, which account for variations in reactivity during combustion and internal pore structure [8,11–14]. In general, the benefit of using detailed mathematical combustion models is that results can be obtained in a quick and non-expensive way for boilers of very different arrangements and operating conditions.

However, those models cannot completely capture the complexity of the physical and chemical phenomena that occur in an industrial furnace significantly disturbing the fluid flow and the turbulent mixing, resulting in a severe underprediction of the carbon in ash levels. Dealing with these aspects, the use of computational fluid dynamics (CFD) models constitutes a powerful tool to study and characterize some complex processes that take place in the boiler, providing a great amount of precise numerical values for velocity, temperature and concentration fields, irradiation profiles, heat transfer distribution and pollutants formation.

In spite of the fact, most of the commercial CFD codes still use single film char oxidation submodels, and none of the advanced combustion kinetics models outlined above have been still fully coupled to a commercial CFD code.

The aim of this paper is to evaluate the capability of prediction of carbon in ash levels by coupling elements of the Hurt's CBK model [11] to a commercial CFD code. Comparisons between conventional single film model and a modified combustion model predictions are discussed in the paper, for a specific case-study unit (Brescia ASM power plant, Italy) under different conditions for coal supply and boiler operation.

2. Experimental data

ASM Brescia power plant generates a total output of 139 MWe and consists of three front-fired units, with natural circulation and single reheat. The case-study unit is 63 MWe gross load, equipped with four burners arranged in two rows of two burners each. A vertical rod mill feeds the two burners of the same row.

Operation data gathering was carried out at the plant during the year 2003, when three coals from different provenance were burned separately (Guasare, Unicoal and Saif coals). For the current work, one representative operating scenario for each coal type has been inferred from plant data to perform the CFD simulations. The three scenarios, summarised in Table 1, correspond to nominal load conditions, when higher carbon in ash levels are typically encountered. Albeit slight differences arise concerning fuel flow rates, mean particles size and excess air, discrepant figures are obtained for unburned carbon in ash levels, as discussed later. Proximate and ultimate analysis and gross calorific values for the involved coals are shown in Table 2, as provided by the plant laboratory. The three coals fall within the category of high volatile bituminous coals, according to the ASTM classification standards.

Table 1
Nominal-load operating scenarios from the case-study power plant

Operating conditions	Guasare	Unicoal	Saif
Load (%)	100	100	100
Primary air flow rate (Nm ³ /h)	20,000	20,000	20,000
Temperature of primary air (°C)	80	80	80
Secondary air flow rate (Nm ³ /h)	220,000	220,000	220,000
Secondary air temperature (°C)	243	243	243
Milling load (t/h)	25.10	27.06	25.78
Mean particle diameter (μm)	42.63	49.77	47.82
Main steam temperature (°C)	510	510	510
Gas temperature at boiler exit (°C)	310	310	310
Mean O ₂ at boiler exit (%)	2.82	3.49	3.53

Table 2
Composition and heating value for the case-study coals

	Guasare	Unicoal	Saif
<i>Proximate analysis (as received)</i>			
Moisture (%)	8.45	11.03	7.69
Ash (%)	6.96	4.32	6.19
Volatile (%)	34.16	36.85	35.30
Fixed carbon (%)	50.43	47.80	50.82
<i>Ultimate analysis (as received)</i>			
Carbon (%)	70.24	66.94	70.53
Hydrogen (%)	4.68	4.77	4.64
Nitrogen (%)	1.32	1.34	1.41
Oxygen (%)	7.68	11.10	8.84
Sulphur (%)	0.66	0.50	0.70
<i>Heating value (as received)</i>			
Gross calorific value (kcal/kg)	7166	6638	6881

3. CFD modelling of the case-study boiler

A commercial CFD application, CFX 4.4 developed by AEA Technology, has been chosen to perform the simulations [15].

3.1. Geometry description

Full boiler geometry has been modelled up to the plenum to make easy the definition of an appropriate boundary condition at the outlet section and allowing the inclusion of the radiant superheater geometry in a further development.

The selected mesh is structured and made up of 130,000 square elements. Its size is refined in the nearby of the burners belt to better characterize the major gradients, and it is progressively increased in size up to the top of the furnace. A detail of the burners grid structure is displayed in Fig. 1, where the square elements in the middle are considered as solid walls, simulating the zone where the ignitors and flame detectors are located; the three internal circular rings simulate the inlet section for coal and primary air, and the other three external circular rings simulate the inlet section for secondary and tertiary air.

3.2. Mathematical models

The numerical resolution of the governing equations implies the modelling of all processes that take place in the furnace: turbulent flow, coal combustion and mass transfer, solid particle transport and radiative and convective heat transfer.

The gas flow is modelled, under the Eulerian assumption, solving the steady-state Reynolds average Navier Stokes equations (RANS) along the computational domain. Since the flow is turbulent, the widely used standard $k-\epsilon$ model of Launder and Spalding [16] is coupled to close the turbulence problem. The flow is assumed to behave similarly to incompressible flow, making the density only dependent on temperature through a reference pressure $\rho = \rho(T, P_{\text{ref}})$, a reasonable assumption for problems with Mach number under 0.3.

Coal combustion modelling comprises volatiles yield and homogeneous combustion, and char heterogeneous oxidation. Devolatilization rate is modelled using the single

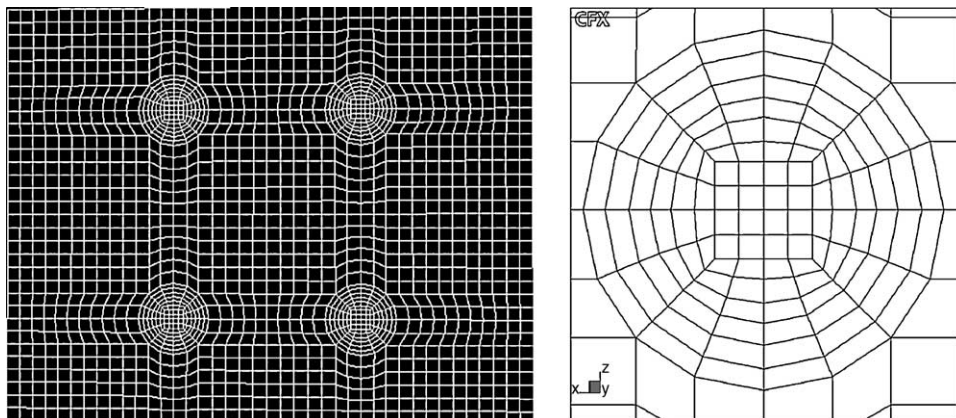


Fig. 1. Detail of mesh structure at the burner belt region.

step model of Badzioch and Hawksley [3], which states that the rate of production of volatile gases is given by a first-order reaction and the rate constant is expressed in an Arrhenius form. The homogeneous combustion of volatiles released from the particle are modelled using the mixed-is-burnt model, see for instance [17], which assumes infinitely fast chemistry. The instantaneous mass fractions are given in terms of the instantaneous mixture fraction. The mean mass fraction of fuel, oxidant and products are obtained from the mean and variance of the mixture fraction assuming the beta probability density function, β -PDF.

The process of char oxidation is modelled using the popular single film char oxidation model developed by Field et al. [9] coupling both rank-dependent empirical correlations [18] and a specific submodel describing ash inhibition at the late stages of combustion [11]. As a matter of fact, the inclusion in this enlarged combustion model of rank dependant correlations for the global pre-exponential factor, A_a , and for the global activation energy, E_a , establishes a direct dependence between char reactivity and coal properties. These empirical correlations are suitable for the prediction of coal burning under pulverized coal conditions in utility boilers: gas temperatures over 1500 K, particle diameters in the range from 75 to 200 μm and oxygen partial pressures over 0.03 bar [18]. Furthermore, the ash inhibition submodel introduces an additional diffusion resistance to account for the inhibitory effect of ash on char oxidation, introducing two new parameters: the critical ash porosity and the minimum ash film thickness [11]. All the expressions used in the char oxidation model are summarized in Table 3: coal consumption rate q (first row of the table), oxygen diffusion rate k_d (second and third row) and chemical reaction rate k_c (two last rows).

The coal combustion model has to be necessarily combined with a particle transport calculation. A Lagrangian approach has been chosen, considering the influence of a diluted particle phase on the fluid flow, two-way coupling [19]. Interactions between particles have been neglected. The total mass flow of particles has been modelled by tracking a number of 2000 trajectories, assuming that each simulated particle represents a sample of the real number of particles.

Table 3
Summary of models used for coal modelling

Global reaction [9]	$q = \frac{p^0.5}{\frac{1}{k_d} + \frac{1}{k_c}}$
Diffusion rate constant [11]	$k_d = \frac{\text{Sh}D_c d_p \theta_{\text{af}}^{2.5}}{RT_m (\text{Sh}d_c + \theta_{\text{af}}^{2.5} d_c^2)}$
Diffusion coefficient, Jensen and Mitchell (1993) [20]	$D_o = 1543 \times 10^{-4} T_m^{1.67}$
Reaction rate constant	$k_c = A_a e^{(-E_a/RT_p)}$
Empirical kinetics [18]	$E_a = 4186.9(-5.94 + 35.5 \frac{C}{1-Z-M})$ $A_a = \exp(\ln(k_{c,1750 \text{ K}}) + \frac{E_a}{1750R})$ $\frac{10}{101325^{1/2}}$ $\ln(k_{c,1750}) = 2.8 - 7.58 \frac{C}{1-Z-M}$

Table 4
Summary of models used for CFD simulation of furnace performance

Phenomenon	Model	Reference
Turbulence	Standard $k-\epsilon$	Launder and Spalding [16]
Devolatilization	Single-step devolatilization	Badzioch and Hawksley [3]
Volatiles combustion	Mixed is burnt	Wartnatz et al. [17]
Char oxidation	Conventional single film+	Field et al. [9]
	Rank-dependant correlations+	Hurt and Mitchel [18]
	Ash inhibition (CBK)	Hurt et al. [11]
Radiation	Discrete transfer	Lockwood and Shah [20]
Particles tracking	Lagrangian approach (two-way coupling)	

The thermal radiation in the furnace is the dominant heat transfer mechanism due to the presence of a mixture of participative gases and particles at high temperature. The radiative heat transfer has been modelled using the Discrete Transfer method [21], which solves a transport equation for the radiation intensity along paths between two boundary walls. For simplicity, a grey gas model is considered to evaluate the properties of the gas phase, considering a constant value for the absorption coefficient over the whole wavelength spectrum. The influence of the particles, also participating in the radiative heat transfer, is accounted by including a specific heat source in the energy conservation equation. Summing up, Table 4 shows the combination of models used for performing the CFD simulation of the case-study boiler.

3.3. Validation of furnace modelling

Besides the main validation of the target prediction of this paper (unburned carbon in ash level), which is discussed in Section 4, additional verifications of furnace simulation correctness are highly desirable. Unfortunately, available instrumentation in the case-study boiler does not allow a detailed validation, just limiting it to the prediction of the oxygen content in flue gases. In fact, this is a usual situation in large-scale utility boilers, which are conventionally instrumented for control and safe operation purposes, but not for undertaking accurate thermal calculations. Moreover, the aggressive environment of high temperatures and ash particles in the furnace make unfeasible the insertion of

Table 5
Experimental value against numerical prediction for mean oxygen content in flue gases for the three simulated scenarios

	Guasare	Saif	Unicoal
Mean %O ₂ plant value	2.82	3.53	3.49
Mean %O ₂ CFD prediction	3.05	3.35	3.25

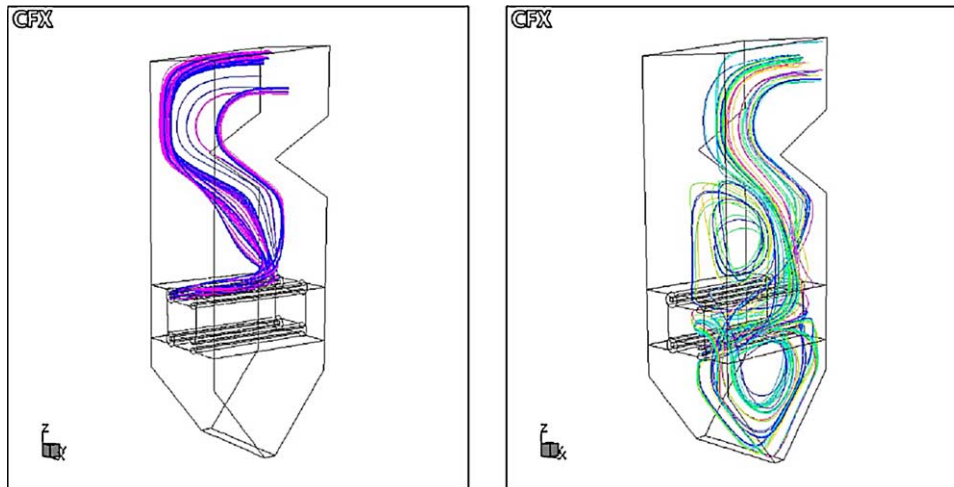


Fig. 2. Predicted particle trajectories tracked from different inlets.

long-term durable measurement probes in most cases, restricting the on-line available information to very few gas temperature and oxygen samples at the cold exit of the boiler convective section [22,23].

Numerical predictions for the mean values of oxygen content in flue gases show good agreement with available plant measurements, for the three tested full-load scenarios, as shown in Table 5. These figures, along with the predictions of unburned carbon hereinafter discussed, permit to conclude that the simulation of coal combustion is reasonable for the variety of coal feedstock tested.

4. Results and discussion

Six simulations have been carried out concerning the unburned carbon prediction, two for each coal type: one using the conventional single film char oxidation model and the other one introducing the modifications to the char oxidation model already explained in Section 3. A complete simulation, including fluid flow, coal combustion, heat transfer and particle tracking, has been performed for each case.

Three large recirculation loops can be typically distinguished in large front-fired furnaces, which largely affect the particles trajectories and modify the coal burnout behaviour. This effect is stronger in the lower burner level (as shown in Fig. 2 for the case-study boiler), where most of the particles are captured by the reversed-flow zone in the bottom hopper region. In addition, interactions between the inlet flows from neighbour burners and interactions with the confining walls are significant enough to noticeably distort the coal particles trajectories.

The near burner region, see flame prediction in Fig. 3, is highly relevant because volatile matter combustion is completed in this zone and the recirculating combustion products provide the heat release needed to ensure flame stability. Downstream of this core zone, char particles and combustion gases follow an intricate path through

the furnace to reach the exit. In general, such flow interactions, vortices and reversed-flows delay oxygen and fuel mixing, resulting in larger combustion times, and therefore, affecting carbon in ash levels.

Once each simulation is completed, particle track files are generated. Therefore, the amount of unburned carbon in ash for every specific condition is calculated in a post-processing task. As it is often reported in the literature, see for instance [24], char burnout is quite difficult to pinpoint as an absolute value, but at least generic trends are usually indicated in a correct way by CFD codes when variations in parameters like excess air and size of entering particles are imposed. However, it is more difficult to accurately predict variations in carbon in ash levels when only fuel properties are varied. This fact is currently becoming of great relevance, since coal blends of different origin are usually burnt together to reduce fuel supply costs.

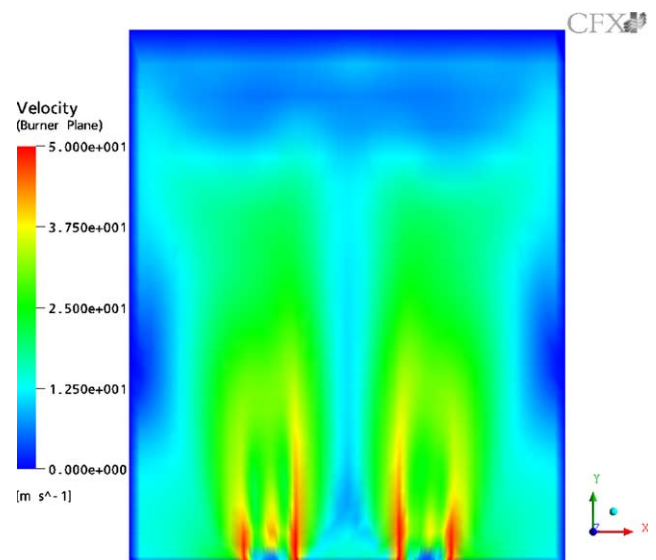


Fig. 3. Velocity flow distribution in the near burner region.

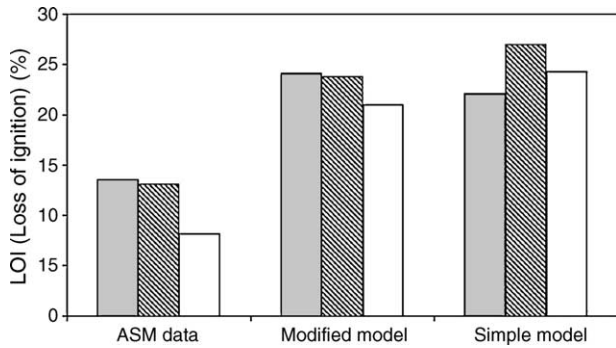


Fig. 4. Results for Loss of Ignition (LOI). ■ Guasare, ▨ Saif and □ Unicoal.

In Fig. 4, the results obtained for unburned carbon in ash levels are compared against the information provided by the plant laboratory. Independent of the combustion model used for the calculation, results from CFD simulations are higher than the averaged data from the plant. This result can be partially explained considering the ash sampling procedure followed in the plant. Ash samples provided to the Loss of Ignition (LOI) test, which measures the heat released from the ash under standardized conditions for the determination of the unburned material, are compiled from the hopper of the first electrostatic precipitator field because of its easy accessibility. However, before entering the electrostatic precipitators, combustion gases flows through the economizer section and through the air pre-heaters, where about 10–20% of the fly ash deposits in both their respective hoppers and stagnation zones. This percentage depends to a great amount of non-controlled factors, mainly: gas flow pattern, ash size distribution and geometrical arrangement of the circuit (ducts, dampers, elbows, etc.). Considering that larger unburned coal particles, which reasonably correspond in most cases to the higher initial diameter particles, are preferentially deposited in the economizer and air pre-heaters hoppers, its contribution is in fact being ignored to account for the overall unburned carbon loss in the LOI test. To illustrate their relevant influence on the results, Table 6 summarizes the initial percentage of particles classified into three sieves fractions and their final contribution to the total unburned carbon losses as predicted by the CFD model.

If the contribution of those larger particles that presumably do not reach the electrostatic precipitator is discounted from the final predictions, by means of an additional CFD post-processing task, the predicted values for unburned carbon in ash remarkably improve, as shown in Fig. 5. The figure displays a best approach to the plant laboratory values, since a decrease is observed once larger particles contribution is removed. Of course, there are no sound criteria to select a value for the percentage of ashes retained in the hoppers of the gas circuit and tentative values have to be compulsorily considered, moreover, when in situ verification is technically and economically unfeasible.

Table 6 Starting particle distribution mass percentages divided into three sieve fractions and their final contribution to the predicted total unburned carbon losses

		$d_p < 50 \mu\text{m}$	$50 < d_p < 125 \mu\text{m}$	$125 \mu\text{m} > d_p$
Guasare	%Initial particles	66.34	27.41	6.25
	%Unburned carbon	52.70	28.90	18.40
Saif	%Initial particles	64.90	28.82	6.82
	%Unburned carbon	50.84	30.37	18.79
Unicoal	%Initial particles	63.40	29.90	6.70
	%Unburned carbon	36.34	34.22	29.44

Looking back to Fig. 4, predictions from the modified combustion model follow the same trend for the three different coals and reproduce the same quantitative increment as the observed for the plant values, while results from the conventional single film model clearly differ. The explanation relies on the inclusion of both rank dependant correlations that establish a direct dependence between char reactivity and coal composition and an additional diffusion resistance that accounts for the inhibitory effect of ash on oxygen diffusion through the particle. Fig. 6 shows the comparison of predictions for the averaged oxygen mass fraction and the gas temperature in the nearby of the particle as the combustion proceeds for the three case-study coals. Oxygen mass fraction decreases to a very low value during devolatilization, which usually takes a time between 0.1 and 0.2 s and where peak flame temperature is reached. Afterwards, oxygen fraction rises during one second. Since more than 80% of the conversion takes place in the first two seconds, only the first 2.5 s have been plotted. From the laboratory data in Fig. 4, Unicoal presents the lowest carbon in ash content, while the other coals (Guasare and Saif)

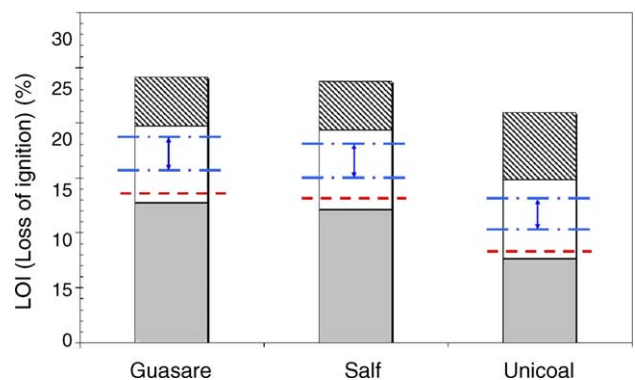


Fig. 5. Carbon in ash distribution depending on the initial particle diameter (d_p) sieve fractions. ■ $d_p < 50 \mu\text{m}$, □ $50 \mu\text{m} < d_p < 125 \mu\text{m}$ and ▨ $d_p > 125 \mu\text{m}$. Dashed line (---) represents plant laboratory LOI values and alternating dash and dotted lines (-·-·-) represent LOI values from numerical modelling within the correction range.

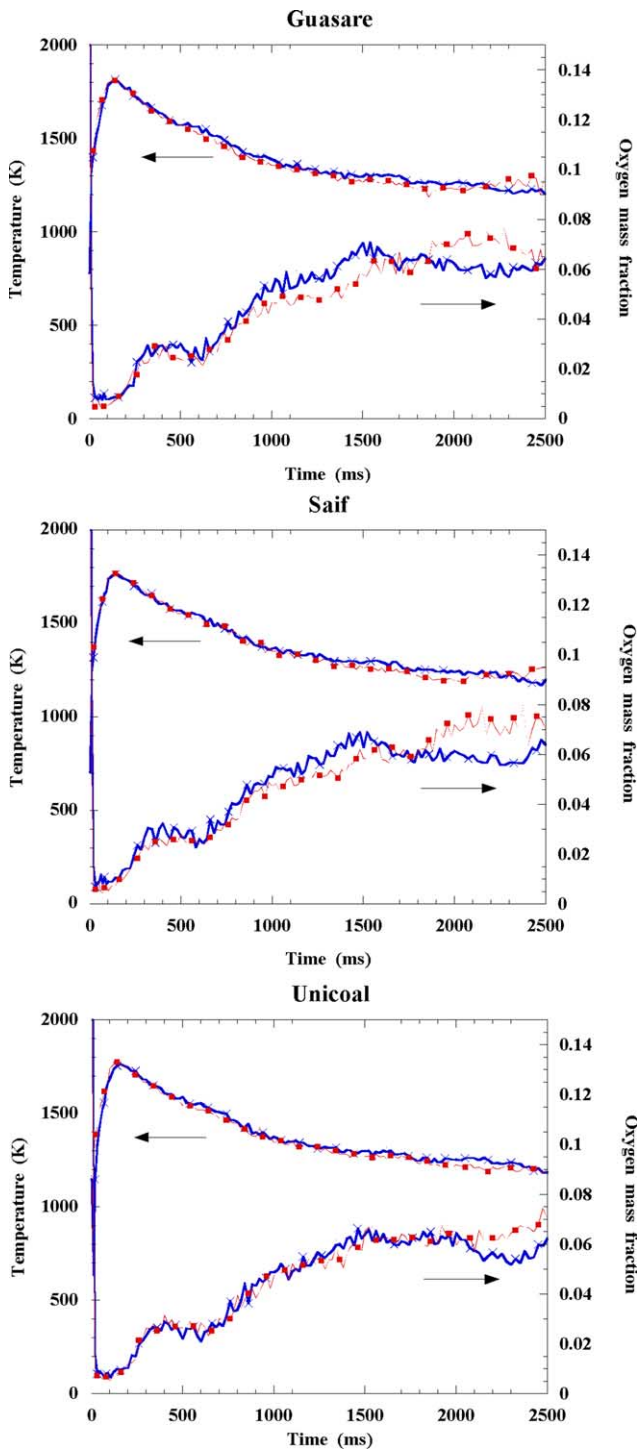


Fig. 6. Oxygen mass fraction and temperature against residence time in the furnace for the three case-study coals using the conventional single film combustion model (■) and the modified combustion model (X).

produce approximately the same level. In consequence, appreciable differences should arise in the oxygen consumption along the path track by the particles. Results from Fig. 6 agree with this assumption, showing a very similar behaviour for the Guasare and the Saif coals, and a very different one for the Unicoal. To better understand how both

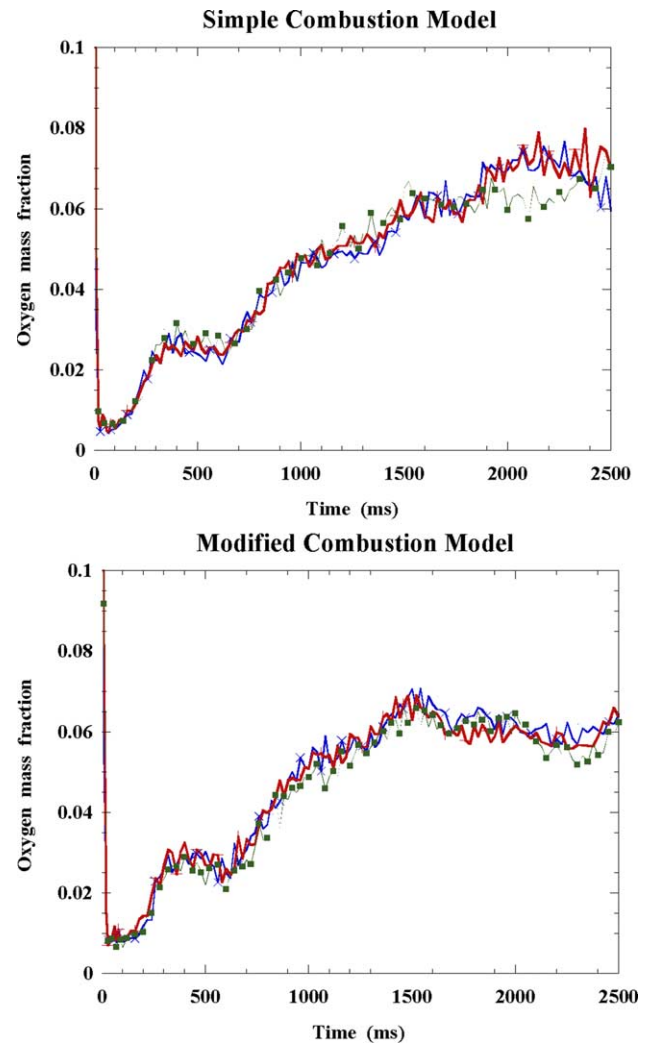


Fig. 7. Detail of oxygen mass fraction against residence time in the furnace using the conventional single film combustion model (a) and the modified combustion model (b) for the three involved coals: Guasare (X), Saif (+) and Unicoal (■).

combustion models behave (conventional against modified one), Fig. 7 plots oxygen concentration profiles for the three coals together. Using the conventional single film combustion model, Fig. 7a, it is not possible to identify which coal behaves in a different way. Maximum and minimum oxygen profiles values alternate from one coal to another at different time positions. However, using the modified combustion model, Fig. 7b, Unicoal shows lower oxygen mass fraction values than the other two coals. Therefore, more oxygen consumption and higher coal conversion have occurred, what agrees with the available experimental data.

5. Conclusions

Commercial CFD codes, mostly using simplified models for coal combustion, clearly fail in the accurate prediction of unburned carbon losses. To better predict the carbon

burnout in a large utility boiler, relatively simple modifications of the combustion models can significantly improve the predictions. To this purpose, both rank-dependent correlations and ash inhibition submodel have been coupled to a commercial CFD combustion model.

CFD simulations have been performed for a case-study utility boiler, for three different nominal load-operating scenarios and coal supplies, either coupling a conventional single film oxidation model or the modified model discussed in the paper. Results from the study show the disagreement between plant laboratory experimental data and conventional model predictions. On the contrary, when the above-mentioned modifications are implemented, trends in unburned carbon values are in good agreement with the collected data. In order to further progress in the development of unburned coal predictive systems, future mid-term works should go in the direction to fully couple advanced kinetics models within CFD codes, maintaining reasonable computing times.

Acknowledgements

The work presented in this paper has been partially supported by the research project 7220-PR-130-CARNO ‘Development of a carbon-in-ash notification system’ funded by the European Commission under the ECSC research program. The authors gratefully acknowledge ASM Brescia plant personnel for their support and collaboration. Chair-Professor Cristóbal Cortés (University of Zaragoza) is specially acknowledged for many useful comments and suggestions.

References

- [1] Walsh PM, Xie J. Effect of coal quality on unburned carbon loss. Third international conference on the effects of coal quality on power plants, San Diego; 1992.
- [2] Unsworth JF, Barrat DJ, Roberts PT. Coal quality and combustion performance, an international perspective. *Coal Sci Technol* 1991;19: 339–408.
- [3] Badzioch S, Hawksley PGW. Kinetics of thermal decomposition of pulverized coal particles. *Ind Eng Chem Process Des Develop* 1970;9: 521–30.
- [4] Ubhayakar SK, Stickler DB, Rosenberg CWV, Gannon RE. Rapid devolatilization coal in hot combustion gases. *Energy Prod Coal* 1976;427–36.
- [5] Kobayashi H, Howard JB, Sarofim AF. Coal devolatilization at high temperatures. 16th symposium (international) on combustion. Pittsburgh, PA: The Combustion Institute; 1976 p. 411–25.
- [6] Backreedy RI, Habib R, Jones JM, Pourkashanian M, Williams A. An extended coal combustion model. *Fuel* 1999;78:1745–54.
- [7] Williams A, Backreedy R, Habib R, Jones JM, Pourkashanian M. Modelling coal combustion: the current position. *Fuel* 2002;81: 605–18.
- [8] Backreedy RI, Jones JM, Pourkashanian M, Williams A. Burn-out of pulverized coal and biomass chars. *Fuel* 2003;82:2097–105.
- [9] Field MA, Gill DW, Morgan BB, Hawksley PGW. Combustion of pulverized coal.: BCURA; 1967.
- [10] Baum MM, Street PJ. Predicting the combustion behaviour of coal particles. *Combust Sci Technol* 1971;3:231–43.
- [11] Hurt R, Sun J-K, Lunden M. A kinetic model of carbon burnout in pulverized coal combustion. *Combust Flame* 1998;113:181–97.
- [12] Hurt R, Sun J-K. Mechanism of extinction and near-extinction in pulverized solid fuel combustion. *Proc Combust Inst* 2000;28: 2205–13.
- [13] Hurt R, Calo JM. Semi-global intrinsic kinetics for char combustion modeling. *Combust Flame* 2001;125:1138–49.
- [14] Cloke M, Wu T, Barranco R, Lester E. Char characterization and its application in a coal burnout model. *Fuel* 2003;82:1989–2000.
- [15] AEA Technology plc. CFX 4.4 user manuals; 1998.
- [16] Launder BE, Spalding DB. The numerical computation of turbulent flows. *Comput Meth Appl Mech Eng* 1974;3:269–89.
- [17] Warnatz J, Mass U, Dibble RW. *Combustion*. Berlin: Springer; 1996.
- [18] Hurt RH, Mitchel RE. Unified high-temperature char combustion kinetics for a suite of coals of various rank. 24th symposium (international) on Combustion. Pittsburgh, PA: The Combustion Institute; 1992 p. 1243–50.
- [19] Sommerfeld M. Theoretical and experimental modelling of particulate flow. Lectures series.: von Karman Institute for Fluid Dynamics; 2000.
- [20] Jensen PT, Mitchell RE. High temperature char reactivity measurements in the sandia laminar Flow Reactor. Energy Research Project No. 1323/87-16, Ministry of the Environment, Geological Survey of Denmark; 1993.
- [21] Lockwood FC, Shah NG. A new radiation solution method for incorporation in general combustion procedure. 18th symposium on combustion. Pittsburgh, PA: The Combustion Institute; 1981 p. 1405–14.
- [22] Chojnowski B, Soloukhin RI, Afgan NH. Research and operational measurements on modern power station boilers: a selective survey. 15th ICHMT symposium on heat and mass transfer measurement techniques; 1985. p. 465–89.
- [23] Díez LI, Cortés C, Arauzo I, Valero A. Combustion and heat transfer monitoring in large utility boilers. *Int J Therm Sci* 2001;40: 489–96.
- [24] Stopford PJ. Recent applications of CFD modeling in the power generation and combustion industries. *Appl Math Modell* 2002;26: 351–74.

P.2

“Integration of CFD codes and advanced combustion models for quantitative burnout determination”

Fuel 86 (2007) 2283-2290

J. Pallarés, I. Arauzo, A. Williams

Integration of CFD codes and advanced combustion models for quantitative burnout determination

Javier Pallarés^{a,*}, Inmaculada Arauzo^{a,1}, Alan Williams^{b,2}

^a Centre of Research for Energy Resources and Consumptions (CIRCE), University of Zaragoza, María de Luna, 3, 50 018 Zaragoza, Spain

^b Energy and Resources Research Institute, Leeds University, Houldsworth Building, Leeds LS2 9JT, UK

Received 20 November 2006; received in revised form 22 January 2007; accepted 25 January 2007

Available online 2 March 2007

Abstract

CFD codes and advanced kinetics combustion models are extensively used to predict coal burnout in large utility boilers. Modelling approaches based on CFD codes can accurately solve the fluid dynamics equations involved in the problem but this is usually achieved by including simple combustion models. On the other hand, advanced kinetics combustion models can give a detailed description of the coal combustion behaviour by using a simplified description of the flow field, this usually being obtained from a zone-method approach. Both approximations describe correctly general trends on coal burnout, but fail to predict quantitative values.

In this paper a new methodology which takes advantage of both approximations is described. In the first instance CFD solutions were obtained of the combustion conditions in the furnace in the Lamarmora power plant (ASM Brescia, Italy) for a number of different conditions and for three coals. Then, these furnace conditions were used as inputs for a more detailed chemical combustion model to predict coal burnout. In this, devolatilization was modelled using a commercial macromolecular network pyrolysis model (FG-DVC). For char oxidation an intrinsic reactivity approach including thermal annealing, ash inhibition and maceral effects, was used. Results from the simulations were compared against plant experimental values, showing a reasonable agreement in trends and quantitative values.

© 2007 Elsevier Ltd. All rights reserved.

Keywords: CFD; Coal combustion; Modelling

1. Introduction

Power companies and power equipment makers' projections suggest a significant switch from gas to coal as the preferred fuel in the coming decade. This re-emergence of coal as a primary fuel for power generation is the result of technological changes that have reduced the amount of pollutants and particulate emissions to the atmosphere, and recent international worries about security of gas supply.

The introduction of emissions control techniques and the increasing competition in the electric generation sector have raised two main issues which require special attention.

Firstly, the use of low NO_x burners and furnaces can increase unburned carbon levels thus reducing the thermal efficiency of the plant, increasing heat exchangers erosion, reducing the performance of electrostatic precipitators and the wholesale value of the fly ash [1,2]. Secondly, whilst traditionally utility boilers were designed for a particular single coal, blending of coals is today a common practice to reduce fuel cost, or to overcome a problem with a particular coal. Blending properties for ignition and burnout are not additive properties that can be derived from the components, so this complicates coal burnout predictions [3]. The requirement that power plant managers must meet both the environmental regulations and specifications for an economically profitable coal supply, have resulted in a new interest in predictive techniques.

In the last two decades, the use of computational fluid dynamics (CFD) codes, both as a predictive and design

* Corresponding author. Tel.: +34 976762562; fax: +34 976732078.

E-mail address: jpallare@unizar.es (J. Pallarés).

¹ Tel.: +34 976761863; fax: +34 976732078.

² Tel.: +44 113 3432507; fax: +44 113 2467310.

Nomenclature

A_i	mass-specific intrinsic reactivity, 1/s (mol/m ³) ⁿ	q_{cmb}	char burning rate (g/cm ² s)
A_o	initial mass-specific intrinsic reactivity, 1/s (mol/m ³) ⁿ	R	gas universal constant, 8.3145 J/mol K
C_{daf}	dry ash free carbon content in coal (%)	R_i	intrinsic reactivity of the char (1/s atm) ⁿ
C_p	specific heat of the char particle (J/g K)	T_p	temperature of particle surface (K)
d_c	diameter of carbon-rich core (cm)	T_g	temperature of the bulk gas (K)
d_p	diameter of the char particle (cm)	T_w	temperature of the environment (K)
D_M	molecular diffusivity of O ₂ in N ₂ (cm ² /s)	Vit	vitrinite content in coal (%)
D_{eff}	effective molecular diffusivity (cm ² /s)	X	overall burnout
E	activation energy for oxidation (J/mol)	Δh_f	combustion enthalpy of carbon (J/g)
f	fraction of the total porosity in feeder pores	α	mode of burning parameter
f_{mac}	abbreviated maceral correction factor	θ	overall particle porosity
In	inertinite content in coal (%)	ρ_p	density of the char particle (g/cm ³)
m_c	mass of carbon in the char particle (g C)	ρ_c	density of the carbon (g C/cm ³)
m_p	mass of the char particle (g)	τ	tortuosity
n	reaction order	Φ	Thiele modulus for spheres
P_s	oxygen partial pressure at particle surface (atm)	ψ_1	convective heat transfer coefficient (W/cm ² K)
P	furnace pressure (Pa)	ψ_2	radiative heat transfer coefficient (W/cm ² K ⁴)
		η	effectiveness factor

technique for the improvement of energy systems efficiency, has complemented other experimental techniques based on expensive pilot scale tests. In spite of the relative precision that a CFD code can give to describe the complex fluid dynamics that take place in the boiler of a power plant, it becomes of doubtful accuracy when detailed coal combustion performance is investigated, particularly carbon burnout because of the complexity of the process. The reason is that commercial CFD codes still use simple devolatilization and char oxidation sub-models. Although previous work has shown that introducing simple modifications on the combustion model can significantly improve CFD burnout predictions [4], they still fail to predict precise quantitative values of burnout [4,5] because these changes do not accurately account for variations in reactivity and internal pore structure during the combustion process.

In order to obtain more accurate predictions on coal burnout a different approach was developed which combines CFD tools to account for detailed fluid dynamics, and a more detailed combustion kinetic model to account for carbon burnout. CFD calculations for a 63 MWe front wall fired unit under different conditions for coal supply and boiler operation were solved to obtain oxygen partial pressure and temperature profiles for a number of representative particles. Then these profiles were used as input for the detailed combustion model to obtain carbon burnout. Devolatilization was modelled using a macromolecular network pyrolysis model (FG-DVC) [6], whilst for char oxidation an intrinsic formulae based on the carbon burnout kinetic model (CBK8) that allows the transition to Zone I was used [7]. It also includes a correction factor to account for the effect of coal maceral content on char properties and reactivity [8,10,11]. Predictions from the burnout model were compared against plant data.

2. Computer model methodology

It was important to develop a methodology that combines a detailed treatment of the fluid dynamics, furnace environment and the kinetics of combustion. Devolatilization of the coal and char combustion are both influenced not only by the properties of the parent coal, but also by the temperature–time history which the coal particle experiences during combustion. The CFD solution contains such information for hundreds of particles with different sizes. Every single particle trajectory across the flow domain is unique and depends on the coal milling operation and boiler conditions, such as particle size, inlet position, excess air, primary to secondary air mass flow ratio, burner tilt, swirl number, burner to burner interactions, uneven mass flow distributions in the boiler, air in-leakages and particle–wall interactions. Therefore the first step lies in solving the CFD code to obtain the overall furnace conditions. At the same time, a first approximation of the carbon burnout solution was obtained. Then the variations in gas temperature and oxygen partial pressure for every particle tracked in the CFD simulation were introduced in the detailed combustion model together with the size distribution and the fuel-related properties obtained experimentally in the plant laboratory. This combustion model includes a network pyrolysis sub-model for devolatilization and an intrinsic sub-model for char oxidation.

2.1. CFD sub-model

A commercial CFD program, CFX 4.4, was used to perform the calculations [12]. Furnace simulations were undertaken on a mesh of approximately 150,000 cells shown in Fig. 1 and 2000 representative coal particles were

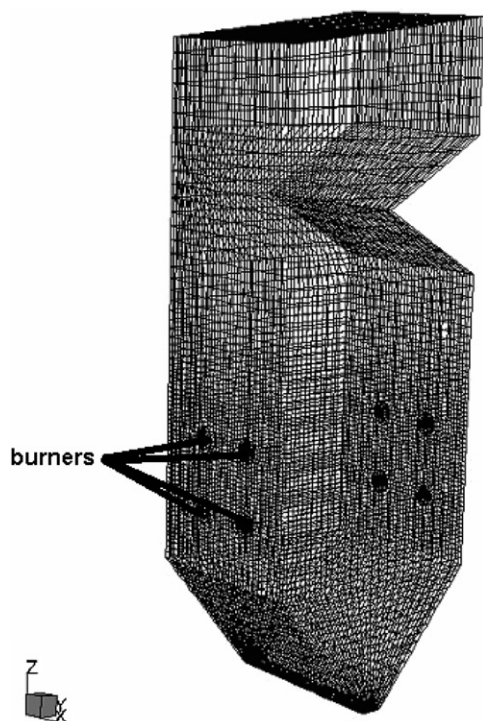


Fig. 1. Boiler computer grid structure.

simulated. Gas flow was modelled solving the steady-state Reynolds averaged Navier–Stokes equations (RANS) along the computational domain, using the standard $k - \epsilon$ model [13] to close the turbulence problem. Coal devolatilization was modelled using the simple single step model of Badzioch and Hawsksley [14]. A mixed-is-burnt model assuming infinite fast chemistry and a beta probability density function, β -PDF was used for the combustion of volatiles. Char oxidation was modelled using the Baum and Street approximation [15] coupled with both rank-dependent empirical correlations [16] and a specific sub-model describing ash inhibition at the late stages of combustion [17]. Radiative heat transfer was modelled using the Discrete Transfer method [18] assuming a grey gas model to evaluate the properties of the gas phase.

In order to validate the CFD model, predictions on the oxygen content in flue gases were compared with available plant measurements for the scenarios tested, showing good agreement as shown in Table 1. This table, along with the predictions of burnout hereinafter discussed, permit to conclude that the simulation of coal combustion was reasonable for the variety of coal feedstock tested.

2.2. Devolatilization sub-model

It is well known that the devolatilization rate and yield increases with temperature and heating rate, and ultimately determines the porous structure and the number of active sites of the char residue, thus its reactivity. Porosity is particularly important because it controls the rates of diffusion of chemical species into and out of the char particle during combustion when that takes place under internal diffusion controlled conditions [19]. Furthermore, under pulverized fuel conditions the peak temperature to which the coal is heated reaches 1500–2200 K and the volatiles yield is significantly higher than the volatile matter content determined by the standard ASTM test. This causes a decrease of the char produced whose oxidation provides the rate controlling step in coal combustion burn-out [20]. As a result, the devolatilization step is crucial in the overall burnout determination.

Mathematical modelling of coal devolatilization is difficult due to its complexity. Simple models, single rate or two competing rates are used when the level of detail required is not very stringent. Nevertheless to predict variations in yield with reaction conditions (temperature, heating rate, pressure, particle size and coal type) more detailed models which predict the evolution of tar, gas and char, major species yield and local concentrations must be used. There are a number of such commercial computer codes, FG-DVC, FLASHCHAIN and CPD that predict the rate of the volatile release and the composition of key species linked to the resulting macroporous and microporous structure of the char [6]. Because of its applicability to a wide range of coals (subbituminous, bituminous and lignites) and heating rates (0.05–10⁵ K/s), and its ability to predict the variations in species yield with reactor conditions [6], FG-DVC was used in this work.

2.3. Char oxidation sub-model

The overall burning rate of a char particle is determined by the oxygen transport to the particle surface and the reactivity of the char, which depend on the temperature and composition of the gaseous environment and the size, porosity and temperature of the particle (see Eq. (1)) [21]

$$q_{\text{cmb}} = f(T_p, P_s, \eta, R_i, n, d_p, \rho_p, \theta) \tag{1}$$

The intrinsic reactivity of the char, R_i , was expressed in the form:

$$R_i = A_i \cdot \exp(-E/R \cdot T_p) \tag{2}$$

Table 1

Experimental values compared with numerical predictions for mean oxygen content (vol.%) in flue gases for the nine simulated scenarios

	Case 1	Case 2	Case 3	Case 4	Case 5	Case 6	Case 7	Case 8	Case 9
Mean % O ₂ plant value	2.63	3.57	3.1	3.63	3.21	3.37	3.31	3.02	2.89
Mean % O ₂ CFD prediction	3.18	3.91	3.52	3.81	3.48	3.45	3.31	3.06	2.97

There is a wide spread of activation energy values E in the literature [7,9,11,21,22]. A value for E of 167 ± 5 kJ/mol was used based on the validation of the model for the type of coals used in this work (172 kJ/mol for Guasare, 167 kJ/mol for Carboandes, and 162 kJ/mol for Russian). However, Arrhenius expressions with constant kinetic parameters cannot account for the changing reactivity occurring during burnout. A deactivation function, proposed by Lans et al. [23], was introduced in the model in order to express reactivity loss by thermal annealing as a function of char conversion (see Eq. (3))

$$A_i = A_0 \cdot (1 - X)^{0.5} \quad (3)$$

where X represents the overall burnout of the char particle and A_0 the initial mass-specific intrinsic reactivity based on the dry, ash-free carbon content of the parent coal, correlated for a wide range of coals by Hurt et al. [17] (see Eq. (4))

$$\log(A_0) = 14.97 - 0.0764 \cdot (\%C_{daf}) \quad (4)$$

The effectiveness factor, η , was obtained from the integration of the mass balance of the reactive for a porous spherical particle under catalytic reaction, assuming a first order reaction (see Eq. (5)) [7]

$$\eta = \frac{1}{\Phi} \left(\coth(3 \cdot \Phi) - \frac{1}{3 \cdot \Phi} \right) \quad (5)$$

where Φ is the Thiele modulus that combines the reaction and diffusion phenomena as is shown in Eq. (6) [7]

$$\Phi = \frac{d_c}{6} \left(\frac{(n+1) \cdot \rho_p \cdot R_i \cdot (P_s/R \cdot T_p)^{n-1}}{2 \cdot D_{eff}} \right)^{0.5} \quad (6)$$

To account for the porous nature of the char and the fact that the oxygen penetrates the porous structure and reacts on the internal surface area, the effective diffusivity to the interior of the particle was modelled according to Eq. (7) [7]

$$D_{eff} = D_M \cdot \left(\frac{\theta \cdot f}{\tau} \right) \quad (7)$$

where θ is the total porosity of the particle, τ/f is a carbon pore structure parameter which was set to 6 [7], and D_M is the bulk diffusion coefficient given by Eq. (8) [24]

$$D_M = 1.543 \cdot (T_p)^{1.67} / P \quad (8)$$

The transition from Zone II to Zone I reaction mode is the result of the extinction phenomena in the late stages of combustion. To explain this behaviour, different mechanism, including reactivity loss by thermal annealing and ash inhibition effects, have been considered [7]. The former was already introduced in the model through Eq. (3). The latter was accounted for the inclusion of an additional diffusion resistance in the mass transfer coefficient used for the determination of the oxygen partial pressure at the outer core of the char particle. This diffusion resistance was expressed in terms of the ash film porosity, ash film thick-

ness and particle core diameter. These variables are computed from the char particle size and density evolution of the particle during combustion, which were modelled relating the char particle density decrease to the carbon conversion and considering a burning mode α of 0.2 (see Eq. (9)). Swelling of the particle during devolatilization is accounted by including a swelling factor that modifies the initial diameter and then the density of the char particle. This swelling factor was estimated to be 1.10 for the three coals. Then, the char particle diameter is obtained by geometric considerations [17].

$$\rho_c = \rho_{c,0} \cdot \left(\frac{m_c}{m_{c,0}} \right)^\alpha \quad (9)$$

Other important parameter governing char reactivity is the presence of various coal maceral types. This fact acquires a greater relevance in coal blends combustion. Typically northern hemisphere coals are rich in vitrinite, whilst coals formed in the southern hemisphere have a high inertinite content [8]. To account for this behaviour, an abbreviated maceral correction factor, f_{mac} , was introduced when coals of the southern hemisphere are considered (see Eq. (10)) [11]

$$f_{mac} = 1.68 \cdot Vit - 0.6 \cdot In \quad (10)$$

Introducing the above considerations into Eq. (1), the overall burning rate of a char particle was expressed as shown in the following equation:

$$q_{cmb} = m_c \cdot \eta \cdot f_{mac} \cdot R_i \cdot (P_s)^n \quad (11)$$

Although in the scientific community there is no general agreement on the magnitude of the reaction order with respect to O_2 , Hurt et al. showed that global power-law kinetics are capable of correctly describe combustion rates as a consequence of the heterogeneity of real carbon surfaces [25,26]. A value of 0.5 was used in this work.

From an energy balance in the particle, the program calculates, in every time-step iteration, the particle temperature T_p and the burning rate q_{cmb} by estimating the particle temperature and comparing the combustion rates in an iterative process until the error is driven to zero (Error $T_p < 0.1$ K). The oxygen partial pressure in the outer surface is determined in an internal iteration with the guessed particle temperature value (Error $P_s < 0.001$ atm)

$$m_p \cdot C_p \cdot \frac{dT_p}{dt} = (q_{cmb} \cdot \Delta h_f) - \psi_1 \cdot (T_p - T_g) - \psi_2 \cdot (T_p^4 - T_w^4) \quad (12)$$

where Δh_f is the combustion enthalpy of the oxidation reaction to CO/CO_2 [17], and ψ_1 and ψ_2 are the convective and radiation heat transfer coefficients, respectively.

3. Results and discussion

To investigate the burnout prediction capability of the model a total of nine scenarios, presented in Table 2 were

Table 2
Nominal-load operating scenarios from the case-study power plant

	Case 1	Case 2	Case 3	Case 4	Case 5	Case 6	Case 7	Case 8	Case 9
Coal	Guasare	Guasare	Guasare	Carboandes	Carboandes	Carboandes	Russian	Russian	Russian
Mill 1 load (t/h)	12.4	12.53	10.43	13.28	13.06	12.93	13.4	13.44	13.41
Mill 2 load (t/h)	12.44	12.6	10.46	13.3	13.01	13.04	13.27	13.42	13.48
Total air flow rate (kNm ³ /h)	208.03	218.45	181.41	218.29	215.11	209.39	219.11	218.68	216.73
Primary air flow rate Mill 1 (kNm ³ /h)	25.28	25.39	23.60	26.03	25.85	25.73	26.14	26.17	26.14
Primary air flow rate Mill 2 (kNm ³ /h)	25.32	25.45	23.63	26.05	25.80	25.83	26.02	26.15	26.21
Primary air T^a (°C)	80	80	80	80	80	80	80	80	80
Secondary air flow rate (kNm ³ /h)	157.43	167.61	134.19	166.21	163.46	157.83	166.95	166.36	164.38
Secondary air T^a (°C)	249.9	257	254.39	256.48	254.99	257.29	254.21	254.9	254.18
Mean particle diameter (μm) ^a	55	55	55	55	55	55	55	55	55

^a Rossin Rammler distribution ($d_{pm} = 55 \mu\text{m}$, $n_{rr} = 1.02$).

tested with standard plant instrumentation measurements gathered at the Lamarmora (ASM Brescia) power station in the year 2005. Study cases were selected covering the regular range of variation of mean oxygen (vol.%) in flue gases (2.5–4%) under full load operating conditions. Differences among scenarios are the result of the normal operation of the plant where small variations in conditions and mass flow imbalances between mills are encountered. The mills classifiers were adjusted to give a particle size distribution of mean diameter of 55 μm . The unit studied was a 63 MWe front wall-fired boiler with four burners arranged in two rows, natural circulation, single reheat and two vertical rod mills feeding each row of burners. In the study, two coals from Central America commonly used in the plant over the last 5 years (Guasare from Venezuela and Carboandes from Colombia) and a coal from Russia, recently used to evaluate its influence on the combustion efficiency, were burned separately. Since no petrographic analysis were available, inertinite and vitrinite values for Guasare coal were taken from Barranco et al. [27]. Table 3 gives the standard ASTM proximate and ultimate analysis, and maceral analysis when available.

Table 3
Proximate, ultimate and petrographic analysis for the coals used in the study

Proximate analysis (as received)	Guasare	Carboandes	Russian
Moisture (%)	6.91	9.60	9.56
Ash (%)	5.75	6.44	7.14
Volatile (%)	35.00	34.17	36.09
Fixed Carbon (%) ^a	52.34	49.79	47.21
<i>Ultimate analysis (as received)</i>			
Carbon (%)	72.75	69.21	65.62
Hydrogen (%)	4.93	4.38	4.66
Oxygen (%) ^a	7.75	8.38	10.74
Nitrogen (%)	1.27	1.36	1.90
Sulphur (%)	0.64	0.64	0.38
<i>Petrographic analysis</i>			
Inertinite (%)	0.24	N/A	N/A
Vitrinite (%)	0.76	N/A	N/A

^a Calculated by difference.

The CFD model was applied to the nine cases. Solutions in the form of the gas temperature and the oxygen partial pressure profiles that every representative coal particle is subject to was obtained, and subsequently used as an input in the coal combustion kinetic model. Fig. 2 shows an example of the variation in these temperature and oxygen partial pressure profiles among particles as a result of the complex fluid dynamics involved in the problem. This approach permits the model to be sensitive to the changes that arise from slight operational condition changes and uneven flow variations which strongly affects the overall burnout prediction. This fact represents an advantage over other zonal-based predictive models which commonly consider a reduced number of zones and particle trajectories.

Then, to determine char and volatile yields, FG-DVC calculations were performed under conditions relevant to pulverised coal combustion, namely a heating rate of 10⁵ K/s and final temperature of 1750 K for 150 ms which have been considered to be appropriate conditions [9,11]. Results presented in Table 4 and Fig. 3 shows a different behaviour of the Russian coal, which gives the lowest volatile rate and yield at high temperature. This behaviour can be explained in terms of the cross-linking and bridge breaking balance competition on the depolymerization of the macromolecular network. In general for lower rank coals crosslinking rates occurs in advanced of the bridge breaking, increasing the coordination number of the macromolecular network and thus reducing the yield [28].

Finally, the char burnout sub-model was run for each scenario, using as inputs the particle size distribution (Table 2) and coal properties (Table 3), the char and volatiles yield from the FG-DVC calculations (Table 4), the oxygen partial pressure and temperature profiles from the CFD simulation (Fig. 2) and the model parameters as described in Section 2.2. To ensure the convergence of the particle heat balance (Eq. (12)), a grid refinement in the CFD model was carried out in the near burner area to obtain data of key variables approximately every 5 ms. Additionally, in case the temperature change was greater than 100 K, the char combustion routine subdivides the calculations into smaller time intervals by linear interpolation of the bulk variables.

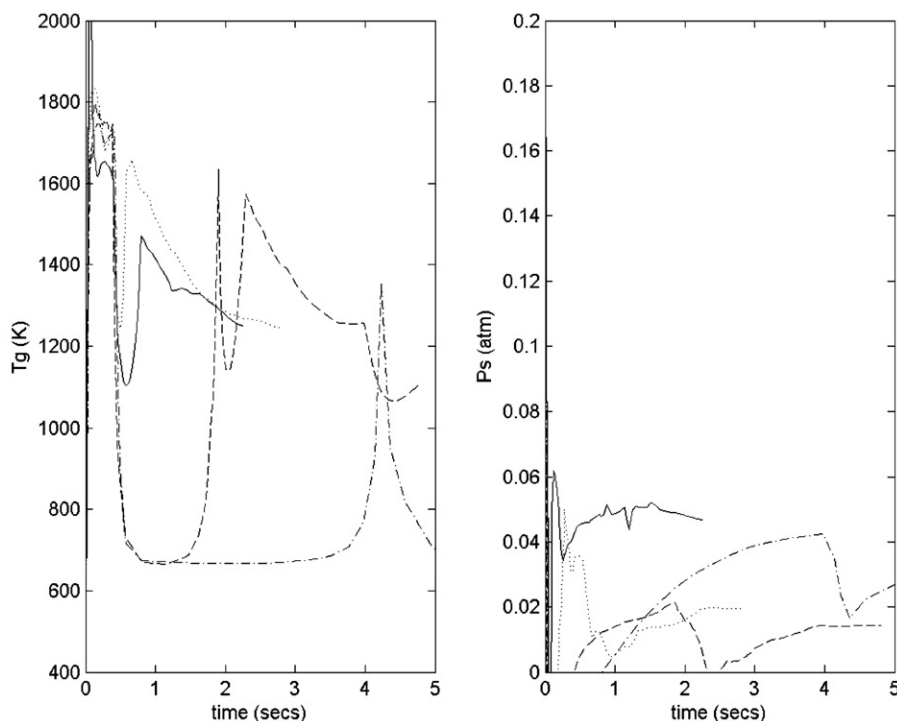


Fig. 2. Oxygen partial pressure and temperature profiles computed by CFD for a number of representative particles of the same diameter ($103 \mu\text{m}$) fed at different locations in the same upper burner (Case 1 conditions).

Table 4

Predicted char, tar, gas and (paraffins + olefins) yields (% by FG-DVC for the y coals studied (10^5 K/s to 1750 K for 150 ms))

	Guasare	Carboandes	Russian
Char (%)	49.0	45.7	51.9
Tar (%)	34.8	38.0	26.4
Gas (%)	13.4	13.4	18.1
Paraffins + Olefins	2.8	2.9	3.7

Results on overall burnout for the model are compared against the initial CFD predictions and plant data measurement in Fig. 4. CFD predictions clearly under-predict the overall burnout as a result of using a simple combustion model that does not account for reactivity loss [4]. On the contrary, the results from the model show that general trends and quantitative values on burnout are accurately predicted. Small discrepancies can be found for Carboandes coal, in cases 5 and 6, where the model slightly differs from the overall burnout value obtained in the plant. This result can be partially explained by the fact that no petrographic information were available for this coal, and thus no maceral correction was applied in the model, besides the intrinsic uncertainty on the election of the kinetic model parameters, since no DTF studies were carried on. On the contrary, deliberately changes in the operation conditions of the plant or mass flow imbalance situations between burners (see Table 1) that noticeably distort the particles' trajectories and thus their combustion behaviours, are sufficiently resolved for all the coals.

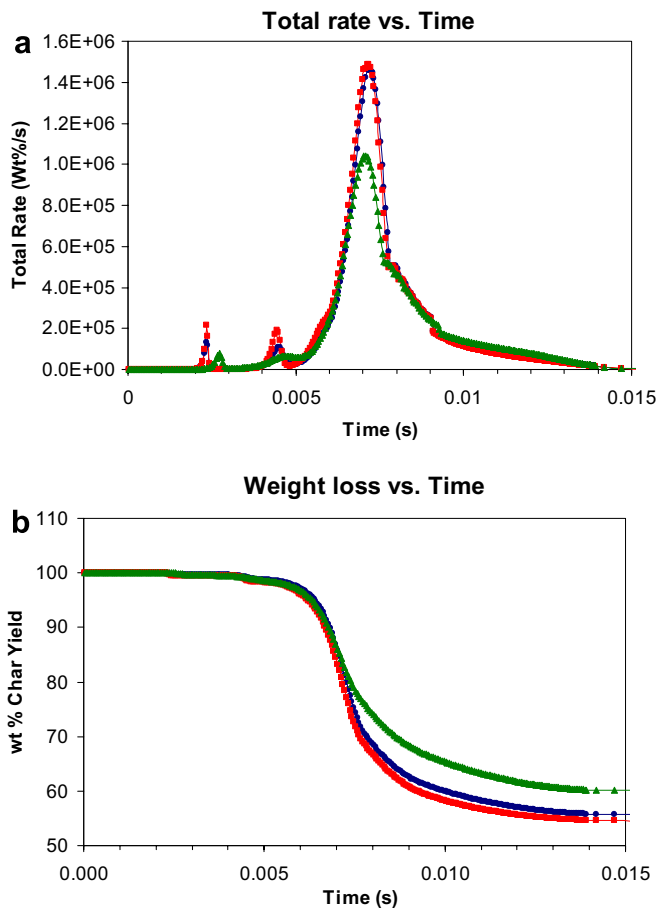


Fig. 3. Devolatilization at 10^5 K/s to 1750 K for 150 ms , (a) total rate against time (b) weight against time, for: ● Guasare, ■ Carboandes and ▲ Russian coals.

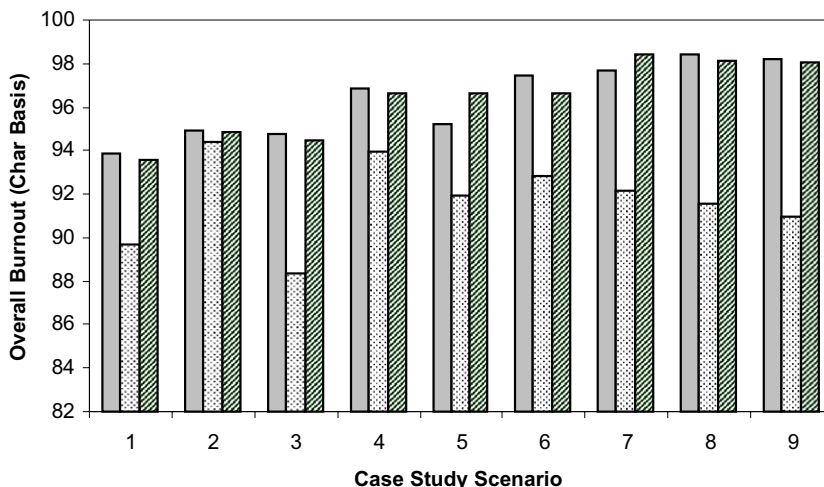


Fig. 4. Results for burnout (Char basis): \square ASM \square CFD predictions \square Model predictions.

4. Conclusions

A methodology that combines CFD codes and a detailed kinetics combustion models for the burnout determination in a large utility boiler has been developed. Nine scenarios of the ASM Brescia power plant under real operation conditions were used to test the model capability for burnout prediction. Results from the study show a good agreement in trends and quantitative values, showing a notable sensibility of the model to arise slight operational variations. Results also confirm to be acceptable the methodology, formulation and assumptions proposed in this paper. Nevertheless, whenever is possible it would be desirable to obtain an accurate description of the coal kinetic properties by means of analytical techniques such as TGA and DTF. Future development of this combustion efficiency predictive tool will be directed to reduce the response time which is limited by the CFD code calculations, but maintaining the model accuracy.

Acknowledgements

The work presented in this paper has been partially supported by the research project 7220-PR-130-CARNO 'Development of a carbon-in-ash notification system' funded by the European Commission under the ECSC research program. The authors gratefully acknowledge Lamarmora (ASM Brescia) plant personnel for their support and collaboration. We special acknowledge and thank helpful discussions held with Dr. Raymond I. Backeedy, Dr. Peter Stephenson and Dr. J.M. Jones for the coal combustion model development.

References

- [1] Walsh PM, Xie J. Effect of coal quality on unburned carbon loss. In: Proceedings of third international, a conference on the effects of coal quality on power plants; San Diego; 1992.
- [2] Hurt RH, Davis KA, Yang NYC, Headley TJ, Mitchell GD. Residual carbon from pulverized-coal-fired boilers: 2. Morphology and physicochemical properties. *Fuel* 1995;74:1297–306.
- [3] Arenillas A, Backreedy RI, Jones JM, Pis JJ, Pourkashanian M, Rubiera F, et al. Modelling of NO formation in the combustion of coal blends. *Fuel* 2002;81:627–36.
- [4] Pallarés J, Arauzo I, Díez LI. Numerical prediction of unburned carbon levels in large pulverized coal utility boilers. *Fuel* 2005;84:2364–71.
- [5] Stopford PJ. Recent applications of CFD modeling in the power generation and combustion industries. *Appl Math Model* 2002;26:351–74.
- [6] Solomon PR, Hamblen DG, Carangelo DG, Carangelo RM, Serio MA, Deshpande GV. General model of coal devolatilization. *Energy Fuels* 1988;2:405–22.
- [7] Hurt R, Sun J-K. Mechanism of extinction and near-extinction in pulverized solid fuel combustion. *Proc Combust Inst* 2000;28:2205–13.
- [8] Hampartsoumian E, Pourkashanian M, Williams A. Combustion rates of chars and carbonaceous residues. *J Inst Energy* 1989;48–56.
- [9] Backreedy RI, Habib R, Jones JM, Pourkashanian M, Williams A. An extended coal combustion model. *Fuel* 1999;78:1745–54.
- [10] Williams A, Backreedy RI, Habib R, Jones JM, Pourkashanian M. Modelling coal combustion: the current position. *Fuel* 2002;81:605–18.
- [11] Backreedy RI, Fletcher LM, Ma L, Pourkashanian M, Williams A. Modelling pulverised coal combustion using a detailed coal combustion model. *Sci Tech* 2006;178:763–87.
- [12] AEA Technology plc., CFX 4.4 User manuals; 1998.
- [13] Launder BE, Spalding DB. The numerical computation of turbulent flows. *Comput Methods Appl Mech Eng* 1974;3:269–89.
- [14] Badzioch S, Hawsksley PGW. Kinetics of thermal decomposition of pulverized coal particles. *Ind Eng Chem Process Des Dev* 1970;9:521–30.
- [15] Baum MM, Street PJ. Predicting the combustion behaviour of coal particles. *Combust Sci Technol* 1971;3:231–43.
- [16] Hurt RH, Mitchell RE. Unified high-temperature char combustion kinetics for a suite of coals of various rank. In: Proceedings of 24th symposium (international) on combustion. The Combustion Institute; 1992. p. 1243–50.
- [17] Hurt R, Sun J-K, Lunden M. A kinetic model of carbon burnout in pulverized coal combustion. *Combust Flame* 1998;113:181–97.
- [18] Lockwood FC, Shah NG. A new radiation solution method for incorporation in general combustion procedure. In: Proceedings of

- 18th symposium on combustion. The Combustion Institute; 1981. p. 1405–14.
- [19] Chan ML, Jones JM, Pourkashanian M, Williams A. The oxidative reactivity of coal chars in relation to their structure. *Fuel* 1999;78:1539–52.
- [20] Kobayashi H, Howard JB, Sarofim AF. Coal devolatilization at high temperatures. In: Proceedings of 16th symposium (international) on combustion. The Combustion Institute; 1976. p. 411–25.
- [21] Smith IW. The combustion rates of coal chars: a review. In: Proceedings of 19th symposium (international) on combustion. The Combustion Institute; 1982. p. 1045–65.
- [22] Charpenay S, Serio MA, Solomon PR. The prediction of coal char reactivity under combustion conditions. In: Proceedings of 24th symposium (international) on combustion. The Combustion Institute; 1992. p. 1189–97.
- [23] Lans RP, Glarborg P, Dam-Johansen K, Knudsen P, Hesselmann G, Hepburn P. Influence of coal quality on combustion performance. *Fuel* 1998;77:1317–28.
- [24] Jensen PT, Mitchell RE. High temperature char reactivity measurements in the Sandia laminar flow reactor. Energy Research Project No. 1323/87-16, Ministry of the Environment, Geological Survey of Denmark; 1993.
- [25] Hurt RH, Haynes BS. On the origin of power-law kinetics in carbon oxidation. *Proc Combust Inst* 2004;30:2161–8.
- [26] Hurt R, Calo JM. Semi-global intrinsic kinetics for char combustion modelling. *Combust Flame* 2001;125:1138–49.
- [27] Barranco R, Cloke M, Lester E. Prediction of the burnout performance of some South American coals using a drop-tube furnace. *Fuel* 2003;82:1893–9.
- [28] Users guide for FG-DVC model. Advanced Fuel Research Inc.; 1992.

P.3

“Design of an engineering system for unburned carbon prediction”

Enviado a Fuel (Sept. 2007)

J. Pallarés, I. Arauzo, E. Teruel

Development of an engineering system for unburned carbon prediction

Author: Javier Pallarés

Affiliation: Centre of Research for Energy Resources and Consumptions (CIRCE), University of Zaragoza (Spain).

Postal address: María de Luna, 3. 50 018 Zaragoza (Spain)

Telephone number: +34 976762562

Fax number: +34 976732078

Email: jpallare@unizar.es

Co-Author: Inmaculada Arauzo

Affiliation: Centre of Research for Energy Resources and Consumptions (CIRCE), University of Zaragoza (Spain).

Postal address: María de Luna, 3. 50 018 Zaragoza (Spain)

Telephone number: +34 976761863

Fax number: +34 976732571

Email: iarauzo@unizar.es

Co-Author: Enrique Teruel

Affiliation: Centre of Research for Energy Resources and Consumptions (CIRCE), University of Zaragoza (Spain).

Postal address: María de Luna, 3. 50 018 Zaragoza (Spain)

Telephone number: +34 976762352

Fax number: +34 976732078

Email: eteruel@unizar.es

Abstract

Within the computational methods used for the prediction of unburned carbon, coal combustion kinetics models, generally developed from the study of the real combustion process in experimental facilities, has the advantage to simulate the coal combustion process in a very realistic way. However, these models need the fluid and thermal behaviour in the boiler, which is usually obtained from simplified zonal approaches. The other group of models, namely CFD codes, present the opposite features. That is, they give a detailed description of the thermal and fluid dynamics behaviour in the boiler, but they use simple combustion models that cannot be used for a quantitative burnout determination. Moreover, the computing cost can be high and cannot be implemented in an on-line predictive system.

The predictive system developed in this work has the same structure as the so-called combustion kinetics models, however, it obtains the fluid and thermal description through CFD simulations. To solve the handicap of the high computational cost needed to run a CFD simulation, a neural network system is used to reproduce the solutions given by the CFD code. Moreover, a neural network system permits to interpolate in the range of variation used during the training stage, and thus, a predictive system covering the whole operational range of the plant can be obtained.

Results from the predictive system have been compared against those gathered at Lamarmora power plant (ASM Brescia, Italy), after carrying out a statistical study for validating and determining the prediction capability of the system. The comparison of both sets of data permits to conclude that the system predicts reasonably well over the whole range of operating conditions of the study plant.

Keywords: Unburned carbon; Coal combustion; CFD; Neural Networks

Introduction

There exist many approaches, experimental and computational, to develop an unburned carbon predictive system. Experimental approaches are very useful in design studies. However, for the daily monitoring of a real plant, the computational methods offer a flexibility as well as a saving of time and money, over current experimental facilities. Within the computational methods regularly used, CFD codes can precisely characterize the processes that take place inside the furnace. Despite this, for the study of unburned coal in utility boilers, these codes have two important drawbacks. Firstly, for the heterogeneous char particle combustion modelling, these codes rely on simple models, that prove to be inadequate for obtaining quantitative values of the combustion process. To solve this difficulty a methodology based on obtaining temperature and oxygen partial pressure profiles for a representative number of particles, that are entered in an advanced combustion model using a CFD code is used [1]. The second disadvantage of CFD codes is their typically high computational cost as creating and solving new simulations may take several days, which makes the use of this kind of tool in taking in situ real plant decisions impossible. Thus, in the development of predictive systems for combustion, some authors prefer to sacrifice part of the problem information using zonal approaches to solve the fluid-dynamics [2, 3]. However, these zonal models also present serious limitations such as the impossibility to correctly characterize many relevant factors that affect the combustion process i.e. primary and secondary air mixing, swirling intensity, burner to burner flow interactions, reversed-flow regions or mass flow imbalances. For that reason, in this work, the use of the CFD code as a thermal and fluid-dynamic characterization tool was kept. To solve the problem of the high computational cost, the utilization of a neural network system that generates the oxygen partial pressure, and temperature profiles, and the residence time of particles for any operating condition is proposed. In this way, a number of CFD simulations, that are representative of the factors influencing unburned carbon losses within the plant operating condition ranges, are carried out. These simulations are then used to train a neural network system, so that this system is able to reproduce the solutions given by the CFD code. As in the case of the CFD code, the solutions from the neural network system are given in the form of oxygen partial pressure and temperature profiles, and particles residence times, to run

immediately after an advanced combustion model. The advantage of introducing the neural network system in this way, is that it is possible to perform the calculations in a short period of time (less than a minute), and therefore, it can be used in the construction of an on-line predictive system. Another advantage is that, if the neural network system is appropriately trained, considering the variations and interactions of all parameters affecting unburned carbon formation, this system permits to interpolate in the range of variation used during the training stage. Thus, a predictive system covering the whole operational range of the plant can be obtained.

Throughout the paper, the development of the neural networks model is described: design of the neural network system structure, training of the system from a number of CFD simulations of the plant, and finally, its validation. Then, the construction of the unburned carbon prediction system (UPS) from the coupling of the neural network model and the advanced combustion model is described. Finally, the system is validated using standard plant instrumentation measurements gathered during three months at Lamarmora plant (ASM Brescia) under different operation conditions. From these results, an evaluation of the system is assessed, hinting at the most significant conclusions.

2. Neural network model

Neural networks form a set of programming and controlling techniques within the subject of Artificial Intelligence, which allows a system to learn; that is, recognize patterns and predict the behaviour from a number of training data [4]. The use of neural networks present many advantages over more traditional techniques. Firstly, they use simple mathematical calculations, reducing the computational cost, which allows them to be used in an on-line application. Moreover, these systems are very robust and fault-tolerant.

The construction of the network system is carried out through an iterative process through the design, training and validation stages. The choice of the neural network architecture is one of the most important stages in designing the system. The first step consists of selecting the most suitable type of neural network for the problem. At this point, a Feedforward network type was chosen, since, as opposed to other designs, it has a great generalization capability and generates reasonable outputs even when the inputs have not been explicitly defined during the training stage. The hidden layer is made up of sigmoid type neurons since they allow the simulation of both linear and non linear systems. The output layer is formed by linear type neurons to allow the network to simulate any function without discontinuities.

The outputs of the system are the oxygen partial pressure, the temperature and the residence time of each particle. The system can be constituted with different architectures using multi input-multi output networks (MIMO) or multi input-single output networks (MISO). The former architecture may save efforts in the design process, since a single network that produces several outputs is used. However, since the weights of the network are the same, the convergence of one output will determine the convergence of the others therefore complicating the process. In this way, it is advisable to use MIMO networks when the simulated outputs bear a similar relation to the inputs and depend on similar parameters. In this work, two independent neural network systems were chosen: a MISO network to generate the particles' residence time, and two-outputs MIMO networks to obtain the oxygen partial pressure and temperature profiles. The initial design of the oxygen partial pressure and temperature neural network was built using a single MIMO network for the whole operational range of the plant. However, large differences in the behaviour of the simulated profiles between full and partial load conditions were found. Therefore, separate networks for both load conditions were used. Similarly, since the case-study unit is equipped with four burners arranged in two rows of two burners each, in order to improve the convergence and accuracy of the results, separate networks for the upper and lower row of burners were considered. As a consequence of these modifications, the final design of the oxygen and temperature profiles network was formed by four MIMO networks. As far as the residence time network was concerned, a high fitness allowed only one MISO network to be adopted for the whole operational range.

The choice of the inputs must contribute to achieve the simplest possible model. For this reason, a carefully selection of the inputs must be done, improving the convergence of the problem. From a factorial analysis, which established the most relevant parameters affecting carbon losses, the inputs for both neural networks were selected (*a* – residence time network; *b* – oxygen and temperature profiles network):

- Load (full or partial load): 1 input ^{a,b}
- Excess O₂: 1 input ^{a,b}
- Air to coal mass flow ratio: 1 input ^{a,b}
- Particle diameter: 1 input ^{a,b}
- Uneven mass flow distributions among burners and mills: 4 inputs ^{a,b}
- Burner position (upper or lower row): 1 input ^a
- Starting feeding position of the particle in the burner: 1 inputs ^b
- Time: 1 input ^b

The hidden layer gives the network the capability of reproducing non linear effects. Since, in Feedforward neurons the hidden layer is made up of sigmoid functions which by themselves have the capability of simulating these non linear effects, it is enough to include one single hidden layer and thus reduce the complexity of the network. Next, the number of neurons that will constitute the hidden layer is determined. Increasing the number of neurons is equivalent to increasing the degrees of freedom of the system, which means that the network will be able to reproduce more accurately the training data. However, an excessive number of neurons should be avoided, since it will result in an overtraining situation. On the contrary, reducing the number of neurons, increases the network capability to generalize, at the expense of a decrease in the accuracy. It is necessary to balance both situations. Usually, the number of neurons is determined according to previous experiences, and then, from the results, an iterative process for the proper selection of the number of neurons is carried out. In general, it is preferable to start with a reduced number of neurons, and then increase this number by one unit at a time until the addition of a new neuron does not improve anymore the convergence of the problem. The hidden layer of the residence time network is formed by 20 neurons, whilst the oxygen and temperature profiles networks are made up of 15 neurons each.

Before starting the training of the neural network, a pre-treatment of the input data in order to expedite the learning process was carried out, removing from the training set any error in the inputs. Besides, the input and output data were normalized in the range -1 to 1. In this way, the range of values for all the inputs is the same, and as a consequence, the training is faster, and accuracy problems in the variables with lower values are avoided.

In order to obtain the data used to train the neural network, a design of experiments based on factorial analysis was carried out, in such a way that three levels of the most relevant factors affecting carbon losses (Excess oxygen, primary air to coal mass flow ratio, particle size, fuel/air mass flow imbalances through burners) were included, differentiating between full and partial load conditions. In order to completely characterize this design, 72 CFD simulations were carried out using a commercial application, CFX 4.4 (AEA Technology plc.) running on a Windows machine, Pentium IV X-dual processor 2.8 GHz, 2 GB RAM each. Once the accuracy of the numerical resolution was verified, we proceeded with the validation. For that purpose, the oxygen values at the exit of the boiler obtained in the simulations were compared against the predetermined values for each case. Figures 1.a and 1.b show the results obtained, and allows us to accept the correctness of the simulation.

For training the networks, the Levenberg-Marquardt algorithm with Bayesian regularization implemented in MatLab (trinbr), was used. This algorithm uses an approximation technique

based in Newton's method. In this way, the network learns by modifying the weights vector of the neurons. The Levenberg-Marquardt algorithm as compared with other training methods, gives the fastest response with a minimum convergence error. In addition, the Bayesian regularization provides the training algorithm with a superior generalization capability. This technique modifies the optimization function, including the quadratic sum of the network parameters (weights and bias) into the sum of the quadratic errors. This way, at the same time as the error is reduced, the network parameters are reduced too, so that the network generates softer responses that contribute to avoid overtraining situations [5]. The stop criterion for the training was reached when the quadratic errors and the weights remained relatively constant.

The validation process lies in verifying the correlation and generalization capabilities of the network. The validating methods widely used in the research community are based on graphical techniques. These kinds of methods vary also depending on the type of output that needs to be validated. As a result, in this work, two different graphical techniques to validate the residence time network and the oxygen and temperature profiles network were applied. For the former, a correlation graph that shows the comparison of the simulated and real data was used. In this way, it is possible to verify the fitness and the range of values where the best fit is attained. Figure 2 shows a good fitness for the residence times generated by the neural network over a wide range of values (4 s – 25 s), which covers the most probable variation of this parameter. With regard to the oxygen and temperature profiles networks validation, the most suitable graphical method to validate these is to represent together the real and simulated values as a function of time. Since the final use of the network lie in generating oxygen partial pressure and temperature profiles as a function of time for a particular operating condition; it is appropriate to verify if the simulated data adequately reproduces the oxygen and temperature profiles obtained by the CFD code for a wide range of conditions. Since there is a large number of profiles for each output (72 simulations x 1920 particles = 138240 profiles), the validation is a tedious and difficult task. So in order to interpret and compare the results, average temperature and oxygen profiles in five sieve fractions (< 30 μm , 30 – 60 μm , 60 – 90 μm , 90 - 120 μm , > 120 μm) were represented for each burner and simulation case considered. In addition to the seventy two CFD simulations used for the model development, twenty additional simulations were also considered in the validation. Figures 3.a and 3.b show two examples of the validation process for the averaged profiles. In the same way, similar results were obtained for the rest of cases considered in the validation, thus leading us to the conclusion that the neural networks system adequately reproduces the profiles obtained by any CFD simulation in the operational conditions range of the study plant.

The goal of generating these profiles is to use them as inputs in an advanced combustion model to determine the combustion efficiency within the furnace. Therefore, it is worthwhile to look at the time scales of Figure 3 to appreciate in detail the quality standard of the profiles and their influence on the later combustion calculations. It is only during the first 500 ms, when most of the combustion process takes place, when the neural network system is used to generate data every 5 ms; that is, 100 discrete points are obtained. From 0.5 seconds residence time onwards the time step has been progressively increased to save on computing time, as long as the coal conversion has been completed and the temperature and oxygen gradients are reduced. Furthermore, if computing processing power is not an issue it is possible to keep the time step increment of 5 ms due to the large amount of data used in the training stage from the CFD simulations i.e. around 100 million data points.

2. Combustion model

The development of the combustion model is focused on the reactions that take place on the particle surface, that is, devolatilization and char oxidation. Devolatilization was modelled using a commercial macromolecular network pyrolysis model (FG-DVC) [6]. Char oxidation was modelled and programmed in Fortran using a developed intrinsic formulae based on the carbon burnout kinetic model (CBK8) [7], that allows the transition to Zone I and includes the variation in the porous structure and reactivity of the char as combustion proceeds, mineral matter effects, and the influence of coal's maceral content [1].

3. Unburned carbon prediction system

The unburned carbon prediction system is formed by the union of the neural network system with the advanced combustion model. The combination of predictive techniques, that are generally used isolated, allows us to unify the following advantages within the same system: fluid dynamics and heat transfer from CFD codes, detailed chemical kinetics from advanced combustion models, and reduced computing cost and interpolation capabilities from neural networks. Figure 4 shows the final structure of the predictive system.

The order sequence for running the system is simple: For a given boiler condition, the system starts the neural network system and generates an output file containing the temperature and oxygen partial pressure information for the particles in the furnace, as well as their residence times. Immediately after this output file has been generated, the coal properties are also introduced as an input in the coal combustion model to determine the unburned carbon in ash. The combustion model is divided into two subroutines corresponding to the devolatilization and

char oxidation stages. The former determines the amount of volatiles yielded together with the resultant char residue in which the intrinsic char oxidation model is applied.

One of the main advantages of this predictive system is the reduced number of inputs (boiler conditions and coal properties) required to run the model and their availability at any power station: coal load, excess oxygen at the exit of the boiler, primary air to coal mass flow ratio, uneven mass flow distributions in the boiler (this input is adapted to the information available in the plant), proximate and ultimate coal analysis, petrographic coal analysis (if available), and pulverized coal size distribution. The kinetic parameters of the combustion processes form part of a third group of inputs which are directly introduced in the combustion model. These parameters can be either determined empirically by DTF experiments or be approached through correlations or databases [1].

3.1 Validation and discussion

The validation of the unburned carbon prediction system is carried out using standard plant instrumentation measurements gathered at Lamarmora ASM Brescia power station during the year 2005 (January – March 2005). Study cases were obtained covering the regular range of variation under full and partial load conditions. In the study, two coals from Central America commonly used in the plant over the last 5 years (Guasare from Venezuela and Carbonandes from Colombia) and a coal from Russia, recently used to evaluate its influence on the combustion efficiency, were burned separately. Proximate, ultimate and petrographic (when available) analysis for these three coals are presented in Table 1. Generally, petrographic analysis is not performed in power plants. In such case, we can make use of databases, where coals from all over the world are catalogued. In this work, since no petrographic analysis was available, inertinite and vitrinite values for Gausare coal were taken from [8].

The average computational time for each case calculation, using an Intel Core 2 DUO 6300 (1.86 GHz, 0.86 GB de RAM) machine, was less than one minute. Figures 5.a and 5.b show the dispersion diagrams for the carbon-in-ash values gathered at the plant during the test period against the calculated values from the predictive system, under full and partial load conditions.

Figures 5.a and 5.b indicate an adequate correspondence with plant data and calculated values from the predictive system, since the cloud of points are close to the bisector of the first quadrant for both diagrams. Next, it was necessary to analyze, separately, the results obtained under full load conditions where the variation in the operating conditions is slight and the results obtained under partial load conditions where this operational range is larger. As a result, the fitness of the model under full load conditions (Figure 5.a) shows a good agreement for the

three study goals. Focusing now on the more distant points from the bisector, it is not possible to identify the reason for this inaccuracy, since the operating conditions in those cases were very similar to the ones in other cases where the carbon-in-ash values were apparently “normal”. Consequently, these “fault points” may have been due to the data gathering process or due to other factors not included in the instrumented controls of the plant and therefore not considered in the model development. Fortunately, these “fault points” represent a negligible percentage and do not affect the general conclusions of the model. With regards to the results under partial load conditions (Figure 5.b), there exists a larger dispersion between plant data and the calculated values from the predictive system. The reason for this discrepancy can be explained from a fluid dynamics point of view. Of course, under partial load conditions the stratification of the conditions within the boiler is more relevant than in the case of full load conditions where there is a greater uniformity in the temperature and oxygen partial pressure profiles. Starting from this assumption and taking into account that neural networks average and interpolate those values in the furnace, the results found are not strange. In fact, this behaviour illustrates one of the biggest challenges of the problem and thus, where an increased emphasis in the neural networks system development have been placed. Designing a neural network with a higher number of neurons would improve the fluid and thermal description within the furnace. However, an excessive number of neurons should be avoided since it would result in an overtraining situation leading to a decrease in the generalization capability of the network. Consequently, in order to find a balanced situation, we opted for complicating the neural networks system design by considering different networks for the upper and lower row of burners and including the starting feeding position of the particles within the burner. Finally, an iterative process to select the most suitable number of neurons for the problem was carried out.

Additionally to the correlation diagrams in Figures 5.a and 5.b, a statistical study to analyze in detail the correspondence existing between plant data and the values calculated by the predictive system was performed. For this, the statistical distributions of both data sets (plant data and system predicted values) were compared. Since the distributions type was unknown, the Anderson-Darling normality test for both sets was carried out. Figures 6.a (Full load) and 6.b (Partial load), show the probability diagrams obtained from the Anderson-Darling test, overlaid for both data sets and including the limits corresponding to a confidence level of 95 %. The interpretation of Figures 6.a and 6.b suggests that both sets are not normal (p -value < 0.005). Therefore, in order to compare both distributions, we should make use of the mean, standard deviation, and the probability diagram itself. Under full load conditions, the comparison of the probability diagrams together with mean and standard deviation for both sets shows a good agreement. On the other hand, under partial load conditions the correspondence with the mean

is in agreement, but there exists a discrepancy in the standard deviation. These results confirm the discussion presented for Figures 5.a and 5.b.

It is also noticeable that Figures 5.a and 5.b show a clear distinction between the three coals in the results. Obviously, carbon-in-ash values depend on the mineral matter content of the coal. Therefore, in order to obtain a rigorous estimation of the accuracy of the unburned carbon prediction system, it is necessary to view the results in the same base line i.e. the overall burnout.

The last step in the development of the system lies in determining and expressing the global accuracy of the model. To achieve this, the statistical distribution of the overall burnout prediction error, calculated by difference of the plant data and the values predicted by the system, was analyzed. Again, the Anderson-Darling normality test was applied, this time giving a positive result for the test (p-value = 0.012), as can be seen in Figure 7. It is outstanding that, in spite of the fact that the p-value is small, a leptokurtic distribution (kurtosis = 0.558172) was obtained, showing a smaller concentration of points in the extremes with a greater concentration around the mean value. This gives an extra confidence in the results obtained when analyzing the normal distribution. Another important result is that the mean is moved a little from zero, which means that the model slightly overpredicts burnout. This result is not worrying, since it is very small (0.071778), but it should be considered in the construction of the confidence intervals.

Taking the values of the 95.5 % confidence interval for the mean and standard deviation from Figure 7, it is possible to define an interval for the prediction error of a punctual estimation, with a 95.5 % confidence level. That is, 95.5 % of the probability mass of the prediction error is inside the interval $[\mu - 2\sigma, \mu + 2\sigma]$. Consequently, the error for a punctual estimation (E_{Bnt}) can be expressed according to Eq. (1).

$$E_{Bnt} = \mu \pm 2 \cdot \sigma \approx \pm 0.82 \% \quad (1)$$

Since the mean of the distribution is moved from zero, the lower extreme of the interval of Eq. (1) is in fact - 0.75 %. However, to simplify the interpretation, the error has been expressed using a symmetric interval from the higher value (0.82 %) according to Eq. (1), so that the confidence level is in fact higher than 95.5 %.

In addition to the determination of the prediction error for a punctual estimation of the model, it is advisable to give the averaged prediction error for a set of random estimations. This practice is especially suitable in the case where using an on-line data acquisition system that collects

data in short periods of time and, due to the fluctuations, target control variables are usually expressed as an average. Following this analysis, the average error for a number of random estimations ($n_o > 30$) for a 95 % confidence level ($\alpha = 0.05$) is within the interval defined in Eq. (2).

$$\bar{E}_{Bnt} = \bar{x}_n \pm \frac{\sigma}{\sqrt{n_o}} \cdot z_{1-\alpha/2} \approx \pm 0.15 \% \quad (2)$$

Again, a symmetric interval has been given, notwithstanding that the mean of the distribution has moved from zero, and so, the lower extreme of the interval of Eq. (2) is in fact -0.07% .

In order to obtain an indicator of the model accuracy in terms of the unburned carbon in ash (%), we can make use of the Kurose's et al. [9] expression (Eq. (3)). This leads to expressions, that depend on the material matter content of the coal and the burnout.

$$CIA_{Bnt} = 100 \cdot \frac{100 - Bnt_{UPS}}{\left(\frac{Z}{1-Z}\right) + (100 - Bnt_{UPS})} \quad (3)$$

Where Z is the ash content (%), and CIA_{Bnt} is the carbon-in-ash value corresponding to a burnout level (% , coal basis) Bnt_{UPS} .

Depending on the type of error that is used in Eq. (3), punctual or averaged for a number of random estimations, we will obtain respectively both expressions for the accuracy of the model. Considering the most disadvantageous situation, Table 2 summarizes the maximum error achieved for the three study coals, both for a punctual estimation and for the average of a set of random estimations. It should be noted that the calculated values in this table, are maximum errors. That is, these points would be located at the extremes of the distribution function (close to a signification level $\alpha/2$ or $1-\alpha/2$). Furthermore, it should be remembered that the more sharpened the shape of the probability distribution function (positive kurtosis), the more points are located around the mean value, and consequently, this shows that the values presented in Table 2 are very exceptional. Finally, it should be considered that none of the prediction errors obtained in the study have been discarded from the analysis. Generally, in statistical studies, the values located furthest away from the mean are discarded from the analysis if there is not a logical interpretation for them according to the data available in the problem. In the analysis of Figures 5.a and 5.b, it was mentioned that that the more distant points from the bisector did not correspond to any apparent reason to infer an error in the model. In spite of this, we have decided to keep these fault points in the error analysis, in order to give a more conservative estimation of the prediction error and so taking into consideration the errors derived from the acquisition data process.

4. Conclusions

In this work, an unburned carbon prediction system that provides an on-line estimation of the unburned carbon in ash for a given operating condition in a utility boiler has been developed.

The final system is formed by a neural network model and an advanced combustion model. The former provides the system with the evolution of the temperature and oxygen partial pressure profiles found by the particles in their trajectories across the boiler for the range of operation conditions in the study plant. The other sub-model is the combustion model itself which is divided into two subroutines. One corresponding to the devolatilization of the coal particle (FG-DVC), and the other the char oxidation intrinsic model which includes thermal annealing, variations in the porous structure as combustion proceeds, ash inhibition effects, and the influence of macerals in the reactivity of the char.

Results from the predictive system have been compared against those gathered at the plant, after carrying out a statistical study for validating and determining the prediction capability of the system. The comparison of both sets of data (gathered at the plant and predicted by the system) has shown an excellent correspondence in the probability distribution, mean and standard deviation along the whole range of situations studied. The maximum error achieved for the burnout prediction is 0.82 % for a punctual estimation, and 0.15 % for the average of a number of random estimations.

Finally, the main advantages of the unburned carbon prediction system are presented in a schematic way:

- The system includes a detailed description of the transport phenomena involved in the problem by implementing the neural network system which was trained with CFD simulations covering the operation range of the plant.
- The neural network system itself allows us to interpolate for other conditions not specifically used during the training stage.
- The combustion model describes in detail both devolatilization and char oxidation.
- The number of inputs of the predictive system is small and they are available at any power station.
- The computational time, less than a minute, allows us to use it in an on-line monitoring system of a power station.
- The accuracy of the system is good enough in the whole range of operation of the plant, and improves the results obtained with other predictive systems based on zonal approaches.

Acknowledgments

The work presented in this paper has been partially supported by the research project 7220-PR-130-CARNO 'Development of a carbon-in-ash notification system' funded by the European Commission under the ECSC research program. The authors gratefully acknowledge Lamarmora (ASM Brescia) plant personnel for their support and collaboration. We also thank helpful discussions held with Dr. Pedro Jodrá for the statistical study of the results.

References

1. Pallarés J, Arauzo I, Williams A. Integration of CFD codes and advanced combustion models for quantitative burnout determination. *Fuel*, 2007 (In press).
2. Fiveland WA, Jamaluddin AS. An efficient method for predicting unburned carbon in boilers. *Combustion Science and Technology*, 1992, 81: 147-167.
3. Severin T, Wirtz S, Scherer V, Roth K. Simulation of pulverised coal fired boilers with a simplified cellnet model. *Chemie-Ingenieur-Technik*, 2005; 77: 1042.
4. Bishop CM. *Neural networks for pattern recognition*. Oxford University Press, 1995.
5. Demuth H, Beale M. *Mat Lab Neural Network Toolbox 4.0*. 2002.
6. Solomon PR, Hamblen DG, Carangelo DG, Carangelo RM, Serio MA, Deshpande GV. General model of coal devolatilization. *Energy & Fuels*, 1988; 2:405-422.
7. Hurt R, Sun J-K, Lunden M. A kinetic model of carbon burnout in pulverized coal combustion. *Combustion and Flame*, 1998; 113:181-197.
8. Barranco R, Cloke M, Lester E. Prediction of the burnout performance of some South American coals using a drop-tube furnace. *Fuel*, 2003; 82:1893-1899.
9. Kurose R, Ikeda M, Makino H. Combustion characteristics of high ash coal in a pulverized coal combustion. *Fuel*, 2001; 80: 1447-1455.

Table 1

Proximate analysis (as received)	Guasare	Carboandes	Russian
Moisture (%)	6.91	9.60	9.56
Ash (%)	5.75	6.44	7.14
Volatile (%)	35.00	34.17	36.09
Fixed Carbon (%) ^{cd}	52.34	49.79	47.21
Ultimate analysis (as received)			
Carbon (%)	72.75	69.21	65.62
Hydrogen (%)	4.93	4.38	4.66
Oxygen (%) ^{cd}	7.75	8.38	10.74
Nitrogen (%)	1.27	1.36	1.90
Sulphur (%)	0.64	0.64	0.38
Petrographic analysis			
Inertinite (%)	0.24	N/A	N/A
Vitrinite (%)	0.76	N/A	N/A

Table 1. Proximate, ultimate and petrographic analysis for the coals used in the study.

^{cd} Calculated by difference

Table 2

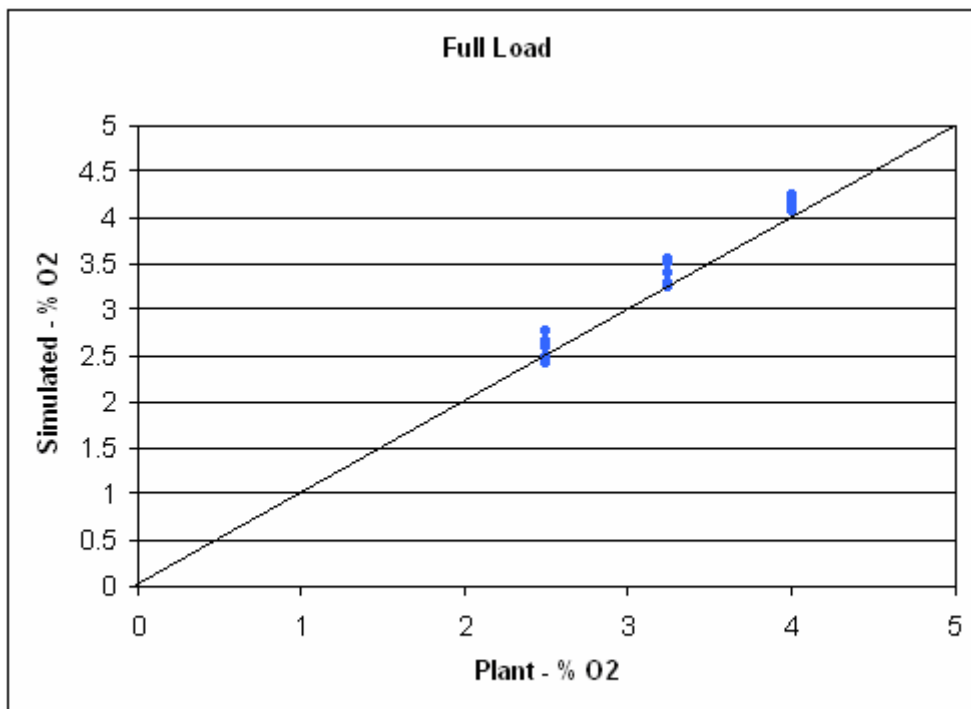
CIA maximum errors (%)		
	Punctual estimation	Averaged estimation
Guasare	9.48	1.52
Carbonandes	8.44	1.38
Russian	7.73	1.27

Table 2. Maximum errors in the prediction of carbon-in-ash values within a confidence level of 95 % for the three study coals.

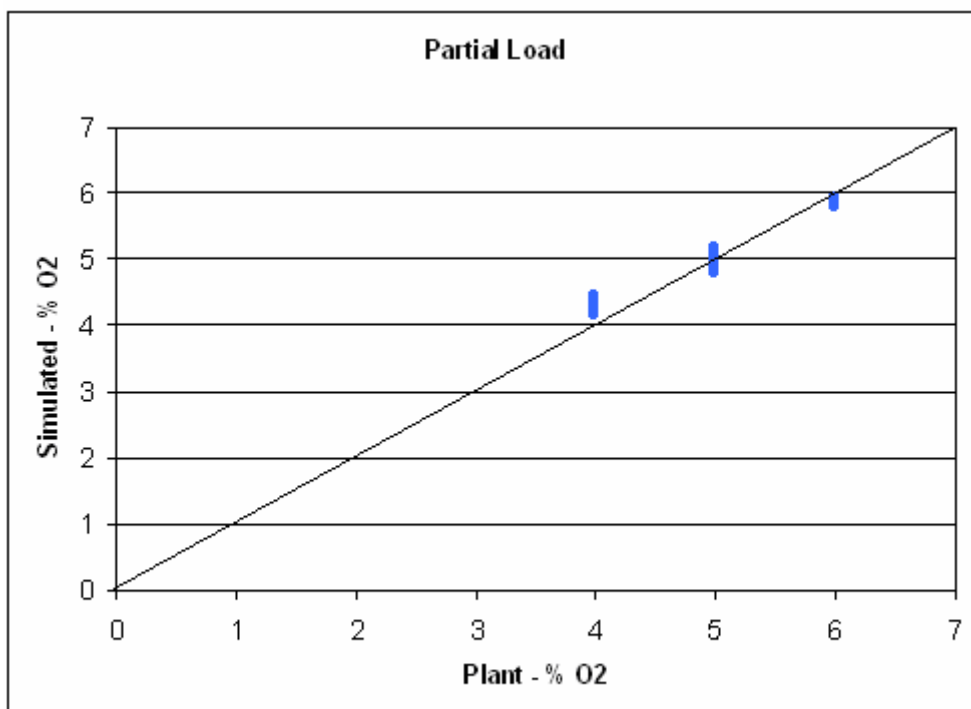
Captions to illustrations

- Fig. 1. Experimental values compared with numerical predictions for mean oxygen content (vol. %) in flue gases for the simulated scenarios: (a) Full load, (b) Partial load.
- Fig. 2. Correlation graph of CFD simulated and neural network prediction residence time.
- Fig. 3. Graphical comparison of temperature and oxygen partial pressure averaged profiles simulated by the neural network and the ones obtained by the CFD code: (a) Particle size ($< 30 \mu\text{m}$), (b) Particle size (60 - 90 μm).
- Fig. 4. Unburned coal prediction system block diagram.
- Fig. 5. Correlation graph of simulated (UPS) and real (plant) carbon-in-ash values (%): (a) Full load, (b) Partial load.
- Fig. 6. Probability diagrams of simulated (UPS) and real (plant) carbon-in-ash values (%): (a) Full load, (b) Partial load.
- Fig. 7. Statistical distribution of the UPS burnout (% , coal basis) prediction error.

Figure 1



(a)



(b)

Figure 2

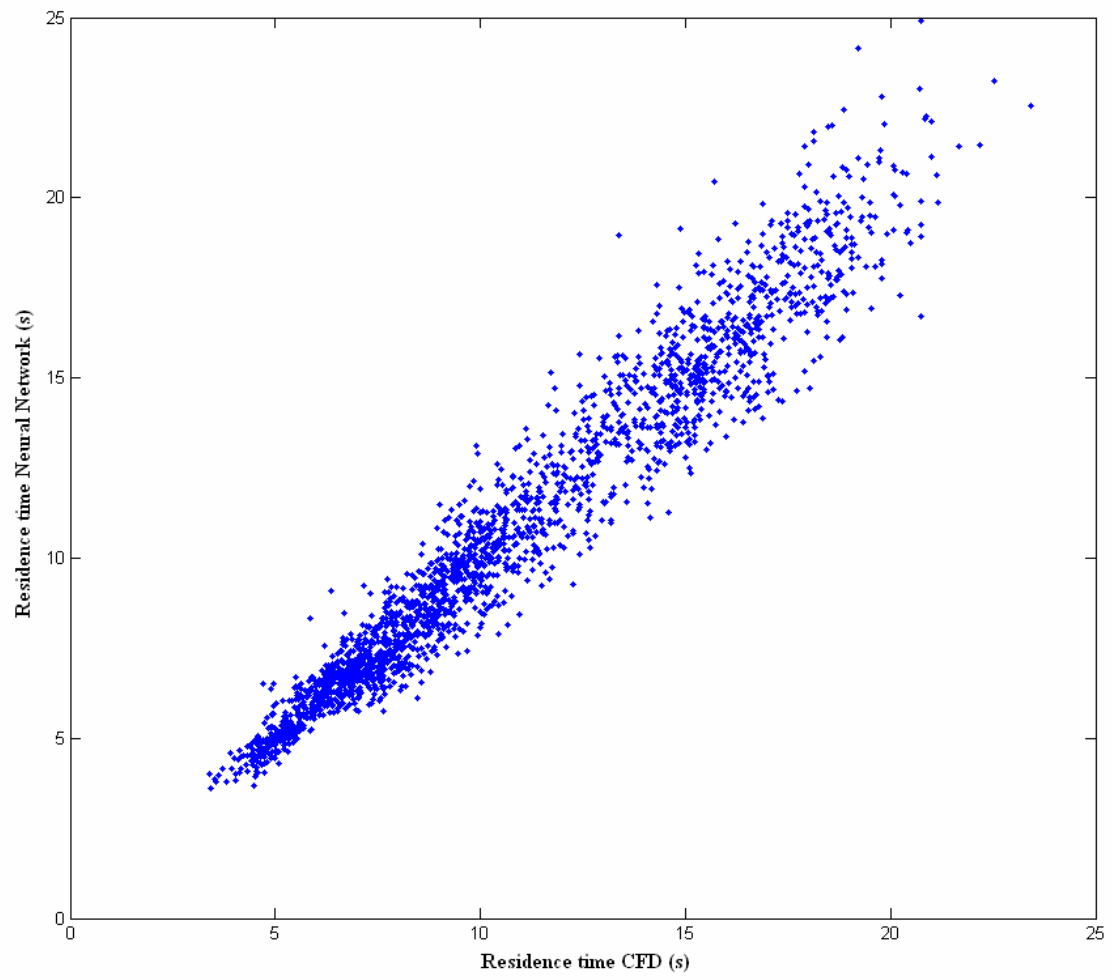
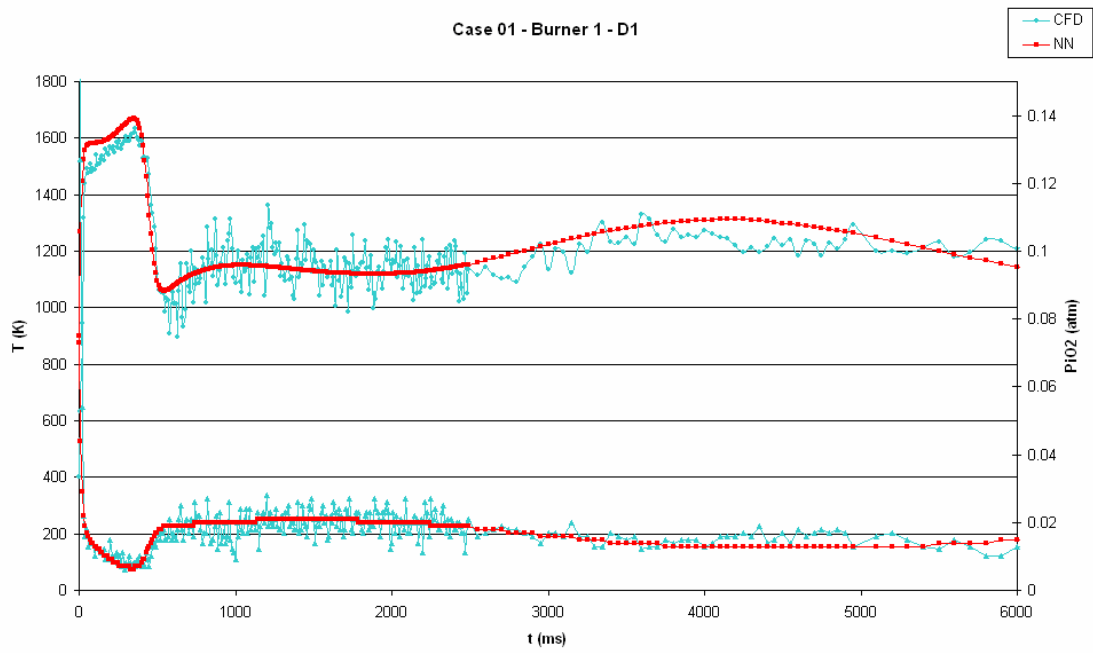
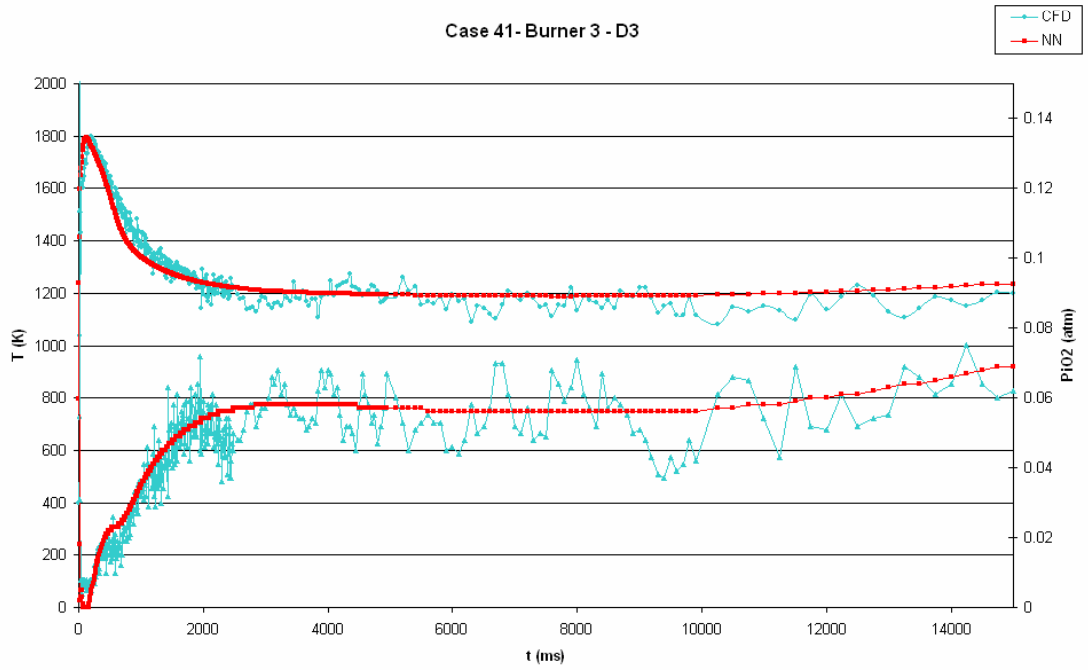


Figure 3



(a)



(b)

Figure 4

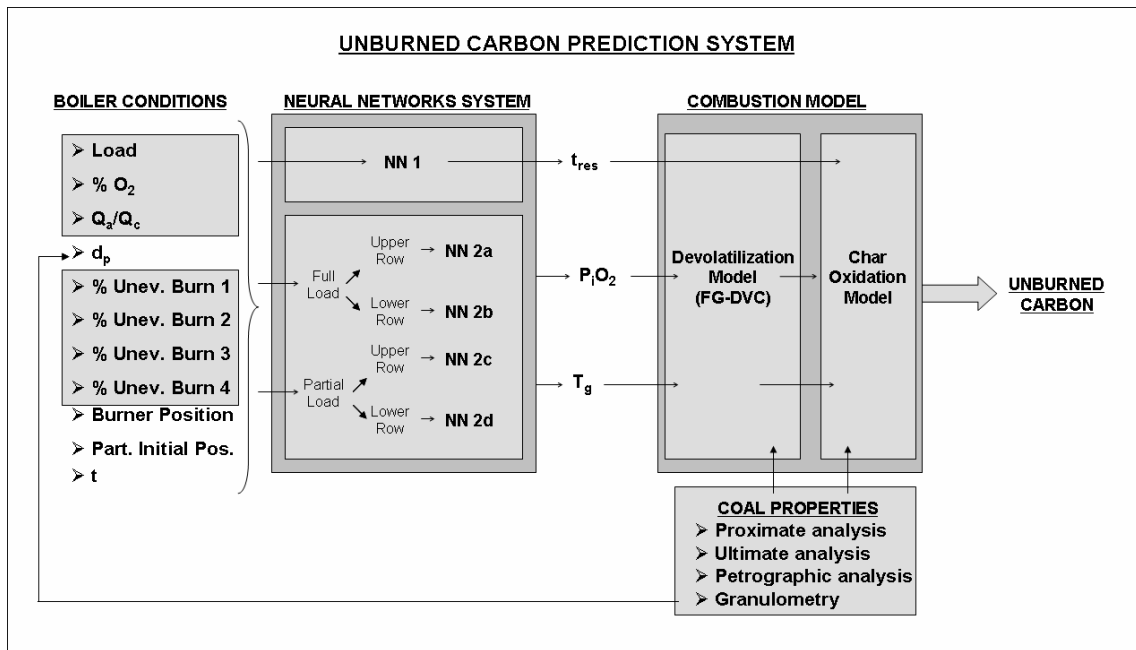
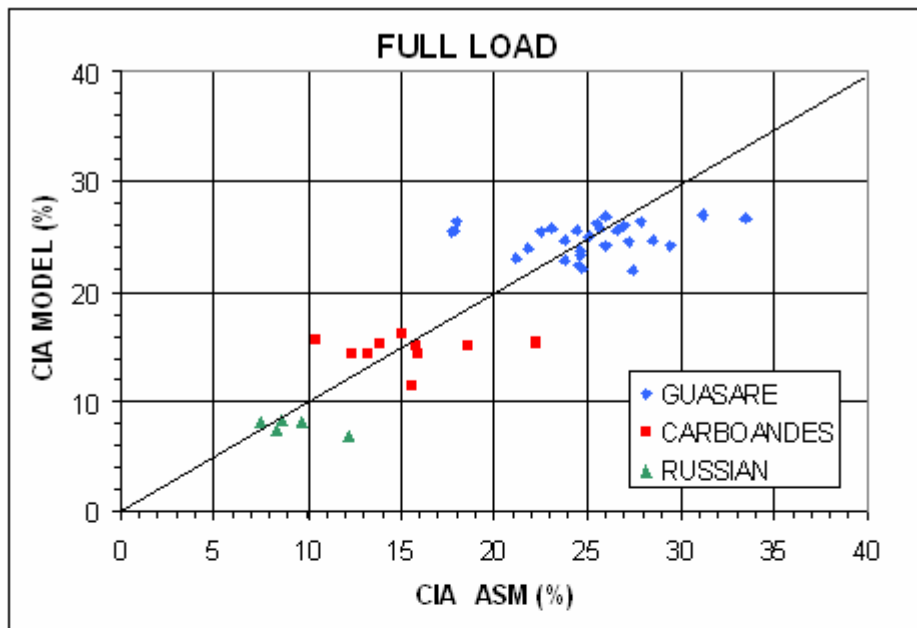
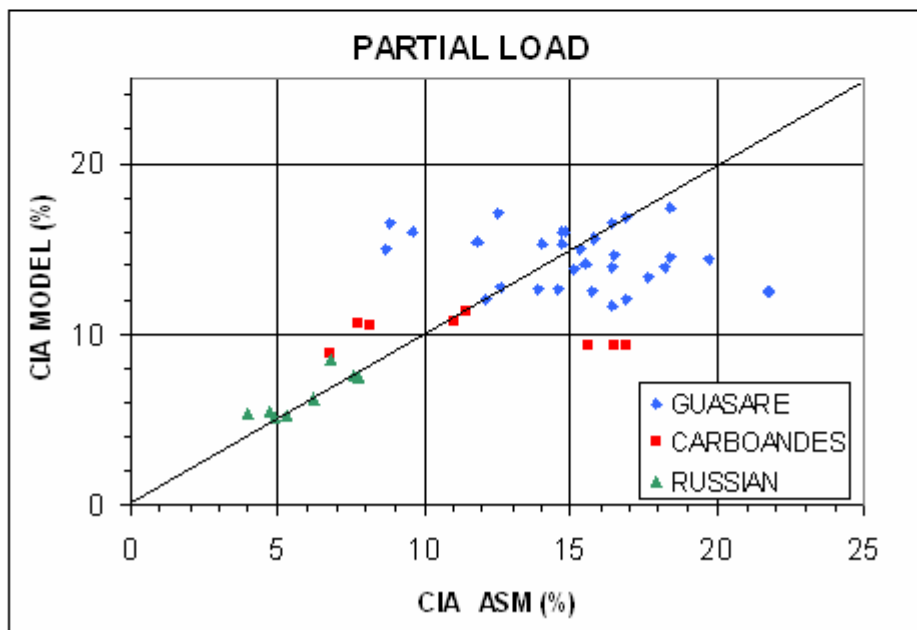


Figure 5

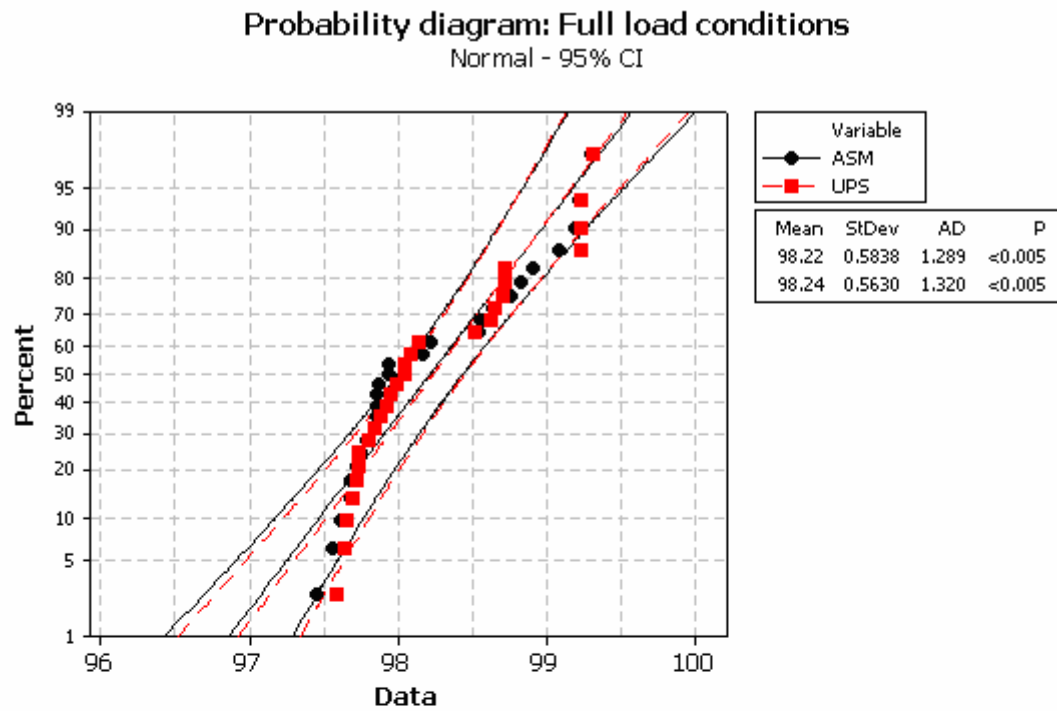


(a)

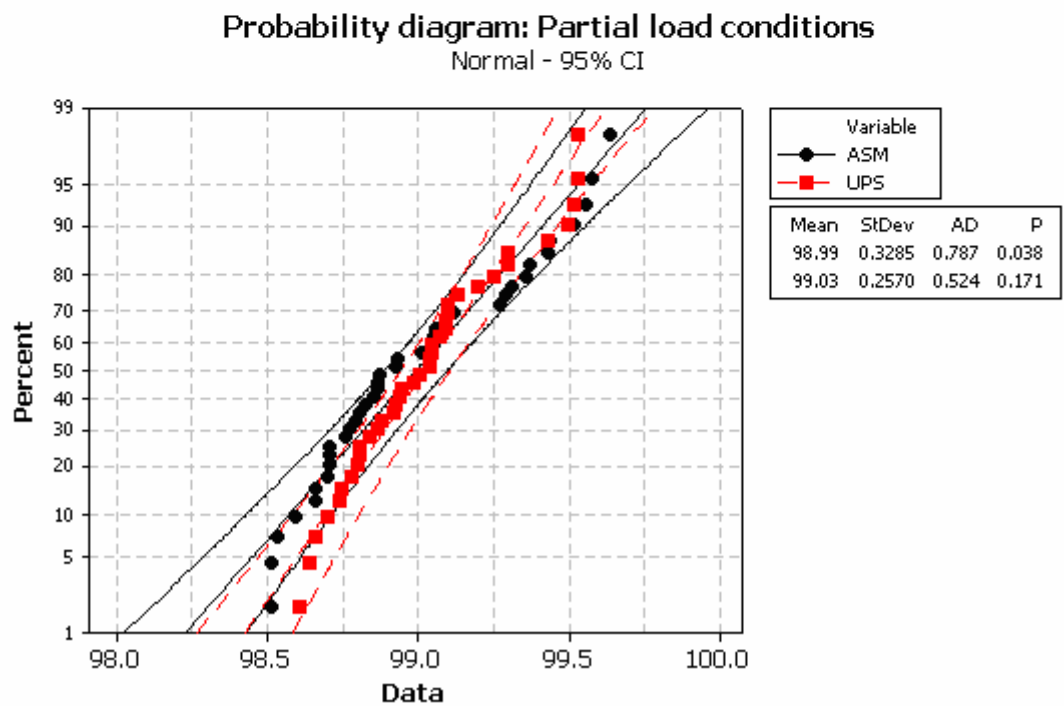


(b)

Figure 6



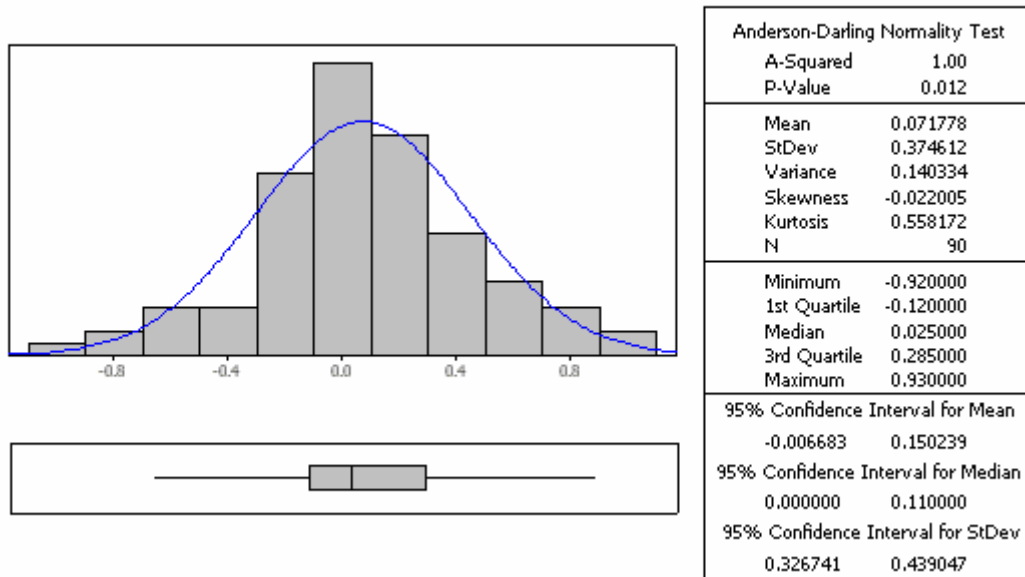
(a)



(b)

Figure 7

Statistical error distribution



BIBLIOGRAFÍA

- Aarna I, Suuberg EM. Changes in reactive surface area and porosity during char oxidation. 27th (International) on Combustion. The Combustion Institute, 1998: 2933-2939.
- Abd El-Samed AK, Hampartsoumian E, Farag TM, Williams A. Variations of char reactivity during simultaneous devolatilization and combustion of coals in a drop-tube reactor. *Fuel*, 1990; 69: 1029-1036.
- Anderson JD. Introduction to computational fluid dynamics. Lecture Series von Karman Institute for Fluid Dynamics, 2000.
- Anthony DB, Howard JB, Hottel HC, Meissner HP. Rapid devolatilization and hydrogasification of bituminous coals. *Fuel*, 1976; 55: 121-128.
- Badzioch S, Hawksley PGW. Kinetics of thermal decomposition of pulverized coal particles. *Industrial engineering chemical processes design development*, 1970; 9: 521-530.
- Backreedy RI, Habib R, Jones JM, Pourkashanian M, Williams A. An extended coal combustion model. *Fuel*, 1999; 78: 1745-1754.
- Backreedy RI. Modelling the combustion of pulverized coal. Tesis Doctoral. Department of Fuel and Energy, University of Leeds, 2002.
- Backreedy RI, Jones JM, Pourkashanian M, Williams A. Burn-out of pulverised coal and biomass chars. *Fuel*, 2003; 82: 2097-2105.
- Backreedy RI, Jones JM, Ma L, Pourkashanian M, Williams A, Arenillas A, Arias B, Pis JJ, Rubiera F. Prediction of unburned carbon and NO_x in a tangentially fired power station using single coals and blends. *Fuel*, 2005; 2196-2203.
- Backreedy RI, Fletcher LM, Ma L, Pourkashanian M, Williams A. Modelling pulverized coal combustion using a detailed coal combustion model. *Combustion Science and Technology*, 2006; 178: 763-787.
- Barranco R, Cloke M, Lester E. Prediction of the burnout performance of some South American coals using a drop-tube furnace. *Fuel*, 2003; 82: 1893-1899.
- Bartok W, Sarofim AF. *Fossil Fuel Combustion*. John Wiley & Sons, Inc. 1991.
- Basu P, Cefa K, Jestin L. *Boilers & Burners: Design and Theory*. Springer, 2000.
- Baum MM, Street PJ. Predicting the combustion behaviour of coal particles. *Combustion Science and Technology*, 1971; 3: 231-243.
- Beely TJ, Crelling JC, Gibbins JR, Hurt R, Man CK, Williamson J. *Coal Science*, 1995: 615-618.
- Belosevic S, Sijercic M, Oka S, Tucakovic D. Three-dimensional modelling of utility boiler pulverized coal tangentially fired furnace. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2006; 49: 3371-3378.

-
- Bews IM, Hayhurst AN, Richardson SM, Taylor SG. The order, Arrhenius parameters and mechanism of the reaction between gaseous oxygen and solid carbon. *Combustion and Flame*, 2001; 124: 231-245.
 - Bhatia SK, Perlmutter DD. A random pore model for fluid-solid reactions: II Diffusion and transport effects. *AiChE*, 1981; 27: 247-254.
 - Bishop CM. *Neural networks for pattern recognition*. Oxford University Press, 1995.
 - Carpenter AM. *Coal classification*. IEA Coal Research, 1988; 12.
 - Carpenter AM, Skorupska NM. *Coal combustion – analysis and testing*. IEA Coal Research, 1993; 64.
 - Carsky M, Kuwornoo DK. Neural network modelling of coal pyrolysis. *Fuel*, 2001; 80: 1021-1027.
 - CFX-4.4 manuals. AEA Technology plc, 1997.
 - Chan ML, Jones JM, Pourkashanian M., Williams A. The oxidative reactivity of coal chars in relation to their structure. *Fuel*, 1999; 78: 1539-1552.
 - Charpenay S, Serio MA, Solomon PR. The prediction of coal char reactivity under combustion conditions. 24th Symposium (International) on Combustion. The Combustion Institute, 1992; 1189-1197.
 - Chen KH, Shuen JS. *A coupled multi-block solution procedure for spray combustion in complex geometries*. AIAA press, 1993.
 - Cloke M, Lester E, Belghazi A. Characterisation of the properties of size fractions from ten world coals and their chars produced in a drop-tube furnace. *Fuel*, 2002; 81: 699-708.
 - Cloke M, Lester E, Thompson AW. Combustion characteristics of coals using a drop-tube furnace. *Fuel*, 2002; 81: 727-735.
 - Cloke M, Wu T, Barranco R, Lester E. Char characterisation and its application in a coal burnout model. *Fuel*, 2003; 82: 1989-2000.
 - Coelho LMR, He XG, Costa M, Azevedo JLT. Full boiler performance modelling. *Joule III Programme. Clean Coal Technology R&D*, 2000.
 - Coimbra CFM, Azevedo JLT, Cavalho MG. 3-D numerical model for predicting NO_x emissions from an industrial pulverized coal combustor. *Fuel*, 1994; 73: 1128-1134.
 - Cortés C, Gil A. Modeling the gas and particle flow inside cyclone separators. *Progress in Energy and Combustion Science*, 2007; 33: 409-452.
 - Cremer MA, Wang DH, Chiodo AP. CFD based evaluation of the sensitivity of furnace conditions to burner air and fuel imbalances. *EPRI-EPA-DOE-A&WMA Power Plant Air Pollutant Control Mega Symposium, Washington DC (USA)*, 2004.
 - Crowe CT, Sharma MP, Stock DE. The particle-source-in cell (PSI-cell) model for gas droplets flows. *Journal of Fluids Engineering*, 1977; 99:325-32.

-
- Davis KA, Eddings EG, Heap MP. Computational investigation of carbon-in-ash levels for a wall-fired boiler after low-NO_x combustion modifications. Pittsburgh Coal Conference, 1998.
 - Dick E. Introduction to finite volume methods in computational fluid dynamics. Lecture Series von Karman Institute for Fluid Dynamics, 2000.
 - Demuth H, Beale M. Mat Lab Neural Network Toolbox 4.0. 2002.
 - Díez LI. Monitorización y simulación en tiempo real de calderas de potencia de carbón pulverizado. Tesis Doctoral, Universidad de Zaragoza, 2002.
 - Domino SP, Smith PJ. Loss on ignition in coal combustion simulations. Interim Report DE-FG22-949C9422, University of Utah, 1999.
 - Driest ER. On turbulent flow near a wall. Journal of the Aeronautic Science, 1956; 1007-1011, 1036.
 - Eaton AM, Smoot LD, Hill SC, Eatough CN. Components, formulations, solutions, evaluation, and application of comprehensive combustion models. Progress in Energy and Combustion Science, 1999; 25: 387-436.
 - Eberhart RC, Dobbins RW. Neural network PC tools. Academic Press Inc., 1990.
 - Essenhigh RH, Howard JB. Toward a unified combustion theory: The pyrolysis and combustion mechanism of carbonaceous solids. Industrial and Engineering Chemistry, 1966; 58: 14-23.
 - Essenhigh RH, Klimesh HE, Förstch D. Combustion Characteristics of carbon: Dependence of the Zone I-Zone II transition temperature (T_c) on particle radius. Energy & Fuels, 1999; 13: 826-831.
 - Essenhigh RH, Förtsch D, Klimesh HE. Combustion characteristics of carbon: Influence of the Zone I-Zone II transition on burn-out in pulverized coal flames. Energy & Fuels, 1999; 13: 955-960.
 - Fan J, Quian L, Ma Y, Sun P, Cen K. Computacional modeling of pulverized coal combustion processes in tangentially fired furnaces. Chemical Engineering Journal, 2001; 81: 261-269.
 - Farzan H, Essenhigh RH. High intensity combustion of coal. 19th Symposium (International) on Combustion. The Combustion Institute, 1982: 1105-1111.
 - Ferziger JH, Peric M. Computational methods for fluid dynamics. Springer, 2002.
 - Field MA, Gill DW, Morgan BB, Hawksley PGW. Combustion of pulverized coal. BCURA, 1967.
 - Fiveland WA, Jamaluddin AS. An efficient method for predicting unburned carbon in boilers. Combustion Science and Technology, 1992, 81: 147-167.

-
- Fletcher TH, Kerstein AR, Pugmire RJ, Grant DM. Chemical percolation model for devolatilization:II. Temperature and heating rate effects on products yield. *Energy & Fuels*, 1990; 4: 54.
 - Fletcher TH; Kerstein RJ, Pugmire RJ, Solum MS, Grant DM. A chemical percolation model for devolatilization: 3. Chemical structure as a function of coal type. *Energy and fuels*, 1992; 6: 414.
 - Fletcher TH, Kerstein A, Pugmire RJ, Solum M, Grant DM. A chemical percolation model for devolatilization: Summary. Brigham Young University, 1992.
 - Fluent Inc. Manuals, 2001.
 - Förtsch D, Essenhigh RH, Schnell U, Hein KRG. On the application of the Thiele/Zeldovich analysis to porous carbon combustion. *Energy & Fuels*, 2003; 17: 901-906.
 - Gale TK, Bartholomew CH, Fletcher TH. Effects of pyrolysis heating rate on intrinsic reactivities of coal chars. *Energy & Fuels*, 1996; 10: 766-775.
 - Garetta R. Sistema de supervision basado en modelos inteligentes para gestionar los ciclos de limpieza en una caldera de biomasa. Tesis Doctoral, Universidad de Zaragoza, 2004.
 - Gavalas GR. Analysis of char combustion including the effect of pore enlargement. *Combustion Science and Technology*, 1981; 24: 197-210.
 - Genetti DB. An advanced model of coal devolatilization based on chemical structure. Tesis doctoral. Department of chemical engineering, Brigham Young University, 1999.
 - Gera D, Mathur M, Freeman M, O'Dowd W. Moisture and char reactivity modelling in pulverized coal combustors. *Combustion Science & Technology*, 2001; 172: 35-69.
 - Glarborg P. Solid combustion course. Universidad de Zaragoza, 2001.
 - Grant DM, Puigmire RJ, Fletcher TH, Kerstein AR. A chemical model of coal devolatilization using percolation lattice statistics. *Energy & Fuels*, 1989; 3: 175.
 - Gouesbet G, Berlemont A. Eulerian and lagrangian approaches for predicting the behaviour of discrete particles in turbulent flows. *Progress in Energy and Combustion Science*, 1999; 25: 133-159.
 - Graham DI, Moyeed RA. How many particles for my Lagrangian simulations? *Powder Technology*, 2002; 125: 179-186.
 - Gurgel Veras CA, Saastamoinen J, Carvalho JR, Aho M. Overlapping of the devolatilization and char combustion stages in the burning of coal particles. *Combustion and Flame*, 1999; 116:567-579.
 - Haas J, Tamura M, Weber R. Characterization of coal blends for pulverized fuel combustion. *Fuel*, 2001; 80: 1317-1323.
 - Hanjalic K. Turbulence closure Models. Lecture Series von Karman Institute for Fluid Dynamics, 2000.
-

-
- Hampartsoumian E, Pourkashanian M, Williams A. Combustion rates of chars and carbonaceous residues. *Journal of the Institute of Energy*, 1989; 48-56.
 - Hampartsoumian E, Murdoch PL, Pourkashanian M, Trangmar DT, Williams A. The reactivity of coal chars gasified in a carbon dioxide environment. *Combustion Science and Technology*, 1993; 92: 105-121.
 - Hampartsoumian E, Nimmo W, Rosenberg P, Thomsen E, Williams A. Evaluation of the chemical properties of coals and their maceral group constituents in relation to combustion reactivity using multi-variate analyses. *Fuel*, 1998; 77: 735-748.
 - Hamor RJ, Smith IW, Tyler RJ. Kinetics of combustion of a pulverized brown coal char between 630 and 2200 K. *Combustion and Flame*, 1973; 21: 153-162.
 - Hao Z, Kefa C, Jianbo M. Combining neural network and genetic algorithms to optimize low NO_x pulverized coal combustion. *Fuel*, 2001; 80: 2163-2169.
 - Haynes BS. A turnover model for carbon reactivity I. development. *Combustion and Flame*, 2001; 126: 1421-1432.
 - Hesselmann G. Modelling of pulverised coal fired furnaces with advanced combustion systems by integrated performance programs. III Joule Programme. *Clean Coal Technology R&D*, 2000.
 - Hong J, Hecker WC, Fletcher TH. Predicting effectiveness factor for m-th order and langmuir rate equations in spherical coordinates. *ACS Division of Fuel Chemistry*, 1999; 44: 1011-1015.
 - Hong J. Modelling char oxidation as a function of pressure using an intrinsic Langmuir rate equation. Tesis Doctoral, Brigham Young University, 2000.
 - Hottel HC, Sarofim AF. *Radiative Transfer*. McGraw Hill, 1967.
 - Howard JB, Essenhigh RH. Pyrolysis of coal particles in pulverized fuel flames. *I&EC Process Design and Development*, 1967: 74-84.
 - Hurt RH, Mitchell RE. Unified high-temperature char combustion kinetics for a suite of coals of various rank. 24th Symposium (International) on Combustion. *The Combustion Institute*, 1992: 1243-1250.
 - Hurt RH. Reactivity distributions and extinction phenomena in coal char combustion. *Energy & Fuels*, 1993; 7:721-733.
 - Hurt RH, Gibbins JR. Residual carbon from pulverized coal fired boilers:1. Size distribution and combustion reactivity. *Fuel*, 1995; 74: 471-480.
 - Hurt RH, Davis KA, Yang NYC, Headley TJ, Mitchell GD. Residual carbon from pulverized coal fired boilers: 2. Morphology and physicochemical properties. *Fuel*, 1995; 74: 1297-1306.
 - Hurt RH. Statistical kinetics for char combustion and carbon burnout. *Coal Science*, 1995: 611:614.
-

-
- Hurt RH, Hadad C., Kerstein A. Fundamental models of coal char formation and combustion. Interim Report Federal Energy Technology Center DE-FG22-96PC96249, 1998.
 - Hurt RH, Sun JK, Lunden M. A kinetic model of carbon burnout in pulverized coal combustion. *Combustion and Flame*, 1998; 113: 181-197.
 - Hurt RH, Sun JK, Lang T. Extinction mechanisms in pulverized coal combustion. *Prospects for Coal Science in the 21st Century*, 1999: 379-382.
 - Hurt RH, Calo JM. Semi-global intrinsic kinetics for char combustion modelling. *Combustion and Flame*, 2001; 125: 1138-1149.
 - Hurt RH, Haynes BS. On the origin of power-law kinetics in carbon oxidation. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2004; 125: 1138-1149.
 - Iranzo I, Domingo E, Cortés C, Arauzo I. Combustion characterization of a pulverized coal utility boiler based on CFD techniques. CIRCE press, 2001.
 - Jamaluddin AS, Smith PJ. Predicting radiative transfer in rectangular enclosures using the discrete ordinates method. *Combustion Science and Technology*, 1988; 89: 321-340.
 - Jensen A. Solid combustion course. Universidad de Zaragoza, 2001.
 - Jensen PT, Mitchell RE. High temperature char reactivity measurements in the Sandia laminar flow reactor. Energy research project N° 1323/87-16, Ministry of the Environment, Geological Survey of Denmark, 1993.
 - Jones JM, Pourkashanian M, Rena CD, Williams A. Modelling the relationship of coal structure to char porosity. *Fuel*, 1999; 78: 1737-1744.
 - Kobayashi H, Howard JB, Sarofim AF. Coal devolatilization at high temperatures. 16th Symposium (International) on Combustion. The Combustion Institute, 1976; 411-425.
 - Külaots I, Gao YM, Hurt RH, Suuberg EM. Characterization of carbon in coal fly ash. Brown University press, 1999.
 - Külaots Indrek, Hurt RH, Suuberg EM. Size distribution of unburned carbon in coal fly ash and its implications. *Fuel*, 2004; 83: 223-230.
 - Kurose R, Ikeda M, Makino H. Combustion characteristics of high ash coal in a pulverized coal combustion. *Fuel*, 2001; 80: 1447-1455.
 - Kurose R, Ikeda M, Makino H, Kimoto M, Miyazaki T. Pulverized coal combustion characteristics of high-fuel-ratio coals. *Fuel*, 2004; 83: 1777-1785.
 - Langmuir I. Chemical reaction on surfaces. *Transactions of the Faraday Society*, 1921; 606-621.
 - Launder BE, Spalding DB. The numerical computation of turbulent flows. *Computational Methods on Applied Mechanical Engineering*, 1974; 3: 269-289.
 - Levenspiel Octave. *Ingeniería de las reacciones químicas*. Ediciones Reverte, 2001.
-

-
- Lipson C, Sheth NJ. Statistical design and analysis of engineering experiments. McGraw Hill, 1973.
 - Llera E. Modelo semiempírico de ensuciamiento de calderas alimentadas con mezclas de carbones. Tesis Doctoral, Universidad de Zaragoza, 2002.
 - Lockwood FC, Shah NG. A new radiation solution method for incorporation in general combustion procedure. 18th (International) on Combustion. The Combustion Institute, 1981: 1405-1414.
 - Lockwood FC, Parodi SA. Performance prediction in advance coal fired boilers: burner-burner interaction. The Imperial College of Science press, 1998.
 - Longwell JP, Sarofim AF, Lee CH. Effects of catalytic mineral matter on CO/CO₂, temperature and burning time for char combustion. Massachusetts Institute of Technology, Progress Report DE-FG22-89PC89774, 1993; 14.
 - Mann AP, Kent JH. A computational study of heterogeneous char reactions in a full-scale furnace. Combustion and Flame, 1994; 99: 147-156.
 - Maroto-Valer MM, Taulbee DN, Hower JC. Characterization of differing forms of unburned carbon present in fly ash separated by density gradient centrifugation. Fuel, 2001; 80: 795-800.
 - Martins N, Calisto H. Diagnostic system for boilers and furnaces using CFD tools and a neural network-based approach. Universidade de Aveiro (Portugal). 2006.
 - Mehta BN, Aris R. Communications on the theory of diffusion and reaction – VII The isothermal nth order reaction. Chemical Engineering Science, 1971; 26: 1699-1712.
 - Mitchell RE, McLean WJ. On the temperature and reaction rate of burning pulverized fuels. 19th Symposium (International) on Combustion. The Combustion Institute, 1982; 1113-1122.
 - Modest MF. Radiative Heat Transfer. McGraw Hill, 1993.
 - Montgomery DC. Diseño y análisis de experimentos. Grupo Editorial Iberoamérica, 1991.
 - Niksa S, Kerstein AR. FLASHCHAIN theory for rapid coal devolatilization kinetics. 1. Formulation. Energy & Fuels, 1991; 5: 647-665.
 - Niksa S. FLASHCHAIN theory for rapid coal devolatilization kinetics. 2. Impact of operating conditions. Energy & Fuels, 1991; 5: 665-673.
 - Niksa S. FLASHCHAIN theory for rapid coal devolatilization kinetics. 3. Modeling the behavior of various coals. Energy & Fuels, 1991; 5: 673-683.
 - Niksa S. FLASHCHAIN theory for rapid coal devolatilization kinetics. 4. Predicting ultimate yields from ultimate analyses alone. Energy & Fuels, 1994; 8: 659-670.
 - Niksa S. FLASHCHAIN theory for rapid coal devolatilization kinetics. 5. Interpreting rates of devolatilization for various coal types and operating conditions. Energy & Fuels, 1994; 8: 671-679.
-

-
- Niksa S. Coal combustion Modelling. IEA Coal Research, 1996.
 - Pallarés J, Arauzo I, Díez LI. Numerical prediction of unburned carbon levels in large pulverized coal utility boilers. *Fuel*, 2005; 84: 2364-2371.
 - Pallarés J, Arauzo I, Williams A. Integration of CFD codes and advanced combustion models for quantitative burnout determination. *Fuel*, 2005; 86: 2283-2290.
 - Pao YH. Adaptive pattern recognition and neural networks. Addison Wesley, 1989.
 - Pope SB. Turbulent flows. Cambridge University Press, 2000.
 - Rich E, Knight K. Inteligencia artificial. McGraw Hill, 1994.
 - Roger Jang JS, Sun ChT, Mizutani E. Neuro-Fuzzy and soft computing. A computational approach to learning and machine intelligence. Prentice Hall, 1997.
 - Romeo LM, Garetta R. Neural network for evaluating boiler behaviour. *Applied Thermal Engineering*, 2006; 26: 1530-1536.
 - Rosendahl LA, Sorensen H. Anisotropic turbulent dispersion of non-spherical and spherical particles in swirling flow. Proceedings of ASME Fluid Engineering Summer Meeting, 2000. Boston (USA).
 - Sami M, Annamalai K, Wooldridge M. Co-firing of coal and biomass fuel blends. *Progress in Energy and Combustion Science*, 2001; 27: 171-214.
 - Santamaría JM, Herguido J, Menéndez MA, Monzón A. Ingeniería de reactores. Editorial Síntesis, 1999.
 - Sear LKA. UK practice- A review of fly ashes for use in concrete. Progress Workshop on Novel Products from Combustion Residues, 2001. Morella (Spain).
 - Sear LKA. Fly ash standards, market strategy and UK practice. . Progress Workshop on Novel Products from Combustion Residues, 2001. Morella (Spain).
 - Severin T, Wirtz S, Scherer V, Roth K. Simulation of pulverised coal fired boilers with a simplified cellnet model. *Chemie-Ingenieur-Technik*, 2005; 77: 1042.
 - Sheng Ch, Moghtaderi B, Gupta R, Wall TF. A computational fluid dynamics bases study of the combustion characteristics of coal blends in pulverised coal-fired furnace. *Fuel*, 2004; 83: 1543-1552.
 - Shim HS, Hurt RH. Thermal annealing of chars from diverse organic precursors under combustion-like conditions. *Energy & Fuels*, 2000; 14: 340-348.
 - Simon GA. Coal pyrolysis I. Pore evolution theory. *Combustion and Flame*, 1983; 53: 83-92.
 - Smart JP, Nakamura T. NOx emissions and burnout from a swirl-stabilised burner firing pulverised coal: the effects of firing coal blends. *Journal of the Institute of Energy*, 1993; 66: 99-105.
 - Smith IW. Kinetics of combustion of size-graded pulverized fuels in the temperature range 1200-2270 K. *Combustion and Flame*, 1971; 17: 303-314.
-

- Smith IW. The kinetics of combustion of pulverized semi-anthracite in the temperature range 1400-2200 K. *Combustion and Flame*, 1971; 17: 421-428.
- Smith IW, Tyler RJ. Internal burning of pulverized semi-anthracite: the relation between particle structure and reactivity. *Fuel*, 1972; 51: 312-321.
- Smith IW. The intrinsic reactivity of carbons to oxygen. *Fuel*, 1978; 57: 409-414.
- Smith IW. The combustion rates of coal chars: a review. 19th Symposium (International) on Combustion. The Combustion Institute, 1982: 1045-1065.
- Smith JD, Smith PJ, Hill SC. Parametric sensitivity study of a CFD-based coal combustion model. *AIChE Journal*, 1993; 39: 1668-1679.
- Smith PJ, Fletcher TH, Smoot LD. Model for pulverized coal-fired reactors. 18th Symposium (International) on Combustion. The Combustion Institute, 1981: 1285-1293.
- Smoot DL, Smith PJ. Coal combustion and gasification. The Plenum Chemical Engineering Series, 1985.
- Solomon PR, Colket MB. 17th Symposium (International) on Combustion. The Combustion Institute, 1979: 131-143.
- Solomon PR, Hamblen DG, Carangelo RM, Serio MA, Deshpande GV. General model of coal devolatilization. *Energy & Fuels*, 1988; 2: 405-422.
- Solomon PR, Hamblen DG, Yu ZZ, Serio MA. Network models of coal thermal decomposition. *Fuel*, 1990; 69: 754-763.
- Solomon PR, Serio MA, Carangelo RM, Bassilakis R, Yu ZZ, Charpenay S, Whelan J. Analysis of coal by thermogravimetry – Fourier transform infrared spectroscopy and pyrolysis modelling. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 1991; 1-14.
- Solomon PR, Hamblen DG, Serio MA, Yu ZZ, Charpenay S. A characterization method and model for predicting coal conversion behaviour. *Fuel*, 1993; 72: 469-488.
- Sommerfeld M. Theoretical and experimental modelling of particulate flow. Lecture Series von Karman Institute for Fluid Dynamics, 2000.
- Spalding DB. A single formula for the law of the wall. *Journal of Applied Mechanics*, 1961; 455-458.
- Stephenson PL. Mathematical modelling of semi-anthracite combustion in a single burner furnace. *Fuel*, 2003; 82: 2069-2073.
- Stopford PJ. Recent applications of CFD modeling in the power generation and combustion industries. *Applied Mathematics Modelling*, 2002; 26:351-374.
- Stubington JF, Linjewile TM. The effects of fragmentation on devolatilization of large coal particles. *Fuel*; 1989; 68: 155-160.
- Sun JK, Hurt RH. Mechanisms of extinction and near-extinction in pulverized solid fuel combustion. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2000; 28: 2205-2213.

-
- Suuberg EM. Thermally induced changes in reactivity of carbons. *Fundamental Issues in Control of Carbon Gasification Reactivity*, 1991: 269-305.
 - Suuberg E, Hurt RH, Külaots I, Gao YM. *Fundamental mechanisms in high-carbon fly ash utilization*. Brown University and Princeton University, 1999.
 - Tan CK, Wilcox SJ, Ward J. Use of artificial intelligence techniques for optimisation of co-combustion of coal with biomass. *Journal of the Energy Institute*, 2006; 79: 19-25.
 - Teruel E, Cortés C, Díez LI, Arauzo I. *Monitoring and prediction of fouling in coal-fired utility boilers using neural networks*. Universidad de Zaragoza, 2005.
 - Timothy LD, Sarofim AF, Béer JM. *Characteristics of single particle coal combustion*. 19th Symposium (International) on Combustion. The Combustion Institute, 1982; 1123-1130.
 - Tomczek J, Palugniok H. Kinetics of mineral matter transformation during coal combustion. *Fuel*, 2002; 81: 1251-1258.
 - Turns SR. *An introduction to combustion*. McGraw Hill, 2000.
 - Tyler RJ, Wouterlood HJ, Mulcahy MFR. Kinetics of the graphite-oxygen reaction near 1000 K. *Carbon*, 1976; 14: 271-278.
 - Ubhayakar SK, Stickler DB, Rosenberg CW, Gannon RE. Rapid devolatilization of pulverized coal in hot combustion gases. *Energy production from coal*, 1976; 427-436.
 - Ulloa C, Borrego AG, Gordon AL, García X. Char characterization and DTF assays as tools to predict burnout of coal blends in power plants. *Fuel*, 2005; 84: 247-257.
 - Unsworth JF, Barratt DJ, Roberts PT. Coal quality and combustion performance. *Coal Science and Technology*, 1991; 19: 231-408.
 - Users guide for FG-DVC model. Advanced Fuel Research Inc., 1992.
 - Van der Lans RP, Glarborg P, Dam-Johansen K, Knudsen P, Hesselmann G, Hepburn P. Influence of coal quality on combustion performance. *Fuel*, 1998; 77: 1317-1328.
 - Velilla J. *Estudio del flujo en el interior del conducto de extracción de sólidos de un ciclón de una central térmica de lecho fluido a presión*. Tesis Doctoral, Universidad de Zaragoza, 2004.
 - Versteeg HK, Malalasekera W. *An introduction to computational fluid dynamics – The finite volume method*. Longman, 1995.
 - Veynante D, Vervisch L. *Turbulent combustion modelling*. Lecture Series von Karman Institute for Fluid Dynamics, 2003.
 - Wall TF. *Principles of combustion engineering for boilers: The combustion of coal as pulverized fuel through swirl burners*, 1987.
 - Walsh P, Xie J, Douglas RE, Battista JJ, Zawadzki EA. Analysis of carbon loss from coal-fired utility boilers. EPRI Heat-Rate Improvement Conference, 1992. Birmingham (USA).
 - Walsh P, Xie J, Douglas RE, Battista JJ, Zawadzki EA. Effect of coal quality on unburned carbon loss. EPRI Heat-Rate Improvement Conference, 1992. Birmingham (USA).
-

- Warnatz J, Mass U, Dibble RW. Combustion. Springer, 1996.
- White BR. Encyclopedia of fluid mechanics: Solids and gas-solids flows. Nicholas P. Cheremisinoff, 1996.
- Wilcox DC. Turbulence modelling for CFD. DCW industries, 1998.
- Williams A, Backreedy RI, Habib R, Jones JM, Pourkashanian M. Modelling coal combustion: the current position. Fuel, 2002; 81: 605-618.
- Wu Z. Prevention of particulate emission. IEA Coal Research report, 2000.
- Xu M, Azevedo JLT, Cavalho MG. Modelling of the combustion process and NO_x emissions in a utility boiler. Fuel, 2000; 79: 1611-1619.
- Xu M, Azevedo JLT, Cavalho MG. Modelling of a front fired utility boiler for different operating conditions. Computational Methods on Applied Mechanical Engineering, 2001; 190: 3581-3590.
- Young BC, Smith IW. The combustion of Loy Yang Brown coal char. Combustion and flame, 1989; 76: 29-35.
- Zhu Q, Jones JM, Williams A, Thomas KM. The predictions of coal/char combustion rate using an artificial neural network approach. Fuel, 1999; 78: 1755-1762.



Departamento de Ingeniería Mecánica
Centro Politécnico Superior
Universidad de Zaragoza