

TRABAJO ESPECIAL DE GRADO

**SIMULACIÓN NUMÉRICA USANDO CFD DE UN REACTOR DE
REFORMACIÓN CATALÍTICA DE METANO CON VAPOR**

Presentado ante la Ilustre
Universidad Central de Venezuela
Por el Br. Fernández, Ricardo,
Para optar al Título
de Ingeniero Químico

Caracas, 2015

TRABAJO ESPECIAL DE GRADO

SIMULACIÓN NUMÉRICA USANDO CFD DE UN REACTOR DE REFORMACIÓN CATALÍTICA DE METANO CON VAPOR

TUTOR ACADÉMICO: Prof. Andrés Rosales

Presentado ante la Ilustre
Universidad Central de Venezuela
Por el Br. Fernández, Ricardo,
Para optar al Título
de Ingeniero Químico


Caracas, 2015

Caracas, Octubre, 2015


Los abajo firmantes, miembros del Jurado designado por el Consejo de Escuela de Ingeniería Química, para evaluar el Trabajo Especial de Grado presentado por el Bachiller Fernández, Ricardo, titulado:

“SIMULACIÓN NUMÉRICA USANDO CFD DE UN REACTOR DE REFORMACIÓN CATALÍTICA DE METANO CON VAPOR”


Consideran que el mismo cumple con los requisitos exigidos por el plan de estudio conducente al título de Ingeniero Químico, y sin que esto signifique que se hacen solidarios con las ideas expuestas por el autor, lo declaran **APROBADO**




Prof. Julio Segura
Jurado



Prof. Alí Lara
Jurado



Prof. Andrés Rosales
Tutor Académico





Caracas, 30 de Octubre de 2015

ACTA


MENCIÓN HONORÍFICA

Los miembros del jurado examinador del Trabajo Especial de Grado para optar al Título de Ingeniera Química presentado por el bachiller **RICARDO ANTONIO FERNANDEZ FAJARDO** (C.I. 17706714) y cuyo título es "**SIMULACIÓN NUMÉRICA USANDO CFD DE UN REACTOR DE REFORMACIÓN CATALÍTICA DE METANO CON VAPOR**" consideramos que merece ser reconocido con una **Mención Honorífica**.


Después de finalizada la defensa pública y considerando que:

1. El estudiante realizó un desarrollo sistemático del procedimiento para obtener una simulación de un reactor de reformación usando dinámica de fluidos computacional (CFD), lo cual permitirá seguir evaluando la posibilidad de simular otras geometrías de catalizador o empaques novedosos, integrando conocimientos en fenómenos de transporte y del área computacional.
2. Este trabajo realiza un aporte significativo en el desarrollo, evaluación de catalizadores y de los reactores utilizados para la producción de gas de síntesis, debido a que el estudio de este proceso usando CFD, permitiría la reducción de costos y tiempos de implementación de nuevas tecnologías, dependientes de pruebas a escala de laboratorio, piloto e industrial.

Acordado y firmado a los a los 30 días del mes de Octubre del año 2015.


Prof. Julio Segura
Jurado


Prof. Alí Lara
Jurado


Prof. Andrés Rosales
Tutor académico



DEDICATORIA

Este Trabajo esta cariñosamente dedicado a todas aquellas personas que hicieron posible mi transcurrir por la etapa universitaria, así como la realización de este ambicioso proyecto. Especialmente a aquellos cuya presencia onírica me dieron la fuerza y ánimos necesarios para perseverar, a pesar de los obstáculos, propios de la oscuridad que el día de hoy considero he vencido.

AGRADECIMIENTOS

Nadie nace con conocimiento o experiencia, estos se adquieren en el pasar de los años, gracias a las buenas costumbres de aquellos que deciden ser honestos y apuestan por un futuro mejor. Muchas gracias entonces a quienes que sin darse cuenta me brindaron el saber necesario, para el día de hoy ser el persona que soy y mañana el profesional que seré. Gracias a mis padres, a mis amigos y conocidos.

Muchas gracias a todo el personal docente de la Facultad de Ingeniería de la UCV, especial mención a los departamentos de Matemática, Computación, Enseñanzas Generales y de Termodinámica de la Escuela de Ingeniería Química. A mi Tutor y amigo Prof. A. Rosales y también a todas esas personas inteligentes y especiales que al menos en mi memoria, mientras la vida me permita, siempre tendré presentes con gran alegría y el mayor de los respetos.

Fernández, Ricardo.

SIMULACIÓN NUMÉRICA USANDO CFD DE UN REACTOR DE REFORMACIÓN CATALÍTICA DE METANO CON VAPOR

Tutor académico: Prof. Andrés Rosales

**Tesis. Caracas, U.C.V. Facultad de Ingeniería. Escuela de Ingeniería Química.
2015, 175 pp.**

Palabras claves: Simulación, CFD, Reformador, Reactor Tubular, Lecho empacado.

Resumen. Hoy en día los reactores de reformado de metano con vapor han adquirido gran interés dada la creciente demanda de Hidrógeno en el mercado energético. Por otra parte, las simulaciones basadas en fluido dinámica computacional se han vuelto muy importantes para el logro de un mayor entendimiento del comportamiento de reactores químicos, en la medida que ésta tecnología avanza. Por estas razones se efectuó una simulación CFD de un segmento de un reactor de reformado de metano con vapor a condiciones de operación industrial, a fin de comparar los resultados con resultados provenientes de una bibliografía especializada. Para ello, se utilizó el programa AnsysCFX, que permitió simular el campo de flujo dentro de un lecho catalítico de pellets, dispuestos en el interior de un tubo. Se comenzó con el planteamiento de un diseño de reactor de reformado y luego tras análisis de las simetrías presentes se llegó a un segmento de tubo lleno de pellets catalíticos, que pasó a ser construido utilizando el programa DesignModeler. Posteriormente se generó una malla y luego se acoplaron los modelos matemáticos necesarios para la simulación, utilizando la línea de comandos CFX CEL. Una vez alcanzada consistencia física del sistema, se corrió la simulación en un computador con un CPU Intel QuadCore de 2,8Hz y 4Gb de memoria RAM. Se simuló empaques basados en pellets cerámicos de geometrías 0H, 1H y 4H; así como un empaque estructurado de la empresa Catacel. Luego de la simulación, se efectuó una comparación de los resultados arrojados por el CFD con aquellos predichos por modelos de naturaleza unidimensional, evidenciándose buena aproximación entre los perfiles de Presión, Temperatura del gas y Conversión. Por último se encontró que la implementación del catalizador estructurado, condujo a mejoras en la conversión de hasta un 31%, respecto a sus contrapartes basados en pellets.

ÍNDICE DE CONTENIDO

| | |
|---|----|
| CAPÍTULO I. FUNDAMENTOS DE LA INVESTIGACIÓN | 2 |
| I.1 PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA | 2 |
| I.2 ANTECEDENTES..... | 6 |
| I.3 OBJETIVOS | 11 |
| I.3.1 Objetivo general | 11 |
| I.3.2 Objetivos específicos | 11 |
| CAPÍTULO II. MARCO TEÓRICO | 13 |
| II.1 MODELADO DE REACTORES DE LECHO EMPACADO | 13 |
| II.1.1 Modelo Pseudohomogeneo | 13 |
| II.1.2 Modelo de Celdas Equivalentes | 16 |
| II.1.3 Modelo de Empaque Discreto..... | 17 |
| II.2 REFORMADO DE METANO CON VAPOR | 18 |
| II.2.1 Hornos del Reformador..... | 21 |
| II.2.2 El Modelo Cinético | 22 |
| II.3 FLUIDO DINAMICA COMPUTACIONAL..... | 24 |
| II.3.1 Método de Volúmenes Finitos | 25 |
| II.3.2 Ecuaciones Gobernantes | 25 |
| II.3.2.1 Ecuaciones de Cambio para Mezclas Multicomponente..... | 26 |
| II.3.2.2 Ecuaciones Auxiliares y de Transporte | 27 |
| II.3.3 Discretización..... | 27 |
| II.3.4 Mallado | 28 |
| CAPÍTULO III. MARCO METODOLÓGICO | 30 |
| III.1 SELECCIÓN DEL DOMINIO COMPUTACIONAL..... | 30 |
| III.2 CONSTRUCCIÓN CAD DEL LECHO CATALÍTICO | 32 |
| III.2.1 Lecho Empacado..... | 32 |
| III.2.2 Lecho Estructurado | 33 |
| III.3 GENERACIÓN DEL MALLADO | 34 |
| III.4 INTRODUCCIÓN DE PROPIEDADES Y MODELOS AUXILIARES | 36 |
| III.5 SIMULACIÓN..... | 38 |
| III.6 VISUALIZACION Y COMPARACION DE DATOS | 40 |
| CAPÍTULO IV. RESULTADOS Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS | 44 |

| | | |
|--------|---|-----------|
| IV.1 | DOMINIO COMPUTACIONAL..... | 44 |
| IV.1.1 | Análisis de simetrías | 44 |
| IV.1.2 | Simetrías en tubo catalítico | 45 |
| IV.2 | CONSTRUCCIÓN CAD DEL LECHO CATALÍTICO | 46 |
| IV.2.1 | Lecho de Pellets: | 46 |
| IV.2.2 | Empaque Estructurado | 51 |
| IV.3 | GENERACION DE MALLADO..... | 53 |
| IV.4 | INTRODUCCIÓN DE PROPIEDADES Y MODELOS AUXILIARES | 57 |
| IV.5 | SIMULACIÓN..... | 62 |
| IV.5.1 | Ecuaciones de Momentum y Masa | 62 |
| IV.5.2 | Ecuación de Energía..... | 66 |
| IV.5.3 | Ecuación de Fracción Másica..... | 67 |
| IV.6 | VISUALIZACION Y COMPARACION DE DATOS | 69 |
| IV.6.1 | Presión Absoluta | 69 |
| IV.6.2 | Temperatura del Gas Reaccionante..... | 75 |
| IV.6.3 | Conversión de Metano | 81 |
| | CAPÍTULO V. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES | 88 |
| V.1 | CONCLUSIONES | 88 |
| V.2 | RECOMENDACIONES | 91 |
| | CAPÍTULO VI. REFERENCIAS | 93 |

ÍNDICE DE FIGURAS

| | |
|---|----|
| Figura 1: Pellets Catalíticos típicos..... | 3 |
| Figura 2: Catalizadores Catacel | 4 |
| Figura 3: Tendencia histórica en la capacidad de computo | 5 |
| Figura 4: Gradiente de temperatura intrapartícula en pellet esférico | 7 |
| Figura 5: a) Fracción másica de Hidrógeno b) Fracción másica de Metano..... | 8 |
| Figura 6: Malla continua generada en Gambit..... | 9 |
| Figura 7: Comparación de modelo integro diferencial con los resultados de simuladores comerciales | 10 |
| Figura 8: Diagrama modelo pseudohomogeneo | 13 |
| Figura 9: Esquema de modelo de celda equivalente | 17 |
| Figura 10: Esquema del modelo de empaque discreto..... | 17 |
| Figura 11: Vista interior de un reformador comercial | 18 |
| Figura 12: Catalizadores para reformado..... | 19 |
| Figura 13: Esquema típico de un proceso de reformado..... | 20 |
| Figura 14: Simulación CFD de gases de combustión en horno de reformador industrial..... | 21 |
| Figura 15: Configuraciones típicas de los quemadores | 22 |
| Figura 16: Reacción en sitios activos..... | 23 |
| Figura 17: Ilustración de un elemento del dominio | 28 |
| Figura 18: Mallado estructurado y no estructurado | 29 |
| Figura 19: Análisis de simetrías típico..... | 30 |
| Figura 20: Esquema planos de simetría | 31 |
| Figura 21: Transformaciones en pellets | 32 |
| Figura 22: Vista superior de empaque estructurado Catacel..... | 33 |
| Figura 23: Ejemplo de malla dividida..... | 34 |
| Figura 24: A) dominios comunes B) dominios separados | 35 |
| Figura 25: Vista CFX CEL | 36 |
| Figura 26: refinamiento de malla cerca de la pared | 38 |
| Figura 27: Corte de lectura de datos | 41 |

| | |
|---|----|
| Figura 28: Mallado en una zona de lectura | 42 |
| Figura 29: Planos de simetría en reformador | 44 |
| Figura 30: Sistema de referencia para el reformador | 45 |
| Figura 31: Geometría dominio computacional base | 46 |
| Figura 32: Ilustración de proyecciones del dominio computacional | 46 |
| Figura 33: Segmento con empaque preliminar | 48 |
| Figura 34: Empaque final..... | 48 |
| Figura 35: Aglomeración entre pellets | 49 |
| Figura 36: Empaque para pellets 1H..... | 50 |
| Figura 37: Generación de agujeros para pellet 4H..... | 50 |
| Figura 38. Empaque pellets 4H..... | 51 |
| Figura 39: Corte catalizador estructurado | 52 |
| Figura 40: Empaque estructurado | 52 |
| Figura 41: Vista mallado de geometría 0H | 55 |
| Figura 42: Mallado geometría estructurada | 56 |
| Figura 43: Efectividades de modelo cinético (Molina, et al., 2011)..... | 59 |
| Figura 44: Captura del CEL de CFX..... | 61 |
| Figura 45: Residual de masa y momentum 0H | 62 |
| Figura 46: Residuales de momentum y masa 4H..... | 63 |
| Figura 47: Residual momentum y masa Estructurado | 65 |
| Figura 48: Residuales BE, catalizador estructurado | 66 |
| Figura 49: Residuales de FM para caso 1H | 67 |
| Figura 50: Residuales de FM para caso ES..... | 68 |
| Figura 51: Countor de presión caso 0H..... | 70 |
| Figura 52: Countor de presión caso 1H..... | 71 |
| Figura 53: Countor de presión caso Estructurado | 72 |
| Figura 54: Countor de presión caso 4H..... | 73 |
| Figura 55: Comparación de presiones 1d-CFD..... | 74 |
| Figura 56: Countor de temperatura en la masa gaseosa 0H | 76 |
| Figura 57: Countor de temperatura en la masa gaseosa 1H | 77 |

| | |
|---|-----|
| Figura 58: Countor de temperatura en la masa gaseosa 4H | 78 |
| Figura 59: Countor de temperatura en la masa gaseosa Estructurado | 79 |
| Figura 60: Comparación de perfiles de temperaturas del gas | 80 |
| Figura 61: Conversión de metano en 0H..... | 82 |
| Figura 62: Conversión de metano en 1H..... | 83 |
| Figura 63: Conversión de metano en 4H..... | 84 |
| Figura 64: Conversión de metano en catalizador estructurado | 85 |
| Figura 65: Comparación de conversiones de CH ₄ , para distintos modelos de catalizador | 85 |
| Figura 66: Oblicuidad | 97 |
| Figura 67: Relación de Aspecto en un mallado | 98 |
| Figura 68: vista lateral dominio computacional..... | 105 |
| Figura 69: vista lateral dominio computacional rotado..... | 105 |
| Figura 70: empaque a la entrada | 105 |
| Figura 71: Vista entrada empaque 0H..... | 106 |
| Figura 72: Vista entrada empaque 1H..... | 106 |
| Figura 73: Vista entrada empaque estructurado..... | 106 |
| Figura 74: Vista entrada empaque 4H..... | 106 |
| Figura 75: vista entrada región del fluido | 110 |
| Figura 76: vista superior 0H..... | 110 |
| Figura 77: vista lateral región del fluido, empaque 0H..... | 110 |
| Figura 78: entrada empaque 1H | 111 |
| Figura 79: mallado región del fluido 1H..... | 111 |
| Figura 80: mallado empaque 1H..... | 111 |
| Figura 81: región del fluido empaque 4H | 112 |
| Figura 82: mallado empaque 4H..... | 112 |
| Figura 83: Introducción de una expresión..... | 114 |
| Figura 84: Configuración de reacción química..... | 114 |
| Figura 85: Residual de Turbulencia (0H)..... | 146 |
| Figura 86: Residual de FM (0H)..... | 147 |

| | |
|--|-----|
| Figura 87: Residual de BE (1H)..... | 148 |
| Figura 88: Residual de Turbulencia (1H)..... | 149 |
| Figura 89: Residual de FM (1H) | 150 |
| Figura 90: Residual de Turbulencia (4H)..... | 151 |
| Figura 91: Residual de FM (4H) | 152 |
| Figura 92: Residual de BE (ES)..... | 153 |
| Figura 93: Residual de Turbulencia (ES)..... | 154 |
| Figura 94: Residual de FM (ES) | 155 |
| Figura 95: Planos de lectura empaque 0H..... | 156 |
| Figura 96: Planos de lectura empaque 1H..... | 157 |
| Figura 97: Planos de lectura empaque 4H..... | 157 |
| Figura 98: Planos de lectura empaque Estructurado..... | 158 |

ÍNDICE DE TABLAS

| | |
|---|-----|
| Tabla 1: Modelo Cinético Intrínseco..... | 23 |
| Tabla 2: Parámetros del modelo cinético | 24 |
| Tabla 3: Especificaciones de CAD de Empaques | 33 |
| Tabla 4: Configuración del Computador..... | 35 |
| Tabla 5: Heurística para Residuales | 39 |
| Tabla 6: Ubicación planos de simetría | 45 |
| Tabla 7: Transformaciones de construcción de clúster base | 47 |
| Tabla 8: Parámetros de mallado | 53 |
| Tabla 9: Elementos y nodos totales para cada geometría | 54 |
| Tabla 10: Nodos y elementos totales dominio del fluido..... | 56 |
| Tabla 11: Calidad de mallado | 57 |
| Tabla 12: Efectividades promedio | 59 |
| Tabla 13: Factores de corrección | 59 |
| Tabla 14: Difusividades binarias en la masa gaseosa | 60 |
| Tabla 15: Condiciones de borde constantes | 60 |
| Tabla 16: Resumen de MAE para Presión | 74 |
| Tabla 17: Resumen de MAE para temperatura del gas..... | 80 |
| Tabla 18: Resumen de MAE para la Conversión de Metano..... | 86 |
| Tabla 19: Parámetros modelo de turbulencia $\kappa - \epsilon$ | 100 |
| Tabla 20: Fracciones molares..... | 100 |
| Tabla 21: Difusividades en mezcla y razones molares | 101 |
| Tabla 22: Transformaciones para construcción de cumulo de pellets (continuación) | 107 |
| Tabla 23: Punto y vector normal de planos base para primer clúster | 108 |
| Tabla 24: Punto y vector normal de planos base para primer cumulo | 109 |
| Tabla 25: Elementos y nodos para dominio del solido | 112 |
| Tabla 26: radio elementos del dominio solido al dominio del fluido | 113 |

NOMENCLATURA

A continuación los distintos símbolos y nomenclaturas utilizadas, con sus respectiva identificación.

| | |
|------------|--|
| u_s | Velocidad superficial |
| C | Concentración |
| ρ_s | Densidad del catalizador |
| r_A | Velocidad de reacción del componente A |
| ρ_B | Densidad del gas |
| c_p | Capacidad calorífica del gas |
| T | Temperatura del gas |
| ΔH | Calor de reacción |
| T_r | Temperatura de los alrededores |
| d_i | Diámetro de la tubería |
| z | Dirección axial |
| k_g | Coefficiente de transferencia e masa |
| a_v | Área superficial del empaque por unidad de volumen del reactor |
| h_f | Coefficiente de transferencia de masa de la película de gas a la superficie adyacente del empaque. |
| T_s | Temperatura en el interior del pellet |
| T_s^s | Temperatura en la superficie del pellet |
| C_s | Concentración en el interior del pellet |

| | |
|---|--|
| C_s^s | Concentración en la superficie del pellet |
| C_0 | Concentración inicial |
| T_0 | Temperatura inicial |
| z_0 | Posición axial de la entrada |
| ξ | Distancia radial del pellet |
| η | Factor de efectividad |
| η_i | Factor de efectividad de la reacción i (i=1,2,3) |
| V | Volumen del pellet |
| ϵ | Fracción vacía del lecho |
| $k_{er,f}$ | Conductividad térmica efectiva para la fase fluida |
| Re | Numero de Reynolds |
| r_i | Velocidad de reacción i (i=1,2,3) |
| κ_i | Constante de equilibrio de reacción i (i=1,2,3) |
| $p_{CO}; p_{H_2}; p_{CH_4}; p_{H_2O}; p_{CO_2}$ | Presiones parciales de los compuestos i. |
| ΔH_i | Calor de reacción de la reacción i |
| K_i | Constantes de adsorción de los compuestos i. |
| K_j | Constantes de velocidad de la reacción j |
| R | Constante universal de los gases |
| Re | Numero de Reynolds |
| ρ | Densidad de mezcla |
| ω_α | Concentración molar del componente α |
| r_α | Velocidad de reacción de la especie α |

| | |
|-----------------------|---|
| \mathbf{v} | Vector de velocidades, en x,y,z. |
| p | Presión absoluta de la mezcla. |
| \mathbf{g} | Vector de fuerza gravitacional |
| \hat{C}_P | Capacidad calorífica específica. |
| \hat{V} | Volumen |
| x_α | Fracción másica de la especie α |
| \overline{H}_α | Entalpía molar parcial de la especie α |
| R_α | Velocidad de reacción másica de especie α |
| $\mathcal{D}_{A,B}$ | Difusividad de A en B. |
| $\boldsymbol{\mu}$ | Tensor de viscosidades |
| $\boldsymbol{\kappa}$ | Tensor de viscosidad dilatante |
| k | Conductividad térmica |
| \mathbf{j}_A | Vector de flujo másico |
| $\boldsymbol{\tau}$ | Tensor de esfuerzos |
| M_α | Peso molecular de especie química α |
| \mathbf{q} | Vector de flujo de calor |
| C-b i | Clúster base i |
| $R(\theta)$ | Matriz de rotación para un ángulo θ |
| θ | Angulo en radianes |
| \mathbf{n} | Vector normal a una superficie S |
| T_δ | Traslación de un vector en la dirección $\boldsymbol{\delta}$ |
| $D_{A,m}$ | Difusividad de la especie A en la mezcla m. |

| | |
|-------------------|--|
| $D_{A,k}$ | Difusividad binaria de la especie A en la especie k |
| y_k | Fracción molar de especie k en la mezcla |
| y_A | Fracción molar de la especie A |
| $\frac{N_K}{N_A}$ | Razón molar de la especie k a la especie A |
| Y_i | Fracción molar de la especie i |
| u_j | Componente de velocidad en la dirección j |
| x_j | Dirección eje j |
| D_i | Coefficiente de difusión de la especie i |
| R_i | Velocidad de reacción másica de la especie i |
| S_i | Producción y consumo neto de la especie i por causas distintas al modelo cinético. |
| MAE | Error absoluto medio |
| n | Población total de muestras a comparar |
| f_i | Predicción para el valor i |
| y_i | Valor verdadero de i |
| $ e_i $ | Error de predicción de i |
| FM | Fracción másica |
| ES | Estructurado |

INTRODUCCIÓN

En la actualidad la creciente capacidad de cómputo ha hecho posible explorar nuevos mundos y posibilidades, por medio de la solución de complejos modelos matemáticos de determinados procesos, cuya simulación ofrece la posibilidad de predecir el comportamiento de estos sistemas tanto de forma estacionaria como dinámica. Esta posibilidad ofrece la ventaja de efectuar una gran cantidad de experimentos, de naturaleza numérica, sin necesidad de gastar recursos físicos, altamente valuados en el mercado.

Por ese motivo el presente trabajo especial se grado se ha enfocado en la implementación de simulaciones de CFD (Fluido Dinámica Computacional), para el análisis de distintas geometrías de catalizador enfocadas a predecir, sin la necesidad de experimentos intermedios, la mejora incorporada por determinados diseños de catalizador. Para este fin se hizo uso de un programa de CFD, acoplado, conocido como Ansys CFX, el cual se considera capaz de efectuar estas simulaciones con un mayor nivel de rapidez que en otros programas.

Tal meta se logró gracias a la determinación de un dominio computacional, en el reactor real, que luego fue construido por medio de una herramienta CAD, desde la cual se exporto el proyecto a un programa de mallado comercial, cuya malla deestructurada generada, permitió la discretización y solución de las ecuaciones gobernantes y del modelo cinético del reactor en consideración.

Se concluye con una comparación de los resultados arrojados por el CFD con aquellos predichos por modelos de naturaleza unidimensional, a fin de conocer el nivel de aproximación, para luego visualizar la solución CFD de un catalizador estructurado basado en aletas radiales, con miras a determinar el nivel de mejora incorporado por este nuevo diseño de catalizador en comparación con aquellos basados en pellets.

CAPÍTULO I

FUNDAMENTOS DE LA INVESTIGACIÓN

En este capítulo se presentan las bases que sustentaran esta investigación, entre los cuales se encuentran el planteamiento del problema, el objetivo general, los objetivos específicos y los antecedentes.

I.1 PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

La demanda creciente de fuentes alternativas de energía, tales como el Hidrógeno, bien sea para uso como combustible directo o para otros fines, solicita de procesos cada vez más eficientes y mejor controlados para garantizar una producción rentable de este producto. Una de las tecnologías más usadas en la actualidad para la producción de Hidrógeno es el reformado de metano con vapor de agua, proceso en el cual, a partir de metano y vapor de agua se puede generar Hidrógeno con altos niveles de conversión. El corazón de este proceso reside en el reformador, contentivo de una serie de reactores tubulares, donde se efectúan reacciones reversibles de desplazamiento de agua, en presencia de un catalizador.

En general el modelado matemático de este proceso está bien desarrollado bajo el uso de correlaciones empíricas y modelos pseudohomogeneos de las ecuaciones gobernantes para el balance de masa, energía y momentum (De Sousa & Pisani, 2010). A pesar del nivel de desarrollo de estos modelos, los mismos continúan siendo objeto activo de estudio, principalmente a causa de la aparición de nuevos y mejores catalizadores los cuales según su mecanismo de reacción catalítico, varían unos de otros en lo referente al modelo cinético, así como las propiedades termofísicas de los materiales que los componen (De Sousa & Pisani, 2010).

Por tratarse de una reacción de naturaleza endotérmica en un lecho catalítico, los fabricantes de catalizadores han modificado la geometría de los pellets desde formas cilíndricas sólidas (Figura 1) hasta cilindros con perforaciones en su interior

(Azocleantech, 2014) e incluso en la superficie, lo que ha proporcionado mejoras en el proceso, luego de innumerables pruebas a escala de laboratorio, piloto e industrial.



Figura 1: Pellets Catalíticos típicos

En algunos casos el modelado y la simulación son posibles y contribuyen de manera importante a predecir el comportamiento de estos nuevos diseños en condiciones reales de operación, pero sólo en aquellas circunstancias donde se tienen definidas todas las correlaciones empíricas y ecuaciones gobernantes para ese caso en específico pero siempre bajo un conjunto de hipótesis y suposiciones que pueden o no satisfacer la realidad o inclusive aproximarse a la realidad experimental.

Exponentes recientes de este tipo de limitaciones se pueden encontrar en la aparición de catalizadores que aunque continúan siendo pellets pueden no ser de forma cilíndrica o bien pueden contar con geometrías que no se encuentren estudiadas desde el punto de vista experimental en aspectos como la transferencia de calor y caída de presión, cuando en su conjunto forman empaques y lechos en el interior del tubo catalítico. En otra instancia, se tienen a los llamados catalizadores estructurados, tales como los de la empresa Catacel (Figura 2) o incluso los diseños ZoneFlow de G. Froment, en los cuales el concepto de lecho empacado ha sido sustituido por una geometría definida

para todo el catalizador que llena los tubos del reactor. Algunos en formas tan simples como aletas radiales que van desde el eje de la tubería hasta las paredes de esta y otras en diseños mucho más sofisticados que pueden incluso ser difícil de describir por medio distinto a una imagen o fotografía (Catacel, 2015).



Figura 2: Catalizadores Catacel

Para validar este tipo de propuestas, cada vez más numerosas en el mercado, es necesaria la realización de numerosos experimentos a distintas escalas que permitan brindar la certeza necesaria para promover la sustitución de los actuales catalizadores en uso dentro de reformadores operativos, por modelos novedosos que garanticen una inmediata reducción de los costos de operación a cambio de un mantenimiento de las especificaciones del producto: reducción de gasto de combustible (emisiones de contaminantes) y altas conversiones de Metano a la salida del reactor. Estos experimentos resultan costosos en las distintas escalas (laboratorio, piloto e industrial) y siempre será una prueba a nivel y condiciones industriales la que determinara la verdadera factibilidad de ese nuevo diseño de catalizador en particular, por ende tener certeza de las prestaciones de un nuevo diseño es una actividad que puede tardar años y acarrear grandes costos los cuales se estiman en el orden de cientos de miles de dólares (Deutschmann, 2010).

En este punto las simulaciones de Fluido Dinámica Computacional, CFD por sus siglas en inglés, sobresalen como una manera de analizar nuevos productos (catalizadores) por la vía de simulaciones especializadas, que valiéndose de poder de cómputo, cada

día más creciente y económico en nuestra sociedad (Trace, 2015), proporciona resultados muy cercanos a la realidad, constituyéndose en experimentos numéricos.

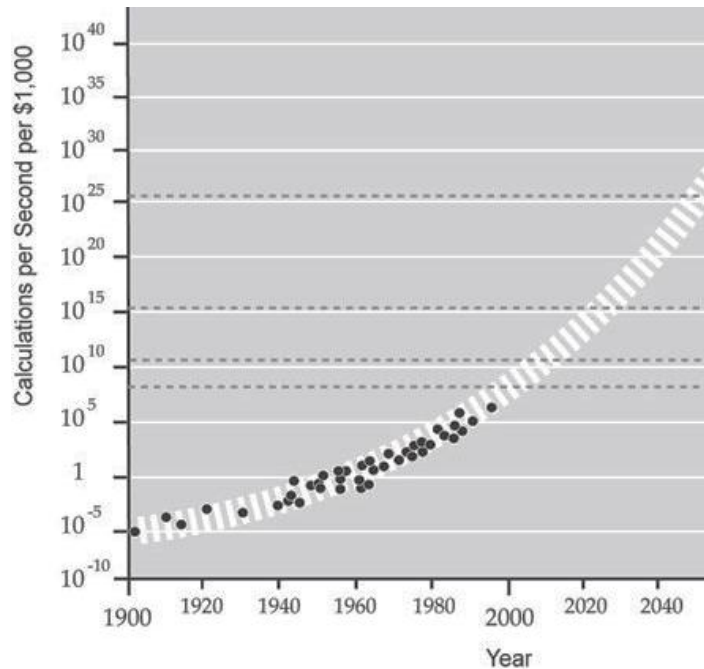


Figura 3: Tendencia histórica en la capacidad de cómputo

Actualmente en el mercado de programas para simulaciones CFD, se reconoce a Fluent v5, uno de los pocos programas capaces de simular este proceso, de manera conservativa, desacoplada en alrededor de 10.000 iteraciones (Dixon A. , 2009).

Se plantea entonces, la simulación CFD de este proceso utilizando un programa conservativo acoplado, con la finalidad de reducir el elevado número de iteraciones y recursos de cómputo requeridos, que haga permisible la evaluación de diversos tipos de catalizador así como un mayor entendimiento del comportamiento de los fenómenos de transporte que rigen el proceso, dentro de los rangos de precisión aceptados en la literatura de la Fluidodinámica Computacional. Considerando lo anterior, resalta como candidato el programa Ansys-CFX v14, por facilitar el acoplamiento de modelos auxiliares dentro de sus rutinas de cálculo, y por ofrecer, soluciones en tiempos reducidos con un número de iteraciones no mayor a 200. Además de formar parte de la suite de Ansys, la cual acompaña a éste de todas las herramientas necesarias para la

realización de simulaciones CFD, abarcando desde la construcción CAD (DesingModeler) hasta el análisis de resultados en el CFX-POST.

I.2 ANTECEDENTES

En este capítulo se presentan y explican los diversos trabajos que se han realizado con respecto a simulación numérica del reactor de reformado con vapor de agua, utilizando la metodología de CFD.

Nijemeisland & Dixon (2004): Se efectuó un estudio comparativo de la eficiencia en la transferencia de calor desde la pared del tubo hacia las partículas de catalizador, variando la geometría de las mismas, conservando su cuerpo cilíndrico y $N=4$ (relación tamaño de partícula a diámetro de tubo), se cambiaron el número de agujeros, partiendo desde cilindros sólidos, hasta de 4 agujeros. Se pudo encontrar que las partículas con cero agujeros eran más eficaces para la transferencia de calor en el segmento del empaque, pero las conversiones a la salida eran relativamente bajas. En este trabajo la simulación CFD se realizaron utilizando Fluent 5.

Dixon & Stitt (2006): Para un segmento de lecho empacado de diámetro de escala industrial y para pellets esféricos del tipo $N=4$, se logró la simulación CFD en Fluent, acoplando todas las reacciones y modelos cinéticos del reformado de metano con vapor, para un segmento transversal de pared de 120° . En esta simulación se acoplo, por medio de rutinas UDF, el modelo de conducción de calor y transporte de masa de las especies en la fase gaseosa (Dixon & Stitt, 2006). La simulación logro demostrar las suposiciones CFD, anteriormente establecidas para esta geometría, de que los gradientes de temperatura para pellets esféricos, se hacen más pronunciados en la medida que la partícula se encuentra en la proximidad de la pared del tubo (Figura 4).

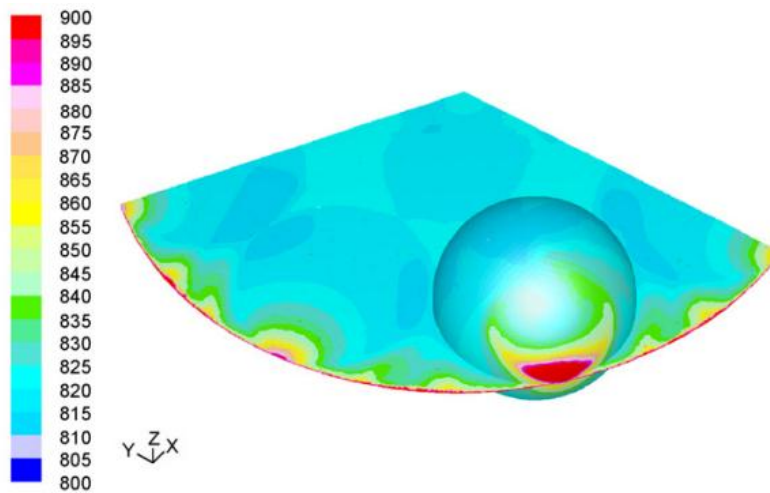


Figura 4: Gradiente de temperatura intrapartícula en pellet esférico

Wilde & Froment (2011): Del mismo autor del modelo cinético de la reacción de reformado G. A. Froment (Froment & Xu, 1989), se realizó una simulación CFD, en código no publicado, de un reactor de reformado de 1m de longitud, utilizando un catalizador estructurado patentado conocido como ZoneFlow, a las condiciones operación de un reactor industrial. Omitiendo los fenómenos de reacción-difusión intrapartícula se logró convergencia de la solución, demostrándose un mayor nivel de transferencia de calor y por ende mayores conversiones. A pesar que no hizo referencia a los programas utilizados o los tiempos de cálculo, se presume convergencia, por similitud entre la tendencia mostradas por las curvas de composición versus longitud del reactor, dada por el CFD y las arrojadas por la simulación del modelo unidimensional anteriormente desarrollado y simulado por Froment (Froment & Xu, 1989).

Behnam & Dixon (2012): Se efectuó un estudio comparativo entre los resultados de la simulación CFD Fluent, con los obtenidos en un reactor de laboratorio donde se efectuó la reacción, utilizando un reactor cargado de pellets tipo anillo de $N=1$. La comparación se realizó entre las temperaturas del gas a la salida y su composición, entre el reactor real y la simulación, lográndose buena aproximación cualitativa y cuantitativa, en composición (Figura. 5). El reactor simulado fue de una longitud de

1,22 metros y diámetro 0,5 pulgadas. A 800°C y 20 bar (Behnam & Dixon, 2012). El mallado fue generado en Gambit, para una densidad 13 millones de elementos y un tiempo total de cómputo no especificado.

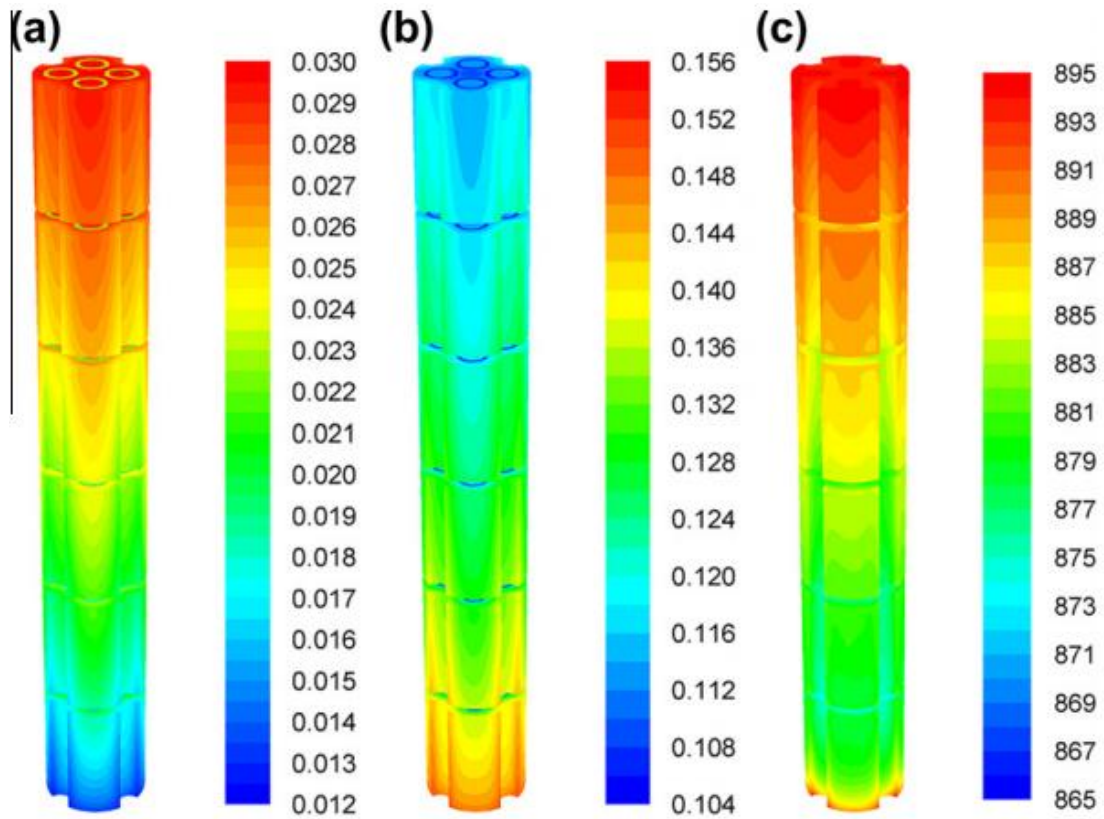


Figura 5: a) Fracción másica de Hidrógeno b) Fracción másica de Metano
c) Temperatura (K)

Deutschmann (2013): En este trabajo se recopilan las técnicas de modelado más comunes para reactores de lecho catalítico, del tipo monolítico. Alcanzándose gran exactitud en la producción de campos de flujo complejos, utilizando metodologías de Fluido Dinámica Computacional. Inclusive luego de acoplar modelos sofisticados de transporte de calor y masa, gracias al uso de algoritmos de computo, no comerciales, adaptados al reactor específico a modelar y a la disposición de computadores de altas prestaciones. Se tomaron en consideración modelos cinéticos detallados para reacciones químicas heterogéneas, en fase sólida y gas. Manteniéndose como un reto, la estabilidad de la solución, debido al gran número de ecuaciones de conservación de

masa, su acoplamiento no lineal, y un amplio rango de escalas de tiempo físico debido a la complejidad de los sistemas de reacciones químicas.

Los objetivos de este trabajo fueron un mejor entendimiento de la manera en la que interaccionan los distintos fenómenos físicos en reactores catalíticos, a fin de mejorar los parámetros de diseño de los mismos, tales como la geometría del lecho para incrementar las conversiones. Luego de un extenso trabajo de programación en código CFD Fluent, las soluciones no fueron del todo concluyentes para la convergencia. Utilizando las geometrías de empaque propuestas por (Dixon A. , 2009), el mallado fue uno de los mayores inconvenientes, difícilmente alcanzándose su construcción (Deutschmann, 2010), en los programas de mallado libres, como se puede apreciar en la figura 6.

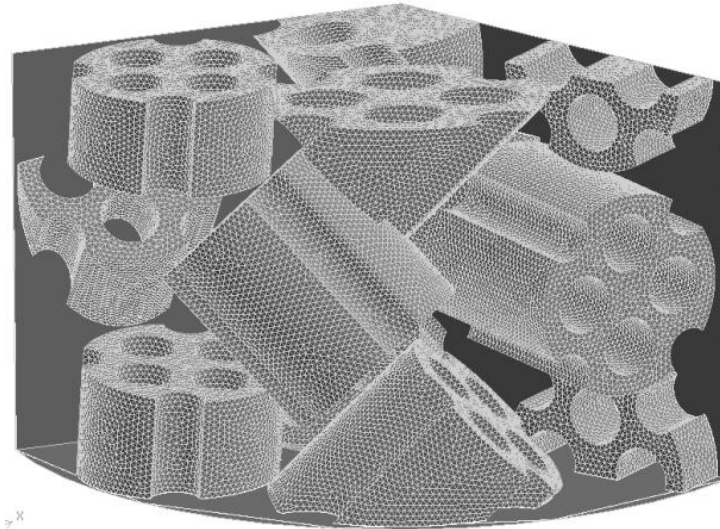


Figura 6: Malla continua generada en Gambit.

Los trabajos de Dixon y Deutschmann, en síntesis representan la columna vertebral de las simulaciones CFD, de reacciones heterogéneas en código Fluent 5, para el reformado de metano con vapor. Su importancia reside en demostrar, además de la validez de las simulaciones CFD, la necesidad por aplicar un nuevo algoritmo de solución para las ecuaciones gobernantes de este proceso, a fin de determinar la factibilidad de una simulación completa en dimensiones industriales, que permita ganar

un mayor conocimiento de cómo interaccionan los diferentes fenómenos de transporte y así proponer mejoras en el diseño y operación de la unidad.

De Sousa & Pissani (2010): en este trabajo se desarrolló un modelo matemático pseudohomogeneo en estado estacionario y dinámico, de un reformador, lográndose buena precisión tras comparación con datos de planta y los resultados arrojados por simuladores comerciales (Figura 7). En general el modelado se basó en un balance integro diferencial en los tubos catalíticos, tomando en consideración el fenómeno de la difusión intrapartícula, en términos del modelo propuesto por Froment & Xu en el 1989. Los resultados permitieron demostrar y validar tanto la cinética como los fenómenos de transporte identificados para este proceso, así como la exactitud del modelado tradicional a pesar de ignorar la presencia de perfiles de velocidad en el interior de los tubos catalíticos (De Sousa & Pissani, 2010).

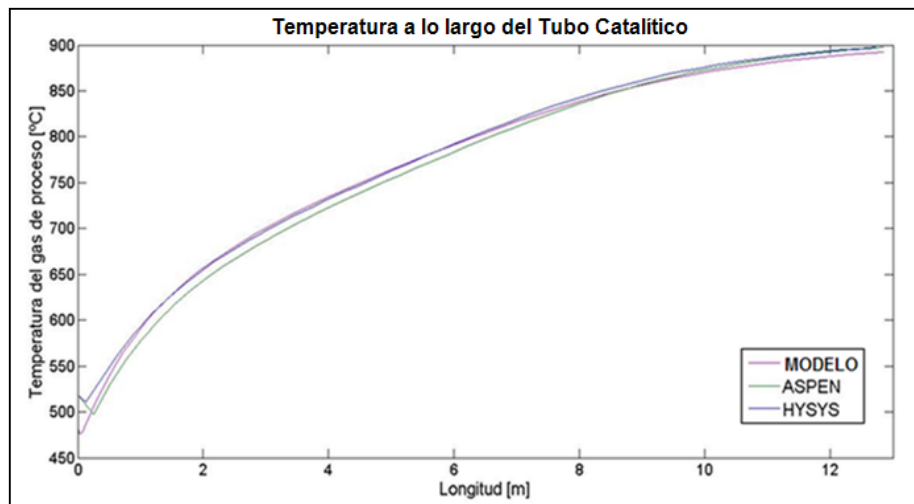


Figura 7: Comparación de modelo integro diferencial con los resultados de simuladores comerciales

I.3 OBJETIVOS

En base a la información presentada, en este trabajo de investigación se plantea el siguiente objetivo general y los objetivos específicos.

I.3.1 Objetivo general

Realizar una simulación numérica en estado estacionario de la reacción de reformación catalítica del metano con vapor a escala industrial, en catalizadores de geometría en forma de pellets y en forma estructurada, utilizando el programa Ansys CFX v14.

I.3.2 Objetivos específicos

- (a) Especificar el dominio computacional de un reformador comercial a partir de sus dimensiones y diseño para efectuar una simulación CFD de la zona catalítica.
- (b) Construir mediante el uso de un programa de dibujo asistido por computador (CAD) las geometrías para el estudio numérico del reformado de vapor con metano, con catalizadores en forma de pellets cilíndricos y un catalizador estructurado.
- (c) Generar el mallado de las geometrías de estudio a partir del modelo CAD, aplicando el programa Ansys Meshing, para la discretización y solución numérica de las ecuaciones gobernantes y de las ecuaciones auxiliares del reformado.
- (d) Imposición de las condiciones de borde para la simulación, en base a condiciones de operación de escala industrial del proceso de reformado, así como el estado de flujo, propiedades termofísicas adicionales, dominio del fluido y del sólido, así como modelos adicionales necesarios para la consistencia física de la simulación.
- (e) Integrar un modelo cinético de la reacción de reformación catalítica con vapor, para todas las geometrías, como un conjunto de ecuaciones auxiliares tomando en cuenta el dominio de la reacción.

- (f) Efectuar la simulación de las geometrías de estudio y por medio de la herramienta de visualización Ansys CFX-Post, extraer la información necesaria para la construcción de los perfiles de presión, temperatura y composición de la región del fluido, para cada geometría y comparar con los valores arrojados por un modelo pseudohomogeneo proveniente de una bibliografía especializada

CAPÍTULO II

MARCO TEÓRICO

En este capítulo se presenta de manera general las bases teóricas que fundamentan este Trabajo Especial de Grado.

II.1 MODELADO DE REACTORES DE LECHO EMPACADO

Cuando se diseña un reactor de lecho empacado, el objetivo fundamental es llegar a un sistema de parámetros que permitan su funcionamiento óptimo. Para este tipo de reactores los parámetros son presión, temperatura, composición, flujo másico, y las dimensiones del pellet. Con la finalidad de alcanzar determinadas conversiones, un sistema de ecuaciones debe ser aplicado de manera que se correlacionen los parámetros anteriores con los fenómenos de transporte que se llevan a cabo en el reactor. Para ello, se han desarrollado tres tipos de modelos matemáticos, cada uno con sus propias técnicas de solución; siendo estos: el pseudohomogeneo, el de celda equivalente y el de empaque discreto también llamado CFD (Dixon A. , 2009).

II.1.1 Modelo Pseudohomogeneo

De los tres tipos, el pseudohomogeneo es el más usado (Froment G. , 1974), este considera el empaque como una fase uniforme, donde se ignora la presencia de un perfil de velocidades en el interior del tubo catalítico (Figura 8), así como de gradientes intrapartícula y fenómenos de difusión.

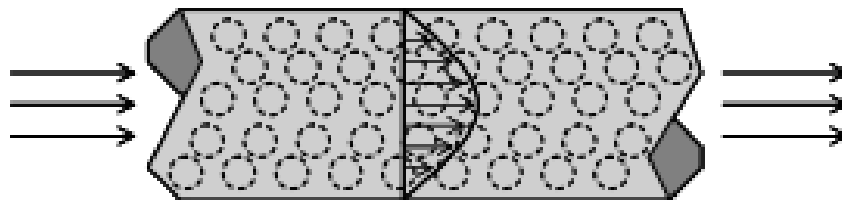


Figura 8: Diagrama modelo pseudohomogeneo

Este modelo es unidimensional, por ende solo considera el transporte axial en una sola dirección. Sus ecuaciones en estado estacionario pueden ser planteadas como una sola reacción llevada a cabo en un tubo cilíndrico, como sigue:

$$u_s \frac{\partial C}{\partial z} + \rho_s r_A = 0 \quad (\text{Ec. 1})$$

$$u_s \rho_B c_p \frac{\partial T}{\partial z} - \rho_s r_A (-\Delta H) + 4 \frac{U}{d_i} (T - T_r) = 0 \quad (\text{Ec. 2})$$

Donde u_s es la velocidad superficial, C la concentración, ρ_s la densidad del catalizador, r_A la velocidad de reacción, ρ_B la densidad del gas, c_p la capacidad calorífica del gas, T la temperatura, ΔH el calor de reacción, T_r la temperatura de los alrededores, d_i el diámetro de la tubería y z la dirección axial.

En el caso de requerirse diferenciar entre la fase sólida y la gaseosa, el modelo queda, como un balance de masa y energía para cada fase por separado.

Para el gas:

$$u_s \frac{\partial C}{\partial z} + k_g a_v (C - C_s^s) = 0 \quad (\text{Ec. 3})$$

$$u_s \rho_B c_p \frac{\partial T}{\partial z} - h_f a_v (T_s^s - T) + 4 \frac{U}{d_i} (T - T_r) = 0 \quad (\text{Ec. 4})$$

Para el sólido:

$$k_g a_v (C - C_s^s) = \rho_s r_A \quad (\text{Ec. 5})$$

$$h_f a_v (T_s^s - T) = \rho_s (-\Delta H) r_A \quad (\text{Ec. 6})$$

Con condiciones de iniciales $C = C_0$ y $T = T_0$ en $z = z_0$.

Cuando existe una resistencia importante en la transferencia de calor y masa dentro del catalizador, la tasa de reacción no es uniforme a través del pellet. En este caso las ecuaciones 5 y 6 deben ser reemplazadas por las siguientes, bajo la suposición de geometría esférica:

$$\frac{D_e}{\xi^2} \frac{d}{d\xi} \left(\xi^2 \frac{dC_s}{d\xi} \right) - \rho_s r_A(C_s, T_s) = 0 \quad (\text{Ec. 7})$$

$$\frac{k_e}{\xi^2} \frac{d}{d\xi} \left(\xi^2 \frac{dT_s}{d\xi} \right) + \rho_s (-\Delta H) r_A(C_s, T_s) = 0 \quad (\text{Ec. 8})$$

Con condiciones iniciales dadas por:

$$\left(\frac{dC_s}{d\xi} \right) = \frac{dT_s}{d\xi} = 0 \quad \text{en } \xi = 0 \quad (\text{Ec. 9})$$

$$-D_e \left(\frac{dC_s}{d\xi} \right) = k_g (C_s^s - C) \quad \text{en } \xi = \frac{d_p}{2} \quad (\text{Ec. 10})$$

$$-k_e \left(\frac{dT_s}{d\xi} \right) = h_f (T_s^s - T) \quad \text{en } \xi = \frac{d_p}{2} \quad (\text{Ec. 11})$$

Para este caso solo se considera una sola partícula, no el sólido como un todo donde existen perfiles internos. Estas ecuaciones son de segundo orden y no lineales. Esto significa que se deben resolver utilizando un método iterativo de solución (De Sousa & Pisani, 2010). Para reacciones isotérmicas simples una solución analítica es posible; sin embargo para considerar los fenómenos intrapartícula, se introduce un factor de efectividad η . El cual multiplica la velocidad de reacción en la superficie para arrojar el valor verdadero de esta velocidad en presencia de fenómenos difusivos, que es el caso observado en condiciones de operación industrial. El factor de efectividad se define de la siguiente manera:

$$\eta = \frac{\text{tasa de reaccion con resistencia difusiva}}{\text{tasa de reaccion en condiciones superficiales}} \quad (\text{Ec. 12})$$

La presencia de η se reduce el sistema de ecuaciones a las siguientes:

$$k_g a_v (C - C_s^s) = \eta \rho_s r_A(C_s^s, T_s^s) \quad (\text{Ec. 13})$$

$$h_f a_v (T_s^s - T) = \eta \rho_s (-\Delta H) r_A (C_s^s, T_s^s) \quad (\text{Ec. 14})$$

Siendo el factor de efectividad una función de la concentración y temperatura en la superficie del sólido $\eta = f(C_s^s, T_s^s)$. En la práctica este puede ser calculado de la siguiente manera (Froment & Xu, 1989):

$$\eta = \frac{\int_0^V r_A(C_s, T_s) \rho_s \frac{dv}{V}}{r_A(C_s^s, T_s^s)} \quad (\text{Ec. 15})$$

Para el caso bidimensional se pueden encontrar modelos semejantes, planteados en forma de ecuaciones diferenciales parciales, como se presenta a continuación (Froment G. , 1974):

$$\epsilon D_{er} \left(\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C}{\partial r} \right) - u_s \frac{\partial C}{\partial z} - k_g a_v (C - C_s^s) = 0 \quad (\text{Ec. 16})$$

$$k_{er,f} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right) - u_s \rho_B c_p \frac{\partial T}{\partial z} + h_f (T_s^s - T) = 0 \quad (\text{Ec. 17})$$

$$k_g a_v (C - C_s^s) = \eta \rho_p r_A \quad (\text{Ec. 18})$$

$$h_f a_v (T_s^s - T) = \eta \rho_B (-\Delta H) r_A + k_{er,f} \left(\frac{\partial^2 T_s}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T_s}{\partial r} \right) \quad (\text{Ec. 19})$$

II.1.2 Modelo de Celdas Equivalentes

El modelo celda equivalente, también conocido como de celdas de mezclado ha sido propuesto como alternativa a la estrategia anterior. En este caso se considera que el lecho consiste en una red bidimensional de celdas perfectamente mezcladas con dos salidas y dos entradas, como se muestra en la figura siguiente:

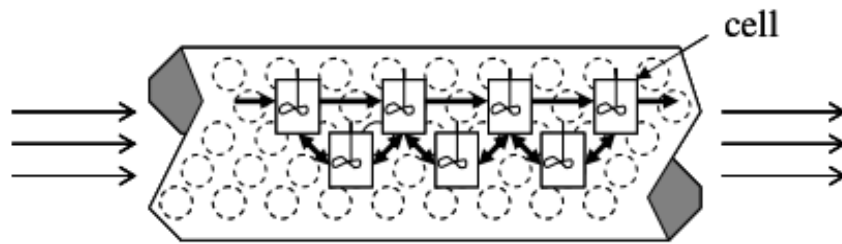


Figura 9: Esquema de modelo de celda equivalente

Configuraciones alternativas a las mostradas pueden ser planteadas a fin de incluir fenómenos como el mezclado radial y otros efectos (Edeleanu, 2014). En estado estacionario cada celda puede ser modelada como un sistema de ecuaciones algebraicas sencillas (McGuire, 1965). Esta vía pocas veces es utilizada puesto demuestra tener desviaciones mayores a un 20% a grandes números Re los cuales son los típicos de situaciones industriales (McGuire, 1965).

II.1.3 Modelo de Empaque Discreto

Esta vía no simplifica la complejidad geométrica inherente a los lechos empacados, como si sucede en los modelos anteriores. La misma está basada en CFD y sus significados son intercambiables en el caso de reactores de lecho empacado; en este sentido su estrategia consiste en resolver el patrón de flujo en el interior del empaque, en el dominio del gas. Tal como puede apreciarse en la figura siguiente, es la vía más realista para el modelado y simulación de reactores de este tipo, puesto son simulados tal cual se muestran en la vida real, sin suposiciones más allá de las asociadas a las ecuaciones de Navier-Stokes (Dixon & Stitt, 2006).

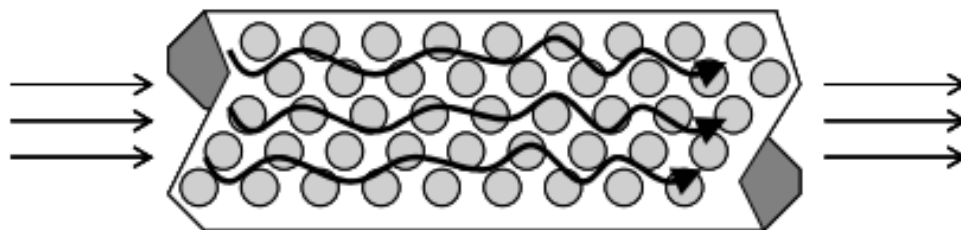


Figura 10: Esquema del modelo de empaque discreto

Mayor detalle de esta estrategia de modelado será estudiado más adelante, cuando se aborde el tema de la metodología CFD.

II.2 REFORMADO DE METANO CON VAPOR

Una de las aplicaciones más comunes de los reactores de lecho empacado o fijo, es en los reformadores, donde tienen lugar las reacciones de desplazamiento de agua. El reformado de hidrocarburos con vapor, es la vía más importante y económica para la producción de Hidrógeno y Gas de Síntesis, el cual está adquiriendo una gran importancia como combustible y en otros procesos como el Fischer Tropsch (Hawkings, 2010). La generación de gas de síntesis data desde 1917, con el desarrollo del proceso Haber Bosch, basado en la reacción de vapor con coke.

Para 1931, la empresa Standard Oil, construye una planta dedicada a la generación de Hidrógeno a partir de gases de venteo de una refinería; la reacción de reformado se dio en presencia de un catalizador depositado en tubos verticales dispuestos en paralelo, ubicados dentro de un horno (Figura 11). En 1959, ICI dio apertura al primer reformador de gran escala utilizando nafta como alimentación y operando a elevadas presiones. Esta última tecnología se convirtió rápidamente en el estándar de muchas plantas construidas para la generación de Hidrógeno en lugares donde no se tenía fácil acceso al gas metano (Hawkings G. , 2006).

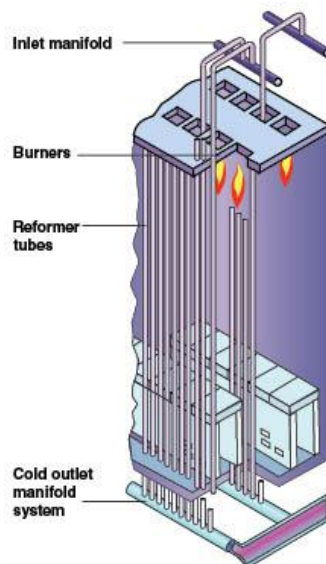


Figura 11: Vista interior de un reformador comercial

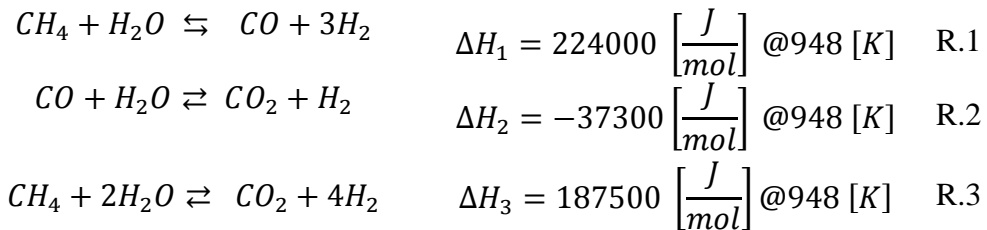
Desde ese entonces el desarrollo de nuevos catalizadores (Figura 12) ha permitido a las plantas y reformadores operar a presiones y temperaturas cada vez más altas (Mattey, 2015), con relaciones variables de vapor y carbono a la entrada (Acevedo, 2002).



Figura 12: Catalizadores para reformado

En los últimos 10 años, nuevas aplicaciones han adquirido un gran interés: la manufactura de combustibles líquidos a partir de gas natural, y la generación de hidrógeno a partir de metano, para alimentar celdas de combustible (Stitt, 2005).

Las reacciones químicas que constituyen el proceso de reformado de metano con vapor, son las de desplazamiento de agua (Wáter Shift Reactions), (Wassenberg, 2005), que se resumen a continuación:



Siendo estas: la reacción de reformación (R.1), la reacción de cambio agua-gas (R.2) y la reacción de metanación (R.3), respectivamente.

Es de notar que a pesar que la reacción de desplazamiento de agua es exotérmica, la reacción global de las anteriores conduce a un proceso endotérmico, con un calor de reacción $\Delta H_r = 374,2 \frac{kJ}{mol}$ (Olejnik, 2010).

Esta reacción altamente endotérmica, es la que tiene lugar en el reformador, el cual en la mayoría de los casos se compone de un modelo de tubos y carcasa. Dentro de los tubos se carga el catalizador y se alimenta con la mezcla de entrada, mientras que por el lado de la carcasa se realiza una combustión para lograr el mayor calentamiento posible de la mezcla reaccionante, alcanzándose temperaturas de operación de 1000 K (Grégoire, 2000).

Previo a la entrada en el reformador, existen pasos adicionales encaminados a minimizar impurezas y maximizar la producción de hidrogeno; el proceso en si puede ser esquematizado en la siguiente figura (Broadhurst & Abbot, 2002):

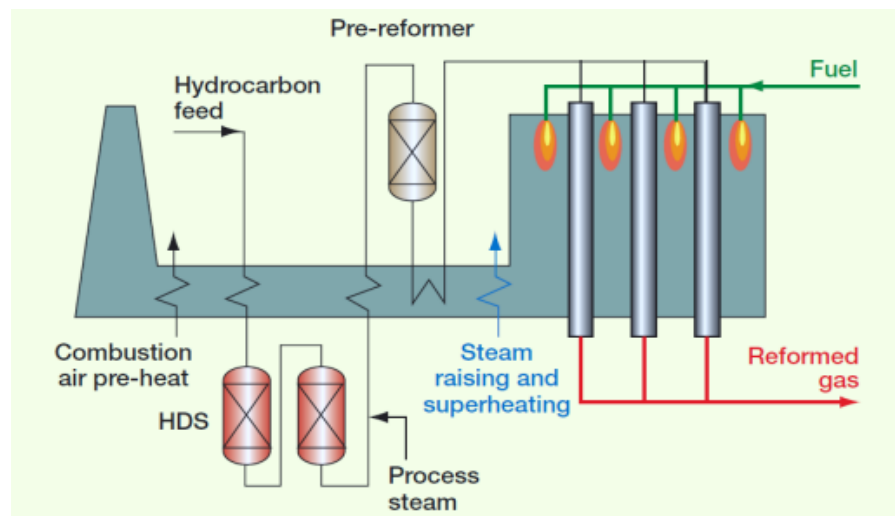


Figura 13: Esquema típico de un proceso de reformado

Debido a las altas temperaturas y elevadas condiciones de flujo dentro del reactor, no es una tarea sencilla, la medida de los gradientes de temperatura o de los patrones de flujo dentro del reactor. Actualmente, la única data experimental disponible, que puede ser obtenida del interior de un reformador es medidas pirometricas de la temperatura de la pared externa del tubo (Edeleanu, 2014).

Aun así, este método solo proporciona una medida superficial de lo que sucede en el interior del tubo, pero ha sido información suficiente para los operarios determinar problemas como un empacado no uniforme o áreas con elevada absorción de calor en

el tubo. Es en casos como este donde las simulaciones CFD pueden dar una gran cantidad de información sin necesidad de alterar la normal operación del reformador. Estrategia de uso creciente en la industria, como se evidencia entre los servicios ofrecidos por la empresa japonesa Toyo Engineering (Toyo, 2014) (Figura 14).

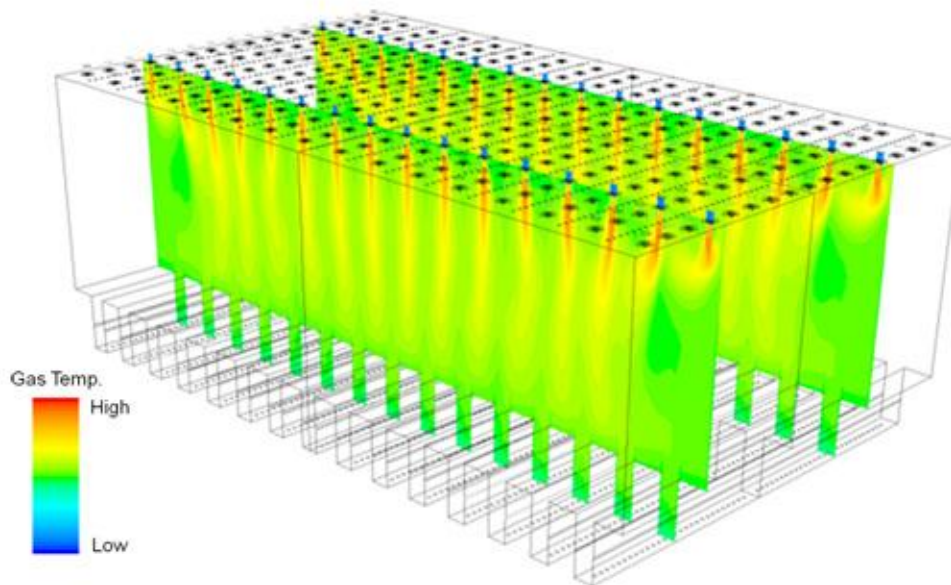


Figura 14: Simulación CFD de gases de combustión en horno de reformador industrial

II.2.1 Hornos del Reformador

El horno provee el calor para que una reacción química se lleve a cabo dentro de los tubos catalíticos. Uno de los sistemas de combustión más simples a nivel industrial es el que tiene múltiples quemadores en una geometría rectangular. Normalmente este tipo de sistemas es difícil de analizar debido a la multiplicidad de las fuentes de calor y debido a las interacciones entre la llama y los productos asociados a la combustión (Baukal, 2003).

Hay tres tipos convencionales de diseño de hornos reformadores, como se muestra en la Figura 5, calentados en el tope, calentados lateralmente y calentados en el fondo (Rostrup, 1984) :

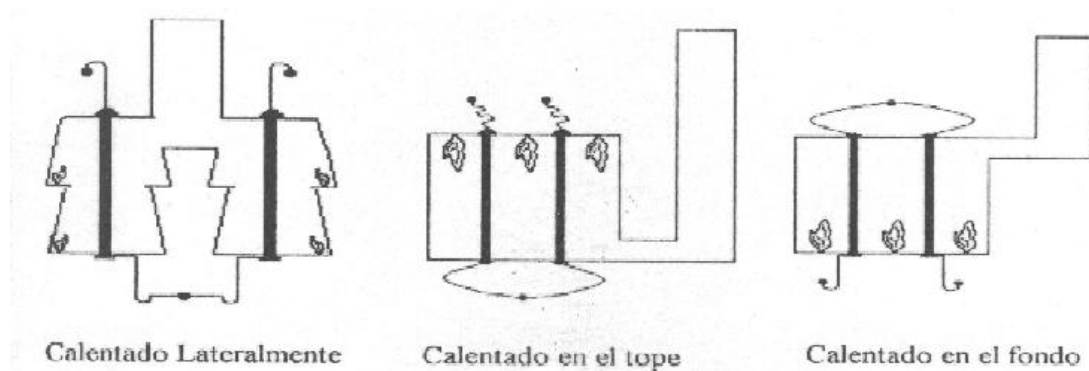


Figura 15: Configuraciones típicas de los quemadores

II.2.2 El Modelo Cinético

El modelo cinético para las reacciones reformado, o modelo de cinética intrínseca, en presencia de un catalizador de níquel soportado en alfa alúmina ($Ni / \alpha - Al_2O$), fue determinado experimentalmente en 1989 por (Froment & Xu, 1989), para un catalizador comercial, bajo la condición de ausencia de fenómenos difusivos intra partícula.

Adicionalmente, se tomó en consideración los efectos termodinámicos de presión y temperatura, además de la adsorción superficial; quedando el mecanismo cinético expresado en los siguientes pasos:

1. El vapor de agua reacciona sobre la superficie de los átomos de níquel, produciéndose Oxígeno e Hidrógeno adsorbidos.
2. El Metano reacciona en la superficie de los átomos de Níquel, generando Hidrógeno gaseoso, y moléculas de CH_2 adsorbidos.
3. Los radicales de CH_2 y el Oxígeno adsorbidos, reaccionan para producir Hidrógeno y CHO adsorbidos.
4. CHO adsorbido, se disocia para dar CO y H , o reacciona con Oxígeno adsorbido, para dar CO_2 y H .

5. CO adsorbido reacciona con O_2 para producir CO_2 y desorber en la fase gaseosa (Hawkings, 2010).

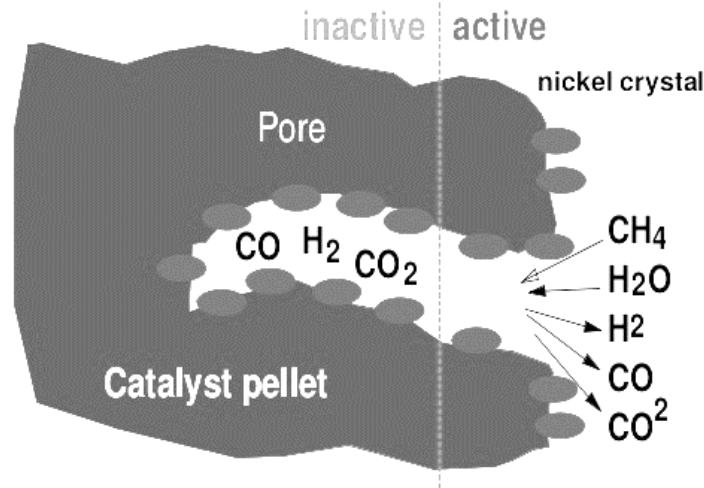


Figura 16: Reacción en sitios activos

En función a las hipótesis anteriores, el modelo cinético queda como se refleja en la tabla 1.

Tabla 1: Modelo Cinético Intrínseco

| | |
|--|-------|
| $r_1 = \frac{\frac{\kappa_1}{p_{H_2}^{2.5}} \cdot \left(p_{CH_4} \cdot p_{H_2O} - \frac{p_{H_2}^3 \cdot p_{CO}}{K_1} \right)}{DEN^2}$ | Ec.20 |
| $r_2 = \frac{\frac{\kappa_2}{p_{H_2}^{3.5}} \cdot \left(p_{CH_4} \cdot p_{H_2O}^2 - \frac{p_{H_2}^4 \cdot p_{CO_2}}{K_2} \right)}{DEN^2}$ | Ec.21 |
| $r_3 = \frac{\frac{\kappa_3}{p_{H_2}} \cdot \left(p_{CO} \cdot p_{H_2O} - \frac{p_{H_2} \cdot p_{CO_2}}{K_3} \right)}{DEN^2}$ | Ec.22 |
| $DEN = 1 + K_{CO} \cdot p_{CO} + K_{H_2} \cdot p_{H_2} + K_{CH_4} \cdot p_{CH_4} + K_{H_2O} \cdot \left(\frac{p_{H_2O}}{p_{H_2}} \right)$ | Ec.23 |

Donde las ecuaciones 19, 20 y 21 son las velocidades de reacción, de las reacciones 1, 2, 3 respectivamente, expresadas en $[kmol/kg\ cat * hr]$. La ecuación 4, representa la adsorción en el catalizador, con presiones parciales expresadas en $[bar]$.

Adicionalmente se definen los siguientes parámetros para resolver el modelo anterior.

Tabla 2: Parámetros del modelo cinético

| | | | |
|--|-------|--|-------|
| $\kappa_1 = 4.225 * 10^{15} * e^{\left(\frac{-240100}{RT}\right)}$ | Ec.24 | $K_3 = 10^{\left(\frac{-9740}{T}+11.312\right)}$ | Ec.29 |
| $\kappa_1 = 1.955 * 10^6 * e^{\left(\frac{-67130}{RT}\right)}$ | Ec.25 | $K_{CO} = 8.23 * 10^{-5} * e^{\left(\frac{70650}{RT}\right)}$ | Ec.30 |
| $\kappa_1 = 1.020 * 10^{15} * e^{\left(\frac{-243900}{RT}\right)}$ | Ec.26 | $K_{H_2} = 6.12 * 10^{-9} * e^{\left(\frac{82900}{RT}\right)}$ | Ec.31 |
| $K_1 = 10^{\left(\frac{-11650}{T}+13.076\right)}$ | Ec.27 | $K_{CH_4} = 6.65 * 10^{-4} * e^{\left(\frac{38280}{RT}\right)}$ | Ec.32 |
| $K_2 = 10^{\left(\frac{1910}{T}+1.764\right)}$ | Ec.28 | $K_{H_2O} = 1.77 * 10^{-5} * e^{\left(\frac{-88680}{RT}\right)}$ | Ec.33 |

Las ecuaciones del factor pre-exponencial y las constantes de adsorción, se definieron para ser dependientes de la temperatura solamente. Se utiliza una constante universal de los gases definida como $R = 8.314472 \left[\frac{J}{mol K} \right]$.

II.3 FLUIDO DINAMICA COMPUTACIONAL

La Fluida Dinámica Computacional (CFD), envuelve el análisis de flujo de fluidos y fenómenos relacionados, tales como calor y difusión de masa, utilizando métodos de solución numérica de ecuaciones diferenciales parciales. Los códigos CFD disponibles en la actualidad bien sea libres o comerciales, utilizan alguno de los siguientes métodos de solución: diferencias finitas (FD), volúmenes finitos (FV) o elementos finitos (FE). En sus inicios el método más usado fue y aún está en uso para la gran mayoría de las aplicaciones, es el de elementos finitos (FE), sin embargo en la actualidad casi la totalidad de los programas CFD utiliza el método de los volúmenes finitos (FV) (Pletcher, 2012).

II.3.1 Método de Volúmenes Finitos

El método de volúmenes finitos consiste en dividir el dominio de cálculo en un número finito de volúmenes de control, de modo que cada nodo de la malla conformada pertenezca a un volumen de control. Las ecuaciones diferenciales que rigen el comportamiento del flujo son integradas sobre cada uno de los volúmenes de control, utilizando para ello algún perfil seleccionado que exprese la variación de una función ϕ , entre dos nodos consecutivos que son utilizados para evaluar la integral requerida. El resultado de este proceso es la ecuación discreta que contiene los valores de ϕ para un grupo de nodos (Ansys-CFX, 2010).

Por sus características, éste método no requiere un alto número de iteraciones para obtener la convergencia deseada, ya que en su proceso de solución satisface los principios de conservación sobre cualquier grupo de volúmenes de control, y sobre todo el dominio de cálculo (Versteeg, 1995) . Es por ello que presenta una gran ventaja ante los demás métodos numéricos de su especie. Los pasos a seguir para la aplicación de éste método comienzan por la generación de la malla, luego la discretización de las ecuaciones y finalmente la resolución de las mismas.

La solución de las ecuaciones tanto para flujo turbulento, como para flujo laminar han sido extensivamente estudiadas en la literatura, así como su solución utilizando métodos de volúmenes finitos (FV), (Renade, 2002). En el presente trabajo se utilizará el software CFX-13.5, de la casa Ansys Inc, para efectuar las simulaciones.

II.3.2 Ecuaciones Gobernantes

La solución numérica de la forma discretizada de las ecuaciones gobernantes, para la conservación de la masa, momentum y energía, tanto para el dominio como para los volúmenes de control, es logrado gracias a un proceso iterativo, llevado a cabo por el CFX, tanto para ecuaciones como para los demás modelos auxiliares, necesarios para describir o simular correctamente el dominio.

II.3.2.1 Ecuaciones de Cambio para Mezclas Multicomponente

Las ecuaciones gobernantes de un proceso de flujo multicomponente y reactivo (Bird, 2005), se presentan a continuación; en la forma de un conjunto de balances diferenciales de masa por especie, momentum y energía, respectivamente.

$$\rho \frac{D\omega_\alpha}{Dt} = -(\nabla \cdot \mathbf{j}_\alpha) + r_\alpha \quad \text{Ec.34}$$

Para especies: $\alpha = 1, 2, 3 \dots n$

$$\rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\nabla p - [\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}] + \rho \mathbf{g} \quad \text{Ec.35}$$

$$\rho \hat{C}_p \frac{DT}{Dt} = -(\nabla \cdot \mathbf{q}) - (\boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{v}) + \left(\frac{\partial \ln \hat{V}}{\partial \ln T} \right)_{p, x_\alpha} \frac{Dp}{Dt} + \sum_{\alpha=1}^n \overline{H}_\alpha [(\nabla \cdot \mathbf{j}_\alpha) - R_\alpha] \quad \text{Ec.36}$$

Adicionalmente en cada balance anterior se formulan flujos de masa, momentum y energía, en cada ecuación; los cuales deben ser reemplazados, para la adecuada solución de los modelos, por expresiones que involucren el transporte de propiedades y los gradientes de concentración, velocidad y temperatura.

$$\mathbf{j}_A = -\rho \mathcal{D}_{A,B} \nabla \omega_A \quad \text{Ec.37}$$

$$\boldsymbol{\tau} = -\boldsymbol{\mu} [\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^\dagger] + \left(\frac{2}{3} \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\kappa} \right) (\nabla \cdot \mathbf{v}) \boldsymbol{\delta} \quad \text{Ec.38}$$

$$\mathbf{q} = -k \nabla T + \sum_{\alpha=1}^n \frac{\overline{H}_\alpha}{M_\alpha} \mathbf{j}_\alpha \quad \text{Ec.39}$$

El flujo de masa (Ec.36) está dado para una mezcla binaria, mientras que el flujo de momentum es el mismo tanto para mezclas como para fluidos puros. El flujo de energía se compone de dos términos: el primero es el término de transporte de calor por conducción para sustancias puras y el segundo describe el transporte de calor por cada

especie que difunde. El término $\overline{H_\alpha}$ es la entalpia parcial molar de cada especie. Tanto el flujo de masa como el de energía son cantidades vectoriales, mientras que el de momentum es un tensor (Bird, 2005).

Para el caso de más de dos componentes, a presiones moderadas, el flujo de masa se puede estimar a través de la ecuación de Maxwell-Stefan (Cussler, 1997).

$$\nabla x_\alpha = - \sum_{\beta=1}^n \frac{x_\alpha x_\beta}{D_{\alpha,\beta}} (\mathbf{v}_\alpha - \mathbf{v}_\beta) = - \sum_{\beta=1}^n \frac{1}{cD_{\alpha,\beta}} (x_\alpha N_\beta - x_\beta N_\alpha) \quad \text{Ec.40}$$

II.3.2.2 Ecuaciones Auxiliares y de Transporte

En la mayoría de las aplicaciones, no solo basta con la formulación de las ecuaciones gobernantes o fundamentales para la adecuada simulación de un determinado dominio, sino que se requieren de otras ecuaciones también conocidas como ecuaciones auxiliares. Para el presente trabajo las ecuaciones auxiliares son, además del modelo cinético, las correlaciones que describen el perfil de temperaturas en la pared del tubo así como los perfiles de velocidad a la entrada.

II.3.3 Discretización

Para la adecuada solución o aproximación numérica de las ecuaciones arriba descritas, por medio del método de volúmenes finitos (FV), se plantea una discretización de las mismas en unos subdominios o volúmenes de control, también llamados elementos (AnsysCFX, 2013). Esto es posible creando una malla en el dominio de la simulación.

Las ecuaciones de conservación son integradas dentro de cada volumen de control (Figura 17), de manera tal que se garantiza que se conservan las cantidades fundamentales, tanto en los elementos como en el dominio.

La clave del proceso de discretización reside en la aplicación del Teorema de la Divergencia de Gauss, a las ecuaciones fundamentales (Pozrikidis, 2011). El cual permite efectuar la integración de estas ecuaciones en volúmenes de control de superficie definida, bien sean tetraedros, prismas, u otros, relacionando el flujo de

un campo vectorial a través de una superficie cerrada con la integral de su divergencia en el volumen delimitado por esa superficie (AnsysCFX, 2013). Una vez integradas en estos volúmenes, se puede realizar una buena aproximación numérica de su solución en estos conociendo las condiciones de borde que apliquen (Ansys-CFX, 2010).

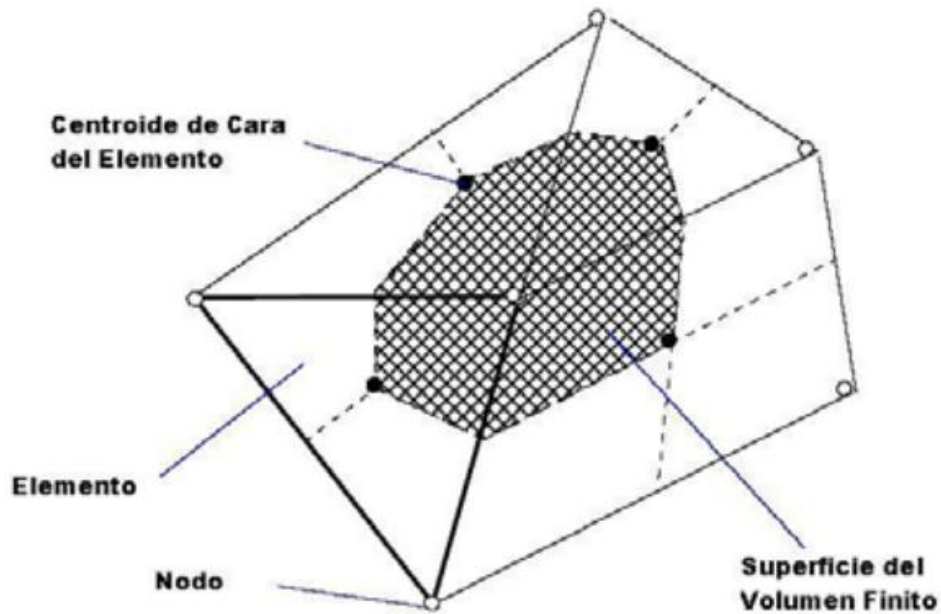


Figura 17: Ilustración de un elemento del dominio

II.3.4 Mallado

Para la adecuada discretización de todas las ecuaciones fundamentales en una determinada simulación en FV, se requiere que la geometría del dominio sea discretizada, para ello se efectúa un mallado (meshing), procesos en el cual el sólido es dividido en una serie de volúmenes discretos, con una geometría bien definida y lo más simple posible (Deutschmann, 2013).

Ese proceso, es llevado a cabo por un programa aparte del CFX, a los fines del presente trabajo, será la herramienta Meshing, de Ansys. El mallado afecta significativamente las simulaciones, pudiéndose requerir más iteraciones para un determinado mallado entre otras cosas. Eventualmente, algunas geometrías difícilmente pueden ser malladas

o simplemente requieren de recursos de cómputo fuera del alcance de cualquier investigación (Ansys-CFX, 2010). En cualquier caso, siempre se identificarán dos tipos principales de mallado: estructurado y no estructurado.

Como se puede apreciar en la Figura 18, puede observarse que para una misma geometría pueden existir varias mallas, las cuales pueden ser generados selectivamente cambiando parámetros clave en el software de mallado. Sin embargo para el caso del reformado y para el Meshing, en mallado no estructurado será la opción por defecto a usar, dada la elevada complejidad de la geometría interior de un empaque (Deutschmann, 2013).

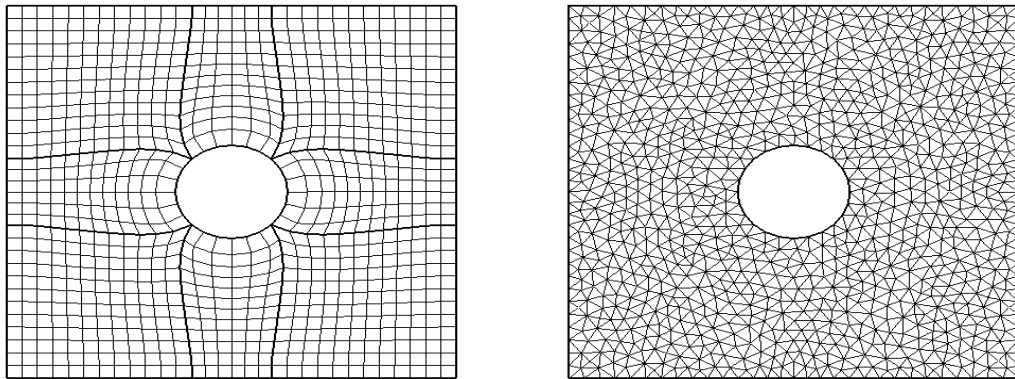


Figura 18: Mallado estructurado y no estructurado

CAPÍTULO III

MARCO METODOLÓGICO

A continuación se presenta la metodología a utilizar para el logro de los objetivos del presente trabajo, cada paso sintetiza las actividades a realizar dentro de cada objetivo específico.

III.1 SELECCIÓN DEL DOMINIO COMPUTACIONAL

La necesidad de un modelo CAD para las simulaciones CFD, hace menester la selección de una geometría, modelo o diseño de dimensiones físicas bien conocidas. Para el presente Trabajo Especial de Grado, se aplicó la estrategia de análisis de simetrías para la determinación del espacio o geometría mínima en la cual suceden los fenómenos de transporte que caracterizan al reformador.

Según la metodología de análisis de simetrías (Figura 19) para CFD (Ghassabzadeh & Ghassemi, 2013), se plantea entonces la selección de un reformador industrial de dimensiones bien definidas, para este caso se utilizó el reformador de metano con vapor, de la planta METOR-Oriente (De Sousa & Pisani, 2010).

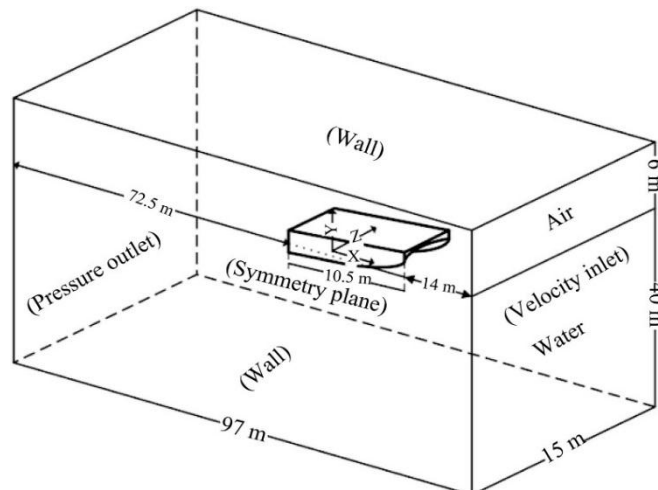


Figura 19: Análisis de simetrías típico

Una vez seleccionado el reformador base, se procede a encapsular dentro de un volumen cubico arbitrario, toda la zona del reactor donde exista flujo, tal que exista al menos una lado de alimentación, uno de salida y paredes o lados sin flujo. Acto seguido se establece un sistema coordenado de referencia centrado en una de las esquinas del volumen anterior (Ghassabzadeh & Ghassemi, 2013). En este sistema se pasa a identificar la dirección de flujo dominante en el reactor, esta dirección se identifica tomando como punto de partida el lado de entrada y de llegada el lado de salida. Normal a esta dirección se traza otro vector arbitrario en cuya dirección el flujo sea nulo o cero, es decir que apunte hacia una pared.

Se procede entonces a trazar los planos de simetría de tal manera que se cumpla:

1. A cada lado del plano de simetría deben existir imágenes especulares.
2. El plano de simetría de ser paralelo a la dirección de flujo dominante y normal a alguna dirección de flujo nulo (Figura 20).
3. Cada plano de simetría debe poseer una imagen especular única.

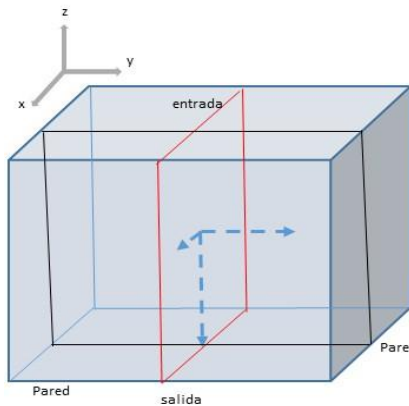


Figura 20: Esquema planos de simetría

Una vez establecidos los planos de simetría, la silueta sobre estos será el dominio bidimensional a simular. En caso de existir más de un plano y estos coincidir en alguna región, se selecciona el dominio tridimensional que incluya a ambos planos y donde exista flujo. En caso contrario la simulación puede ser bidimensional, y tantas simulaciones como simetrías existan, usualmente no más de dos (Ansys-CFX, 2010).

III.2 CONSTRUCCIÓN CAD DEL LECHO CATALÍTICO

III.2.1 Lecho Empacado

Para toda simulación CFD, siempre se requiere de un dibujo CAD como base para el dominio a simular; el trazado de un lecho empacado presenta los inconvenientes de tratarse de una estructura aleatoria que no presenta ningún tipo de simplificación que haga posible su digitalización por medio distintos a RMI (imagen por resonancia magnética) de un empaque real.

En este caso se plantea la elaboración de un empaque del tipo Montecarlo o también llamado empaque aleatorio (Nijemeisland & Dixon, 2004), que supone todas los pellets llegan y se disponen de manera aleatoria dentro del tubo durante el llenado y así se conservan independientemente de las leyes o principios que rigen ese proceso de llenado.

Basándonos en un pellet base de forma cilíndrica (Figura 21) se procede al trazado de todo el empaque utilizando operación de cuerpos y transformaciones de ejes, tomando como punto de partida o valores semillas un conjunto linealmente independiente de vectores que determinan la forma del empaque final (Nijemeisland & Dixon, 2004).

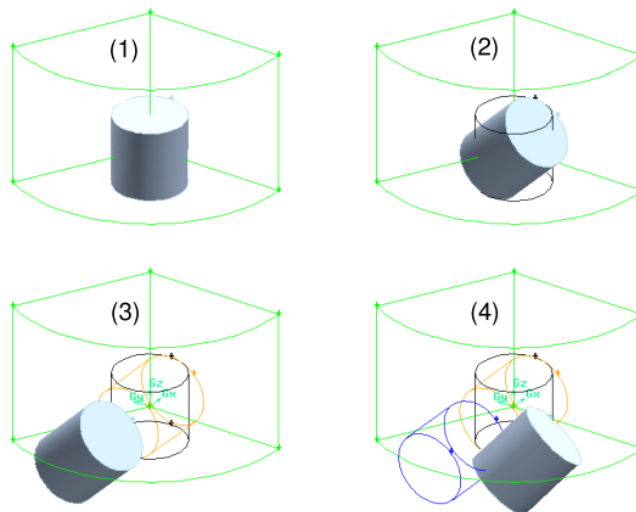


Figura 21: Transformaciones en pellets

Así mismo, en la medida que se van implementando las transformaciones a los cilindros que constituyen a los pellets del empaque, se van conservando los cilindros anteriores de manera que por cada nuevo conjunto de transformaciones se adicionan nuevos pellets al conjunto hasta formarse un clúster que llene por completo el segmento transversal de la tubería, para luego repetirlos a lo largo del tubo y obtener el empaque buscado.

Para el presente trabajo se construyeron tres empaques, con las especificaciones establecidas en la tabla 3.

Tabla 3: Especificaciones de CAD de Empaques

| | CAD-1 | CAD-2 | CAD-3 |
|-----------------------------------|-------|-------|-------|
| Diámetro de pellet [<i>cm</i>] | 2,54 | 2,54 | 2,54 |
| Altura de pellet [<i>cm</i>] | 2,54 | 2,54 | 2,54 |
| Numero de agujeros | 0 | 1 | 4 |
| Diámetro de agujero [<i>cm</i>] | 0,4 | 0,4 | 0,4 |
| Longitud de empaque [<i>cm</i>] | 100 | 40 | 30 |

III.2.2 Lecho Estructurado

Para el empaque estructurado se implementara la geometría de los catalizadores Catacel (Catacel, 2015), componiéndose esta de un cilindro concéntrico a la tubería de 1 pulgada en diámetro desde donde se extienden aletas radiales a los bordes interiores del tubo (Figura 22). El espesor de las aletas se fijó en 0,5 centímetros.



Figura 22: Vista superior de empaque estructurado Catacel.

III.3 GENERACIÓN DEL MALLADO

Paso siguiente se procedió a la generación de la malla, utilizando el programa Ansys Meshing. Es de notar que una geometría tan compleja como la encontrada en empaques, conduce a mallados de igual o mayor complejidad y dificultad, requiriéndose en muchos casos enormes recursos de computo, especialmente memoria (Deutschmann, 2010). Para mitigar ese efecto, al menos parcialmente se propuso la implementación de una malla dividida o malla discontinua, la cual permite separar una sola geometría en dos o más dominio de manera que la generación de la malla sea más simple y consuma menos recursos. Para el presente trabajo se definieron dos dominios: el dominio del gas y el dominio del catalizador sólido.

El mallado dividido implica que en la medida que se construyen los volúmenes discretos que llenan la geometría de trabajo, no necesariamente tiene que haber coincidencia entre los vértices que se encuentran en la frontera (Figura 23).

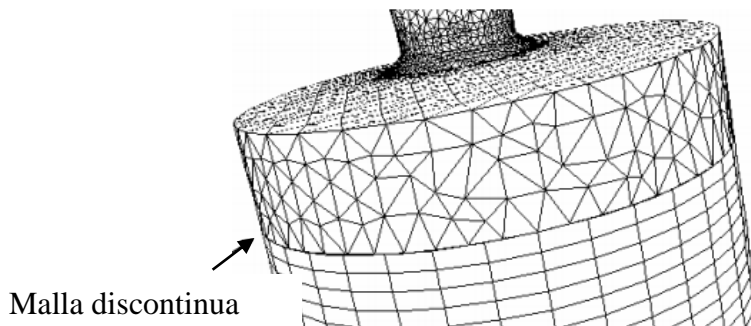


Figura 23: Ejemplo de malla dividida

Para el caso del presente Trabajo Especial de Grado, en el interior de cada dominio por separado se utilizó un mallado desestructurado que permitiera la solución de la geometría de interés, la cual se sabe no posee simetrías internas. Para controlar la generación del mallado se establecieron en el programa AnsysMeshing distintos valores de ángulo de curvatura, tamaños máximos y mínimos de los volúmenes de control, así como la geometría del volumen, para obtener una malla lo más fina posible sin necesidad de usar muchos recursos de cómputo.

Para las cuatro geometrías estudiadas los criterios y estrategias para el mallado fueron los mismos, conservándose de igual manera la división del dominio en todos los casos. La división del dominio consistió en separar el volumen ocupado por el gas, del volumen ocupado por el catalizador sólido, utilizando una frontera imaginaria que coincide físicamente con la superficie del catalizador trazada en el objetivo anterior.

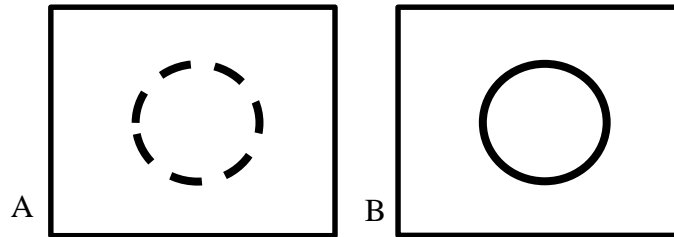


Figura 24: A) dominios comunes B) dominios separados

Como se puede apreciar en la figura 24, la división del dominio constituye una manera de resolver selectivamente ecuaciones gobernantes en determinadas zonas de la geometría de estudio, así en una geometría de dominios comunes, en todo su volumen se resolverán todas las ecuaciones gobernantes, mientras que en una de dominio dividido, como puede ser el caso de un sólido sumergido en un fluido, solo en el exterior del círculo se resolverán las tres ecuaciones gobernantes, mientras que en el interior solo se resolverá la del balance de energía.

El computador utilizado para el presente trabajo especial de grado, tiene una configuración según la mostrada en la tabla 4.

Tabla 4: Configuración del Computador

| | |
|------------------|------------------------|
| CPU | Intel QuadCore 2,8 Ghz |
| Plataforma | 32 bits |
| Memoria RAM | 4 Gb |
| Placa Base | Biostar 775 |
| Disco Duro (HDD) | 300 Gb |
| Socket | 775 |
| Chipset | Intel G41 |
| Refrigeración | Fan Cooler / Heat Sink |
| Sistema | Windows 7 Pro |
| Software | Ansys v14 |

Por ultimo una vez generados los mallados se procedió a cuantificar la calidad de cada uno utilizando los indicadores típicos Oblicuidad y Relación de Aspecto (Ansys-CFX, 2010), esto con la finalidad de garantizar que las mallas generadas poseen las características óptimas para la discretización de las ecuaciones gobernantes.

III.4 INTRODUCCIÓN DE PROPIEDADES Y MODELOS AUXILIARES

Una vez generado el mallado de los dominios a simular, se procedió a imponer las condiciones de borde requeridas para su simulación. Para esto se utilizó la herramienta CFX-Pre, la cual permite la introducción de estas condiciones de borde además de ofrecer la posibilidad de acoplar modelos auxiliares a la simulación con la finalidad de mejorar la precisión de la misma (Ansys-CFX, 2010). Estos modelos auxiliares son implementados por medio del uso de la línea de comandos y expresiones CEL (Figura 25).

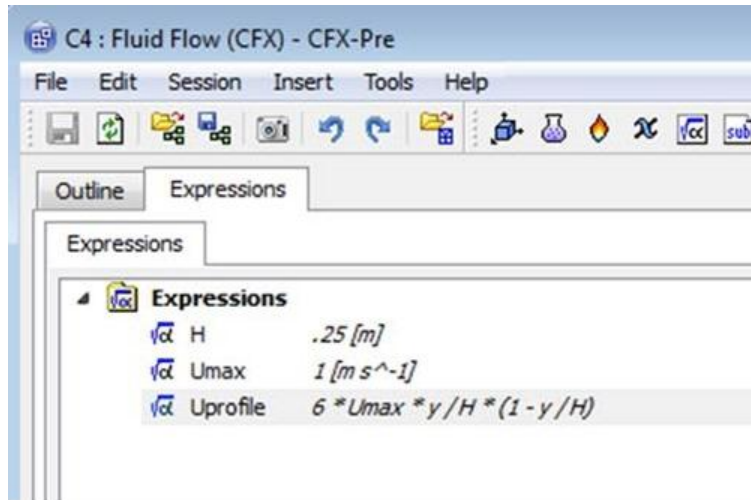


Figura 25: Vista CFX CEL

Son llamados modelos auxiliares, porque pueden ser valores constantes o variables, dependientes o independientes de cantidades calculadas en tiempo de cómputo a partir de las soluciones de las ecuaciones gobernantes. Los modelos auxiliares más comunes son aquellos que definen una condición de frontera en una simulación, como por ejemplo un perfil de velocidades laminar, otros son los que definen una cantidad dada

que pertenece al medio del fluido, como por ejemplo la conductividad térmica o la viscosidad (Cussler, 1997).

Para la simulación de la reacción de reformado, según el modelo de (Froment & Xu, 1989), se estableció como primer paso la incorporación del modelo cinético para cada reacción química. Este modelo fue corregido para tomar en consideración dos aspectos: fenómeno difusivo y la distribución a lo largo de la superficie del catalizador.

Por otro lado la cinética se estableció como un conjunto de fórmulas que son calculadas en tiempo de cómputo solamente en el dominio de la superficie del catalizador sólido. Dejando el interior sólido de este catalizador solo como un medio donde ocurre solamente transferencia de calor. Seguidamente se implementó, también en el seno del fluido, las difusividades de las especies químicas presentes, utilizando para ello las correlaciones especializadas para fase gaseosa recomendadas para este proceso (De Sousa & Pisani, 2010).

Adicionalmente se estableció en el módulo de reacciones químicas del CFX-Pre, un conjunto de tres reacciones químicas que involucren las especies requeridas para el proceso.

Acto seguido se procedió a establecer las condiciones de borde o frontera del dominio geométrico a simular, incluyendo dentro de este conjunto a aquellas que definen lo que sucede en la entrada, salida y paredes del dominio. Igualmente se hizo con las propiedades de los materiales presentes y el modelo de turbulencia (Dixon A. , 2009). Se estableció las condiciones frontera según las condiciones de operación típicas para este proceso (Wilde & Froment, 2011). En la región de la pared se estableció el flujo de calor como la condición de borde, a fin de evitar el refinamiento de malla (Figura 26) en la proximidad de la misma, en presencia de un lecho de pellets (Nikodemus, 2013).

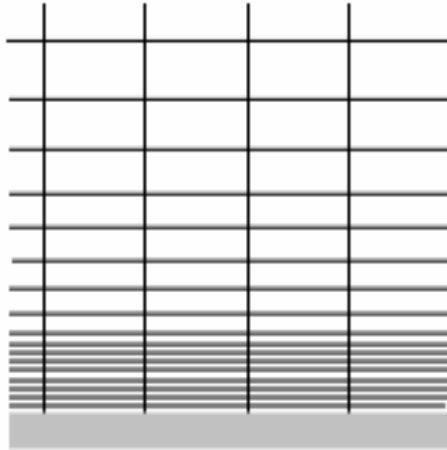


Figura 26: refinamiento de malla
cerca de la pared

III.5 SIMULACIÓN

Una vez especificadas todas las condiciones de borde en el dominio de la simulación, se procedió a la solución de los modelos utilizando la herramienta CFX-Solver. En este programa se estableció la plataforma computacional, según las especificaciones de la Tabla 4. Paso siguiente se establecieron monitores locales de residuales para los balances fundamentales de la simulación, esto con la finalidad de tener control de la estabilidad y convergencia de la solución de las ecuaciones gobernantes (Ansys-CFX, 2010).

Los residuales permiten visualizar la manera en la que se van resolviendo los balances fundamentales de manera que en caso de llegarse a un punto donde se existe demasiada inestabilidad la simulación puede ser detenida manualmente ahorrando así recursos de cómputo y tiempo. A fin de definir lineamientos que permitan decidir cuándo una determinada corrida se está llevando adecuadamente; se utilizaron los establecidos por (Versteeg, 1995), donde se expresa la siguiente heurística (tabla 5):

Tabla 5: Heurística para Residuales

| Indicador | Criterio |
|---------------------------------------|---|
| Tendencia de la curva de residuales | Siempre decreciente |
| Valores de los residuales | Inferiores a 0,01 |
| Estabilidad de la curva de residuales | Preferiblemente una curva suave |
| Avance por iteración | Cada iteración debe arrojar un residual para cada balance |
| Tendencia global | Todas las curvas de residuales deben decrecer. La manera en la que decrecen puede ser distinta, pero al final de la simulación todas deben haber llegado a un valor igual o inferior a residual máximo de 0,01 |
| Decrecimiento tardío | Cuando los valores semilla calculados por el Pre, distan de la solución real, las curvas de residuales pueden ser crecientes en las primeras 10 iteraciones y luego comenzar a decrecer. |
| Número máximo de iteraciones | Depende de cada programa, pero siempre los desacoplados requerirán más iteraciones que los acoplados. |

En lo referente a la estabilidad de la solución se sabe de antemano (Dixon A. , 2009) que para el balance de momentum, se presenten oscilaciones en los residuales, dada la complejidad de la ecuación gobernante y los términos exponenciales del modelo cinético. En el caso específico del CFX-Solver, se tiene que no más de 200 iteraciones son las requeridas para la convergencia de la gran mayoría de las simulaciones, por ende se estableció este tope máximo para el presente trabajo, pudiéndose detener antes las corridas, en caso de observarse o un comportamiento inestable en todos los balances o cuando se alcancen residuales bajos.

Adicionalmente se tienen los residuales de las fracciones másicas de cada especie química, este monitor fue destinado a llevar seguimiento sobre la estabilidad y convergencia de la ecuación general de transporte de fracción másica a lo largo del

dominio, la cual es una ecuación gobernante adicional, que influye en la manera como se lleva a cabo la reacción química dominio.

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j Y_i)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_i \frac{\partial Y_i}{\partial x_j} \right) + R_i + S_i \quad \text{Ec.41}$$

Esta ecuación representa, en un volumen de control la tasa de cambio en el tiempo, más la tasa de movimiento del fluido; igual a la tasa de cambio debida a fenómenos difusivos más la tasa de destrucción de la especie i por el mecanismo cinético, mas cualquier otra forma de generación o consumo de esa misma especie, respectivamente.

En síntesis esta ecuación modela el transporte de las especies químicas a lo largo del dominio, por ende se efectuó el monitoreo de residuales, de todos los compuestos involucrados, dado que el anterior balance es por cada especie i . La estabilidad y convergencia de estas ecuaciones siguen el mismo criterio de las demás (AnsysCFX, 2013).

III.6 VISUALIZACION Y COMPARACION DE DATOS

Siendo objetivo final de este trabajo especial la comparación entre los resultados arrojados por el Ansys-CFX y los del modelo unidimensional, es de gran importancia encontrar una manera efectiva de comparar entre los resultados tridimensionales de CFD con los perfiles unidimensionales.

Así bien, una vez lograda la convergencia de las diferentes simulaciones y geometrías planteadas, se procede a visualizar los resultados con la herramienta CFX-Post, donde es posible establecer la manera de leer la gran cantidad de datos obtenidos tras la solución de las ecuaciones gobernantes (AnsysCFX, 2013).

Se implementaron regiones o zonas de lectura de datos en los dominios tridimensionales, de tal forma que estas sean planares y perpendiculares a la dirección del gas (Figura 27). Estas regiones fueron trazadas utilizando el programa CFX-Post.

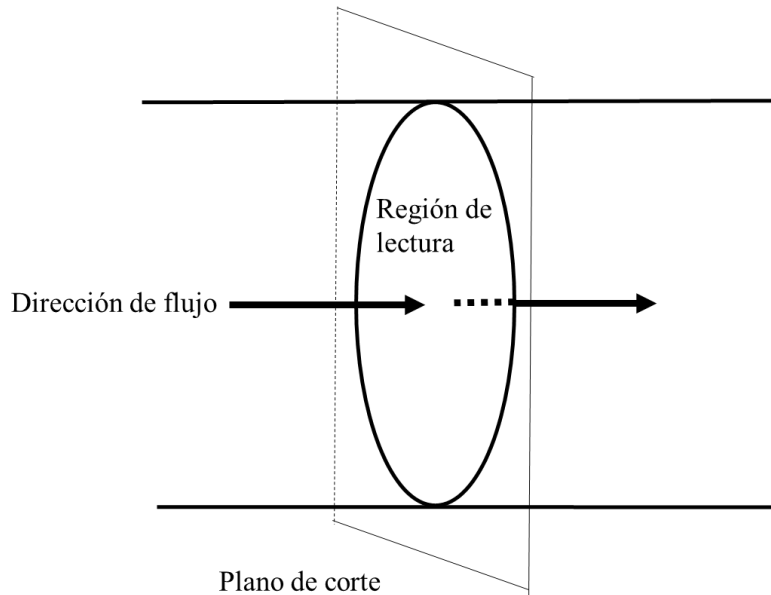


Figura 27: Corte de lectura de datos

Estas zonas de lectura de datos fueron trazadas en diversas zonas del tubo catalítico, todas equidistantes, para un total de 10 zonas en cada geometría. El distanciamiento se calculó en base a las dimensiones de la geometría en cuestión; esto fue una necesidad heredada de los pasos anteriores donde se tuvo que reducir la longitud del segmento de 1H y 4H.

En las zonas de lectura, el CFX-Post ofrece la opción de una operación de lectura, la cual es la manera en la que serán combinados los resultados de una determinada propiedad φ para de esta forma devolver un valor único asociado; esto se realizó a través del calculador de funciones. En esta interfaz se utilizó como función u operación de lectura, la de promedio aritmético ponderado por malla.

$$ave(< var|Expression >)@ < Location >$$

Ec.42

Esta operación devuelve un promedio aritmético basado en la densidad nodal de la región plana donde se aplica (Figura 28).

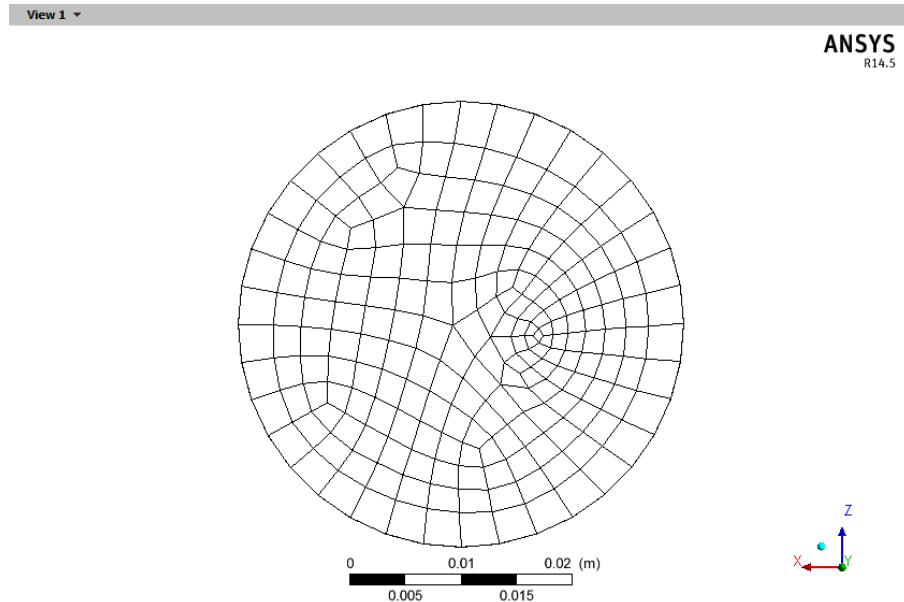


Figura 28: Mallado en una zona de lectura

Se realizó lectura de las variables Presión, Temperatura del Gas, Temperatura del Catalizador, y composición (Wilde & Froment, 2011). De cada región de lectura se obtuvo un valor único de la propiedad y se graficó con respecto a la distancia desde la entrada del tubo catalítico, proporcionando de esta manera un gráfico unidimensional (Nikodemus, 2013). El mismo procedimiento se aplicó para todas las geometrías.

Una vez construidos los perfiles, se procedió a comparar con los arrojados, para la misma variable, por el modelo unidimensional (Molina, Rosales, Rivero, & Mata, 2011), para las geometrías 0H, 1H, 4H. En este punto de comparación se calculó el grado de desviación o error de los resultados del Ansys-CFX con respecto a los del modelo unidimensional, bajo la suposición de que estos últimos son los aceptados como los más cercanos a los resultados experimentales. La desviación o error, se calculó en base a la

fórmula del error absoluto medio (MAE), el cual devuelve una medida global del grado de desviación de toda la población de medidas, para cada variable, con respecto a los valores reales (Dixon & Stitt, 2006).

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |f_i - y_i| = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |e_i| \quad \text{Ec.43}$$

Por último se realizó una comparación entre las conversiones arrojadas por el catalizador estructurado en comparación a lo obtenido con los catalizadores en forma de pellets. El paso anterior nos permitió tener una idea del margen de error que puede estar presente, en caso de encontrar evidencia de mejoras al pasar de la geometría tradicional a la estructurada (Wilde & Froment, 2011).

CAPÍTULO IV

RESULTADOS Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS

En esta sección, se presentan los resultados que se obtuvieron de la investigación y sus respectivos análisis, siguiendo la metodología planteada.

IV.1 DOMINIO COMPUTACIONAL

IV.1.1 Análisis de simetrías

Una vez implementado el análisis de simetrías expuesto en la metodología, se llegó a dos planos especulares principales en el reformador (Figura 29).

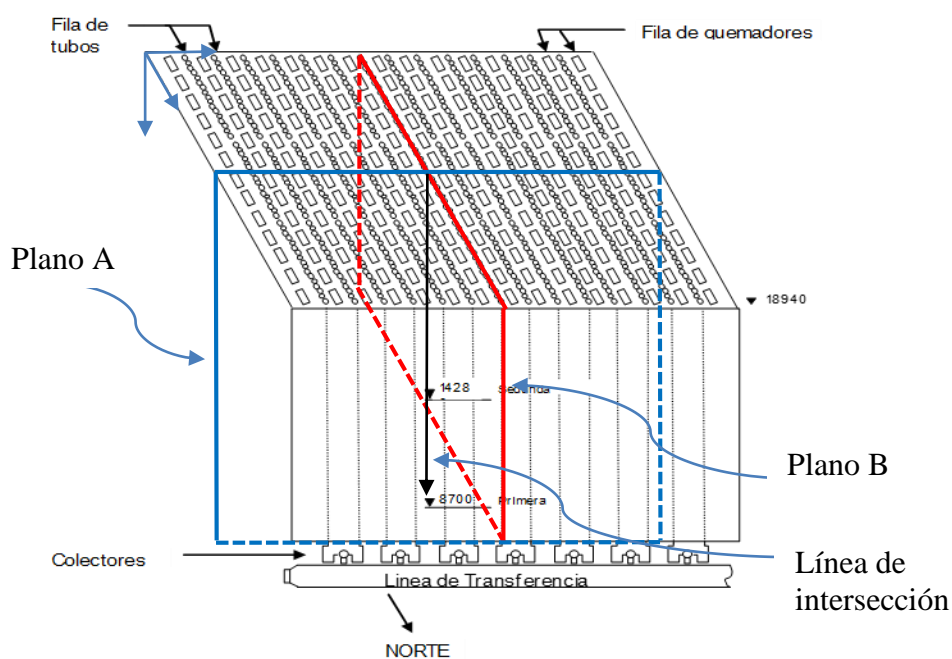


Figura 29: Planos de simetría en reformador

Ambos planos se intersectaron en la ubicación mostrada en la figura 29, dando origen a una línea de intersección que pasó por el centro de uno de los tubos catalíticos, que son las regiones de interés para el presente trabajo.

El sistema de referencia utilizado, se centró en la esquina superior izquierda de la figura 29, según el esquema de la figura 30.

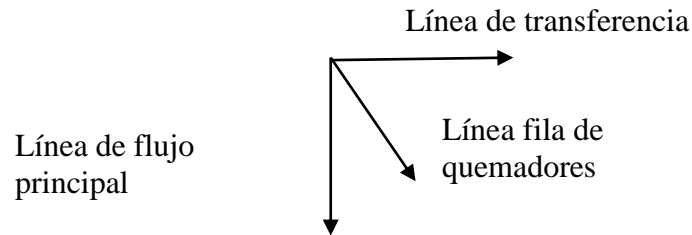


Figura 30: Sistema de referencia para el reformador

En virtud a lo anterior los planos de simetría quedaron definidos por las siguientes dimensiones (Tabla 6).

Tabla 6: Ubicación planos de simetría

| Plano | Línea de flujo principal [m] | Línea fila de quemadores [m] | Línea de transferencia [m] |
|-------|------------------------------|------------------------------|----------------------------|
| A | 13,89 | 9,47 | 10,06 |
| B | 13,89 | 18,9 | 5,06 |

IV.1.2 Simetrías en tubo catalítico

El tubo catalítico por donde atraviesa la línea de intersección carece de simetrías en su interior, dada la habitual disposición aleatoria de los pellets dentro de un empaque. Asumiendo la hipótesis de un empaque aleatorio para $N=4$ (Dixon & Stitt, 2006), el empaque puede ser descrito por medio de un clúster de partículas de 4 pulgadas de altura, ubicado exactamente en la entrada (Figura 31).

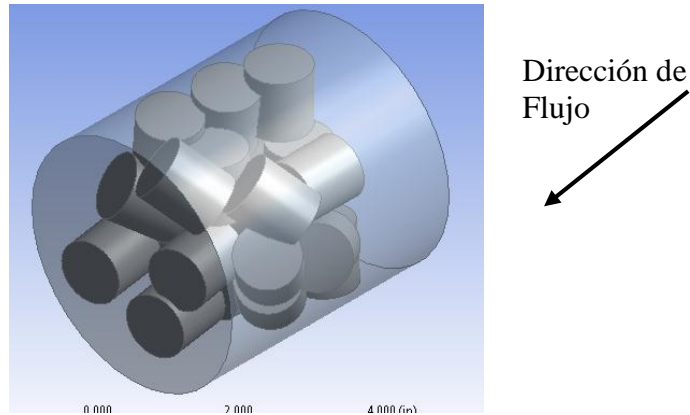


Figura 31: Geometría dominio computacional base

Esta última geometría representa el dominio computacional base (Anexo 1) para la simulación CFD del reformador, en la medida que se requiera una mayor longitud para la generación de más datos el mismo puede ser extendido aplicando operaciones de cuerpos en la dirección del flujo, esta longitud final del segmento de tubería (Figura 32), dependerá del mallado y los recursos de computo disponibles, como se verá más adelante.

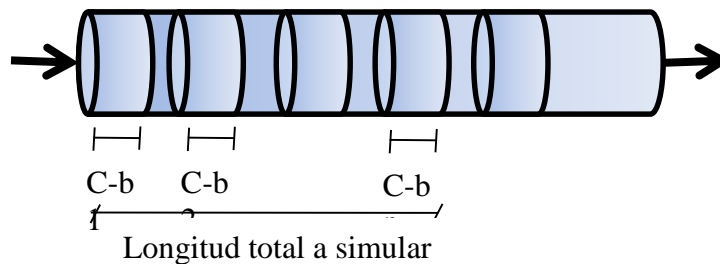


Figura 32: Ilustración de proyecciones del dominio computacional

IV.2 CONSTRUCCIÓN CAD DEL LECHO CATALÍTICO

IV.2.1 Lecho de Pellets:

Partiendo del vector unitario $\hat{j} = (0; 1; 0)$, se generó un primer pellet concéntrico a la tubería o pellet base. Para el desplazamiento de la partícula original a las nuevas posiciones del empaque se implementaron tres operaciones base: Rotación, Traslación y Repetición o copia de un pellet al azar (Anexo 2).

El resultado de las operaciones de transformación sucesivas se puede apreciar en la tabla 7, donde se generó un primer clúster de 12 pellets, o clúster base (Anexo 3). Donde la operación de Repetición(Pellet i), implica tomar como coordenadas base las del vector del Pellet i, en lugar de las del vector \hat{j} .

Tabla 7: Transformaciones de construcción de clúster base

| Numero de pellet | Operación | Eje | Magnitud |
|------------------|----------------------|-----|----------|
| 1 | R [grados] | +X | 45 |
| | T [cm] | +X | 3,5 |
| | R [grados] | +Z | 40 |
| 2 | R [grados] | +X | -45 |
| | T [cm] | +X | 3,5 |
| | T [cm] | +Z | 2,1 |
| | R [grados] | +Z | -20 |
| 3 | Repetición(Pellet1) | | |
| | T [cm] | +Z | 3,2 |
| 4 | R [grados] | +X | +5 |
| | T [cm] | +X | 3,75 |
| | R [grados] | +Z | -9 |
| 5 | Repetición(Pellet4) | | |
| | T [cm] | +Z | 5,4 |
| 6 | R [grados] | +Y | +90 |
| | T [cm] | +Y | 3,75 |
| | R [grados] | +Z | +5 |
| 7 | Repetición(Pellet6) | | |
| | T [cm] | +Z | 4,2 |
| 8 | R [grados] | +X | 90 |
| | T [cm] | +Y | -3,6 |
| | T [cm] | +Z | 2,3 |
| | R [grados] | +Z | -17,5 |
| 9 | R [grados] | +X | +45 |
| | T [cm] | +X | -3,2 |
| | T [cm] | +Z | 2,3 |
| | R [grados] | +Z | -40 |
| 10 | R [grados] | +Y | -45 |
| | T [cm] | +X | 0,63 |
| 11 | Repetición(Pellet10) | | |
| | T [cm] | +Z | 4,3 |
| 12 | R [grados] | +X | 90 |
| | T [cm] | +Z | 2,30 |
| | T [cm] | +Y | -0,91 |
| | T [cm] | +X | 0,5 |

En los anexos se encuentra una versión ampliada de la tabla que incluye un clúster de 24 pellets, que partiendo desde el clúster base, son una imagen especular de este proyectada en dirección del eje z positivo. En la figura 33 se puede apreciar el resultado de las proyecciones del cumulo principal, cerca del origen, cuando se efectuaron las operaciones de imagen especular en la dirección de z positiva, para un total de 9 cúmulos, que en su conjunto llenan gran parte de la tubería.

No se trabajó un mayor número de imágenes especulares dado que consumía una gran cantidad de memoria RAM del computador.

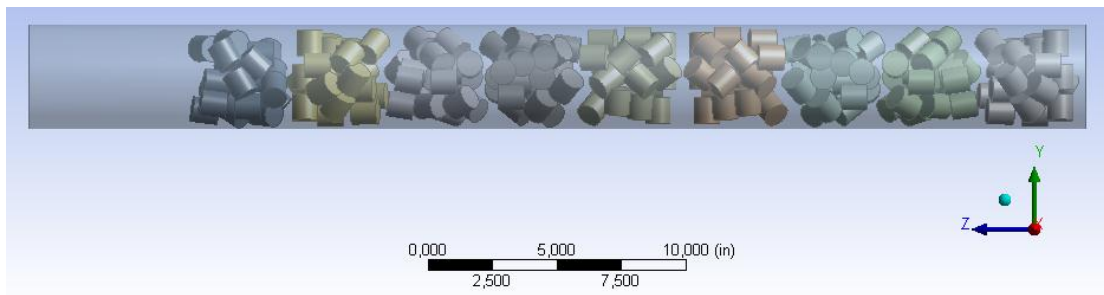


Figura 33: Segmento con empaque preliminar

A fin de mitigar el efecto de los interespaciamientos encontrados entre cúmulo y cúmulo, las imágenes especulares se reajustaron manualmente de manera que los mismos coincidieran o solaparan unos con otros, permitiendo de esta manera un empaque de aspecto más realista (Figura 34).

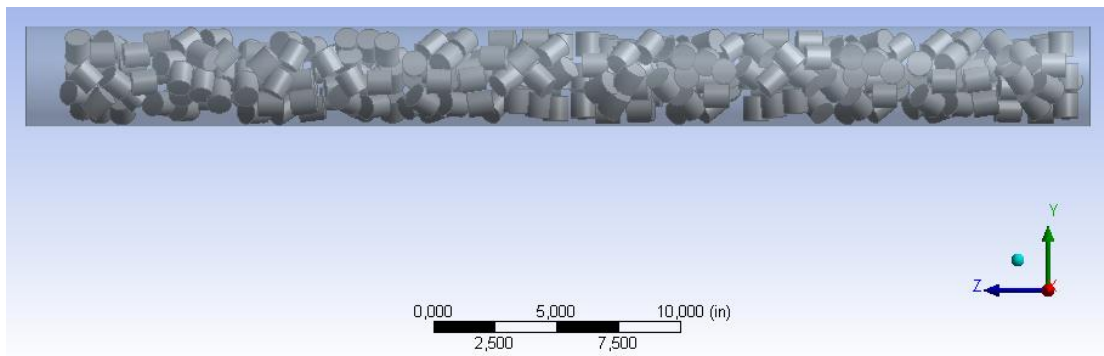


Figura 34: Empaque final

El empaque final resultó en la ausencia de interespaciamentos (Figura 35), los cuales no se encuentran en los empaques reales. Por otro lado, el movimiento de las imágenes especulares de los cúmulos condujo, por razones inherentes al programa, a la fusión o solapamiento leve entre unos pellets y otros, este fenómeno, aunque para el presente trabajo representa una limitación del software DesignModeler, puede encontrarse en condiciones reales de operación donde a causa de los efectos térmicos en el interior de la tubería, los pellets una vez alcanzan altas temperaturas, pueden sufrir deformaciones que conduzcan a aglomerados o a la fusión de pellets muy cercanos entre sí, especialmente si se encuentran en el fondo del lecho; donde por efecto del peso acumulado, se deforman o incluso pueden quebrarse (Hawkings G. , 2006).

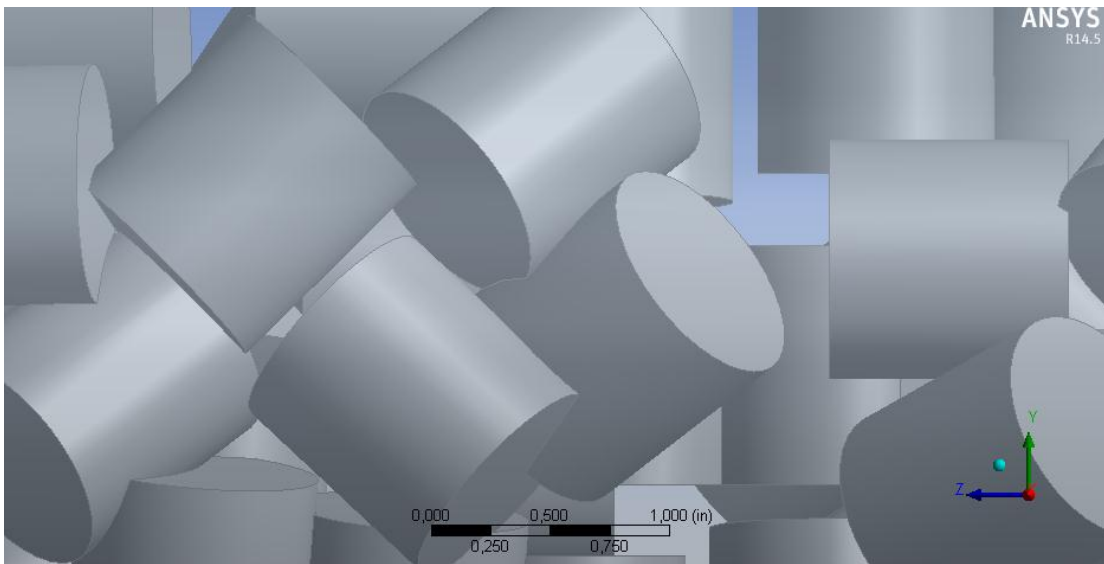


Figura 35: Aglomeración entre pellets

A efectos del proceso reactivo la aglomeración presente en la geometría generada, mejora los fenómenos resistivos de transferencia de calor, brindando mejores puntos de contacto entre los pelles presentes, mientras que mitiga el efecto de una geometría rígida carente de los efectos de deformación que se encuentran en estos tubos catalíticos.

Para el trazado de los respectivos agujeros en los dos empaques restantes, se utilizaron los mismos vectores creados para el empaque tipo 0H, anteriormente presentado, y se volvieron a generar cilindros pero con el diámetro del agujero, y configurados para ser elementos de corte. Quedando como se muestra en la figura 36 (Anexo 2).

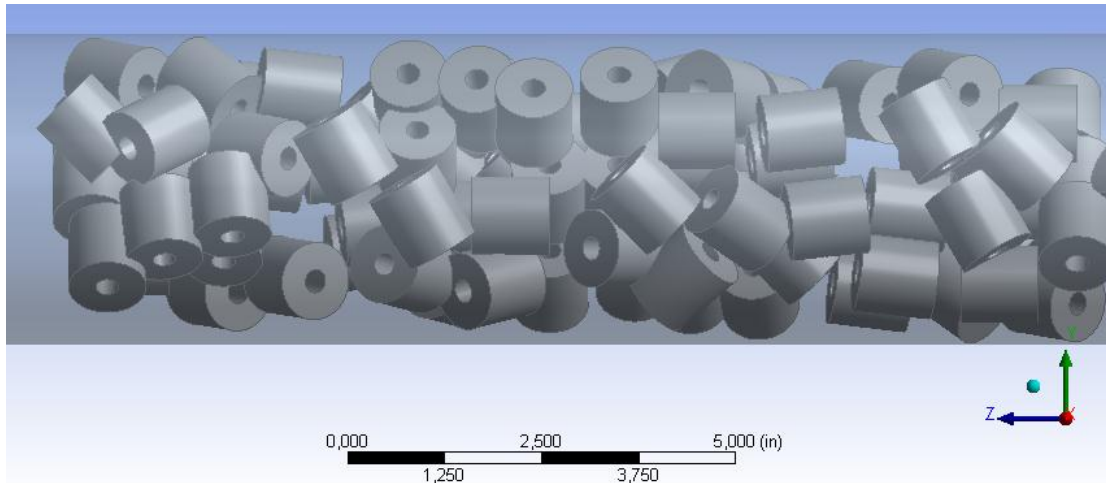


Figura 36: Empaque para pellets 1H

Para el empaque de pellets 4H, las perforaciones se efectuaron de manera semejante, sin embargo el vector principal, fue trasladado en 4 direcciones distintas y paralelas para generar los 4 agujeros presentes en este tipo de catalizadores (Figura 37).

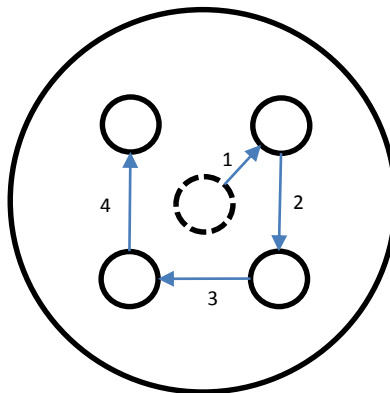


Figura 37: Generación de agujeros para pellet 4H

Estos desplazamientos fueron posibles luego de la construcción de un plano adicional en la base de cada pellet existente, de manera que sobre este se pudiesen trasladar los

cilindros de corte requeridos para el trazado de los agujeros. El empaque 4H resultante puede verse en la figura 38.

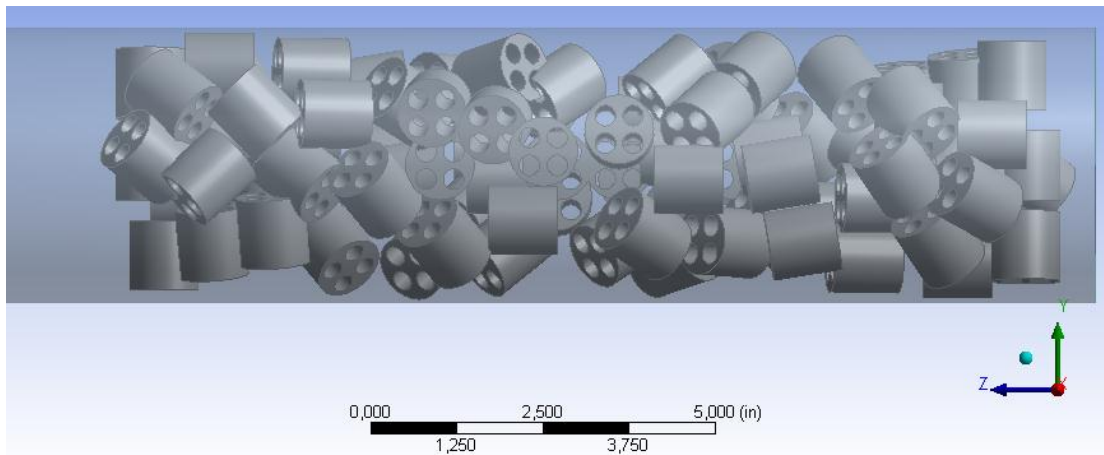


Figura 38. Empaque pellets 4H

Estos dos últimos empaques ameritaron una reducción de la longitud total planteada de 1 metro hasta 0,4 metros y 0,3 metros respectivamente, dado que tanto la geometría como la generación de la malla, como se verá más adelante, exigían de muchos recursos de cómputo, y consecuentes errores de memoria.

IV.2.2 Empaque Estructurado

Los empaques estructurados Catacel, se caracterizan por regularidad geométrica a lo largo del eje de flujo, esta característica facilita su trazado CAD, a la simple implementación de una operación de extrusión a lo largo del eje z positivo a la longitud de empaque deseada. Esta operación se aplica sobre la silueta o corte transversal del catalizador (Figura 39).

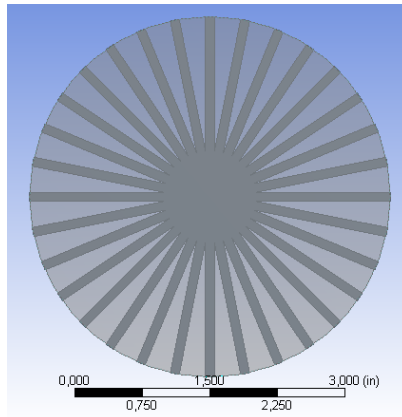


Figura 39: Corte catalizador estructurado

Tras la extrusión se reprodujo, de manera habitual, la geometría buscada, sin mayores inconvenientes. Sin embargo, se incrementó el grosor de las aletas hasta 5 milímetros, a fin de evitar problemas de mallado. Quedando el CAD del empaque estructurado como se puede ver en la figura 40.

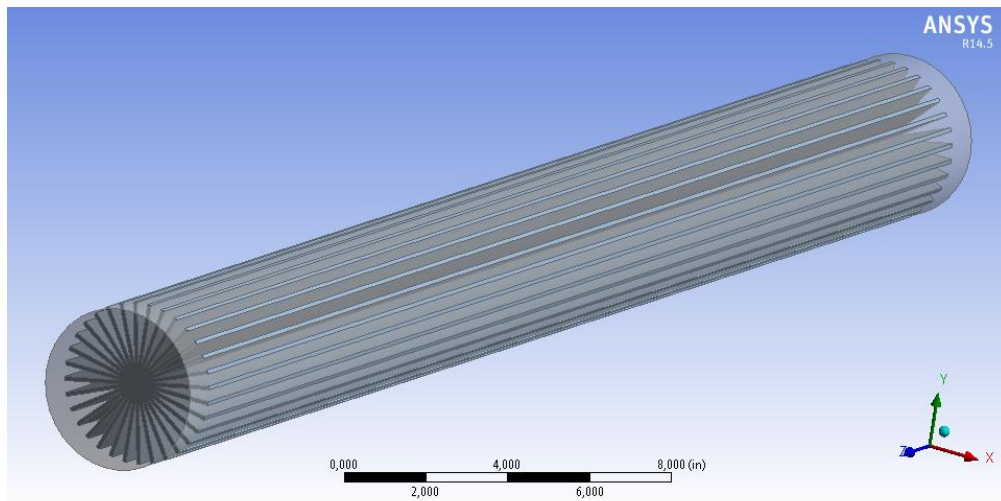


Figura 40: Empaque estructurado

Luego del trazado de las cuatro geometrías propuestas se puede afirmar que el software DesignModeler, cuenta con las prestaciones necesarias para el trazado de lechos, sin embargo, la repetitiva generación de vectores y operaciones de cuerpos que pueden depender del tipo de catalizador a construir, amerita de mejores opciones de construcción más allá de las disponibles al usuario.

Los distintos tipos de empaques a pesar de ser construidos bajo ciertas hipótesis, como por ejemplo, el solapamiento entre pellets, ofrecen las características geométricas típicas de lechos empacados, bien sea para casos reactivos y no reactivos, como lo son aleatoriedad y compactación. Haciendo posible el trazado de empaques con pellets de geometrías distintas para otros tipos de aplicaciones; cabe destacar que los vectores acá generados solo aplican al caso de $N=4$, por ende, cualquier otro diámetro de catalizador requiere de la construcción de un nuevo conjunto aleatorio.

IV.3 GENERACION DE MALLADO

Se logró la generación de cuatro mallados distintos, uno para cada geometría de estudio, en todos los casos del tipo desestructurado y dividido, relativamente fino en el dominio del sólido y grueso en el fluido (Anexo 4). Todas las mallas se lograron gracias a la configuración manual de los parámetros de mallado ofrecidos por el programa AnsysMeshing, como se resume en la tabla 8. Cabe destacar que no se pudo encontrar otras mallas más finas en la región del fluido a casusa del elevado consumo de memoria RAM, del computador disponible, sin embargo la malla generada permitió la discretizacion habitual de las ecuaciones gobernantes (Ansys-CFX, 2010).

Tabla 8: Parámetros de mallado

| Parámetro | Geometría | | | |
|--------------------------------|-----------|---------|---------|--------------|
| | 0H | 1H | 4H | Estructurado |
| Transición [adim] | Lenta | Lenta | Lenta | Lenta |
| Angulo de curvatura [grados] | 17,0 | 17,0 | 18,0 | 12,0 |
| Longitud mínima de Volumen [m] | 2,64e-4 | 1,79e-4 | 1,91e-4 | 2,62e-4 |
| Longitud máxima de Cara[m] | 2,64e-2 | 1,79e-2 | 1,91e-2 | 2,62e-2 |
| Longitud máxima de Volumen[m] | 5,28e-2 | 3,58e-2 | 3,83e-2 | 5,23e-2 |
| Longitud mínima de lado[m] | 2,32e-4 | 2,32e-4 | 1,50e-4 | 2,54e-3 |

Para valores y geometrías distintas a las hexaédrica y tetraédrica, el programa arrojó error, señalando de esta forma el elevado nivel de irregularidad y asimetría de los empaques aleatorios, coincidiendo con lo expuesto en la bibliografía para otros trabajos (Deutschmann, 2010).

La presencia de pellets coincidentes no perfectamente cilíndricos, bien sea con o sin perforaciones, incremento la complejidad de la geometría del dominio sólido, ocasionando que el mallado fuese mucho más denso en este que en el dominio del fluido (Tabla 9).

Tabla 9: Elementos y nodos totales para cada geometría

| Indicador | Geometría | | | |
|----------------------------|-----------|---------|---------|--------------|
| | 0H | 1H | 4H | Estructurado |
| Numero de Nodos [adim] | 225668 | 706868 | 600120 | 23582 |
| Número de Elementos [adim] | 1071380 | 3569612 | 2744358 | 27966 |

En general para los tres primeros casos, se obtuvo un número de elementos alto según (Malasekera, 2002). Siendo en la mayoría de los casos superiores a $1e6$ elementos, crecientes en la medida que incrementó el número de perforaciones en los pellets. Cabe destacar que AnsysMeshing arrojó dos valores para cada malla: el número de elementos y el número de nodos. El primero referido a la cantidad total de volúmenes de control presentes y el segundo la cantidad de vértices asociados a esos volúmenes, los cuales pueden ser compartidos entre varios volúmenes, conduciendo a un número casi siempre menor de nodos en comparación a los elementos.

En el dominio del sólido (empaquetado) la geometría de volumen dominante fue la tetraédrica (figura 41), mientras que para el dominio del fluido lo fue la hexaédrica (Anexos).

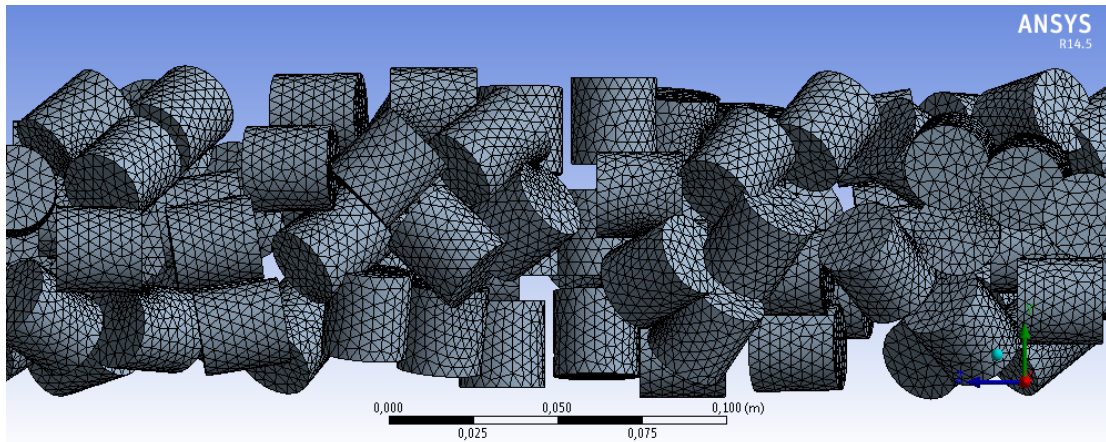


Figura 41: Vista mallado de geometría 0H

El aumento de los valores de longitudes máximas y mínimas de los parámetros de mallado, encaminados a obtener una malla menos densa en el sólido y más fina en el fluido condujeron a errores por parte del programa. Se presume los mismos fueron causados por ser estas mallas (las generadas) las de menor densidad posible, lo que ocasiona que para volúmenes de control más grandes no se pueda resolver la geometría planteada. Conduciendo esto a requerir mallados mucho más densos (volúmenes más pequeños) que se escapan del alcance del presente trabajo.

La malla de la geometría estructurada mostró mayor nivel de simetrías en ambos dominios (Figura 42), pero igualmente incurrió en errores de mallado cuando se intentó incrementar la densidad del mallado. Esto se debió a la presencia de “zonas filosas” entre las aletas del dominio sólido. Las cuales son conocidas por generar problemas de mallado en este programa (AnsysCFX, 2013).

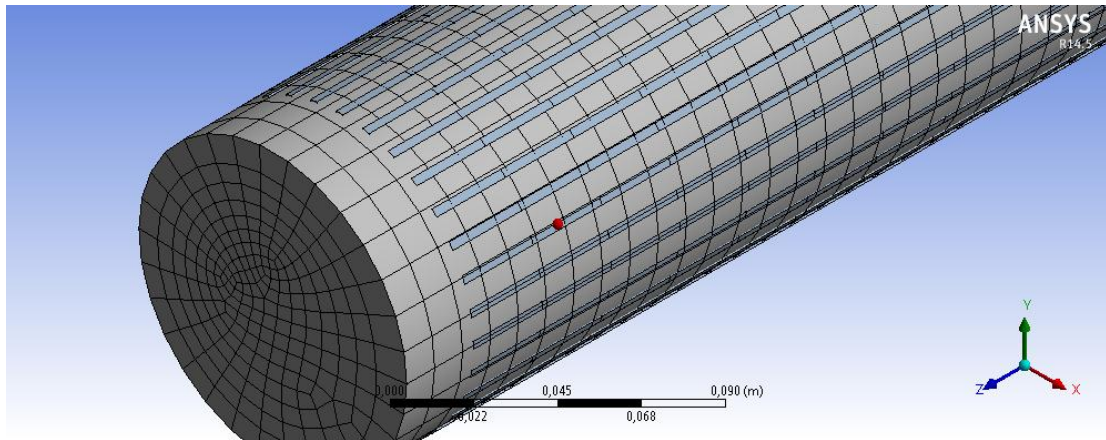


Figura 42: Mallado geometría estructurada

Los dominios del fluido en los cuatro casos, fueron desestructurados, como habría de esperarse; al respecto se debe mencionar que bibliográfica e históricamente no son los más recomendados para la resolución de los perfiles de presión y de velocidad (Renade, 2002). Sin embargo se utilizaron para el presente trabajo, bajo la hipótesis que el actual sistema a simular es débil con respecto a la presión, en otras palabras, requiere grandes cambios en la presión para observarse perturbaciones en las demás variables involucradas (De Sousa & Pisani, 2010). En la tabla 10 se muestran las características principales del dominio fluido para cada caso.

Tabla 10: Nodos y elementos totales dominio del fluido

| Indicador | Geometría | | | |
|----------------------------|-----------|-------|-------|--------------|
| | 0H | 1H | 4H | Estructurado |
| Numero de Nodos [adim] | 56940 | 56940 | 16740 | 23760 |
| Número de Elementos [adim] | 47520 | 47520 | 13520 | 21952 |

Por último, la calidad de cada mallado, fue monitoreada utilizando los indicadores “Oblicuidad” y “Relación de Aspecto”, cuyos valores se resumen en la tabla 11 y significados se exponen en el apéndice.

Tabla 11: Calidad de mallado

| Indicador de Calidad | Geometría | | | |
|-----------------------------|---------------------------|---------|---------|--------------|
| | 0H | 1H | 4H | Estructurado |
| Oblicuidad [adim]: | 0: bueno 1: malo | | | |
| Min | 4,78e-5 | 1,22e-6 | 1,71e-4 | 1,30e-10 |
| Max | 0,99 | 0,99 | 0,99 | 0,90 |
| Promedio | 0,24 | 0,23 | 0,22 | 0,17 |
| Relación de Aspecto [adim]: | 1: ideal ≠ 1: no ideal | | | |
| Min | 1,16 | 1,15 | 1,15 | 1,21 |
| Max | 65,55 | 19,40 | 2691,3 | 35,35 |
| Promedio | 1,88 | 1,86 | 1,86 | 3,58 |
| Calidad General | Media | Media | Media | Media |

Como puede observarse, en virtud a los resultados anteriores se establecen mallados de calidad media para las geometrías construidas, lo que garantiza que la discretización se efectuará de la manera correcta durante la simulación. Cabe destacar que existen muchos otros parámetros de calidad de mallado, pero los aquí utilizados son los más comunes en simulaciones de CFD.

IV.4 INTRODUCCIÓN DE PROPIEDADES Y MODELOS AUXILIARES

A partir de las ecuaciones 19, 20 y 21, se puede establecer que las velocidades de reacción tienen la siguiente forma básica:

$$r_i = \frac{\alpha_i(1 - \beta_i)}{DEN^2} \quad \text{Ec.44}$$

Donde α_i representa el factor cinético de la expresión cinética global, el cual determina cuán rápido la reacción avanza. La termodinámica es expresada por β_i , donde en caso de la reacción estar en equilibrio este factor es igual a la unidad y las velocidades de reacción se hacen cero. El término en el denominador, común para todas las

velocidades de reacción, representa al fenómeno de la adsorción. Las unidades de esta expresión son $\left[\frac{kmol}{kg\ cat * hr} \right]$. Para que pueda ser acoplada al programa Ansys CFX, se estableció un factor de corrección, que hace que la reacción quede en unidades de $\left[\frac{kmol}{m^3 * hr} \right]$. Calculado de la siguiente manera:

$$\left[\frac{kmol}{kg\ cat * hr} \right] * \left[\frac{kg\ cat}{m^3} \right] = \left[\frac{kmol}{m^3 * hr} \right] \quad \text{Ec.45}$$

$$\left[\frac{kmol}{kg\ cat * hr} \right] * [\rho_{cat}] = \left[\frac{kmol}{m^3 * hr} \right] \quad \text{Ec.46}$$

Donde la densidad del catalizador $\rho_{cat} = 2355,2 \left[\frac{kg\ cat}{m^3} \right]$, lo que deja las expresiones de velocidad de reacción en términos de moles por unidad de volumen por unidad de tiempo. Este valor deja la expresión de velocidad de la siguiente forma:

$$r_i = \rho_{cat} * \frac{\alpha_i(1 - \beta_i)}{DEN^2} \quad \text{Ec.47}$$

Por otro lado se tiene el factor de efectividad, o eficiencia de la reacción η_i , el cual es una cantidad adimensional que multiplica a cada expresión de velocidad de este modelo cinético, para tomar en consideración los efectos difusivos intrapartícula. Para un caso unidimensional, este factor puede ser aproximado resolviendo ecuaciones diferenciales (Figura 43) (Molina, Rosales, Rivero, & Mata, 2011), pero en simulaciones CFD resulta una tarea prohibitiva.

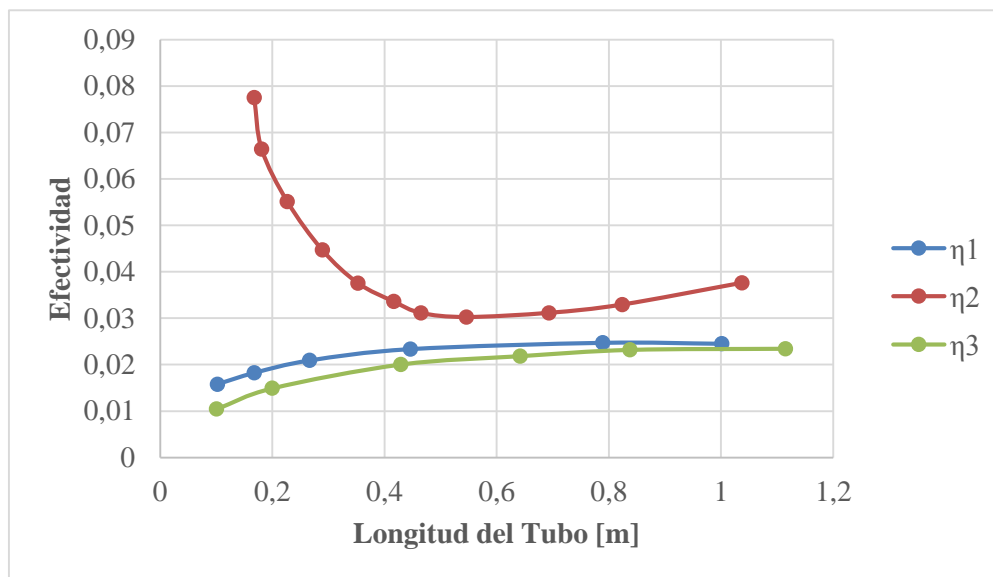


Figura 43: Efectividades de modelo cinético (Molina, et al., 2011)

Por tal motivo para el presente trabajo se utilizó valores promedio (Tabla 12), para todos los modelos de catalizador.

Tabla 12: Efectividades promedio

| Efectividad | Valor Promedio [adim] |
|-------------|-----------------------|
| η_1 | 0,022 |
| η_2 | 0,037 |
| η_3 | 0,020 |

En base a lo anterior se establece como factor de corrección el producto entre la efectividad promedio η_i y la densidad del catalizador ρ_{cat} . Quedando como se muestra en la tabla 13.

Tabla 13: Factores de corrección

| Velocidad | Factor de corrección $\left[\frac{kg\ cat}{m^3} \right]$ |
|-----------|--|
| r_1 | 52,132 |
| r_2 | 88,506 |
| r_3 | 49,285 |

Las difusividades binarias en la masa gaseosa, introducidas en el CFX-Pre fueron valores numéricos calculados a través de la ecuación de Fuller (Schettler & Giddings, 1958). Tomando como fracciones molares las de alimentación y presión y temperatura 21 atm y 900 K respectivamente (Apéndice G).

$$D_{AB} = \frac{0,001 * T^{1,75} * \left[\frac{(M_A - M_B)}{M_A * M_B} \right]^{0,5}}{P * [(\sum v_A)^{1/3} + (\sum v_B)^{1/3}]^2} \quad \text{Ec.48}$$

Quedando las difusividades binarias como se puede apreciar en la tabla 14.

Tabla 14: Difusividades binarias en la masa gaseosa

| | H_2 | CO | CO_2 | H_2O |
|--------|-------|-------|--------|--------|
| CH_4 | 0,192 | 0,060 | 0,050 | 0,075 |
| H_2 | | 0,208 | 0,178 | 0,246 |
| CO | | | 0,045 | 0,072 |
| CO_2 | | | | 0,059 |

Las demás condiciones de borde referidas a la frontera, quedaron según se resume en la tabla 15, donde cada valor se dejó constante a fin de minimizar inestabilidades en tiempo computo, las cuales son promovidas por condiciones de borde tipo variable (Dixon A. , 2009).

Tabla 15: Condiciones de borde constantes

| Condiciones del Reactor | | | |
|-------------------------------|---|-------------------------------|------------------------------|
| Temperatura a la entrada [K] | Flujo de Calor en la Pared [(kW/m ²)] | Presión a la Salida [kPa] | Velocidad a la entrada [m/s] |
| 900 | 113,3 | 2195 | 3,2 |
| Propiedades del Fluido | | | |
| Capacidad calorífica [J/Kg*K] | Conductividad térmica [W/m*K] | Viscosidad [Pa*s] | |
| 2395,38 | 0,087 | 3,0e5 | |
| Propiedades del Solido | | | |
| Densidad [Kg/m ³] | Capacidad calorífica [J/Kg*K] | Conductividad térmica [W/m*K] | |
| 1947 | 1000 | 1 | |

El flujo de calor se tuvo que conservar como un valor fijo a lo largo de toda la pared, dado que el programa no aceptó una expresión variable, conduciendo esto a error. A fin completar la consistencia física del programa, requerimiento para la corrida de las simulaciones, se seleccionó un modelo de turbulencia del tipo RANS, llamado $\kappa - \varepsilon$, cuya teoría se resume en el apéndice. Este es una opción obligatoria a fin de resolver las turbulencias inherentes a la presencia del empaque hay a las condiciones de entrada como tal donde $Re = 12.304$. En un régimen evidentemente turbulento. En los anexos se puede consultar el script CEL (figura 44) de la simulación planteada (Anexo 5 y 6).

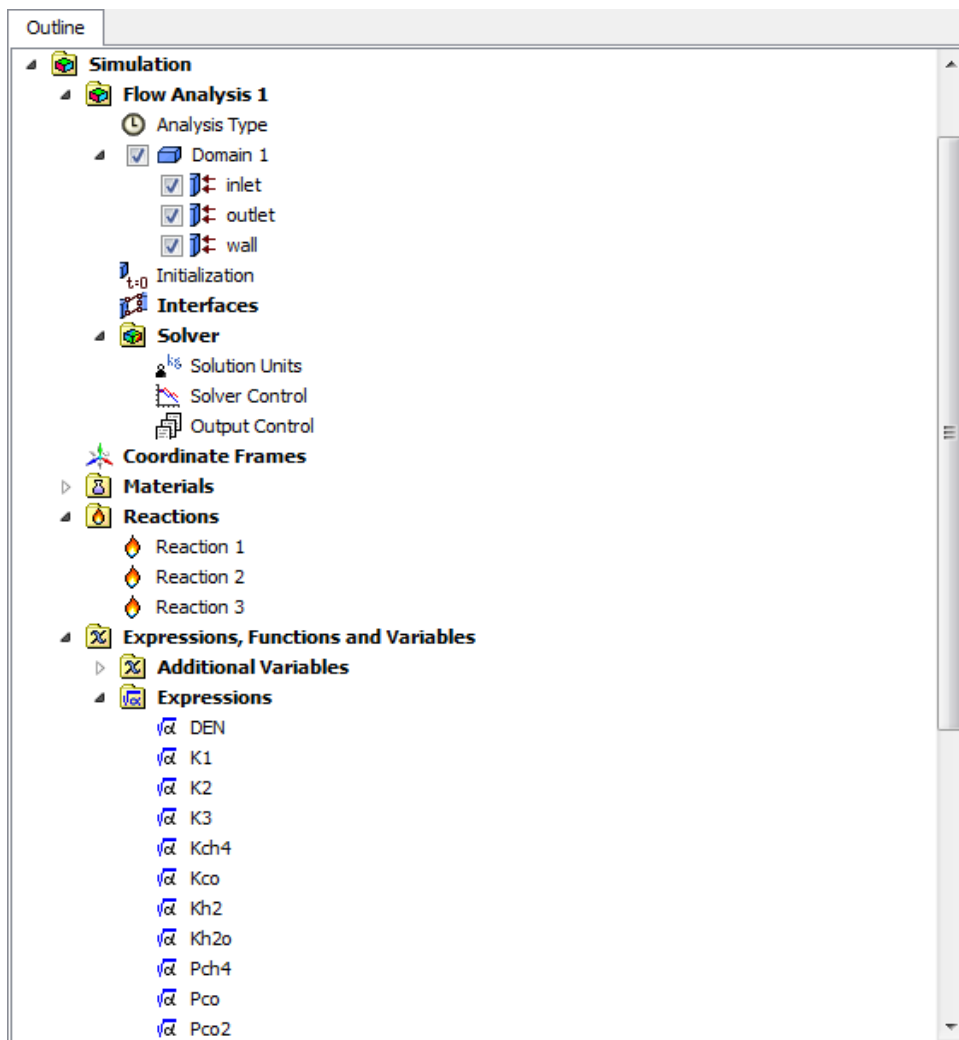


Figura 44: Captura del CEL de CFX

IV.5 SIMULACIÓN

Luego de establecer las condiciones de borde se procedió con la simulación de cada una de las geometrías de estudio encontrándose convergencia en todos los casos.

IV.5.1 Ecuaciones de Momentum y Masa

Para las geometrías 0H y 1H se encontró inestabilidad para momentum y masa, en la forma de oscilaciones tal como se parecían en la figura 45.

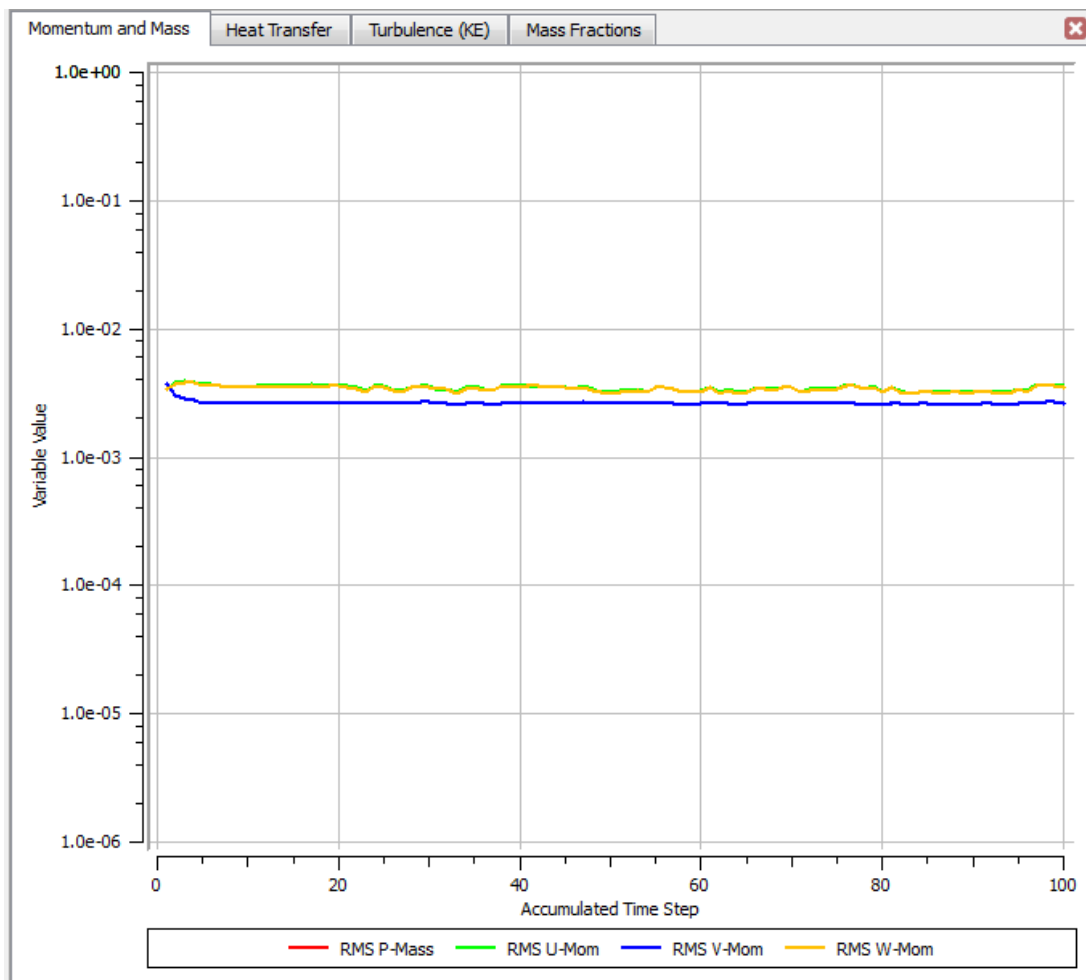


Figura 45: Residual de masa y momentum 0H

Para ambas geometrías se alcanzó el mismo comportamiento reportado en trabajos anteriores (Dixon A. , 2009) debidos principalmente a la presencia de un mallado muy grueso en comparación a la geometría del empaque denso presente. A pesar de tenerse

100 iteraciones para la simulación, las oscilaciones no mostraron cambio significativo fuera de residuales máximos ubicados entre $1e-3$ y $1e-2$, para la ecuación de momentum. Por características propias del monitor de residuales seleccionado la curva de la ecuación del balance de masa se encontró fuera de rango visible, asumiéndose que esta si logró convergencia a valores de residuales por debajo de los graficados (Anexo 7). Garantizándose de esta manera la conservación de la masa global en todo el dominio simulado.

Visiblemente se reconoce al balance de momentum en dirección ($u; w$), como los de mayor nivel de inestabilidad, como consecuencia del complejo perfil de velocidades radiales formadas en el interior del empaque; mientras que en la dirección (v) la convergencia fue mejor por tratarse de la dirección dominante del flujo, dentro de la tubería. En el caso de la geometría 4H, se obtuvo mayor nivel de complejidad en la convergencia de estas cantidades fundamentales (Figura 46).

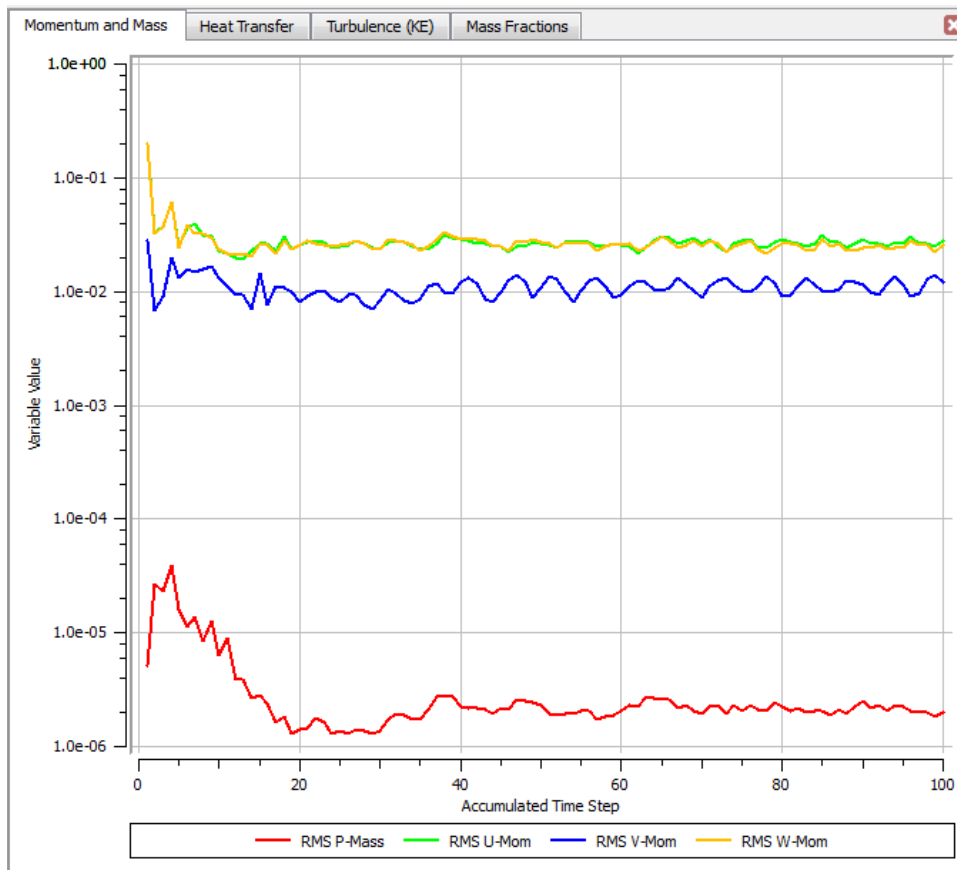


Figura 46: Residuales de momentum y masa 4H

La ecuación de masa obtuvo una rápida convergencia en menos de 20 iteraciones, con un residual de $1e-6$ aproximadamente, comportamiento que es el esperado para programas CFD completamente acoplados como el Ansys-CFX. Caso contrario la ecuación de momentum presentó oscilaciones más marcadas para esta geometría, y con residuales desde $1e-2$ hasta $1e-1$, que aunque continúan siendo bajos, la tendencia de las curvas desvirtúa la posibilidad de convergencia. Se sugiere estas oscilaciones son más pronunciadas que en los casos anteriores debida a las diferencias entre las dimensiones de los elementos de mallado en fase gaseosa comparados con los diámetros de las perforaciones del catalizador 4H, lo que dificulta una buena aproximación de las líneas de flujo en el interior de estos agujeros, causando inestabilidad en el balance de momentum en las dirección radiales, y más aún en la dirección global de flujo (v). En promedio puede sugerirse un residual de $1e-2$ como el valor para esta dirección pero nada puede concluirse al respecto sin tener un mayor número de iteraciones; en virtud de precedentes como los trabajos de Dixon, solo una malla ultra densa y un gran número de iteraciones pueden definir la tendencia general de estos residuales, sin embargo en el caso acoplado, con las 100 iteraciones calculadas, bastan para definir el comportamiento de este balance.

La geometría estructurada quedó como la de comportamiento más inestable, pero con los residuales más bajos (Figura 47).

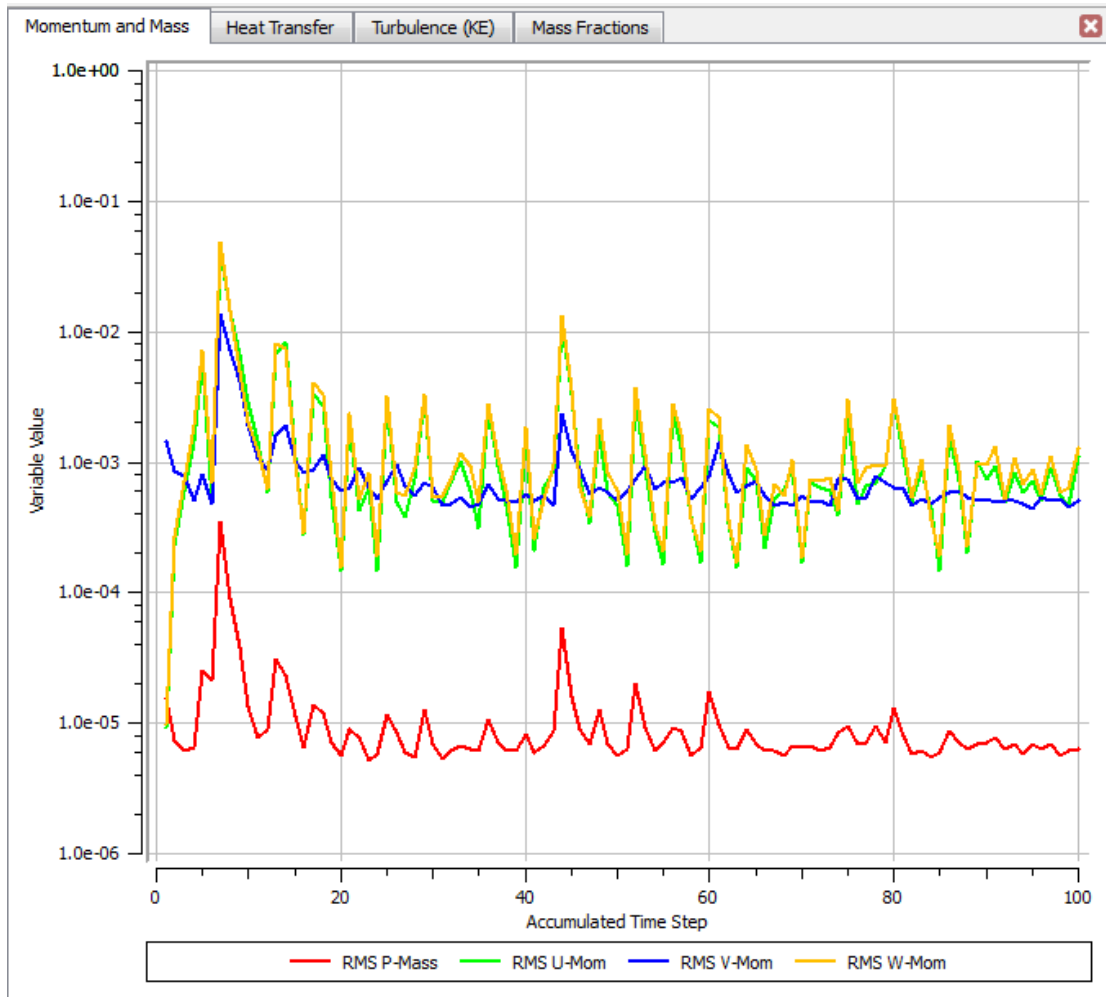


Figura 47: Residual momentum y masa Estructurado

La inestabilidad se debió a unas condiciones de borde a la salida distintas a las esperadas en un reformador real, lo que condujo a inestabilidad inicial en el momentum y masa, pero alcanzado convergencia con residuales bajos de alrededor de $1e-3$ (valor recomendado). Se hace notar la dependencia entre los balances por la presencia de picos en los residuales, casi sincronizados en las iteraciones 10 y 45. Esto es causado por la presencia de zonas filosas en la base de las aletas del catalizador, donde la malla debe ser gruesa por necesidad. Haciendo de esta manera poco preciso el gradiente de presiones y de velocidades en esa región, causando las inestabilidades iniciales mostradas en los residuales.

IV.5.2 Ecuación de Energía

Para el balance de energía, se logró excelente estabilidad y convergencia en los residuales de las geometrías 0H y 1H, con residuales de hasta $1e-3$ y $1e-5$. En ambos casos se obtuvo curvas suaves decrecientes sin ningún tipo de oscilación, dentro del margen de las 100 iteraciones utilizadas. Estas gráficas se pueden apreciar en los Anexos del presente trabajo. En general se considera que la solución del balance de energía para estas geometrías, fue estable y exacto.

Caso contrario con la geometría 4H y la estructurada arrojaron oscilaciones pero convergencia en torno a un residual de $1e-3$, como se muestra en la figura 48.

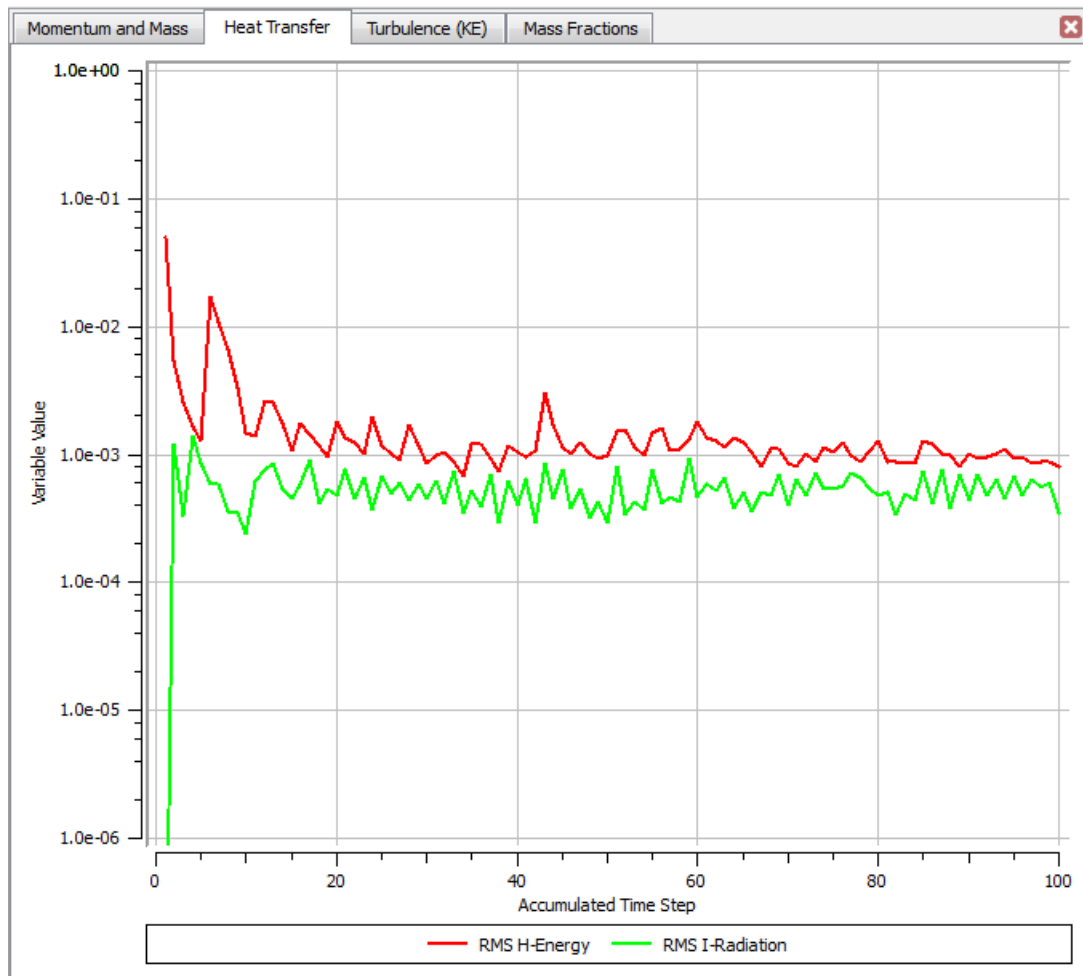


Figura 48: Residuales BE, catalizador estructurado

Para el caso del catalizador 4H, las inestabilidades se debieron nuevamente a las perforaciones de los pellets, encontrándose dificultad para lograr un balance riguroso en la energía transferida al empaque, caso semejante se presentó con el catalizador estructurado, donde el comportamiento se atribuye al uso de superficies delgadas en el trazado de la geometría, las cuales solo admiten gradientes bidimensionales, haciéndose difícil de esta manera la transferencia de calor entre el fluido y las aletas así como en la zona de contacto, en la pared interior de la tubería. A este respecto el uso de superficies delgadas fue una necesidad, con fines de representar en mayor detalle el catalizador estructurado real, aunque se omitieron fenómenos como la expansividad térmica y la deformación a altas temperaturas. En cualquier caso se alcanzaron los residuales esperados ($1e-3$).

IV.5.3 Ecuación de Fracción Másica

En las geometrías del tipo pellet 0H, 1H y 4H, las fracciones másicas de las especies químicas principales arrojaron buena convergencia y estabilidad, con residuales mínimos de $1e-3$ (Figura 49).

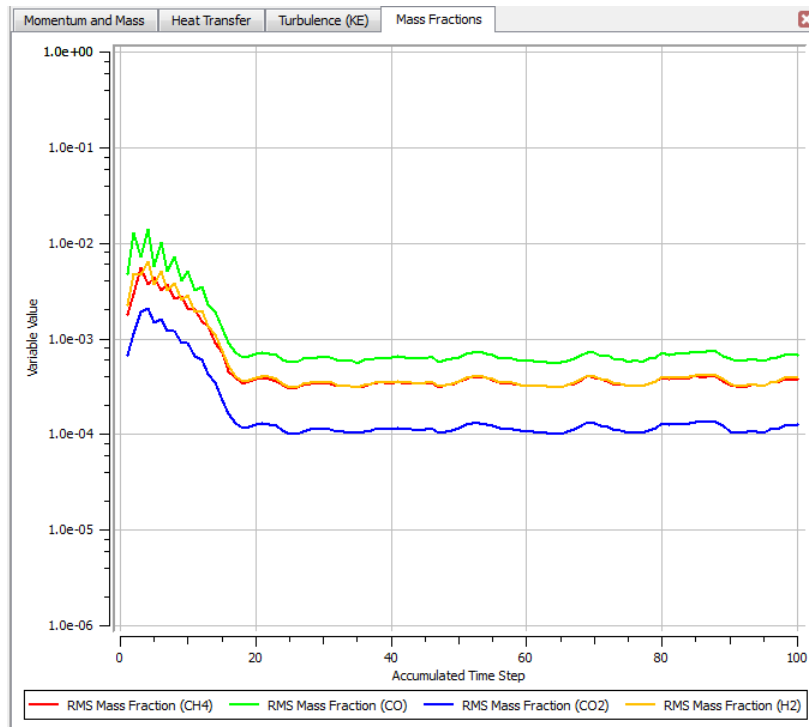


Figura 49: Residuales de FM para caso 1H

Igual que en los residuales anteriores se presentaron pequeñas oscilaciones, sin embargo estas se debieron a la estrecha relación del modelo cinético con los gradientes de presión y temperatura provenientes de los balances de momentum y energía. Sin embargo el efector adicional del balance de masa contribuyó en gran medida a la convergencia de las fracciones másicas. Concluyéndose de este modo la exactitud de los resultados, dentro del marco general de la simulación, sin tomar en consideración los gradientes generados. Esto último por el efecto de los perfiles de velocidad en las ecuaciones de balance de fracción másica. Cabe destacar que solo se trabajó con cuatro especies químicas para este balance, puesto que el agua se utilizó como compuesto clave en el CFX-Pre, y bajo este esquema su fracción másica es calculada vía balance de masa global y no por medio del balance de masa diferencial.

El catalizador en forma de aletas, mostró residuales con alto nivel de inestabilidad con residual mínimo de $1e-2$ aproximadamente (Figura 50).

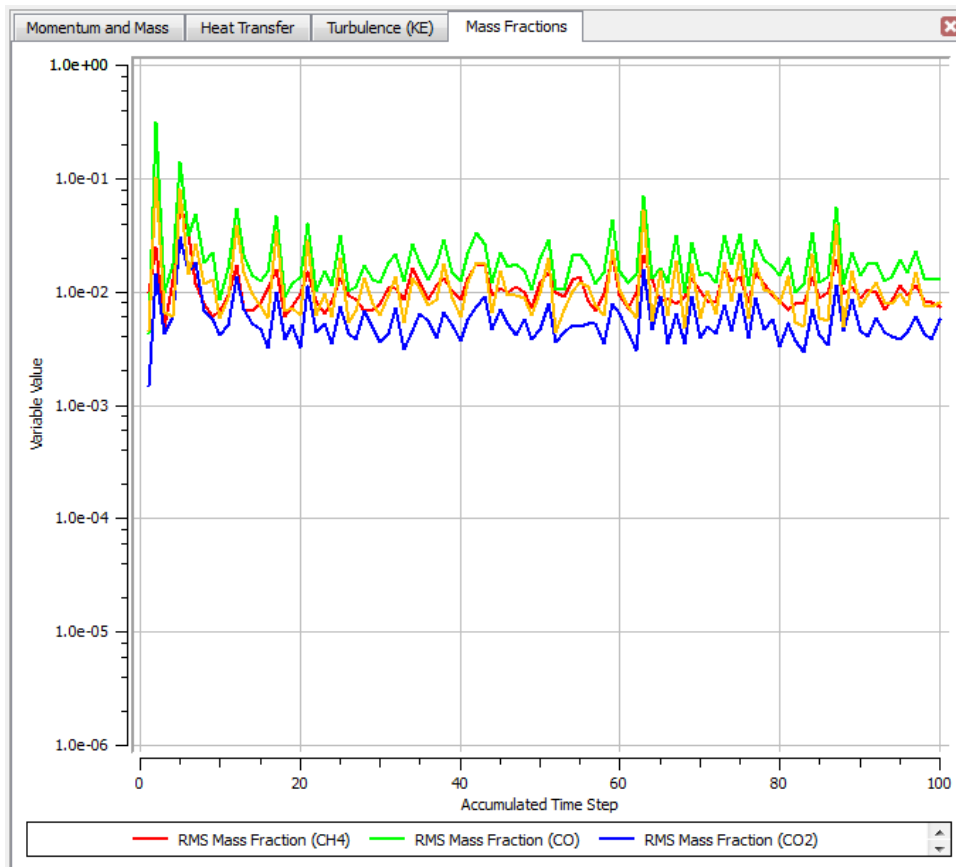


Figura 50: Residuales de FM para caso ES

Para este caso se heredó vía la ecuación de energía las inestabilidades presentes en ese balance, esto debido a la estrecha dependencia del modelo cinético con los perfiles de temperatura, incluso en mayor medida que los de presión, por tratarse de un modelo cuyas funciones son débiles en la presión (Froment & Xu, 1989). Por otro lado, está el efecto de la turbulencia, cuya marcada inestabilidad para este caso contribuyó de manera negativa en el término de conectivo del balance. Sin embargo se toman estos resultados como correctos por el valor neto de los residuales (AnsysCFX, 2013).

De manera semejante se obtuvieron las curvas de residuales para el modelo de turbulencia de cada geometría, cuyo análisis está fuera del alcance del presente trabajo especial de grado, pero constatando la convergencia de sus ecuaciones fundamentales, a través de los residuales alcanzados, del orden de $1e-3$. Estos gráficos pueden apreciarse en los anexos, al final del trabajo.

IV.6 VISUALIZACION Y COMPARACION DE DATOS

Tras obtener las soluciones de las corridas antes mencionadas, se procedió a la extracción y comparación de los datos de interés utilizando la herramienta CFX-Post (Anexo 8 y 9). Dada la gran cantidad de datos arrojada por el CFX-Solver se encontraron inconvenientes a la hora de abrir la solución a causa de agotamiento de la memoria RAM disponible, así bien, se seleccionaron como variables de interés aquellas que caracterizan este proceso desde el punto de vista reactivo, siendo estas: presión absoluta, temperatura de la mezcla gaseosa, temperatura del soporte sólido (catalizador), y conversión de metano (Wilde & Froment, 2011).

IV.6.1 Presión Absoluta

La presión absoluta es una de las condiciones más controladas en este tipo de reactores, puesto se trata de minimizar su caída por efectos del empaque, a fin de conservar el rendimiento energético del proceso, aguas abajo. A partir de los resultados arrojados por las simulaciones CFD, se pudo llegar al siguiente contour de presión para el caso 0H, donde se puede apreciar la ausencia de un gradiente de presiones superior a la unidad en el dominio (Figura 51).

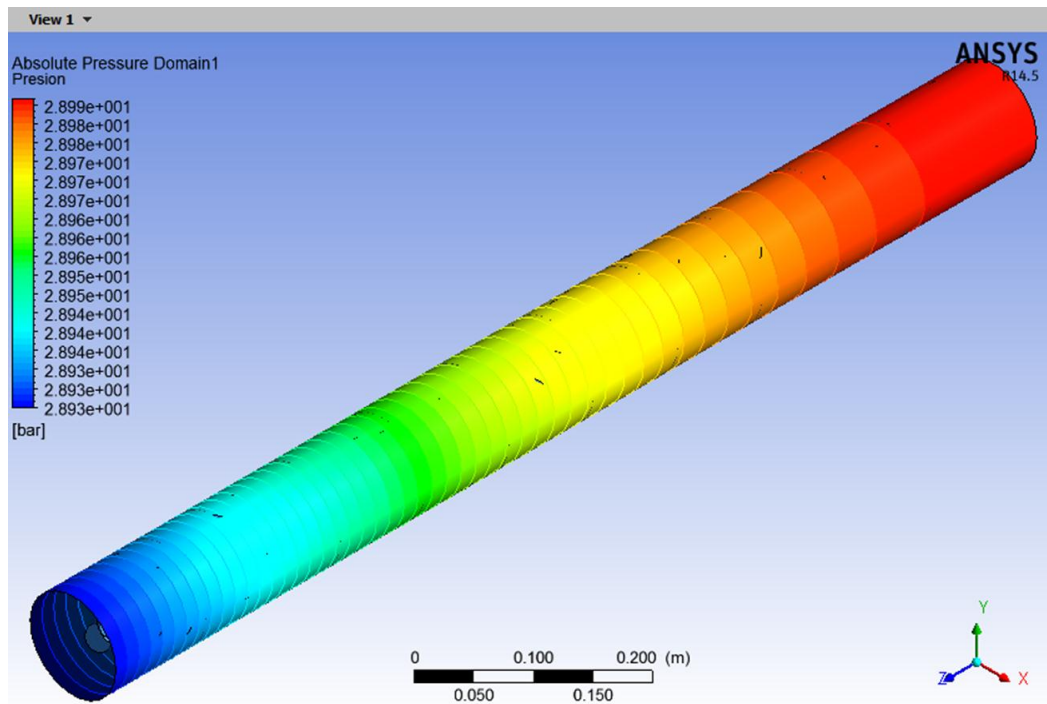


Figura 51: Contour de presión caso 0H

Es de notar que en 1 metro de tubería catalítica la caída de presión es prácticamente ausente, sin embargo el Solver-CFX fue capaz de generar un gradiente para diferencias de valores en el tercer lugar decimal; se presume estos resultados pueden contener ciertos niveles de inestabilidad heredados de la solución oscilante típica de la ecuación de momentum para la simulación de este tipo de sistemas. Sin embargo se destaca coincidencia cualitativa en la caída de presión a medida que el gas recorre la tubería, puesto se obtienen presiones inferiores en la medida que se mueve en dirección positiva del eje Z. Esto último coincide con el efecto que tiene la presencia del empaque 0H.

Caso semejante se encontró con las demás geometrías de empaque, observándose que los valores de la presión absoluta, permanecen casi fijos a lo largo de las longitudes trabajadas. Las únicas diferencias se encuentran en valores en la segunda y tercera posición decimal de los countores. Desde los cuales se puede notar que la presión se vuelve cada vez mayor en la región azul oscuro de los dominios (Figuras 52 y 53).

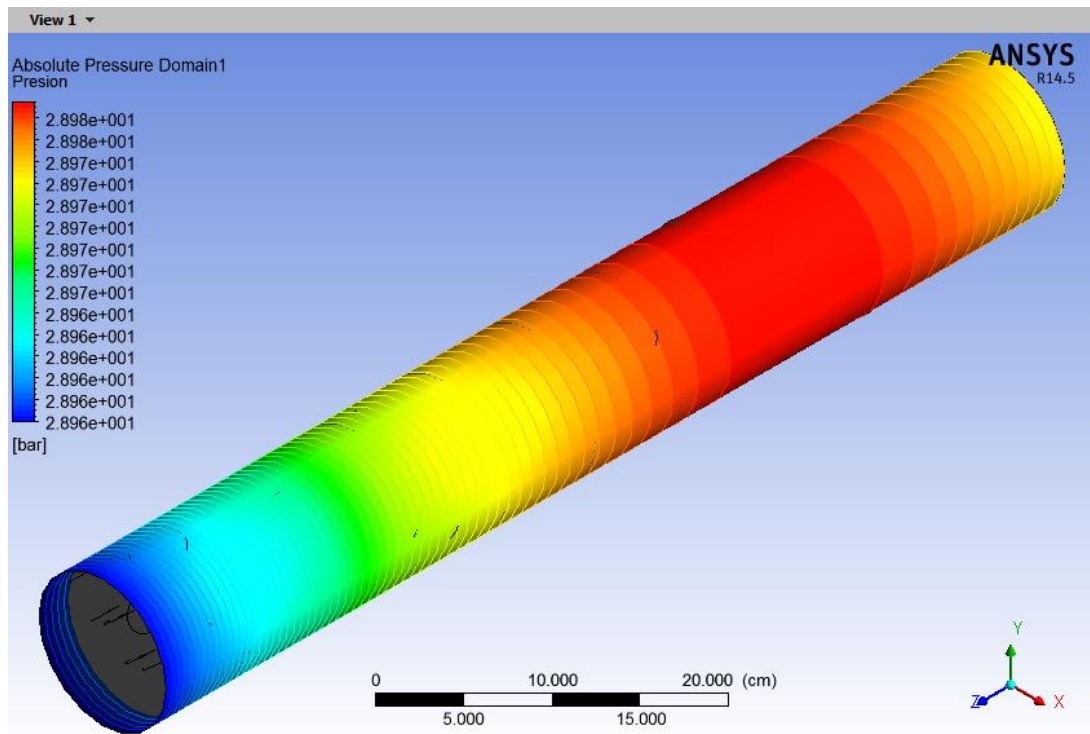


Figura 52: Contorno de presión caso 1H

Aunque las presiones muestren valores semejantes para esta región en los casos 1H y estructurado, se debe recordar que los dominios tienen longitudes distintas siendo la 1H inferior a la estructurada; teniendo esto en consideración, se hace evidente que el catalizador estructurado alcanza el mismo mínimo de presión de a una longitud mayor que la del catalizador 1H, conduciendo esto a una reducción en la caída de presión como habría de esperarse en un caso real.

El efecto positivo del catalizador estructurado se acentúa cuando se compara con la geometría que ofrece la mayor caída de presión en el tubo catalítico, la geometría 0H, que a la misma longitud de tubería ofrece una presión menor que la del catalizador de aletas (Figuras 51 y 52).

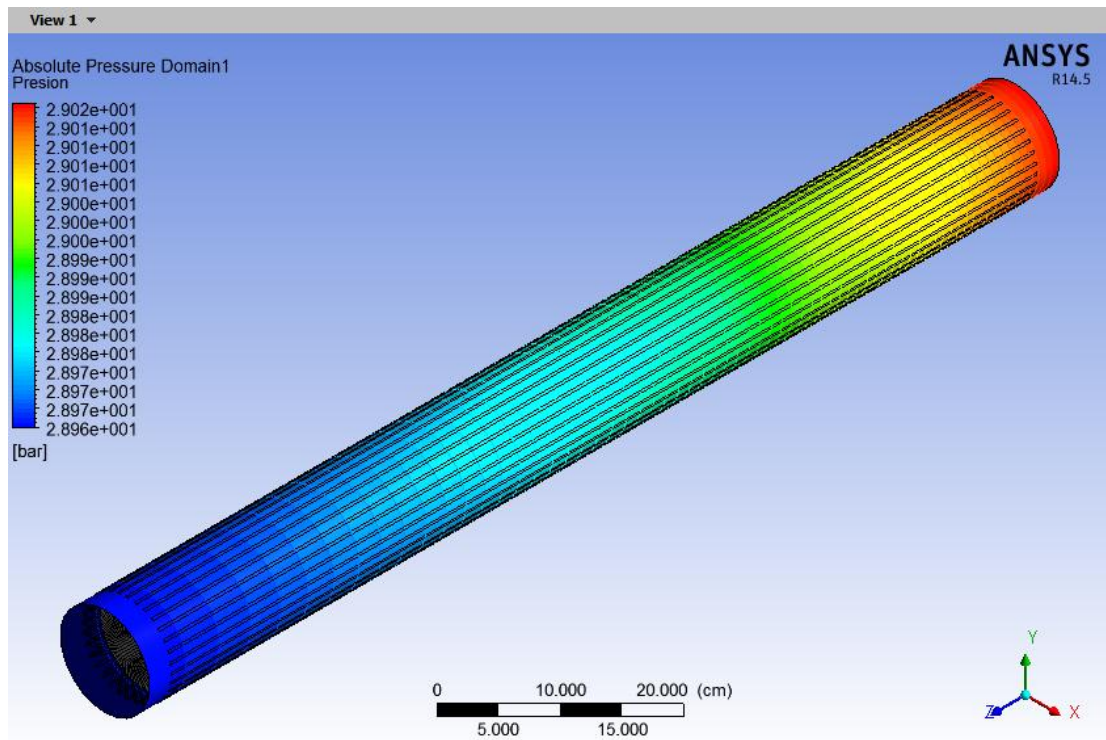


Figura 53: Contour de presión caso Estructurado

De la figura 52 se hace notar en la región de entrada un gradiente positivo en la presión antes de este cambiar de signo (situación esperada). Este caso puede deberse a inestabilidades en la solución alcanzada para el número de iteraciones trabajado o simplemente a causa de fenómenos fluido dinámicos en la región de entrada, de ese dominio cuyo análisis está fuera del alcance del presente trabajo.

Los resultados de la geometría 4H (Figura 54), arrojaron comportamiento distinto a los anteriores, mostrando valores de presión absoluta inclusive más bajos que los casos con un menor número de perforaciones. Hecho que contrasta con lo esperado experimentalmente, donde es bien sabido que a mayor número de agujeros la caída de presión es menor. Esta aparente contradicción puede ser explicada en términos del mallado usado, sin embargo este fenómeno no fue limitativo al momento de mostrar un gradiente de presiones efectivamente negativo a lo largo de la dirección de flujo.

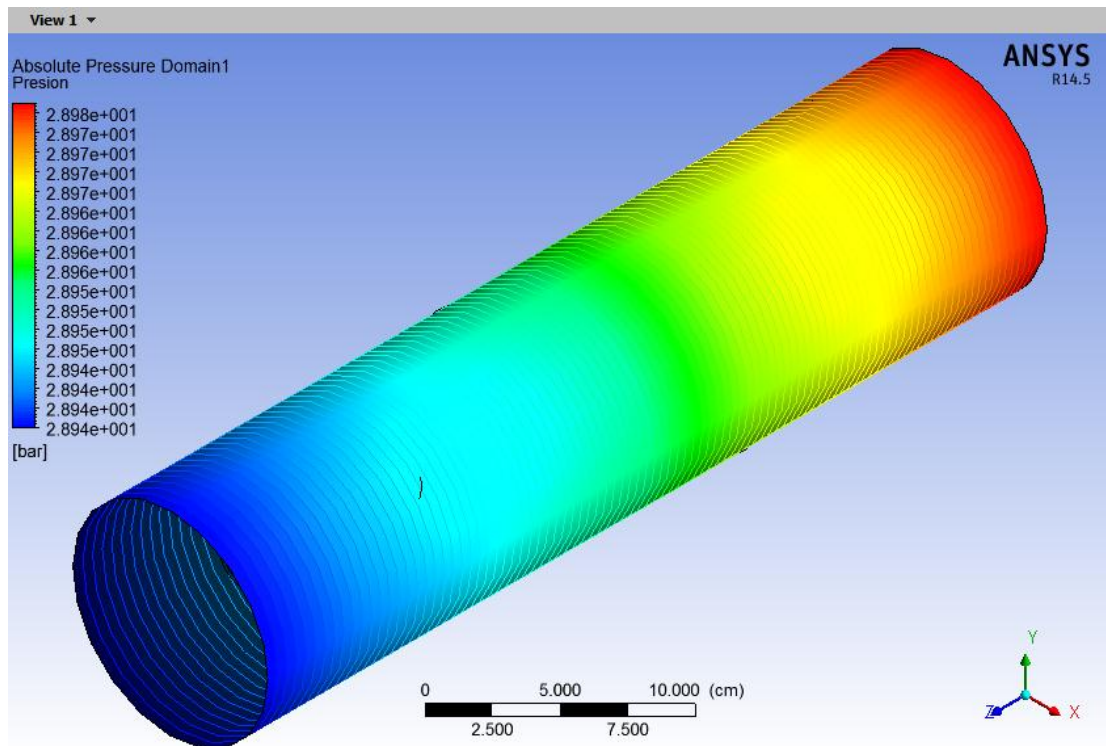


Figura 54: Contour de presión caso 4H

Los datos del CFX-Post y los arrojados por el modelo unidimensional, se comparan en la Figura 55. En todos los casos la tendencia de la presión fue decreciente, coincidiendo con los modelos unidimensionales, a nivel de comportamiento pero no a nivel numérico. Resaltando la geometría 4H, como la de mayor desviación en el grupo de estudio.

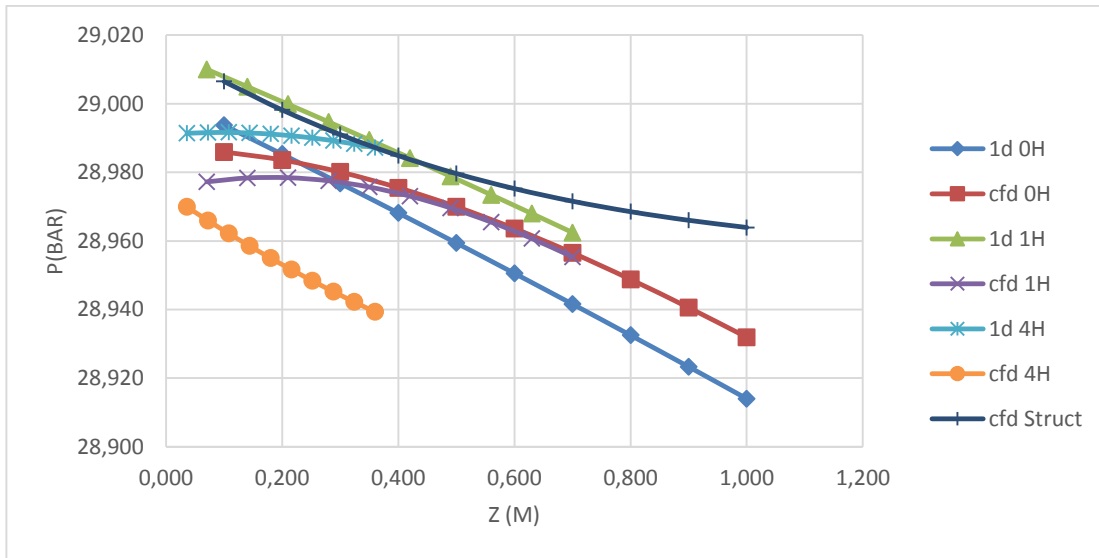


Figura 55: Comparación de presiones 1d-CFD

Numéricamente a nivel de desviación los errores promedio (MAE) de las simulaciones CFD respecto a los modelos unidimensionales, se resumen en la siguiente tabla.

Tabla 16: Resumen de MAE para Presión

| 1d 0H (bar) | cfD 0H (bar) | Fi-yi | 1d 1H (bar) | cfD 1H (bar) | Fi-yi | 1d 4H (bar) | cfD 4H (bar) | Fi-yi |
|-------------|--------------|--------------|-------------|--------------|--------------|-------------|--------------|--------------|
| 28,994 | 28,986 | 0,008 | 29,010 | 28,977 | 0,033 | 28,991 | 28,970 | 0,021 |
| 28,985 | 28,984 | 0,002 | 29,005 | 28,978 | 0,027 | 28,992 | 28,966 | 0,026 |
| 28,977 | 28,980 | 0,003 | 29,000 | 28,978 | 0,021 | 28,992 | 28,962 | 0,029 |
| 28,968 | 28,975 | 0,007 | 28,995 | 28,978 | 0,017 | 28,992 | 28,959 | 0,033 |
| 28,959 | 28,970 | 0,011 | 28,989 | 28,976 | 0,014 | 28,991 | 28,955 | 0,036 |
| 28,951 | 28,964 | 0,013 | 28,984 | 28,973 | 0,011 | 28,991 | 28,952 | 0,039 |
| 28,942 | 28,956 | 0,015 | 28,979 | 28,970 | 0,009 | 28,990 | 28,948 | 0,042 |
| 28,932 | 28,949 | 0,016 | 28,973 | 28,965 | 0,008 | 28,989 | 28,945 | 0,044 |
| 28,923 | 28,941 | 0,017 | 28,968 | 28,961 | 0,007 | 28,988 | 28,942 | 0,046 |
| 28,914 | 28,932 | 0,018 | 28,962 | 28,955 | 0,007 | 28,987 | 28,939 | 0,048 |
| | MAE (bar) | 0,011 | | MAE (bar) | 0,015 | | MAE (bar) | 0,036 |

De la tabla 16 se aprecia que la presión estimada por el CFX tiene buena proximidad con la del modelo unidimensional, siendo el MAE más alto el de la geometría 4H, posiblemente a causa del mallado o a problemas de convergencia y estabilidad de la

solución del balance de momentum. Cabe destacar que a las longitudes trabajadas, la presión ofrece cambios muy pequeños, principalmente a las altas temperaturas de operación de este tipo de reactor, motivo por el cual los perfiles anteriores no son del todo concluyentes, dado que pueden mostrar comportamientos distintos a mayores valores de Z. Lo anterior solo basta para afirmar que la simulación CFD se aproximó bastante a la tendencia y comportamiento de la región de entrada del tubo catalítico.

IV.6.2 Temperatura del Gas Reaccionante

Directa relación con la temperatura del catalizador, está la temperatura del gas reaccionante o bien sea la masa gaseosa que transporta los reactivos a lo largo del tubo catalítico hasta la superficie donde se efectúa la reacción química. Según los precedentes de este trabajo especial de grado, la temperatura de la masa gaseosa en lo progresivo tiende a igualarse con la temperatura del catalizador, pero a longitudes alejadas de la región de entrada de la tubería (De Sousa & Pisani, 2010). Para el caso de las simulaciones realizadas, esta temperatura efectivamente mostró una diferencia marcada respecto a los perfiles de temperatura del catalizador respectivo.

Para los casos de empaque basados en pellets la masa gaseosa mostró un mejor nivel de calentamiento gracias a un mejor efecto de mezclado proporcionado por las geometrías típicas de estos empaques, logrando de esta manera un mejor contacto con la pared interna de la tubería catalítica.

En los counter de las simulaciones, para esta cantidad, las temperaturas se conservaron en el rango de entre 700[K] – 800[K]. Siendo en gradiente longitudinal el único medio para distinguir entre los distintos casos.

El empaque con pellets del tipo 0H (figura 61), mostró el gradiente de menor pendiente, lográndose un bajo nivel de calentamiento de la masa gaseosa, esto a causa de dos razones: la ausencia de agujeros para un mejor mezclado, problemas de convergencia. Al comparar con su contraparte unidimensional se obtuvo un MAE de alrededor de 9,50 [K], siendo este uno de los más altos encontrados (tabla 17). De trabajos precedentes (Dixon & Stitt, 2006), se tiene la referencia que cuando se trabaja con

mallados que no son de gran densidad en el dominio del gas, las líneas de flujo pueden no ser resueltas con el nivel de detalle necesario como para que todas las trayectorias posibles del fluido puedan ser calculadas, reduciendo de esta manera el nivel de contacto entre el gas y el catalizador, reduciendo así la transferencia de calor por convección, en este empaque.

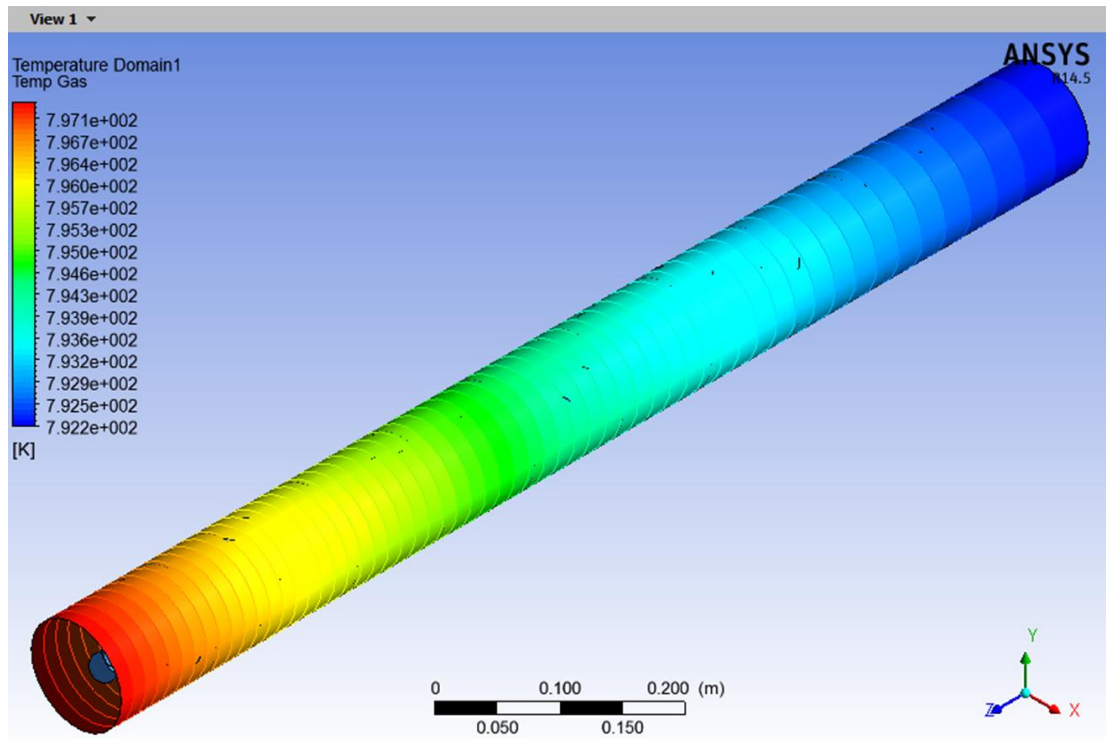


Figura 56: Contour de temperatura en la masa gaseosa 0H

En los resultados asociados al empaque 1H, se encuentra mejor nivel de calentamiento con un rango que va desde los 790[K] hasta los 800[K] (figura 62). Como era de esperarse en la medida que se incrementa el número de agujeros el mezclado mejora y por ende se ofrece un mejor nivel de calentamiento de la masa gaseosa, el cual es una de las características operacionales más deseables de este proceso, puesto que mientras mejor sea el calentamiento del gas menor será la caída de presión a lo largo de la tubería, como consecuencia de la expansión de este.

Numéricamente al comparar con el resultado del modelo tradicional, el MAE fue de 3,225[K], un valor bajo considerando las elevadas magnitudes en las condiciones de operación del reactor. Por otro lado el modelo 4H, ofreció un calentamiento bajo en la longitud de trabajo. Comparativamente al modelo unidimensional, se obtuvo buena similitud con MAE de 0,659[K] (tabla 18).

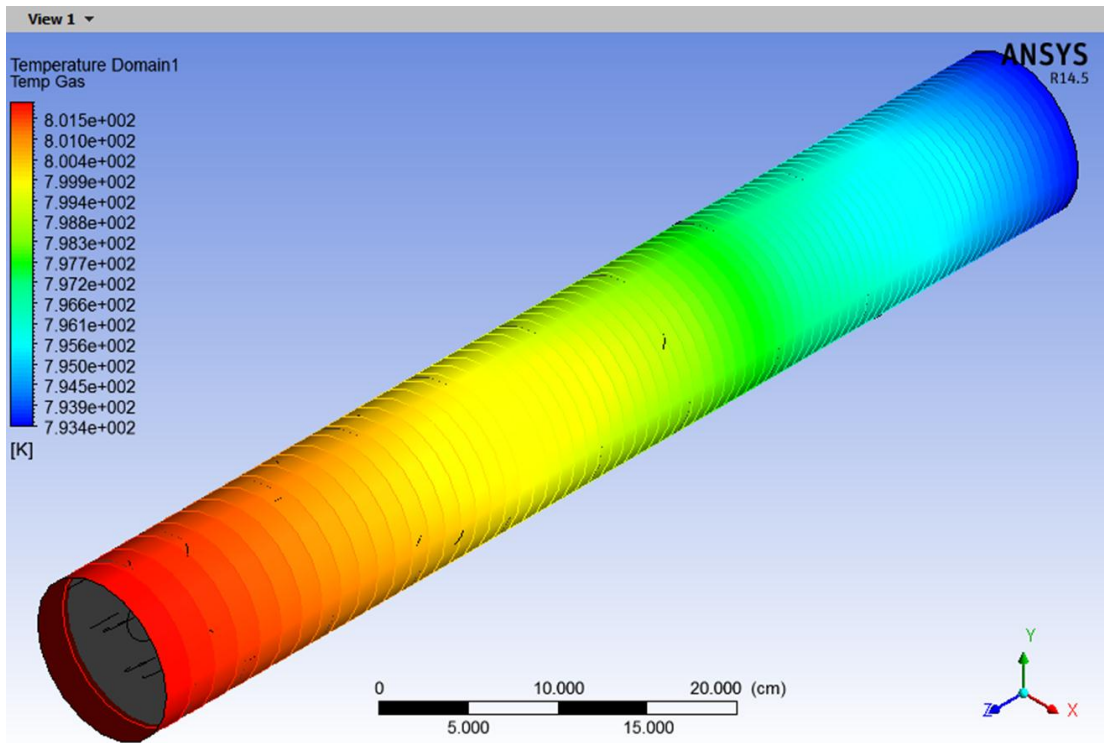


Figura 57: Contour de temperatura en la masa gaseosa 1H

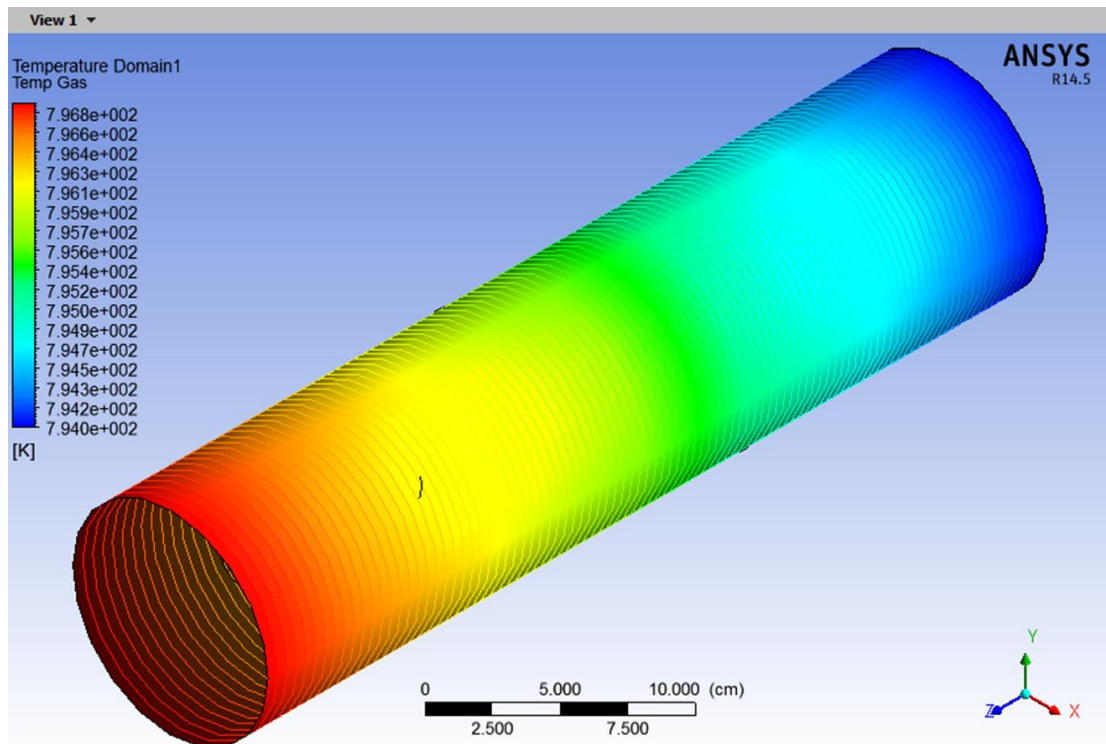


Figura 58: Countor de temperatura en la masa gaseosa 4H

El catalizador estructurado no arrojó una mejora significativa al calentamiento de la masa gaseosa, por contribuir de manera negativa al mezclado de esta y a su contacto con la pared interna de la tubería (figuras 64 y 65).

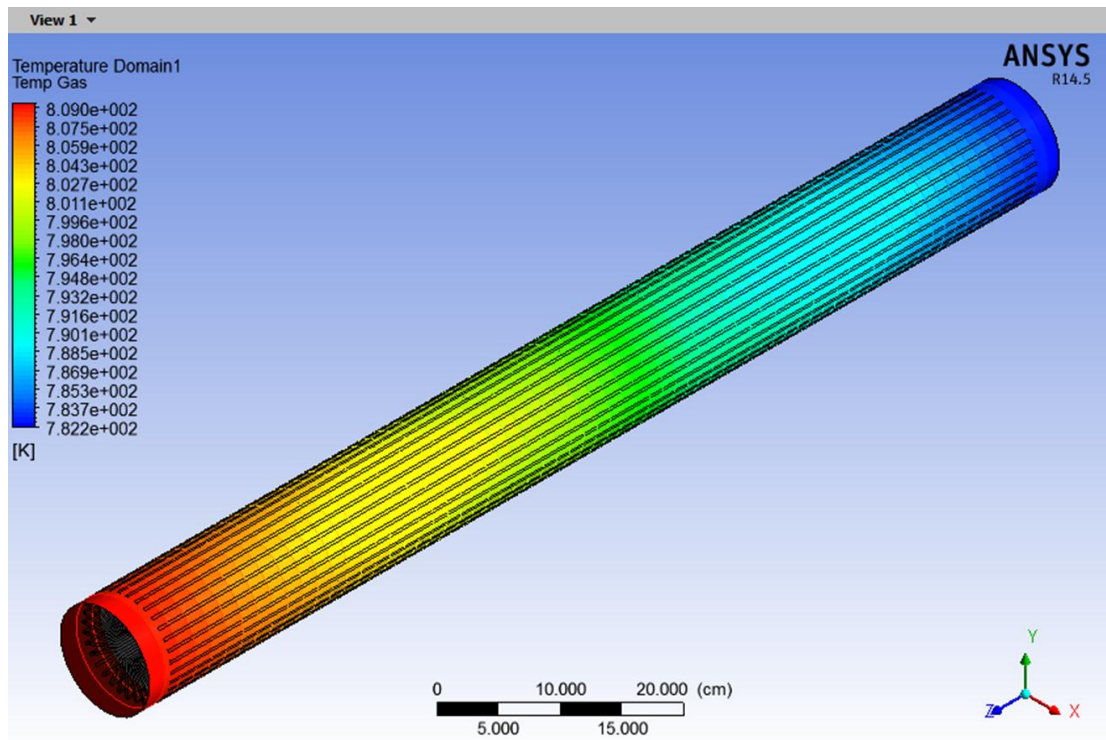


Figura 59: Contorno de temperatura en la masa gaseosa Estructurado

Según se aprecia en el gráfico de la figura 65, la temperatura del gas se ve beneficiada en geometrías estructuradas en lugar de catalizadores tipo pellet 0H, por otra parte las simulaciones CFD, arrojaron mayor nivel de desviación al modelo unidimensional en los casos de cero agujeros, que en el caso de 4H, lo cual puede ser considerado una casualidad deseable, pero acompañada de las típicas inestabilidades del solver y de la baja densidad de la malla. La tendencia general de la temperatura fue al alza en los casos 0H y estructurado, pudiéndose afirmar bajo esta premisa que a mayores longitudes de tubería la masa de gas caliente mejor. Hecho que solo puede ser comprobado por medio de una simulación completa de la tubería (12 metros aproximadamente).

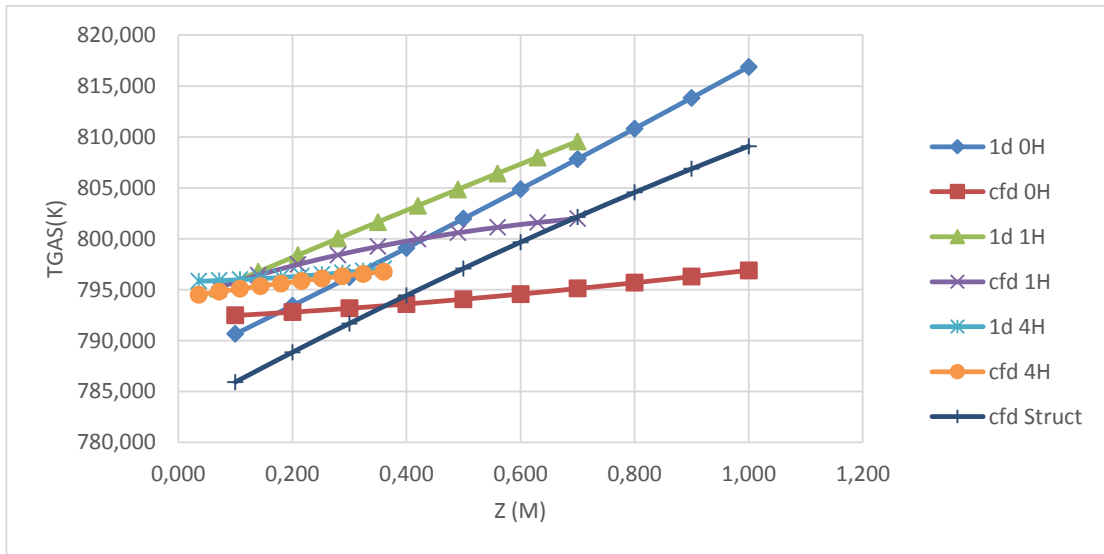


Figura 60: Comparación de perfiles de temperaturas del gas

Tabla 17: Resumen de MAE para temperatura del gas

| 1d 0H (K) | cfd 0H (K) | Fi-yi | 1d 1H (K) | cfd 1H (K) | Fi-yi | 1d 4H (K) | cfd 4H (K) | Fi-yi |
|--------------|---------------|--------------|--------------|---------------|--------------|--------------|---------------|--------------|
| 790,653 | 792,480 | 1,826 | 795,094 | 795,232 | 0,138 | 795,846 | 794,512 | 1,334 |
| 793,431 | 792,805 | 0,626 | 796,758 | 796,416 | 0,342 | 795,912 | 794,803 | 1,109 |
| 796,242 | 793,181 | 3,061 | 798,404 | 797,472 | 0,932 | 795,996 | 795,084 | 0,912 |
| 799,088 | 793,604 | 5,484 | 800,033 | 798,407 | 1,626 | 796,098 | 795,353 | 0,745 |
| 801,968 | 794,070 | 7,897 | 801,647 | 799,232 | 2,416 | 796,218 | 795,613 | 0,606 |
| 804,882 | 794,575 | 10,306 | 803,248 | 799,953 | 3,295 | 796,356 | 795,862 | 0,494 |
| 807,830 | 795,115 | 12,715 | 804,837 | 800,582 | 4,256 | 796,511 | 796,101 | 0,410 |
| 810,812 | 795,685 | 15,127 | 806,416 | 801,125 | 5,291 | 796,683 | 796,331 | 0,352 |
| 813,829 | 796,282 | 17,547 | 807,987 | 801,593 | 6,394 | 796,871 | 796,551 | 0,320 |
| 816,879 | 796,901 | 19,979 | 809,551 | 801,993 | 7,557 | 797,076 | 796,762 | 0,313 |
| | MAE (K) | 9,457 | | MAE (K) | 3,225 | | MAE (K) | 0,659 |

IV.6.3 Conversión de Metano

Punto final, es la conversión molar del compuesto clave, el metano, la cantidad que informa acerca del nivel de eficacia de nuevos diseños de catalizador al proceso de estudio, en el presente trabajo especial de grado.

La lectura del nivel de conversión molar del metano fue efectuada en la misma región utilizada para el estudio de la temperatura de la masa gaseosa, en la zona límite entre el fluido y la pared. Mientras que los datos utilizados para la comparación con el modelo unidimensional fueron tomados utilizando regiones de lectura planares.

Para el catalizador 0H (figura 66), la conversión estuvo comprendida entre 3% - 8 % con un MAE de alrededor de 3% (tabla), respecto al modelo unidimensional, siendo estas dos curvas las más cercanas entre sí, numéricamente, y mostrando lo esperado en estudios empíricos, para este tipo de catalizador, donde gracias a la relativamente buena transferencia de calor por conducción, se obtienen buenas conversiones, con una pendiente creciente en la región de entrada del tubo catalítico, esto considerando que para el modelo cinético utilizado, la temperatura es directamente proporcional a la velocidad de reacción, la cual aumenta los niveles de conversión de la especie clave (Froment & Xu, 1989).

Para el primer metro de tubería reactiva, la conversión se conserva baja, según puede verse en el countor de conversión. Este fenómeno es debido primero a la alta velocidad el gas a la entrada y segundo una baja área superficial para el mezclado y la reacción química. Sin embargo ello, no representó impedimento a la simulación CFD, para efectivamente dar un gradiente positivo de la conversión en la dirección del flujo. En este sentido la simulación se considera cercana a lo esperado en situaciones reales de operación. Dejando para futuros trabajos corroborar que en efecto se conserva esta tendencia a longitudes mayores.

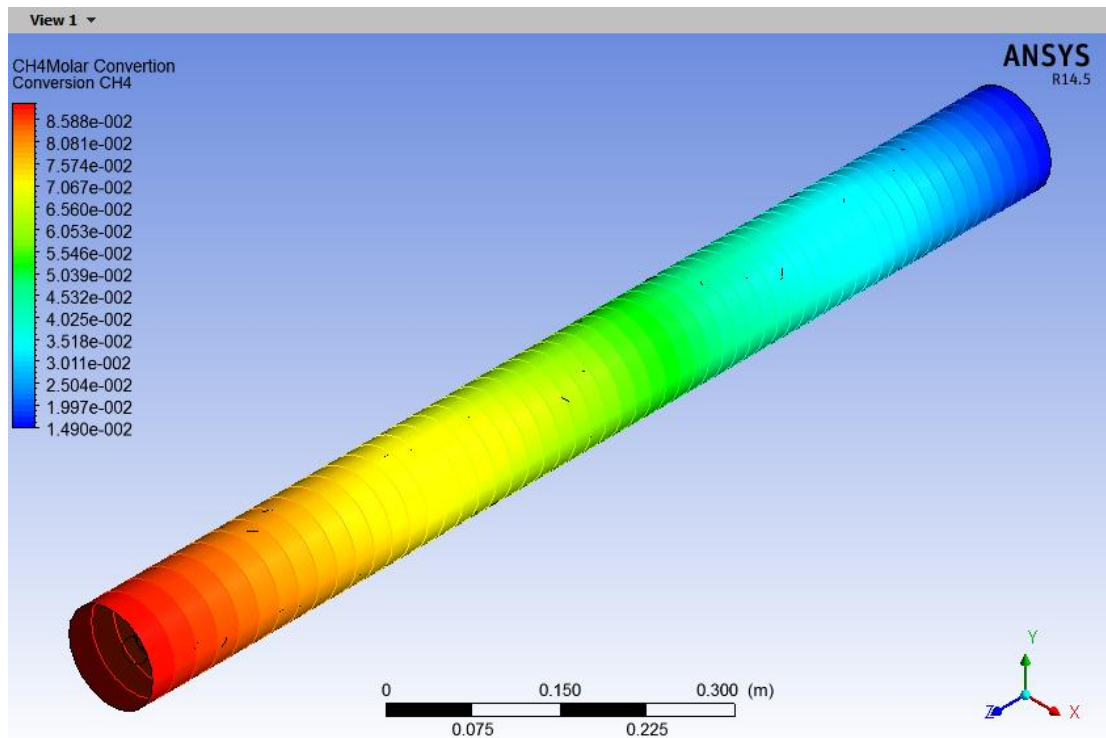


Figura 61: Conversión de metano en 0H

Caso contrario para la geometría 1H, no mostró un nivel de mejora por el incremento del área superficial a expensas de agujeros en los pellets, tal vez a causa de problemas de estabilidad o de densidad de malla como en el caso de la temperatura del gas, no se pudo apreciar la mejoría esperada. Por otro lado en este caso se presentó el mayor MAE para la conversión, siendo de 1,88% respecto al modelo 1d, con este último señalando que la curva de conversión debería estar ligeramente por debajo del primer caso, diferencia que no se mostró al observar la tendencia de las curvas de conversión 0H y 1H, las cuales para las simulaciones CFD mostraron ser casi idénticas en los valores extraídos, mientras que el countor en la pared arrojó mayores conversiones para el segundo pellet.

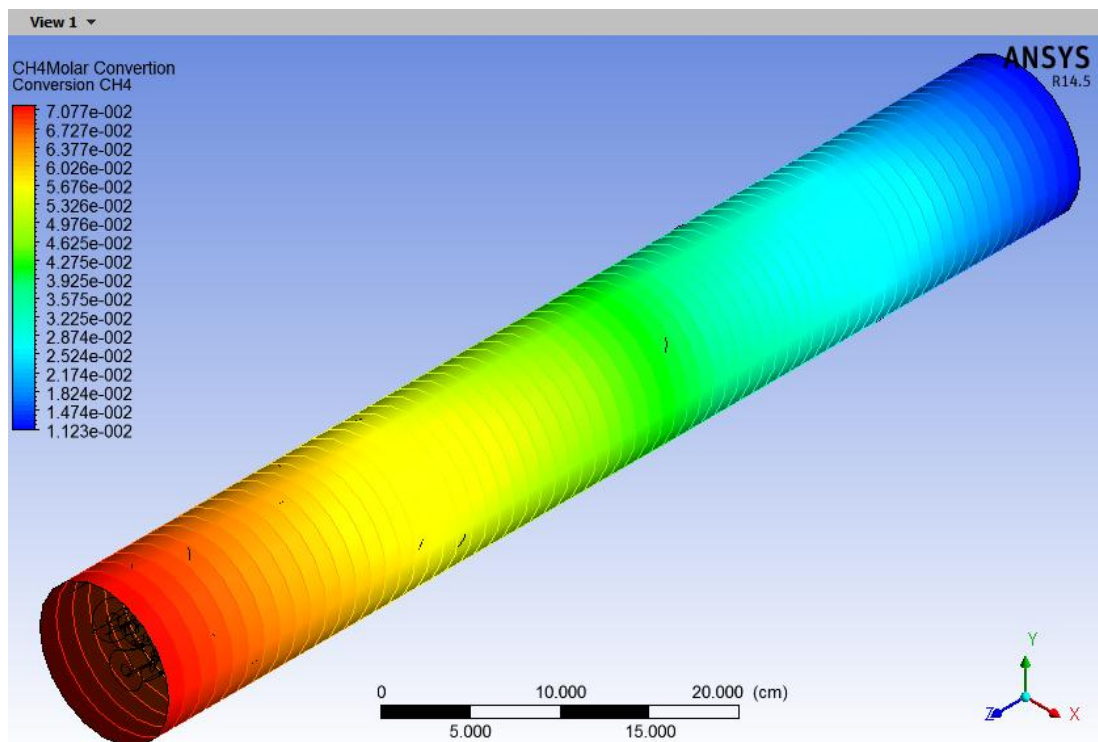


Figura 62: Conversión de metano en 1H

Acto seguido el modelo 4H (figura 68), si arrojó mejora respecto a los anteriores, alcanzándose conversiones de hasta 3% en la pared y de 5%, en la región de lectura. Mostrando de esta forma aumento en la conversión de metano en longitudes inferiores a un metro, con un MAE de 1,26%. Este último el segundo en magnitud para la propiedad, y de un valor relativamente alto, en comparación a los órdenes de magnitud calculados en el dominio. En función en función a ello e igual que en casos anteriores, la tendencia creciente de las curvas informa que la simulación CFD se realizó correctamente, a pesar de las inestabilidades en las ecuaciones gobernantes.

Cabe destacar que el paso de un agujero a cuatro no incorpora mejoras significativas, dado que muestran ser bajas, lo que se corresponde con lo esperado en los casos comerciales como los de la empresa Haldor-Topsoe, quienes a partir de una perforación saltan inmediatamente a 6 o más, para efectivamente incorporar mejoras de mayores dimensiones comparadas con el catalizador 1H.

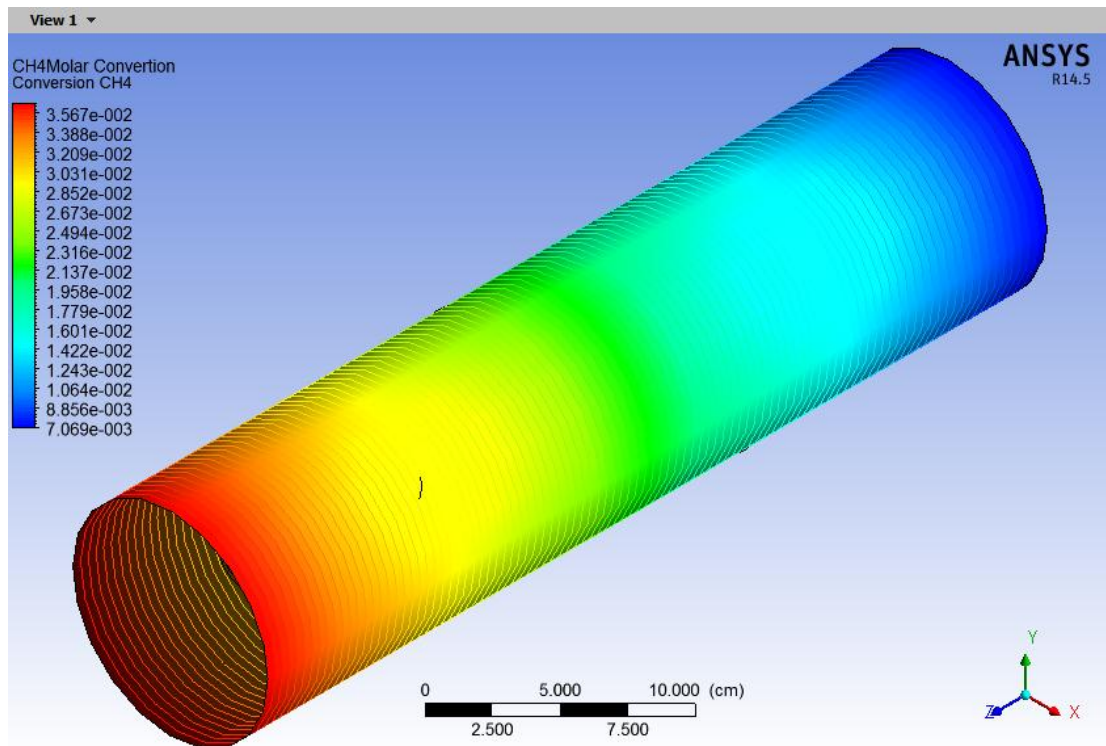


Figura 63: Conversión de metano en 4H

Caso final se tiene el modelo estructurado, cuyo sistema de aletas, destinadas a un incremento en la temperatura del catalizador así como del gas en la vecindad del interior de la tubería, propone conversiones superiores a las de empaques basados en pellets, a partir de longitudes de 0,4 metros (figura 69). Con magnitudes desde un 5% hasta un 13% en 1 metro de longitud. Permitiendo estos valores catalogar al modelo estructurado como el de mejor conversión (figura 70).

El resultado observado corrobora las mejoras incorporadas a este tipo de procesos gracias al cambio en el diseño de los catalizadores utilizados, que a pesar de poseer las mismas propiedades termo físicas que los basados en pellets, mejora de manera sustancial la conversión del metano. Para casos más modernos pueden encontrarse catalizadores como el ZoneFlow, que permiten incluso conversiones más altas en el mismo tramo de tubería.

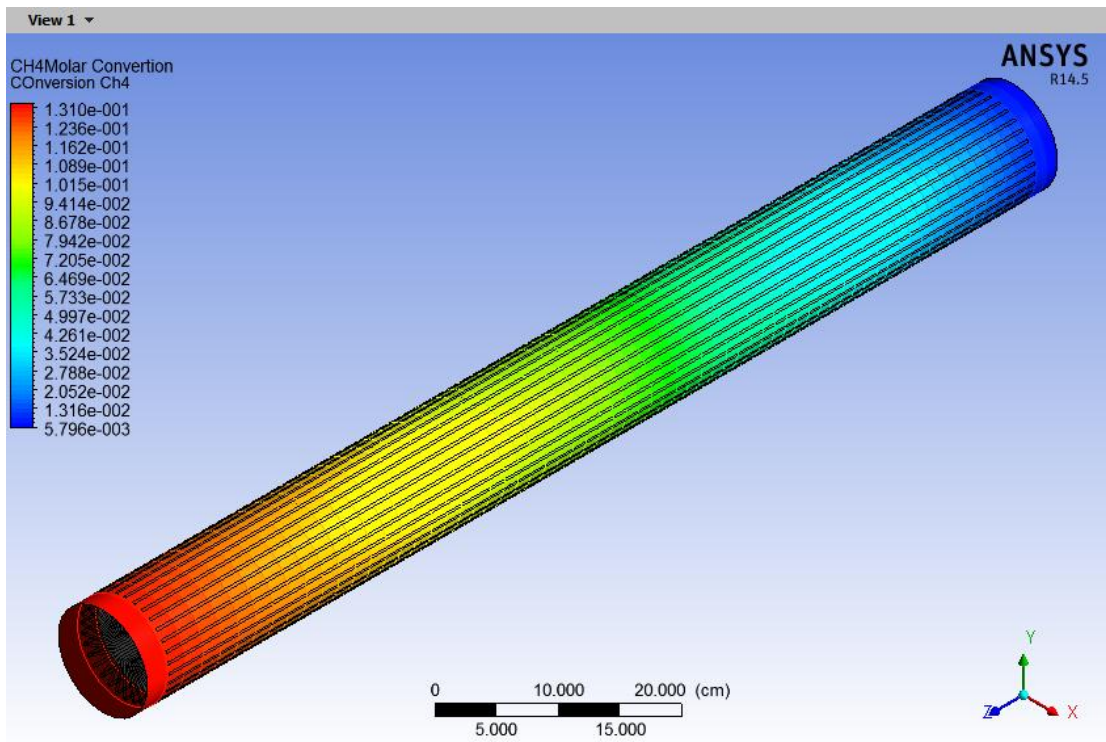


Figura 64: Conversión de metano en catalizador estructurado

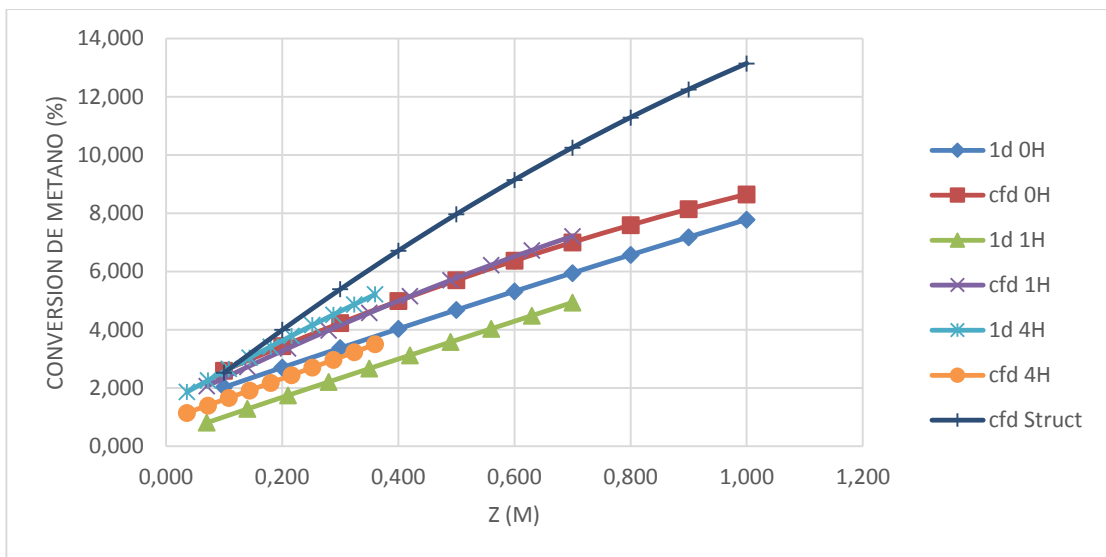


Figura 65: Comparación de conversiones de CH₄, para distintos modelos de catalizador

En este punto se efectuó el cálculo del nivel de mejora en la conversión de metano, por la incorporación del nuevo modelo de catalizador, ubicándose este valor en un 31% de aumento en la conversión del metano. En comparación con la conversión dada por el pellet 1H, a la misma longitud.

En la tabla 19, se resumen los errores MAE, de las simulaciones con sus contrapartes unidimensionales.

Tabla 18: Resumen de MAE para la Conversión de Metano

| 1d 0H | cfD 0H | Fi-yi | 1d 1H | cfD 1H | Fi-yi | 1d 4H | cfD 4H | Fi-yi |
|--------------|---------------|----------------|--------------|---------------|----------------|--------------|---------------|----------------|
| 2,027 | 2,596 | 0,569 | 0,807 | 2,062 | 1,255 | 1,864 | 1,141 | 0,724 |
| 2,704 | 3,433 | 0,729 | 1,279 | 2,725 | 1,445 | 2,264 | 1,397 | 0,867 |
| 3,371 | 4,228 | 0,857 | 1,746 | 3,364 | 1,618 | 2,656 | 1,655 | 1,001 |
| 4,028 | 4,983 | 0,954 | 2,209 | 3,981 | 1,772 | 3,042 | 1,914 | 1,128 |
| 4,677 | 5,696 | 1,019 | 2,668 | 4,576 | 1,908 | 3,421 | 2,175 | 1,246 |
| 5,316 | 6,369 | 1,053 | 3,124 | 5,148 | 2,024 | 3,793 | 2,437 | 1,356 |
| 5,946 | 7,001 | 1,055 | 3,578 | 5,697 | 2,119 | 4,158 | 2,700 | 1,458 |
| 6,566 | 7,592 | 1,025 | 4,031 | 6,223 | 2,193 | 4,517 | 2,965 | 1,552 |
| 7,178 | 8,142 | 0,964 | 4,483 | 6,727 | 2,244 | 4,869 | 3,231 | 1,637 |
| 7,780 | 8,651 | 0,871 | 4,935 | 7,209 | 2,273 | 5,213 | 3,499 | 1,714 |
| | MAE | 0,910 | | MAE | 1,885 | | MAE | 1,268 |

Para cerrar es de notar, que a pesar que se puede evidenciar mejoras, a través del uso de las simulaciones CFD, para el caso de estudio, se requiere aun de métodos de validación adicionales, altamente dependientes de mayores capacidades de cómputo, tendientes primero a efectuar un análisis de sensibilidad riguroso de la malla utilidad y segundo a mitigar las inestabilidades introducidas por la geometría y por el modelo cinético en la simulación.

No cabe duda que efectivamente el solver completamente acoplado del AnsysCFX, es capaz de llevar a la simulación del reactor de reformado, en tiempo de cómputo menor que el reportado para otros programas como Fluent, y más allá demostrar los cambios producidos al incorporar nuevos diseños en el reactor; sino que representa una invitación e incentivo a continuar con esta rama de investigación, invirtiendo en

herramientas que van de la mano con los avances tecnológicos de nuestra época, menos que sustituyendo la labor experimental, reforzando el aprendizaje y acompañando al especialista de laboratorio en nuevos y mejores ensayos encaminados a reducir costos de manera efectiva con resultados de mayor alcance.

CAPÍTULO V

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

En este capítulo se presentan las conclusiones y recomendaciones establecidas por los resultados obtenidos.

V.1 CONCLUSIONES

Tras la realización del presente Trabajo Especial de Grado se pueden establecer las siguientes conclusiones:

- Los reformadores comerciales del tipo Top-Fired, poseen a lo sumo dos planos de simetría, que permiten la simulación CFD de un solo tubo catalítico para representar todo el comportamiento fluido dinámico del sistema.
- En el interior de las tuberías catalíticas a pesar de la naturaleza aleatoria y compleja de los empaques de pellets, la hipótesis de un empaque perfectamente aleatorio o del tipo Monte-Carlo, permiten simular segmentos de la longitud total, en lugar de toda la tubería.
- Los clusters de pellets pueden presentar cierto nivel de discrepancia en comparación con los empaques reales, por lo que solo geometrías tomadas directamente de empaques industriales permiten tener certeza en la precisión de sus dimensiones y disposición geométrica.
- La simulación CFD de tubos catalíticos debe ser siempre tridimensional, en ausencia de planos de simetría transversales a la dirección de flujo.
- Los empaques construidos en DesignModeler deben tener entre sus pellets puntos de contacto o de solapamiento, para así evitar la presencia de zonas vacías en el empaque trazado.
- Cualquier tipo de pellet cuya geometría principal sea la cilíndrica puede ser construido en base al método de empaque aleatorio, pero requerirá al final de la generación del clúster ajustes manuales para garantizar su compactación.

- Los empaques estructurados muestran inconvenientes cuando su geometría tiene corrugaciones o bien sea zonas filosas.
- Un empaque de pellets puede ser construido en base a operaciones simples de rotación y traslación.
- Los mallados de todas las geometrías, en la modalidad de malla dividida, pueden ser generadas, utilizando AnsysMeshing, con elevada densidad de malla en el sólido en comparación a la del fluido.
- La malla del lado del fluido será en todos los casos desestructurada, en presencia de empaque, independientemente sea este de pellets o estructurado.
- El dominio sólido (del empaque) mientras sea de pellets coincidentes, siempre estará mallado en base a tetraedros.
- La línea de comandos CEL del programa Ansys CFX, permite efectivamente la incorporación de modelos adicionales para una simulación, pero según sea el caso se puede requerir de una gran cantidad de datos adicionales.
- La adecuada simulación CFD de lechos empacados para reformado de metano con vapor a condiciones industriales requiere de un modelo de turbulencia, típicamente del tipo RANS.
- La línea de comandos CEL, al menos para la versión que se trabajó, no permitió la incorporación de correlaciones y/o perfiles cuya expresión dependiera de coordenadas espaciales.
- Se alcanzó convergencia de las ecuaciones gobernantes para cada geometría simulada, con inestabilidades locales altamente dependientes de la malla.
- El uso de un empaque denso de pellets, dificulta la estabilidad de la ecuación de momentum generando perfiles de presión y velocidad desviados.
- Las inestabilidades de la ecuación de momentum se vieron reflejadas en las ecuaciones de fracción másica para la geometría estructurada.
- Efectivamente un solver acoplado condujo a tiempo de cómputo mucho más cortos que los reportados para fluent, y convergencia para un número de iteraciones bajo.

- El solver acoplado del Ansys-CFX es capaz de resolver el modelo cinético del proceso de reformado en tiempos de cómputo menores a los requeridos para sus contrapartes desacoplados, como se ha reportado en la literatura.
- La ausencia de un análisis de sensibilidad sobre la malla, reduce el nivel de confianza asociados a resultados obtenidos, a causa de discrepancias con lo esperado, como por ejemplo mejor conversión a medida que aumenta en número de agujeros.
- La herramienta post, requiere de grandes recursos de memoria RAM, para la visualización de los resultados de este tipo de simulaciones.
- A pesar de las oscilaciones en el balance de momentum, típicas del reformado, se pudo obtener una buena aproximación al continuo para la presión absoluta.
- Los catalizadores, de geometría en forma de aletas, incorporan mejoras significativas en la conversión de metano. En la manera en la que estos mejoran la transferencia de calor desde la pared hacia el eje de la tubería y a la masa gaseosa.
- La caída de presión es despreciable, cuando la transferencia de calor hacia la masa gaseosa aumenta.
- Una simulación CFD, de este sistema en estado estacionario no precisa exactamente lo que sucederá en condiciones estacionarias, en el reactor real.

V.2 RECOMENDACIONES

A continuación se presentan diversas de recomendaciones con la finalidad de mejorar o ampliar los resultados obtenidos mediante la realización de futuros proyectos:

- Simular una tubería catalítica de longitud real, con geometría de empaque, que no sea del tipo Monte Carlo, de manera que se tenga un mayor nivel de realismo en el dominio computacional.
- Simular todo el reactor en sus verdaderas condiciones de operación, y con todas sus dimensiones físicas reales de manera que se pueda tener un mayor nivel de precisión en la forma en la que las masas gaseosas se comportan en su interior, de manera que se evite simulaciones bajo la suposición de simetrías en el flujo.
- Dada la necesidad de efectuar operaciones y cálculos repetitivos para la construcción CAD de un empaque, se recomienda la creación de algún tipo de programa generalizado que permita la construcción automática de este tipo de lechos y empaques.
- Construir empaques de este tipo utilizando otros programas CAD disponibles en el mercado, que no consuman muchos recursos de memoria RAM.
- Realizar un estudio cuantitativo de diferencias y semejanzas entre empaques aleatorios y empaques reales, a fin determinar el nivel de calidad de estos en cuanto a su representación de la realidad.
- Construir empaques CAD, utilizando programas especializados en elementos discretos, que si toman en consideración los fenómenos físicos que rigen el proceso de llenado de un tubo catalítico.
- Generar mallas de mayor densidad en ambos dominios a fin de lograr simulaciones más precisas.
- Utilizar estrategias de división de malla más rigurosas, que garanticen buena densidad de mallado en la frontera.
- Se recomienda efectuar simulaciones a otras condiciones de operación industrial, distintas a las aquí usadas.

- Efectuar un análisis del impacto de los modelos de turbulencia en simulaciones de este tipo. Así como determinar un mallado más propicio para este tipo de modelos.
- Utilizar mallas ultradensas a fin de mitigar el efecto de las oscilaciones de residuales en la ecuación de momentum.
- Cambiar a un modelo de empaque basado en cuerpos porosos en lugar de un empaque de pellets denso, para evitar el cálculo de perfiles de velocidad interpartícula.
- Utilizar en los catalizadores estructurados geometrías no basadas en superficies delgadas.
- Efectuar análisis de sensibilidad sobre la malla utilizada.
- Realizar la simulación de un tubo catalítico completo, con condiciones de pared más rigurosa las utilizadas, que reproduzcan con mayor detalle la transferencia de calor por convección en la vecindad de la cara interior de la tubería.
- Efectuar simulaciones con pellets de catalizador que sean de geometrías más rigurosas, a nivel de diseño, en lugar de utilizar pellets basados en cilindros.
- Realizar la simulación en estado dinámico a fin de incorporar todos los términos dependientes del tiempo que implícitamente forman parte los distintos balances fundamentales, así como de los modelos de turbulencia disponibles.

REFERENCIAS

- Acevedo, A. (2002). *Deshidrogenacion Oxidativa del N-Pentano sobre catalizadores Promovidos por Galio Antimonio*. Caracas: Universidad Central de Venezuela.
- Ansys-CFX. (2010). *Ansys CFX User Manual*. Miami: Ansys Inc.
- AnsysCFX. (2013). *Ansys CFX User Manual*. Miami: Ansys Inc.
- Azocleantech. (12 de diciembre de 2014). *High Performance Replacement Catalysts for Steam Reforming Plants Catalyst Replacements by Catacel*. Obtenido de <http://www.azocleantech.com/article.aspx?ArticleID=206>
- Baukal, C. (2003). *Industrial Burners Handbook*. Bogota: Editorial CRC Press.
- Behnam, & Dixon. (2012). Comparison of CFD simulations to experiment under methane steam reforming reacting conditions. *AICHE*, 50-62.
- Bird. (2005). *Transport Phenomena*. New York: Wiley.
- Broadhurst, & Abbot. (2002). (*BROADHURST & ABBOTT*. Miami: Johnson Matthey Catalysts.
- Catacel. (13 de Enero de 2015). *Catacel*. Obtenido de www.catacel.com
- Cussler, W. (1997). *Diffusion: Mass Transfer in Fluid Systems*. New York: Pearson.
- De Sousa, D., & Pisani, O. (2010). *Modelado, simulación y control de una unidad de reformación catalítica con vapor empleada para la obtención de gas de síntesis*. Caracas: Universidad Central de Venezuela.
- Deutschmann. (2010). *Modeling and Simulation of Heterogeneous Catalytic Reactions*. Berlin: Wiley.
- Dixon, & Stitt. (2006). *3D CFD simulations of steam reforming with resolved intraparticle reaction and gradients*. Cleveland: WPI.
- Dixon, A. (2009). Computational Fluid Dynamics in chemical reactor analysis and design. *AICHE*, 71-79.
- Edeleanu. (2014). *Materials Technology in Steam Reforming Processes*. New York: Elsevier.
- Froment, G. (1974). *Chemical Reactor Analysis and Design*. New York: Wiley.
- Froment, G., & Xu, A. (1989). Methane steam reforming: II. Diffusional limitations. *AICHE*, 97-102.
- Ghassabzadeh, M., & Ghassemi, H. (2013). Numerical Hydrodynamic of Multihull Tunnel Vessel. *Open Journal of Fluid Dynamics*, 24-32.
- Grégoire, K. (2000). *Advances in Hydrogen Energy*. Madrid: Springer.
- Hawkings. (2010). *Steam Refoming Common Problems*. Los Angeles: GBHEnterprises.
- Hawkings, G. (2006). *A Brief History of Steam Reforming*. Houston: GBH Enterprises LTD.
- López, L., & Muñoz, M. (2004). Estudio de la Turbulencia a través del Modelo k-e , Mediante un Código Tridimensional con Esquemas de Alto Orden. *FENÓMENOS DE TURBULENCIA*, 25-28.

- Malasekera, P. (2002). *Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method*. Los Angeles: Longman Scientific & Technical.
- Matthey. (4 de julio de 2015). *Panki Staff and Local Supplier team up to Design New Pelleting Equipment*. Obtenido de http://www.matthey.com/sustainability2009/case-studies/environment_cs_33.html
- McGuire, M. a. (1965). On the stability of a detailed packed bed reactor. *American Institute of Chemical Engineers Journal*, 85-95.
- Molina, G., Rosales, A., Rivero, C., & Mata, N. (2011). *Modelado Simulación y Control de un Reformador de Metano con Vapor*. Caracas: Universidad Central de Venezuela.
- Nijemeisland, M., & Dixon, A. (2004). *Catalyst design by CFD for heat transfer and reaction in steam reforming*. Boston: AIChE.
- Nikodemus, M. (2013). *Identifying Favorable Catalyst Design Features in Methane Steam Reforming using Computational Fluid Dynamics*. Boston: WPI.
- Olejnik, R. (2010). *Estudio del reformado autotérmico de metano empleando catalizadores estructurados Ni/Al₂O₃ para la producción de gas de síntesis*. Caracas: Universidad Central de Venezuela.
- Pletcher, R. (2012). *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*. Los Angeles: CRC Press.
- Pozrikidis, A. (2011). *Introduction to Theoretical and Computational Fluid Dynamics*. Moscú: CPR.
- Renade, V. (2002). *Computational Flow Modeling for Chemical Reactor*. Texas: Elsevier.
- Rostrup, J. (1984). *Catalytic Steam Reforming*. Alemania: Springer.
- Schettler, P. D., & Giddings, J. C. (1958). A new method for prediction of binary gas-phase diffusion coefficients. *Industrial & Engineering Chemistry*, 19-27.
- Stitt, H. (2005). *Reactor technology for syngas and hydrogen*. Boston: WPI.
- Toyo. (7 de noviembre de 2014). *Process Optimization*. Obtenido de <http://www.toyo-eng.com/>
- Trace. (15 de Mayo de 2015). *Emerging Technology Overview*. Obtenido de <http://trace.wisc.edu/tech-overview/index0735.html?p=18>
- Versteeg, H. (1995). *An Introduction to Computational Fluid Dynamics*. London: Pearson.
- Wassenberg, H. (2005). *Gas Heated Steam Reformer Modelling*. Noruega: Elsevier.
- Wilde, & Froment. (2011). Computational Fluid Dynamics in chemical reactor analysis and design. *Fuel*, 48-56.

APÉNDICES

APÉNDICE A. Teorema de Gauss

Supóngase V es un subconjunto de \mathbb{R}^n , para el caso de las aplicaciones CFD estacionario, $n = 3$. Donde V representa un volumen cerrado de superficie suave, cerrada y diferenciable S , con vector normal \mathbf{n} . Si existe un campo vectorial \mathbf{F} continuamente diferenciable en la vecindad de V . Entonces se tiene que:

$$\iiint_V (\nabla \cdot \mathbf{F}) dV = \oiint_S (\mathbf{F} \cdot \mathbf{n}) dS \quad \text{Ec.49}$$

El lado izquierdo es una integral de volumen sobre el volumen V , mientras que el lado izquierdo es la integral de superficie sobre la frontera del volumen V .

APÉNDICE B. Transformación de Rotación

En dos dimensiones la matriz de rotación $R(\theta)$ tiene la siguiente forma:

$$R(\theta) = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \quad \text{Ec.50}$$

Tiene la propiedad de rotar un vector columna un ángulo θ , tras la siguiente operación matricial:

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \quad \text{Ec.51}$$

En tres dimensiones se tienen tres matrices de rotación, que aplican dependiendo del eje de rotación que se utilice, así para los ejes x, y, z respectivamente se tienen las siguientes:

$$R_x(\theta) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & -\sin \theta \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \quad \text{Ec.52}$$

$$R_y(\theta) = \begin{bmatrix} \cos \theta & 0 & \sin \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \theta & 0 & \cos \theta \end{bmatrix} \quad \text{Ec.53}$$

$$R_z(\theta) = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \text{Ec.54}$$

APÉNDICE C. Traslación de un Vector

La transformación por traslación de un vector, es un operador T_δ tal que $T_\delta f(\mathbf{v}) = f(\mathbf{v} + \delta)$, para $\mathbf{v}; \delta$ ambos vectores en \mathbb{R}^n . En el caso de un vector fijo \mathbf{v} la traslación queda:

$$T_v(\mathbf{p}) = \mathbf{p} + \mathbf{v} \quad \text{Ec.55}$$

Donde \mathbf{p} es otro vector en el espacio a ser trasladado en la dirección de \mathbf{v} .

APÉNDICE D. Oblicuidad de Mallado

Es un indicador de la calidad y consistencia del mallado, dependiendo del volumen de control en el cual se calcula, viene en distintas formas:

- a) Basado en un volumen equilátero: para tetraedros, compara el tamaño actual de una celda con el óptimo.

$$\text{Oblicuidad} = \frac{\text{tamaño óptimo de celda} - \text{tamaño actual de celda}}{\text{tamaño óptimo de celda}} \quad \text{Ec.56}$$

Considerando el tamaño óptimo como aquel que ocupa el mayor volumen dentro de una esfera que lo encierre.

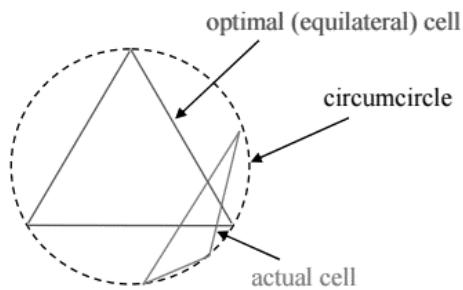


Figura 66: Oblicuidad

- b) Basado en la desviación con respecto a un ángulo: aplicado a prismas, pirámides, hexaedros, entre otros. Mide el nivel de desviación mínimo y máximo con respecto a un ángulo de 90 grados.

$$Oblicuidad(tetr) = \left(\frac{\theta_{max} - 90^\circ}{90^\circ} \right); \left(\frac{90^\circ - \theta_{min}}{90^\circ} \right) \quad Ec.57$$

APÉNDICE F. Relación de Aspecto de Mallado

Es el radio del lado de menor longitud de un volumen de control al lado de mayor longitud.

$$Relación\ de\ Aspecto = \frac{lado\ mayor}{lado\ menor} \quad Ec.58$$

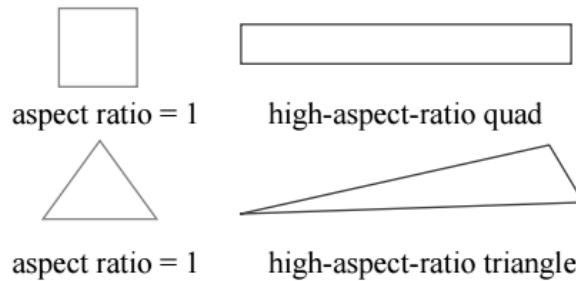


Figura 67: Relación de Aspecto en un mallado

APÉNDICE G. Modelo de Turbulencia $\kappa - \varepsilon$

Campos de velocidad fluctuantes son típicos de flujos turbulentos, los cuales resultan en fluctuaciones de las cantidades transportadas, tales como momentum, energía y masa. Estas fluctuaciones suceden a una escala pequeña y con alta frecuencia, lo que ocasiona simulaciones directas, computacionalmente imprácticas. A fin de resolver este fenómeno se han propuesto modelos basados en ecuaciones diferenciales parciales, desafortunadamente ningún modelo de turbulencia, es aceptado como universal para

todo tipo de situaciones. Su selección dependerá de aspectos tales como la naturaleza del fluido, sus propiedades, la capacidad de cómputo disponible, entre otros.

Dos métodos han sido desarrollados a fin de modificar las ecuaciones gobernantes, de tal manera que se tome en consideración estas fluctuaciones: Reynolds Promedio (RANS) y las simulaciones Large-Eddy (LES). A efectos del presente trabajo, el método RANS es el más conveniente, puesto es el que menos recursos consume, e históricamente es el recomendado para simulaciones CFD estacionarias (López & Muñoz, 2004).

El método RANS tiene diversas variantes, pero la más usada es el modelo $\kappa - \varepsilon$, en el cual las ecuaciones gobernantes son descompuestas en dos términos: \bar{u}_i o velocidad promedio, y u'_i o velocidad fluctuante, cuya suma $u_i = u'_i + \bar{u}_i$ arroja el verdadero perfil de velocidades del fluido. Ambas componentes son calculadas por medio de su integración el tiempo.

El modelo $\kappa - \varepsilon$ consta de dos ecuaciones diferenciales parciales, la primera expresa la energía en la turbulencia, también llamada energía cinética turbulenta κ . La segunda expresa la disipación turbulenta ε , la cual determina la tasa de disipación de la energía cinética turbulenta.

$$\frac{\partial(\rho\kappa)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho\kappa u_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\mu_t}{\sigma_\kappa} \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} \right] + 2\mu_t E_{ij} E_{ij} - \rho\varepsilon \quad \text{Ec.59}$$

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho\varepsilon u_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{\kappa} 2\mu_t E_{ij} E_{ij} - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{\kappa} \quad \text{Ec.60}$$

Donde:

u_i : expresa la velocidad en una dirección i .

E_{ij} : representa los componentes de la tasa de deformación.

μ_t : la viscosidad de eddy.

Y los parámetros restantes son ajustables, dependiendo del tipo de fluido y del programa utilizado para resolver los modelos. Se resumen en la siguiente tabla con sus valores típicos:

Tabla 19: Parámetros modelo de turbulencia $\kappa - \varepsilon$

| | | | |
|------------------------|-----------------------------|---------------------------|---------------------------|
| $\sigma_\kappa = 1,00$ | $\sigma_\varepsilon = 1,30$ | $C_{1\varepsilon} = 1,44$ | $C_{2\varepsilon} = 1,92$ |
|------------------------|-----------------------------|---------------------------|---------------------------|

En síntesis ambas ecuaciones representan un balance para las cantidades $\kappa - \varepsilon$, como sigue:

$$\begin{aligned} \text{cambio}(\kappa; \varepsilon) + \text{transp}_{\text{conveccion}}(\kappa; \varepsilon) = \\ \text{transp}_{\text{difusion}}(\kappa; \varepsilon) + \text{produccion}(\kappa; \varepsilon) - \text{destruccion}(\kappa; \varepsilon) \end{aligned} \quad \text{Ec.61}$$

APÉNDICE G. Difusividad Molecular en la Masa Gaseosa

La difusividad molecular, también conocida como difusividad en la mezcla, para el caso de gases puede ser calculada utilizando la siguiente expresión:

$$\frac{1}{D_{A,m}} = \frac{\sum_{k=1}^n \left(\frac{1}{D_{A,m}} \left(y_k - y_A \frac{N_K}{N_A} \right) \right)}{1 - \left(y_A \sum_{k=1}^n \left(\frac{N_K}{N_A} \right) \right)} \quad \text{Ec.62}$$

Donde $D_{A,m}$ viene en unidades de cm^2/s , y es calculada en base a las fracciones molares de la alimentación.

Tabla 20: Fracciones molares

| Especie en la alimentación | Fracción molar y_k [adim] |
|----------------------------|-----------------------------|
| CH_4 | 0,239 |
| H_2 | 0,005 |
| CO | 0,005 |
| CO_2 | 0,077 |
| H_2O | 0,677 |

Las cuales fueron establecidas bajo la suposición de que la reacción dominante en la entrada del reactor es R.3. Los valores de las razones molares fueron calculados utilizando los coeficientes estequiométricos de cada especie en R.3, quedando como se muestra en la tabla siguiente.

Tabla 21: Difusividades en mezcla y razones molares

| Especie k | Difusividad en mezcla $D_{A,m}$ [cm^2/s] | $\frac{N_K}{N_A}$ [adim] | |
|-----------|---|---------------------------|---------------------------|
| CH_4 | 0,123 | $N_{H_2}/N_{CH_4} = -4$ | $N_{CO}/N_{CH_4} = 0$ |
| | | $N_{CO_2}/N_{CH_4} = -1$ | $N_{H_2O}/N_{CH_4} = 2$ |
| H_2 | 0,225 | $N_{CH_4}/N_{H_2} = -1/4$ | $N_{CO}/N_{H_2} = 0$ |
| | | $N_{CO_2}/N_{H_2} = 1/4$ | $N_{H_2O}/N_{H_2} = -1/2$ |
| CO_2 | 0,049 | $N_{CH_4}/N_{CO_2} = -1$ | $N_{CO}/N_{CO_2} = 0$ |
| | | $N_{H_2}/N_{CO_2} = 4$ | $N_{H_2O}/N_{CO_2} = -2$ |
| H_2O | 0,209 | $N_{CH_4}/N_{H_2O} = -4$ | $N_{CO}/N_{H_2O} = 0$ |
| | | $N_{H_2}/N_{H_2O} = -1/2$ | $N_{H_2}/N_{H_2O} = -2$ |

Cabe destacar que en modelado tradicional de este tipo de proceso, se plantea una difusividad efectiva, a veces llamada la difusividad de Knudsen (Froment & Xu, 1989), la cual debe ser un cálculo intermedio entre las difusividades binarias y de mezcla. Esta difusividad efectiva es la debida a los fenómenos difusivos intrapartícula causados por la porosidad y turtuosidad en los pellets del catalizador.

APÉNDICE H. Calculo Tipo de Plano Base para Trazado de Pellet

Partiendo del vector unitario $\hat{\mathbf{j}} = (0; 1; 0)$ se calcula su transpuesta de la manera habitual:

$$[\hat{\mathbf{j}}]^T = (0 \quad 1 \quad 0)^T = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Paso siguiente se procede a identificar las transformaciones correspondientes, en este caso serían: $R_{+X}(45^\circ)$; $T_{+X}(3,5[cm] \rightarrow 1,45[in])$; $R_{+X}(40^\circ)$, respectivamente.

Para la primera transformación se tendría:

$$R_{+X}(45^\circ) * [\hat{\mathbf{j}}]^T$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos 45^\circ & -\sin 45^\circ \\ 0 & \sin 45^\circ & \cos 45^\circ \end{bmatrix} * \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0,71 \\ 0,71 \end{pmatrix}$$

Luego se tiene la traslación:

$$\mathbf{P}_1 = T_v(\mathbf{p}) = \mathbf{p} + \mathbf{v}$$

Donde: $\mathbf{p} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ y $\mathbf{v} = \begin{pmatrix} 1,45 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$; quedando como sigue:

$$\mathbf{P}_1 = \begin{pmatrix} 1,45 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Este último valor corresponde a las coordenadas del punto por donde pasara el nuevo plano base. Solo resta terminar de calcular la dirección del vector normal de este plano, en función a la última rotación. Es importante mencionar que las unidades de las cantidades anteriores vienen expresadas en [in] para posiciones y vectores y grados para ángulos.

$$\mathbf{n}_1 = (R_{+z}(40^\circ)) * (R_{+x}(45^\circ) * [\hat{j}]^T)$$

$$\mathbf{n}_1 = \begin{bmatrix} \cos 40^\circ & -\sin 40^\circ & 0 \\ \sin 40^\circ & \cos 40^\circ & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} * \begin{pmatrix} 0 \\ 0,71 \\ 0,71 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0,45 \\ 0,54 \\ 0,71 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{n}_1 = \begin{pmatrix} -0,45 \\ 0,54 \\ 0,71 \end{pmatrix}$$

Con los cálculos anteriores ya se tienen los elementos necesarios para construir el plano base desde donde se trazara el cilindro que constituirá al pellet 1, siendo este plano definido en términos de un vector normal \mathbf{n}_1 y un punto \mathbf{P}_1 .

Igualmente el plano puede ser definido de la manera usual, a través del producto punto entre un vector y un punto, como sigue:

$$\Pi_1: \mathbf{n}_1 \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{P}_1) = 0$$

Donde:

$$\mathbf{n}_1 = \begin{pmatrix} -0,45 \\ 0,54 \\ 0,71 \end{pmatrix}; \mathbf{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}; \mathbf{P}_1 = \begin{pmatrix} 1,45 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Cuyos valores pueden observarse en la tabla 24.

ANEXOS

ANEXO 1
Dominio Computacional

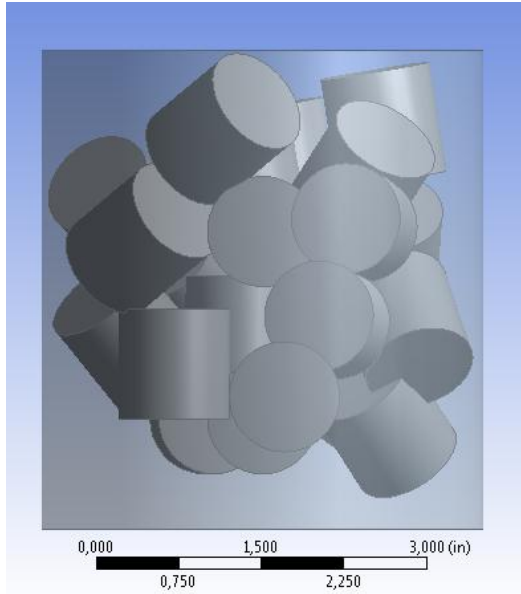


Figura 68: vista lateral dominio computacional

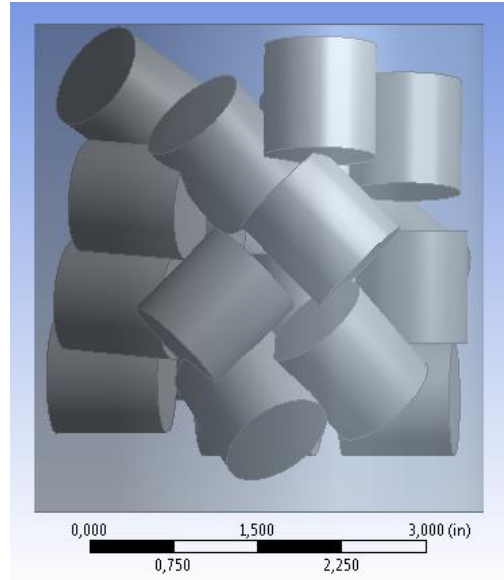


Figura 69: vista lateral dominio computacional rotado

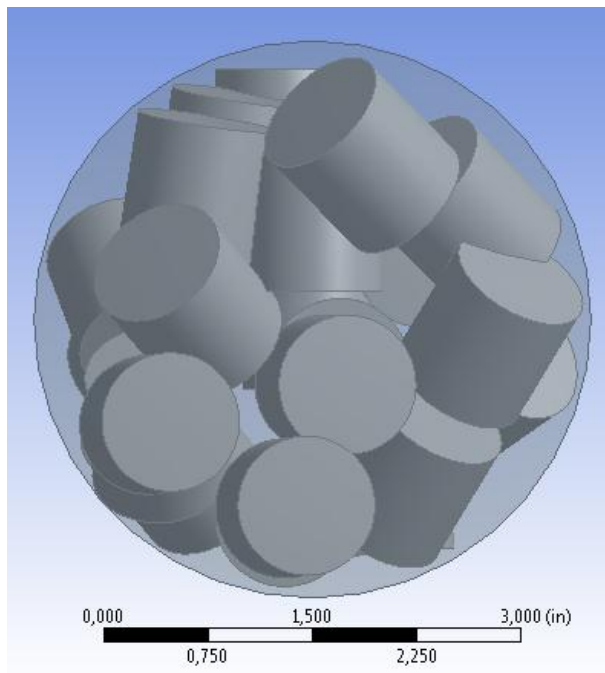


Figura 70: empaque a la entrada

ANEXO 2
Empaque de Pellets

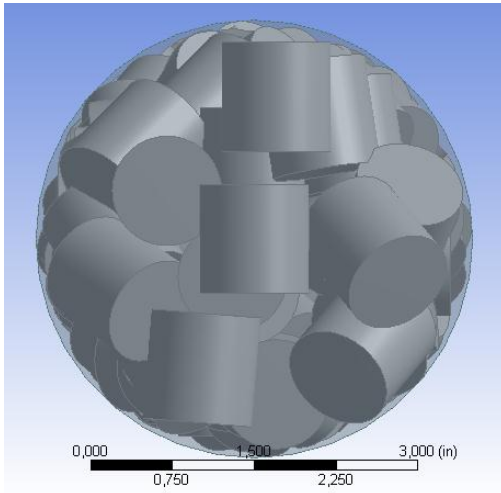


Figura 71: Vista entrada empaque 0H

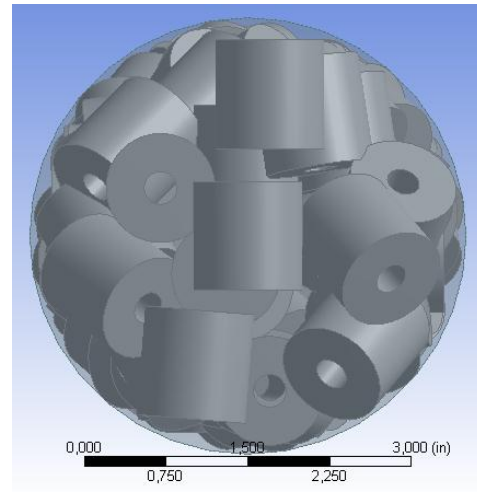


Figura 72: Vista entrada empaque 1H

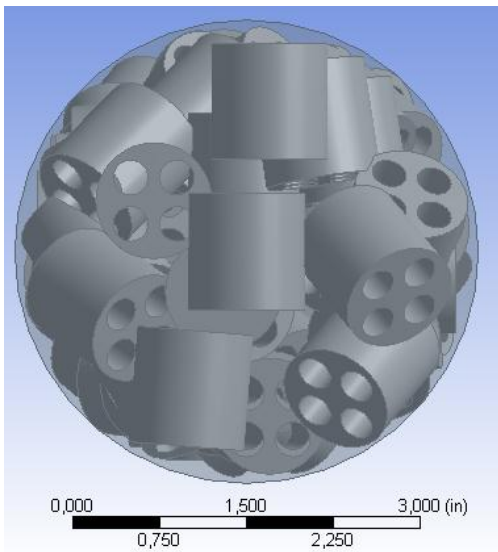


Figura 74: Vista entrada empaque 4H

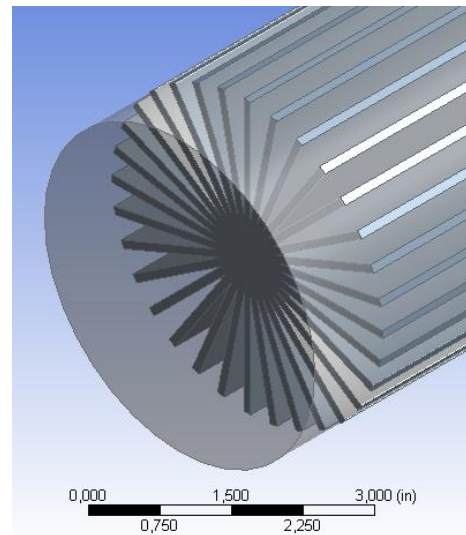


Figura 73: Vista entrada empaque estructurado

ANEXO 3
Trazado de Pellets

Tabla 22: Transformaciones para construcción de cumulo de pellets (continuación)

| Numero de pellet | Operación | Eje | Magnitud |
|------------------|----------------------|-----|----------|
| 12' | Repetición(Pellet12) | | |
| | T [cm] | +Y | 0,48 |
| 13 | Repetición(Pellet2) | | |
| | T [cm] | +Z | 105 |
| | R [grados] | +Z | 0,12 |
| 14 | R [grados] | +X | 29,8 |
| | T [cm] | +X | 3,68 |
| | R [grados] | +Z | -31 |
| 15 | Repetición(Pellet14) | | |
| | T [cm] | +Z | 5,08 |
| 16 | Repetición(Pellet8) | | |
| | R [grados] | +Z | 106,8 |
| | R [grados] | +Y | 10 |
| | T [cm] | +X | -0,76 |
| | T [cm] | +Z | 0,66 |
| | T [cm] | +Y | -0,12 |
| 17 | Repetición(Pellet16) | | |
| | R [grados] | +Z | 10 |
| | T [cm] | +X | -0,22 |
| | T [cm] | +Y | 0,53 |
| | T [cm] | +Z | -2,56 |
| 18 | Repetición(Pellet17) | | |
| | T [cm] | +Z | 5,08 |
| 19 | R [grados] | +X | 30 |
| | T [cm] | +X | 3,68 |
| | R [grados] | +Z | 44,7 |
| | T [cm] | +Z | 2,59 |
| 20 | Repetición(Pellet8) | | |
| | R [grados] | +Z | 199 |
| | T [cm] | +X | 0,07 |
| | T [cm] | +Y | -0,63 |
| | T [cm] | +Z | 0,12 |
| | R [grados] | +X | 5 |
| 21 | R [grados] | +X | -44,9 |
| | T [cm] | +X | -3,68 |
| | R [grados] | +Z | -58 |
| 22 | Repetición(Pellet21) | | |
| | T [cm] | +Z | 5,08 |

| | | | |
|----|----------------------|----|------|
| 23 | R [grados] | +Z | 99,6 |
| | T [cm] | +Z | 0,12 |
| | R [grados] | +X | 2 |
| 24 | Repetición(Pellet23) | | |
| | T [cm] | +Z | 5,08 |

Tabla 23: Punto y vector normal de planos base para primer clúster

| Numero de pellet | Punto [pulg] | | | Vector normal [pulg] | | |
|------------------|--------------|-------|-------|----------------------|------|------|
| | x_0 | y_0 | z_0 | x | y | z |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 |
| 1 | | | | 0 | 0,7 | 0,7 |
| | 1,45 | 0 | 0 | | | |
| | 1,45 | 0 | 0 | -0,45 | 0,54 | 0,7 |
| 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0,7 | -0,7 |
| | -1,45 | 0 | 0 | | | |
| | -1,45 | 0 | 1 | | | |
| | -1,45 | 0 | 1 | -0,24 | 0,66 | -0,7 |
| 3 | -1,45 | 0 | 2 | -0,45 | 0,54 | 0,7 |
| 4 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0,99 | 0,08 |
| | -1,48 | 0 | 0 | | | |
| | -1,48 | 0 | 0 | 0,15 | 0,97 | 0,08 |
| 5 | -1,48 | 0 | 2 | 0,15 | 0,97 | 0,08 |
| 6 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 |
| | 0 | -1,42 | 0 | 0 | 1 | 0 |
| | 0 | -1,42 | 0 | -0,08 | 0,99 | 0 |
| 7 | 0 | -1,42 | 2 | -0,08 | 0,99 | 0 |
| 8 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 |
| | 0 | -1,42 | 0 | | | |
| | 0 | -1,42 | 1 | | | |
| | 0 | -1,42 | 1 | 0 | 0 | 1 |
| 9 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0,77 | 0,77 |
| | -1,45 | 0 | 0 | | | |
| | -1,45 | 0 | -1 | | | |
| | -1,45 | 0 | -1 | 0,45 | 0,54 | 0,70 |
| 10 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 |
| 11 | 0 | 0 | 2 | 0 | 1 | 0 |
| 12 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 |
| | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 |
| | 1 | 0 | 0 | | | |
| | 1 | -0,35 | 0 | 0 | 0 | 1 |

Tabla 24: Punto y vector normal de planos base para primer cumulo

| Numero de pellet | Punto [pulg] | | | Vector normal [pulg] | | |
|------------------|--------------|-------|-------|----------------------|-------|------|
| | x_0 | y_0 | z_0 | x | y | z |
| 12' | 0,2 | -0,16 | 0 | 0 | 0 | 1 |
| 13 | -1,45 | 0 | 1 | -0,57 | -0,40 | -0,7 |
| | -1,45 | 0 | 0,95 | -0,57 | -0,40 | -0,7 |
| 14 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0,86 | 0,49 |
| | 1,45 | 0 | 0 | | | |
| | 1,45 | 0 | 0 | 0,44 | 0,73 | 0,49 |
| 15 | 1,45 | 0 | 2 | 0,44 | 0,73 | 0,49 |
| 16 | 0 | -1,42 | 1 | 0 | 0 | 1 |
| | | | | 0,17 | 0 | 0,98 |
| | -0,3 | -1,42 | 1 | | | |
| | -0,3 | -1,42 | 1,26 | | | |
| | -0,3 | -1,47 | 1,26 | 0,17 | 0 | 0,98 |
| 17 | -0,3 | -1,47 | 1,26 | 0,16 | 0,02 | 0,98 |
| 18 | -0,39 | -1,47 | 1,26 | 0,16 | 0,02 | 0,98 |
| | -0,39 | -1,26 | 1,26 | | | |
| | -0,39 | -1,26 | 0,05 | | | |
| | -0,39 | -1,26 | 2,05 | 0,16 | 0,02 | 0,98 |
| 19 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0,86 | 0,5 |
| | 1,45 | 0 | 0 | | | |
| | | | | -0,60 | 0,611 | 0,5 |
| | 1,45 | 0 | 1,02 | -0,6 | 0,61 | 0,5 |
| 20 | 0 | -1,42 | 1 | 0 | 0 | 1 |
| | 0,03 | -1,42 | 1 | | | |
| | 0,03 | -1,67 | 1 | | | |
| | 0,03 | -1,67 | 1,05 | | | |
| | 0,03 | -1,67 | 1,05 | 0 | 0,9 | 1,08 |
| 21 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0,7 | -0,7 |
| | -1,45 | 0 | 0 | | | |
| | -1,45 | 0 | 0 | 0,59 | 0,37 | -0,7 |

ANEXO 4
Mallado

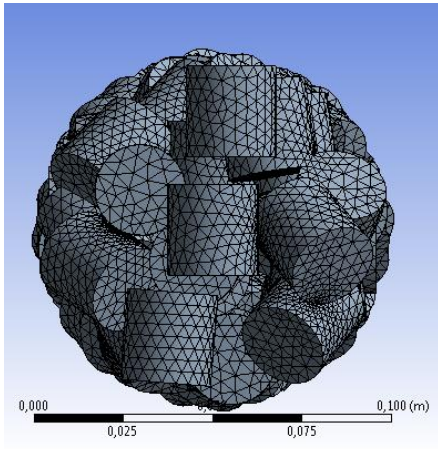


Figura 76: vista superior OH

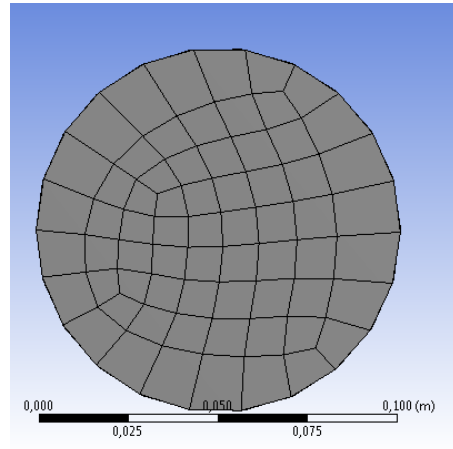


Figura 75: vista entrada región del fluido

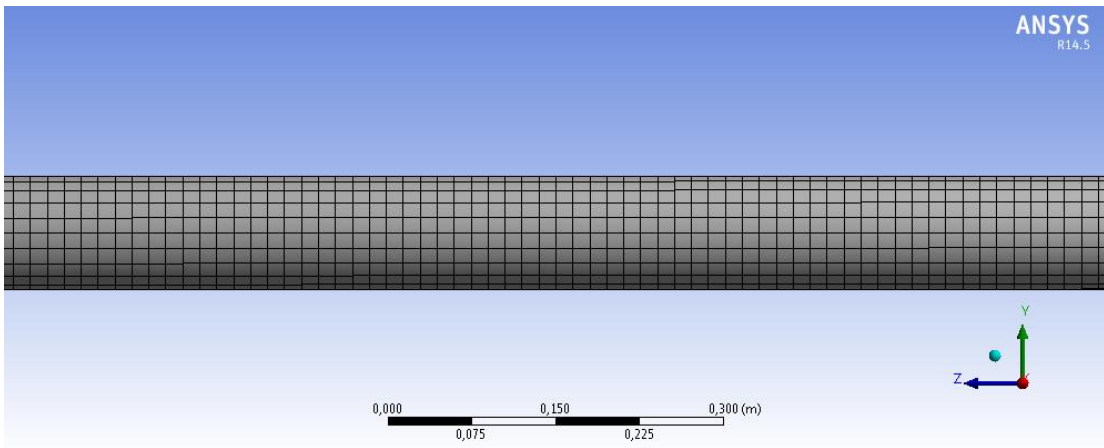


Figura 77: vista lateral región del fluido, empaque OH

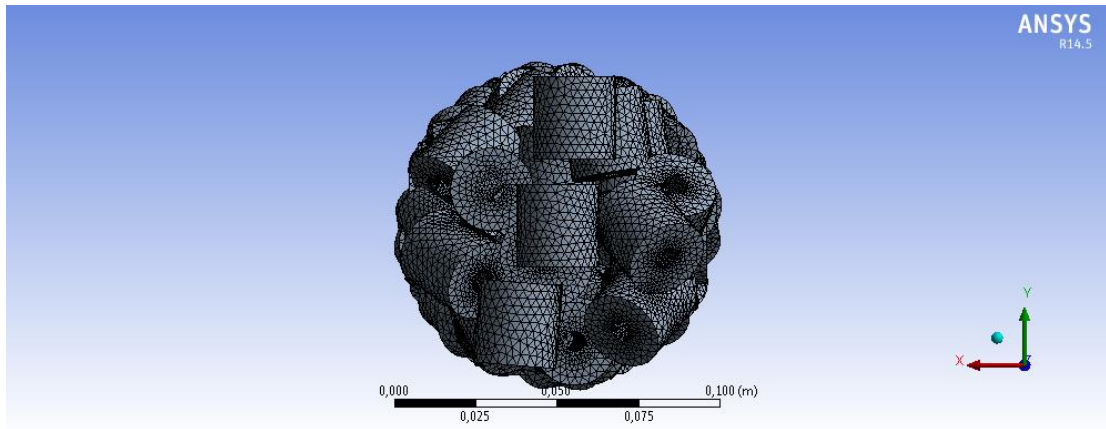


Figura 78: entrada empaque 1H

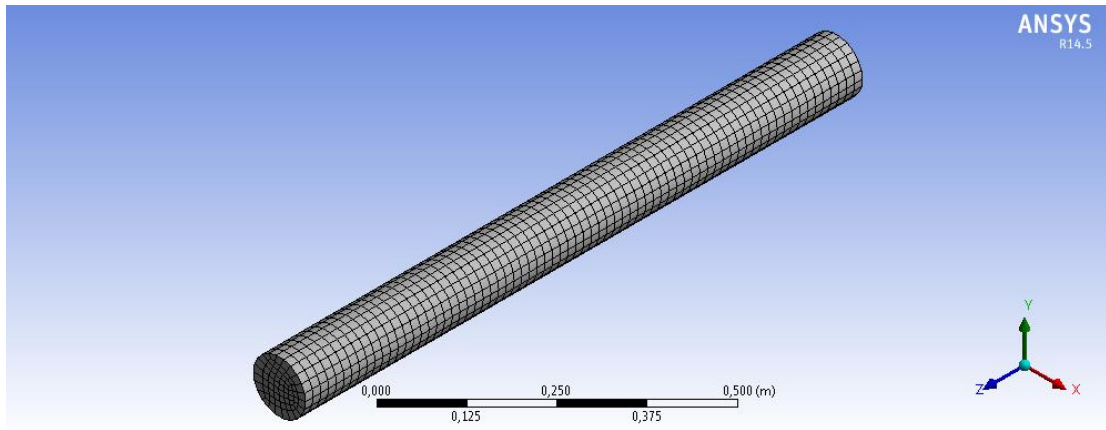


Figura 79: mallado región del fluido 1H

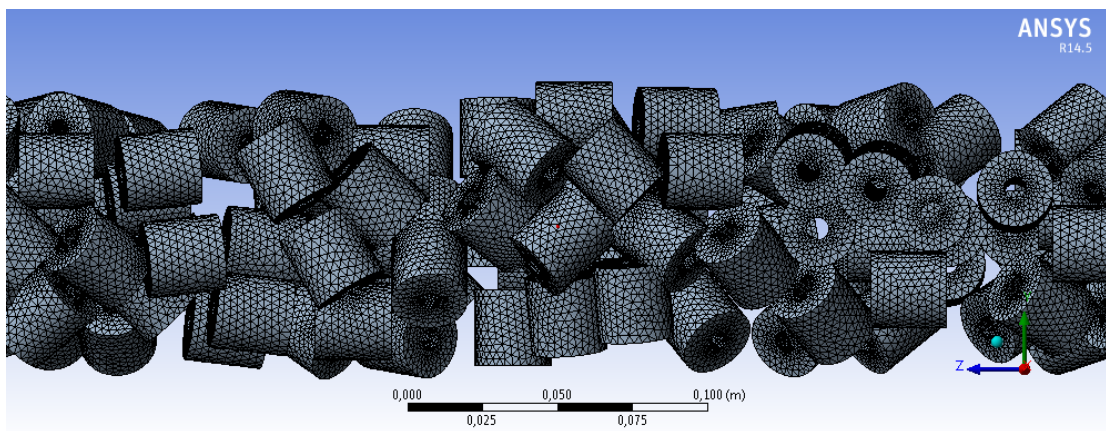


Figura 80: mallado empaque 1H

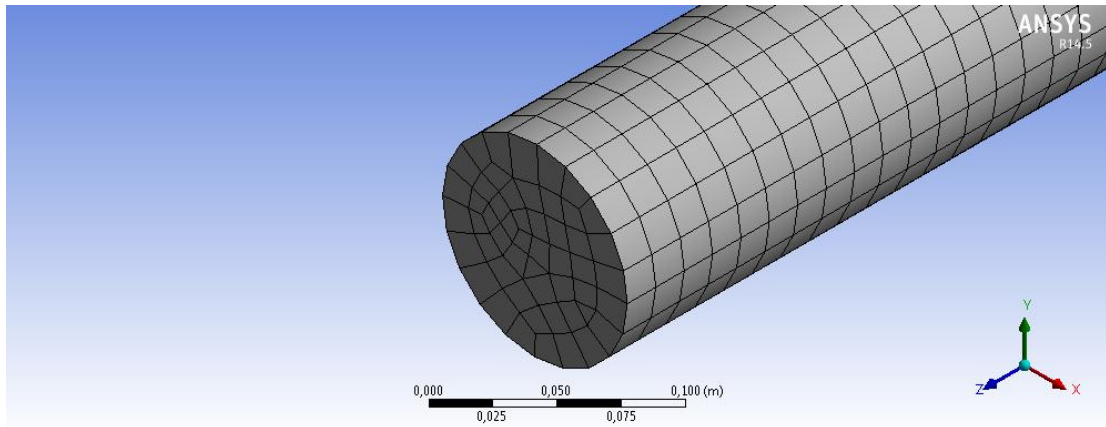


Figura 81: región del fluido empaque 4H

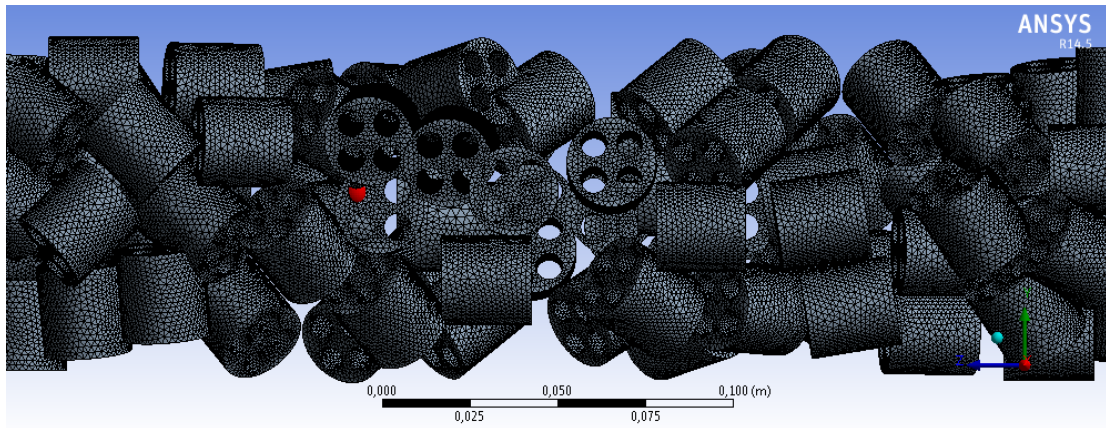


Figura 82: mallado empaque 4H

Tabla 25: Elementos y nodos para dominio del solido

| Indicador | Geometría | | | |
|----------------------------|-----------|---------|---------|--------------|
| | 0H | 1H | 4H | Estructurado |
| Numero de Nodos [adim] | 168728 | 649928 | 583380 | 178 |
| Número de Elementos [adim] | 1023860 | 3522092 | 2730838 | 6014 |

Tabla 26: radio elementos del dominio solido al dominio del fluido

| | Geometría | | | |
|---|-----------|-------|--------|--------------|
| | 0H | 1H | 4H | Estructurado |
| Radio número de elementos del dominio solido a número de elementos dominio fluido | 21,54 | 74,11 | 201,98 | 0,27 |

ANEXO 5 Capturas CFX-Pre

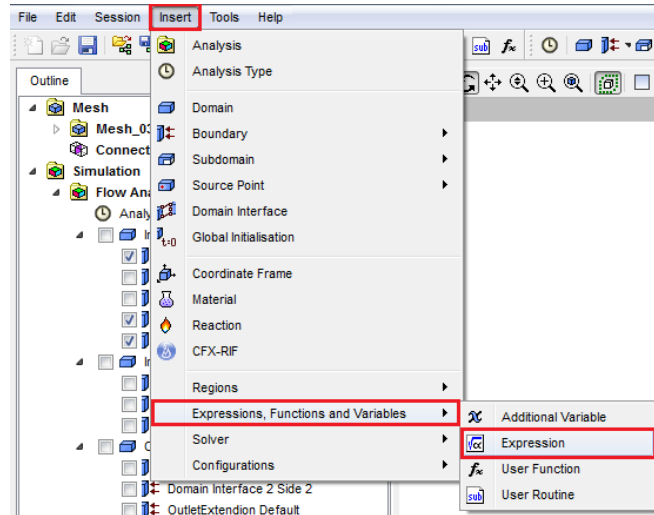


Figura 83: Introducción de una expresión

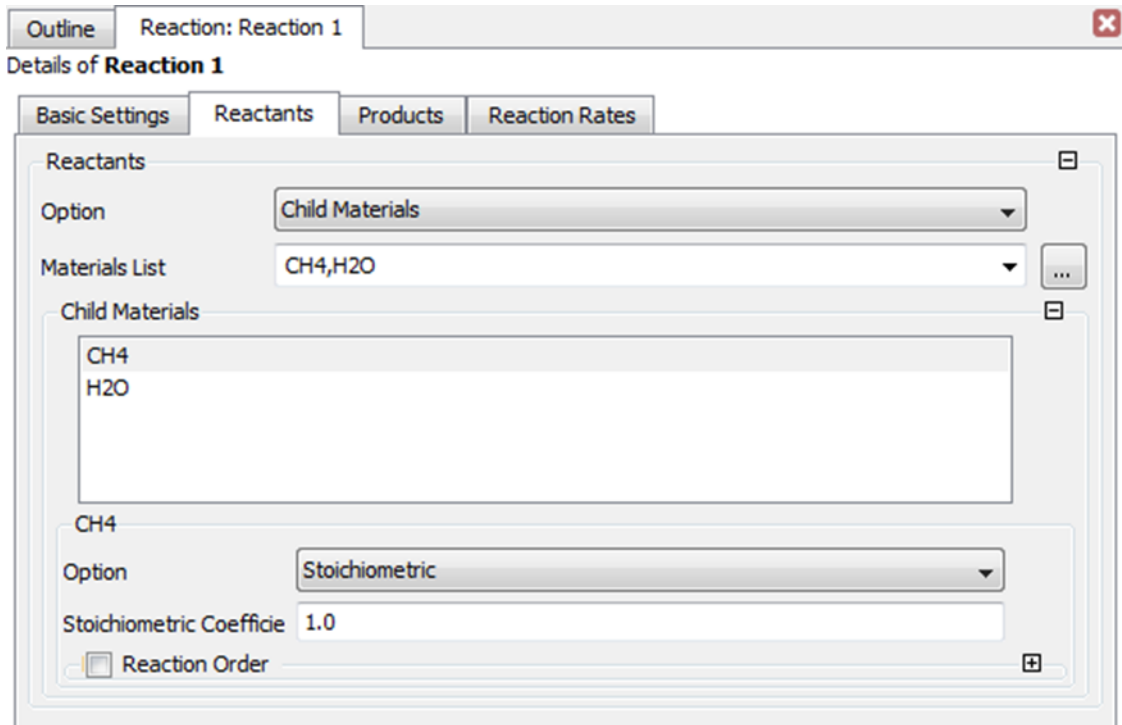


Figura 84: Configuración de reacción química

ANEXO 6
Script CEL CFX-Pre

CFX-14.5 build 2012.09.19-21.47

LIBRARY:

CEL:

EXPRESSIONS:

```

DEN = 1+(Kco*Pco)+(Kh2*Ph2)+(Kch4*Pch4)+(Kh2o)*(Ph2o/Ph2)
K1 = (4.70*10^16) [ kPa^2 ] *exp(-224000 [J mol^-1 ] / (R*T))
K2 = (1.14*10^-2) [ ] *exp(37300 [J mol^-1 ] / (R*T))
K3 = (5.37*10^14) [ kPa^2 ] *exp(-186700 [J mol^-1 ] / (R*T))
Kch4 = (6.64*10^-6) [ kPa^-1 ] *exp(38280 [J mol^-1 ] / (R*T))
Kco = (8.23*10^-7) [ kPa^-1 ] *exp(70650 [J mol^-1 ] / (R*T))
Kh2 = (6.12*10^-11) [ kPa^-1 ] *exp(82900 [J mol^-1 ] / (R*T))
Kh2o = (1.77*10^5) [ ] *exp(-88680 [J mol^-1 ] / (R*T))
Pch4 = Absolute Pressure *CH4.Molar Fraction*(10^-3) [kPa Pa^-1]
Pco = Absolute Pressure *CO.Molar Fraction*(10^-3) [kPa Pa^-1]
Pco2 = Absolute Pressure *CO2.Molar Fraction*(10^-3) [kPa Pa^-1]
Ph2 = Absolute Pressure *H2.Molar Fraction*(10^-3) [kPa Pa^-1]
Ph2o = Absolute Pressure *H2O.Molar Fraction*(10^-3) [kPa Pa^-1]
convRatetom3 = 18.8416 [kg m^-3]
k1 = (4.225*10^16) [kmol kPa^0.5 kg^-1 hr^-1 ]*exp(-240.100 [kJ mol^-1] \
/ (R*T))
k2 = (1.955*10^4) [kmol kPa kg^-1 hr^-1 ] *exp(-67.130 [kJ mol^-1 ] / \
(R*T))
k3 = (1.02*10^16) [kmol kPa^0.5 kg^-1 hr^-1 ] *exp(-243.900 [kJ mol^-1] \
/ (R*T))
r1 = convRatetom3*k1*(Pch4*Ph2o-((Pco*(Ph2^3))/K1))/((DEN^2)*(Ph2^2.5))
r2 = convRatetom3*k2*((Pco*Ph2o)-(Ph2*Pco2/K2))/((Ph2^3)*(DEN^2))
r3 = \
convRatetom3*k3*(Pch4*(Ph2o^2)-((Pco2*(Ph2^4))/K3))/((DEN^2)*(Ph2^3.5))

```

END

END

ADDITIONAL VARIABLE: DDEN

```

Option = Definition
Tensor Type = SCALAR
Units = [ ]
Variable Type = Specific

```

END

ADDITIONAL VARIABLE: KK1

```

Option = Definition
Tensor Type = SCALAR
Units = [kPa^2 ]
Variable Type = Specific

```

END

ADDITIONAL VARIABLE: KK2

```

Option = Definition
Tensor Type = SCALAR
Units = [ ]
Variable Type = Specific

```

END

ADDITIONAL VARIABLE: KK3

```

Option = Definition

```

Tensor Type = SCALAR
 Units = [kPa²]
 Variable Type = Specific
 END
 ADDITIONAL VARIABLE: KKch4
 Option = Definition
 Tensor Type = SCALAR
 Units = [kPa⁻¹]
 Variable Type = Specific
 END
 ADDITIONAL VARIABLE: KKco
 Option = Definition
 Tensor Type = SCALAR
 Units = [kPa⁻¹]
 Variable Type = Specific
 END
 ADDITIONAL VARIABLE: KKh2
 Option = Definition
 Tensor Type = SCALAR
 Units = [kPa⁻¹]
 Variable Type = Specific
 END
 ADDITIONAL VARIABLE: KKh2o
 Option = Definition
 Tensor Type = SCALAR
 Units = []
 Variable Type = Specific
 END
 ADDITIONAL VARIABLE: PPch4
 Option = Definition
 Tensor Type = SCALAR
 Units = [Pa]
 Variable Type = Specific
 END
 ADDITIONAL VARIABLE: PPco
 Option = Definition
 Tensor Type = SCALAR
 Units = [Pa]
 Variable Type = Specific
 END
 ADDITIONAL VARIABLE: PPco2
 Option = Definition
 Tensor Type = SCALAR
 Units = [Pa]
 Variable Type = Specific
 END
 ADDITIONAL VARIABLE: PPh2
 Option = Definition
 Tensor Type = SCALAR
 Units = [Pa]
 Variable Type = Specific
 END
 ADDITIONAL VARIABLE: PPh2o
 Option = Definition

```

Tensor Type = SCALAR
Units = [ Pa ]
Variable Type = Specific
END
ADDITIONAL VARIABLE: kk1
Option = Definition
Tensor Type = SCALAR
Units = [kmol kPa0.5 kg-1 hr-1 ]
Variable Type = Specific
END
ADDITIONAL VARIABLE: kk2
Option = Definition
Tensor Type = SCALAR
Units = [kmol kPa kg-1 hr-1 ]
Variable Type = Specific
END
ADDITIONAL VARIABLE: kk3
Option = Definition
Tensor Type = SCALAR
Units = [kmol kPa0.5 kg-1 hr-1 ]
Variable Type = Specific
END
ADDITIONAL VARIABLE: rr1
Option = Definition
Tensor Type = SCALAR
Units = [ m-3 s-1 mol ]
Variable Type = Specific
END
ADDITIONAL VARIABLE: rr2
Option = Definition
Tensor Type = SCALAR
Units = [m-3 s-1 mol ]
Variable Type = Specific
END
ADDITIONAL VARIABLE: rr3
Option = Definition
Tensor Type = SCALAR
Units = [m-3 s-1 mol ]
Variable Type = Specific
END
MATERIAL GROUP: Air Data
Group Description = Ideal gas and constant property air. Constant \
properties are for dry air at STP (0 C, 1 atm) and 25 C, 1 atm.
END
MATERIAL GROUP: CHT Solids
Group Description = Pure solid substances that can be used for conjugate \
heat transfer.
END
MATERIAL GROUP: Calorically Perfect Ideal Gases
Group Description = Ideal gases with constant specific heat capacity. \
Specific heat is evaluated at STP.
END
MATERIAL GROUP: Constant Property Gases
Group Description = Gaseous substances with constant properties. \

```

Properties are calculated at STP (0C and 1 atm). Can be combined with \ NASA SP-273 materials for combustion modelling.

END

MATERIAL GROUP: Constant Property Liquids
 Group Description = Liquid substances with constant properties.

END

MATERIAL GROUP: Dry Peng Robinson
 Group Description = Materials with properties specified using the built \ in Peng Robinson equation of state. Suitable for dry real gas modelling.

END

MATERIAL GROUP: Dry Redlich Kwong
 Group Description = Materials with properties specified using the built \ in Redlich Kwong equation of state. Suitable for dry real gas modelling.

END

MATERIAL GROUP: Dry Soave Redlich Kwong
 Group Description = Materials with properties specified using the built \ in Soave Redlich Kwong equation of state. Suitable for dry real gas \ modelling.

END

MATERIAL GROUP: Dry Steam
 Group Description = Materials with properties specified using the IAPWS \ equation of state. Suitable for dry steam modelling.

END

MATERIAL GROUP: Gas Phase Combustion
 Group Description = Ideal gas materials which can be use for gas phase \ combustion. Ideal gas specific heat coefficients are specified using \ the NASA SP-273 format.

END

MATERIAL GROUP: IAPWS IF97
 Group Description = Liquid, vapour and binary mixture materials which use \ the IAPWS IF-97 equation of state. Materials are suitable for \ compressible liquids, phase change calculations and dry steam flows.

END

MATERIAL GROUP: Interphase Mass Transfer
 Group Description = Materials with reference properties suitable for \ performing either Eulerian or Lagrangian multiphase mass transfer \ problems. Examples include cavitation, evaporation or condensation.

END

MATERIAL GROUP: Liquid Phase Combustion
 Group Description = Liquid and homogenous binary mixture materials which \ can be included with Gas Phase Combustion materials if combustion \ modelling also requires phase change (eg: evaporation) for certain \ components.

END

MATERIAL GROUP: Particle Solids
 Group Description = Pure solid substances that can be used for particle \ tracking

END

MATERIAL GROUP: Peng Robinson Dry Hydrocarbons
 Group Description = Common hydrocarbons which use the Peng Robinson \ equation of state. Suitable for dry real gas models.

END

MATERIAL GROUP: Peng Robinson Dry Refrigerants
 Group Description = Common refrigerants which use the Peng Robinson \

equation of state. Suitable for dry real gas models.
 END
 MATERIAL GROUP: Peng Robinson Dry Steam
 Group Description = Water materials which use the Peng Robinson equation \ of state. Suitable for dry steam modelling.
 END
 MATERIAL GROUP: Peng Robinson Wet Hydrocarbons
 Group Description = Common hydrocarbons which use the Peng Robinson \ equation of state. Suitable for condensing real gas models.
 END
 MATERIAL GROUP: Peng Robinson Wet Refrigerants
 Group Description = Common refrigerants which use the Peng Robinson \ equation of state. Suitable for condensing real gas models.
 END
 MATERIAL GROUP: Peng Robinson Wet Steam
 Group Description = Water materials which use the Peng Robinson equation \ of state. Suitable for condensing steam modelling.
 END
 MATERIAL GROUP: Real Gas Combustion
 Group Description = Real gas materials which can be use for gas phase \ combustion. Ideal gas specific heat coefficients are specified using \ the NASA SP-273 format.
 END
 MATERIAL GROUP: Redlich Kwong Dry Hydrocarbons
 Group Description = Common hydrocarbons which use the Redlich Kwong \ equation of state. Suitable for dry real gas models.
 END
 MATERIAL GROUP: Redlich Kwong Dry Refrigerants
 Group Description = Common refrigerants which use the Redlich Kwong \ equation of state. Suitable for dry real gas models.
 END
 MATERIAL GROUP: Redlich Kwong Dry Steam
 Group Description = Water materials which use the Redlich Kwong equation \ of state. Suitable for dry steam modelling.
 END
 MATERIAL GROUP: Redlich Kwong Wet Hydrocarbons
 Group Description = Common hydrocarbons which use the Redlich Kwong \ equation of state. Suitable for condensing real gas models.
 END
 MATERIAL GROUP: Redlich Kwong Wet Refrigerants
 Group Description = Common refrigerants which use the Redlich Kwong \ equation of state. Suitable for condensing real gas models.
 END
 MATERIAL GROUP: Redlich Kwong Wet Steam
 Group Description = Water materials which use the Redlich Kwong equation \ of state. Suitable for condensing steam modelling.
 END
 MATERIAL GROUP: Soave Redlich Kwong Dry Hydrocarbons
 Group Description = Common hydrocarbons which use the Soave Redlich Kwong \ equation of state. Suitable for dry real gas models.
 END
 MATERIAL GROUP: Soave Redlich Kwong Dry Refrigerants
 Group Description = Common refrigerants which use the Soave Redlich Kwong \ equation of state. Suitable for dry real gas models.

END
MATERIAL GROUP: Soave Redlich Kwong Dry Steam
Group Description = Water materials which use the Soave Redlich Kwong \
equation of state. Suitable for dry steam modelling.
END
MATERIAL GROUP: Soave Redlich Kwong Wet Hydrocarbons
Group Description = Common hydrocarbons which use the Soave Redlich Kwong \
equation of state. Suitable for condensing real gas models.
END
MATERIAL GROUP: Soave Redlich Kwong Wet Refrigerants
Group Description = Common refrigerants which use the Soave Redlich Kwong \
equation of state. Suitable for condensing real gas models.
END
MATERIAL GROUP: Soave Redlich Kwong Wet Steam
Group Description = Water materials which use the Soave Redlich Kwong \
equation of state. Suitable for condensing steam modelling.
END
MATERIAL GROUP: Soot
Group Description = Solid substances that can be used when performing \
soot modelling
END
MATERIAL GROUP: User
Group Description = Materials that are defined by the user
END
MATERIAL GROUP: Water Data
Group Description = Liquid and vapour water materials with constant \
properties. Can be combined with NASA SP-273 materials for combustion \
modelling.
END
MATERIAL GROUP: Wet Peng Robinson
Group Description = Materials with properties specified using the built \
in Peng Robinson equation of state. Suitable for wet real gas modelling.
END
MATERIAL GROUP: Wet Redlich Kwong
Group Description = Materials with properties specified using the built \
in Redlich Kwong equation of state. Suitable for wet real gas modelling.
END
MATERIAL GROUP: Wet Soave Redlich Kwong
Group Description = Materials with properties specified using the built \
in Soave Redlich Kwong equation of state. Suitable for wet real gas \
modelling.
END
MATERIAL GROUP: Wet Steam
Group Description = Materials with properties specified using the IAPWS \
equation of state. Suitable for wet steam modelling.
END
MATERIAL: Air Ideal Gas
Material Description = Air Ideal Gas (constant Cp)
Material Group = Air Data, Calorically Perfect Ideal Gases
Option = Pure Substance
Thermodynamic State = Gas
PROPERTIES:
Option = General Material
EQUATION OF STATE:

Molar Mass = 28.96 [kg kmol⁻¹]
 Option = Ideal Gas
 END
 SPECIFIC HEAT CAPACITY:
 Option = Value
 Specific Heat Capacity = 1.0044E+03 [J kg⁻¹ K⁻¹]
 Specific Heat Type = Constant Pressure
 END
 REFERENCE STATE:
 Option = Specified Point
 Reference Pressure = 1 [atm]
 Reference Specific Enthalpy = 0. [J/kg]
 Reference Specific Entropy = 0. [J/kg/K]
 Reference Temperature = 25 [C]
 END
 DYNAMIC VISCOSITY:
 Dynamic Viscosity = 1.831E-05 [kg m⁻¹ s⁻¹]
 Option = Value
 END
 THERMAL CONDUCTIVITY:
 Option = Value
 Thermal Conductivity = 2.61E-2 [W m⁻¹ K⁻¹]
 END
 ABSORPTION COEFFICIENT:
 Absorption Coefficient = 0.01 [m⁻¹]
 Option = Value
 END
 SCATTERING COEFFICIENT:
 Option = Value
 Scattering Coefficient = 0.0 [m⁻¹]
 END
 REFRACTIVE INDEX:
 Option = Value
 Refractive Index = 1.0 [m m⁻¹]
 END
 END
 MATERIAL: Air at 25 C
 Material Description = Air at 25 C and 1 atm (dry)
 Material Group = Air Data, Constant Property Gases
 Option = Pure Substance
 Thermodynamic State = Gas
 PROPERTIES:
 Option = General Material
 EQUATION OF STATE:
 Density = 1.185 [kg m⁻³]
 Molar Mass = 28.96 [kg kmol⁻¹]
 Option = Value
 END
 SPECIFIC HEAT CAPACITY:
 Option = Value
 Specific Heat Capacity = 1.0044E+03 [J kg⁻¹ K⁻¹]
 Specific Heat Type = Constant Pressure
 END

REFERENCE STATE:
 Option = Specified Point
 Reference Pressure = 1 [atm]
 Reference Specific Enthalpy = 0. [J/kg]
 Reference Specific Entropy = 0. [J/kg/K]
 Reference Temperature = 25 [C]
 END
 DYNAMIC VISCOSITY:
 Dynamic Viscosity = 1.831E-05 [kg m⁻¹ s⁻¹]
 Option = Value
 END
 THERMAL CONDUCTIVITY:
 Option = Value
 Thermal Conductivity = 2.61E-02 [W m⁻¹ K⁻¹]
 END
 ABSORPTION COEFFICIENT:
 Absorption Coefficient = 0.01 [m⁻¹]
 Option = Value
 END
 SCATTERING COEFFICIENT:
 Option = Value
 Scattering Coefficient = 0.0 [m⁻¹]
 END
 REFRACTIVE INDEX:
 Option = Value
 Refractive Index = 1.0 [m m⁻¹]
 END
 THERMAL EXPANSIVITY:
 Option = Value
 Thermal Expansivity = 0.003356 [K⁻¹]
 END
 END
 MATERIAL: Aluminium
 Material Group = CHT Solids, Particle Solids
 Option = Pure Substance
 Thermodynamic State = Solid
 PROPERTIES:
 Option = General Material
 EQUATION OF STATE:
 Density = 2702 [kg m⁻³]
 Molar Mass = 26.98 [kg kmol⁻¹]
 Option = Value
 END
 SPECIFIC HEAT CAPACITY:
 Option = Value
 Specific Heat Capacity = 9.03E+02 [J kg⁻¹ K⁻¹]
 END
 REFERENCE STATE:
 Option = Specified Point
 Reference Specific Enthalpy = 0 [J/kg]
 Reference Specific Entropy = 0 [J/kg/K]
 Reference Temperature = 25 [C]
 END

THERMAL CONDUCTIVITY:
 Option = Value
 Thermal Conductivity = 237 [W m⁻¹ K⁻¹]
 END
 END
 END
 MATERIAL: CH4
 Material Description = Methane CH4
 Material Group = Gas Phase Combustion
 Option = Pure Substance
 Thermodynamic State = Gas
 PROPERTIES:
 Option = General Material
 EQUATION OF STATE:
 Molar Mass = 16.04 [kg kmol⁻¹]
 Option = Ideal Gas
 END
 SPECIFIC HEAT CAPACITY:
 Option = NASA Format
 LOWER INTERVAL COEFFICIENTS:
 NASA a1 = 0.07787415E+01 []
 NASA a2 = 0.01747668E+00 [K⁻¹]
 NASA a3 = -0.02783409E-03 [K⁻²]
 NASA a4 = 0.03049708E-06 [K⁻³]
 NASA a5 = -0.01223931E-09 [K⁻⁴]
 NASA a6 = -0.09825229E+05 [K]
 NASA a7 = 0.01372219E+03 []
 END
 TEMPERATURE LIMITS:
 Lower Temperature = 300 [K]
 Midpoint Temperature = 1000 [K]
 Upper Temperature = 5000 [K]
 END
 UPPER INTERVAL COEFFICIENTS:
 NASA a1 = 0.01683479E+02 []
 NASA a2 = 0.01023724E+00 [K⁻¹]
 NASA a3 = -0.03875129E-04 [K⁻²]
 NASA a4 = 0.06785585E-08 [K⁻³]
 NASA a5 = -0.04503423E-12 [K⁻⁴]
 NASA a6 = -0.01008079E+06 [K]
 NASA a7 = 0.09623395E+02 []
 END
 END
 REFERENCE STATE:
 Option = NASA Format
 Reference Pressure = 1 [atm]
 Reference Temperature = 25 [C]
 END
 DYNAMIC VISCOSITY:
 Dynamic Viscosity = 11.1E-06 [kg m⁻¹ s⁻¹]
 Option = Value
 END
 THERMAL CONDUCTIVITY:
 Option = Value

Thermal Conductivity = 343E-04 [W m⁻¹ K⁻¹]
 END
 ABSORPTION COEFFICIENT:
 Absorption Coefficient = 1.0 [m⁻¹]
 Option = Value
 END
 SCATTERING COEFFICIENT:
 Option = Value
 Scattering Coefficient = 0.0 [m⁻¹]
 END
 REFRACTIVE INDEX:
 Option = Value
 Refractive Index = 1.0 [m m⁻¹]
 END
 END
 MATERIAL: CO
 Material Description = Carbon Monoxide CO
 Material Group = Gas Phase Combustion
 Option = Pure Substance
 Thermodynamic State = Gas
 PROPERTIES:
 Option = General Material
 EQUATION OF STATE:
 Molar Mass = 28.01 [kg kmol⁻¹]
 Option = Ideal Gas
 END
 SPECIFIC HEAT CAPACITY:
 Option = NASA Format
 LOWER INTERVAL COEFFICIENTS:
 NASA a1 = 0.03262452E+02 []
 NASA a2 = 0.01511941E-01 [K⁻¹]
 NASA a3 = -0.03881755E-04 [K⁻²]
 NASA a4 = 0.05581944E-07 [K⁻³]
 NASA a5 = -0.02474951E-10 [K⁻⁴]
 NASA a6 = -0.01431054E+06 [K]
 NASA a7 = 0.04848897E+02 []
 END
 TEMPERATURE LIMITS:
 Lower Temperature = 300 [K]
 Midpoint Temperature = 1000 [K]
 Upper Temperature = 5000 [K]
 END
 UPPER INTERVAL COEFFICIENTS:
 NASA a1 = 0.03025078E+02 []
 NASA a2 = 0.01442689E-01 [K⁻¹]
 NASA a3 = -0.05630828E-05 [K⁻²]
 NASA a4 = 0.01018581E-08 [K⁻³]
 NASA a5 = -0.06910952E-13 [K⁻⁴]
 NASA a6 = -0.01426835E+06 [K]
 NASA a7 = 0.06108218E+02 []
 END
 END
 REFERENCE STATE:

Option = NASA Format
 Reference Pressure = 1 [atm]
 Reference Temperature = 25 [C]
 END
 DYNAMIC VISCOSITY:
 Dynamic Viscosity = 16.6E-06 [kg m⁻¹ s⁻¹]
 Option = Value
 END
 THERMAL CONDUCTIVITY:
 Option = Value
 Thermal Conductivity = 251E-04 [W m⁻¹ K⁻¹]
 END
 ABSORPTION COEFFICIENT:
 Absorption Coefficient = 1.0 [m⁻¹]
 Option = Value
 END
 SCATTERING COEFFICIENT:
 Option = Value
 Scattering Coefficient = 0.0 [m⁻¹]
 END
 REFRACTIVE INDEX:
 Option = Value
 Refractive Index = 1.0 [m m⁻¹]
 END
 END
 MATERIAL: CO2
 Material Description = Carbon Dioxide CO2
 Material Group = Gas Phase Combustion
 Option = Pure Substance
 Thermodynamic State = Gas
 PROPERTIES:
 Option = General Material
 EQUATION OF STATE:
 Molar Mass = 44.01 [kg kmol⁻¹]
 Option = Ideal Gas
 END
 SPECIFIC HEAT CAPACITY:
 Option = NASA Format
 LOWER INTERVAL COEFFICIENTS:
 NASA a1 = 0.02275725E+02 []
 NASA a2 = 0.09922072E-01 [K⁻¹]
 NASA a3 = -0.01040911E-03 [K⁻²]
 NASA a4 = 0.06866687E-07 [K⁻³]
 NASA a5 = -0.02117280E-10 [K⁻⁴]
 NASA a6 = -0.04837314E+06 [K]
 NASA a7 = 0.01018849E+03 []
 END
 TEMPERATURE LIMITS:
 Lower Temperature = 300 [K]
 Midpoint Temperature = 1000 [K]
 Upper Temperature = 5000 [K]
 END
 UPPER INTERVAL COEFFICIENTS:

NASA a1 = 0.04453623E+02 []
 NASA a2 = 0.03140169E-01 [K^-1]
 NASA a3 = -0.01278411E-04 [K^-2]
 NASA a4 = 0.02393997E-08 [K^-3]
 NASA a5 = -0.01669033E-12 [K^-4]
 NASA a6 = -0.04896696E+06 [K]
 NASA a7 = -0.09553959E+01 []
 END
 END
 REFERENCE STATE:
 Option = NASA Format
 Reference Pressure = 1 [atm]
 Reference Temperature = 25 [C]
 END
 DYNAMIC VISCOSITY:
 Dynamic Viscosity = 14.9E-06 [kg m^-1 s^-1]
 Option = Value
 END
 THERMAL CONDUCTIVITY:
 Option = Value
 Thermal Conductivity = 145E-04 [W m^-1 K^-1]
 END
 ABSORPTION COEFFICIENT:
 Absorption Coefficient = 1.0 [m^-1]
 Option = Value
 END
 SCATTERING COEFFICIENT:
 Option = Value
 Scattering Coefficient = 0.0 [m^-1]
 END
 REFRACTIVE INDEX:
 Option = Value
 Refractive Index = 1.0 [m m^-1]
 END
 END
 END
 MATERIAL: Copper
 Material Group = CHT Solids, Particle Solids
 Option = Pure Substance
 Thermodynamic State = Solid
 PROPERTIES:
 Option = General Material
 EQUATION OF STATE:
 Density = 8933 [kg m^-3]
 Molar Mass = 63.55 [kg kmol^-1]
 Option = Value
 END
 SPECIFIC HEAT CAPACITY:
 Option = Value
 Specific Heat Capacity = 3.85E+02 [J kg^-1 K^-1]
 END
 REFERENCE STATE:
 Option = Specified Point
 Reference Specific Enthalpy = 0 [J/kg]

Reference Specific Entropy = 0 [J/kg/K]
 Reference Temperature = 25 [C]
 END
 THERMAL CONDUCTIVITY:
 Option = Value
 Thermal Conductivity = 401.0 [W m⁻¹ K⁻¹]
 END
 END
 MATERIAL: H2
 Material Description = Hydrogen H2
 Material Group = Gas Phase Combustion
 Option = Pure Substance
 Thermodynamic State = Gas
 PROPERTIES:
 Option = General Material
 EQUATION OF STATE:
 Molar Mass = 2.016 [kg kmol⁻¹]
 Option = Ideal Gas
 END
 SPECIFIC HEAT CAPACITY:
 Option = NASA Format
 LOWER INTERVAL COEFFICIENTS:
 NASA a1 = 0.03298124E+02 []
 NASA a2 = 0.08249442E-02 [K⁻¹]
 NASA a3 = -0.08143015E-05 [K⁻²]
 NASA a4 = -0.09475434E-09 [K⁻³]
 NASA a5 = 0.04134872E-11 [K⁻⁴]
 NASA a6 = -0.01012521E+05 [K]
 NASA a7 = -0.03294094E+02 []
 END
 TEMPERATURE LIMITS:
 Lower Temperature = 300 [K]
 Midpoint Temperature = 1000 [K]
 Upper Temperature = 5000 [K]
 END
 UPPER INTERVAL COEFFICIENTS:
 NASA a1 = 0.02991423E+02 []
 NASA a2 = 0.07000644E-02 [K⁻¹]
 NASA a3 = -0.05633829E-06 [K⁻²]
 NASA a4 = -0.09231578E-10 [K⁻³]
 NASA a5 = 0.01582752E-13 [K⁻⁴]
 NASA a6 = -0.08350340E+04 [K]
 NASA a7 = -0.01355110E+02 []
 END
 END
 REFERENCE STATE:
 Option = NASA Format
 Reference Pressure = 1 [atm]
 Reference Temperature = 25 [C]
 END
 DYNAMIC VISCOSITY:
 Dynamic Viscosity = 8.8E-06 [kg m⁻¹ s⁻¹]
 Option = Value

END
 THERMAL CONDUCTIVITY:
 Option = Value
 Thermal Conductivity = 1.809E-01 [W m⁻¹ K⁻¹]
 END
 ABSORPTION COEFFICIENT:
 Absorption Coefficient = 1.0 [m⁻¹]
 Option = Value
 END
 SCATTERING COEFFICIENT:
 Option = Value
 Scattering Coefficient = 0.0 [m⁻¹]
 END
 REFRACTIVE INDEX:
 Option = Value
 Refractive Index = 1.0 [m m⁻¹]
 END
 END
 MATERIAL: H2O
 Material Description = Water Vapour
 Material Group = Gas Phase Combustion, Interphase Mass Transfer, Water Data
 Option = Pure Substance
 Thermodynamic State = Gas
 PROPERTIES:
 Option = General Material
 EQUATION OF STATE:
 Molar Mass = 18.02 [kg kmol⁻¹]
 Option = Ideal Gas
 END
 SPECIFIC HEAT CAPACITY:
 Option = NASA Format
 LOWER INTERVAL COEFFICIENTS:
 NASA a1 = 0.03386842E+02 []
 NASA a2 = 0.03474982E-01 [K⁻¹]
 NASA a3 = -0.06354696E-04 [K⁻²]
 NASA a4 = 0.06968581E-07 [K⁻³]
 NASA a5 = -0.02506588E-10 [K⁻⁴]
 NASA a6 = -0.03020811E+06 [K]
 NASA a7 = 0.02590233E+02 []
 END
 TEMPERATURE LIMITS:
 Lower Temperature = 300 [K]
 Midpoint Temperature = 1000 [K]
 Upper Temperature = 5000 [K]
 END
 UPPER INTERVAL COEFFICIENTS:
 NASA a1 = 0.02672146E+02 []
 NASA a2 = 0.03056293E-01 [K⁻¹]
 NASA a3 = -0.08730260E-05 [K⁻²]
 NASA a4 = 0.01200996E-08 [K⁻³]
 NASA a5 = -0.06391618E-13 [K⁻⁴]
 NASA a6 = -0.02989921E+06 [K]
 NASA a7 = 0.06862817E+02 []

```

END
END
REFERENCE STATE:
  Option = NASA Format
  Reference Pressure = 1 [atm]
  Reference Temperature = 25 [C]
END
DYNAMIC VISCOSITY:
  Dynamic Viscosity = 9.4E-06 [kg m^-1 s^-1]
  Option = Value
END
THERMAL CONDUCTIVITY:
  Option = Value
  Thermal Conductivity = 193E-04 [W m^-1 K^-1]
END
ABSORPTION COEFFICIENT:
  Absorption Coefficient = 1.0 [m^-1]
  Option = Value
END
SCATTERING COEFFICIENT:
  Option = Value
  Scattering Coefficient = 0.0 [m^-1]
END
REFRACTIVE INDEX:
  Option = Value
  Refractive Index = 1.0 [m m^-1]
END
END
END
MATERIAL: Soot
  Material Group = Soot
  Option = Pure Substance
  Thermodynamic State = Solid
PROPERTIES:
  Option = General Material
EQUATION OF STATE:
  Density = 2000 [kg m^-3]
  Molar Mass = 12 [kg kmol^-1]
  Option = Value
END
REFERENCE STATE:
  Option = Automatic
END
ABSORPTION COEFFICIENT:
  Absorption Coefficient = 0 [m^-1]
  Option = Value
END
END
END
MATERIAL: Steel
  Material Group = CHT Solids, Particle Solids
  Option = Pure Substance
  Thermodynamic State = Solid
PROPERTIES:

```

Option = General Material
 EQUATION OF STATE:
 Density = 7854 [kg m⁻³]
 Molar Mass = 55.85 [kg kmol⁻¹]
 Option = Value
 END
 SPECIFIC HEAT CAPACITY:
 Option = Value
 Specific Heat Capacity = 4.34E+02 [J kg⁻¹ K⁻¹]
 END
 REFERENCE STATE:
 Option = Specified Point
 Reference Specific Enthalpy = 0 [J/kg]
 Reference Specific Entropy = 0 [J/kg/K]
 Reference Temperature = 25 [C]
 END
 THERMAL CONDUCTIVITY:
 Option = Value
 Thermal Conductivity = 60.5 [W m⁻¹ K⁻¹]
 END
 END
 MATERIAL: Water
 Material Description = Water (liquid)
 Material Group = Water Data, Constant Property Liquids
 Option = Pure Substance
 Thermodynamic State = Liquid
 PROPERTIES:
 Option = General Material
 EQUATION OF STATE:
 Density = 997.0 [kg m⁻³]
 Molar Mass = 18.02 [kg kmol⁻¹]
 Option = Value
 END
 SPECIFIC HEAT CAPACITY:
 Option = Value
 Specific Heat Capacity = 4181.7 [J kg⁻¹ K⁻¹]
 Specific Heat Type = Constant Pressure
 END
 REFERENCE STATE:
 Option = Specified Point
 Reference Pressure = 1 [atm]
 Reference Specific Enthalpy = 0.0 [J/kg]
 Reference Specific Entropy = 0.0 [J/kg/K]
 Reference Temperature = 25 [C]
 END
 DYNAMIC VISCOSITY:
 Dynamic Viscosity = 8.899E-4 [kg m⁻¹ s⁻¹]
 Option = Value
 END
 THERMAL CONDUCTIVITY:
 Option = Value
 Thermal Conductivity = 0.6069 [W m⁻¹ K⁻¹]
 END

ABSORPTION COEFFICIENT:
 Absorption Coefficient = 1.0 [m⁻¹]
 Option = Value
 END
 SCATTERING COEFFICIENT:
 Option = Value
 Scattering Coefficient = 0.0 [m⁻¹]
 END
 REFRACTIVE INDEX:
 Option = Value
 Refractive Index = 1.0 [m m⁻¹]
 END
 THERMAL EXPANSIVITY:
 Option = Value
 Thermal Expansivity = 2.57E-04 [K⁻¹]
 END
 END
 MATERIAL: Water Ideal Gas
 Material Description = Water Vapour Ideal Gas (100 C and 1 atm)
 Material Group = Calorically Perfect Ideal Gases, Water Data
 Option = Pure Substance
 Thermodynamic State = Gas
 PROPERTIES:
 Option = General Material
 EQUATION OF STATE:
 Molar Mass = 18.02 [kg kmol⁻¹]
 Option = Ideal Gas
 END
 SPECIFIC HEAT CAPACITY:
 Option = Value
 Specific Heat Capacity = 2080.1 [J kg⁻¹ K⁻¹]
 Specific Heat Type = Constant Pressure
 END
 REFERENCE STATE:
 Option = Specified Point
 Reference Pressure = 1.014 [bar]
 Reference Specific Enthalpy = 0. [J/kg]
 Reference Specific Entropy = 0. [J/kg/K]
 Reference Temperature = 100 [C]
 END
 DYNAMIC VISCOSITY:
 Dynamic Viscosity = 9.4E-06 [kg m⁻¹ s⁻¹]
 Option = Value
 END
 THERMAL CONDUCTIVITY:
 Option = Value
 Thermal Conductivity = 193E-04 [W m⁻¹ K⁻¹]
 END
 ABSORPTION COEFFICIENT:
 Absorption Coefficient = 1.0 [m⁻¹]
 Option = Value
 END
 SCATTERING COEFFICIENT:

```

Option = Value
Scattering Coefficient = 0.0 [m^-1]
END
REFRACTIVE INDEX:
Option = Value
Refractive Index = 1.0 [m m^-1]
END
END
END
MATERIAL: mixture
Material Group = User
Materials List = CH4,CO,CO2,H2,H2O
Option = Fixed Composition Mixture
CHILD MATERIAL: CH4
Mass Fraction = 0.1966
Option = Mass Fraction
END
CHILD MATERIAL: CO
Mass Fraction = 0.0007
Option = Mass Fraction
END
CHILD MATERIAL: CO2
Mass Fraction = 0.1753
Option = Mass Fraction
END
CHILD MATERIAL: H2
Mass Fraction = 0.0005
Option = Mass Fraction
END
CHILD MATERIAL: H2O
Mass Fraction = 0.6269
Option = Mass Fraction
END
END
MATERIAL: reactmixture
Material Group = User
Materials List = CH4,CO,CO2,H2,H2O
Option = Variable Composition Mixture
END
MATERIAL: reactmixture2
Material Group = User
Option = Reacting Mixture
Reactions List = Reaction 1,Reaction 2,Reaction 3
END
MATERIAL: solid support
Material Group = User
Option = Pure Substance
Thermodynamic State = Solid
PROPERTIES:
Option = General Material
EQUATION OF STATE:
Density = 1947 [g cm^-3]
Molar Mass = 142.27 [kg kmol^-1]
Option = Value

```

```

END
SPECIFIC HEAT CAPACITY:
  Option = Value
  Specific Heat Capacity = 1000 [J kg^-1 K^-1]
END
THERMAL CONDUCTIVITY:
  Option = Value
  Thermal Conductivity = 2 [W m^-1 K^-1]
END
END
END
REACTION: Reaction 1
  Option = Single Step
COMBUSTION MODEL:
  Option = Finite Rate Chemistry
END
FORWARD REACTION RATE:
  Option = Expression
  Reaction Rate = r1
END
PRODUCTS:
  Materials List = CO,H2
  Option = Child Materials
CHILD MATERIAL: CO
  Option = Stoichiometric
  Stoichiometric Coefficient = 1.0
END
CHILD MATERIAL: H2
  Option = Stoichiometric
  Stoichiometric Coefficient = 3
END
END
REACTANTS:
  Materials List = CH4,H2O
  Option = Child Materials
CHILD MATERIAL: CH4
  Option = Stoichiometric
  Stoichiometric Coefficient = 1.0
END
CHILD MATERIAL: H2O
  Option = Stoichiometric
  Stoichiometric Coefficient = 1.0
END
END
END
REACTION: Reaction 2
  Option = Single Step
COMBUSTION MODEL:
  Option = Finite Rate Chemistry
END
FORWARD REACTION RATE:
  Option = Expression
  Reaction Rate = r2
END

```

PRODUCTS:
 Materials List = CO2,H2
 Option = Child Materials
 CHILD MATERIAL: CO2
 Option = Stoichiometric
 Stoichiometric Coefficient = 1.0
 END
 CHILD MATERIAL: H2
 Option = Stoichiometric
 Stoichiometric Coefficient = 1.0
 END
 END
 REACTANTS:
 Materials List = CO,H2O
 Option = Child Materials
 CHILD MATERIAL: CO
 Option = Stoichiometric
 Stoichiometric Coefficient = 1.0
 END
 CHILD MATERIAL: H2O
 Option = Stoichiometric
 Stoichiometric Coefficient = 1.0
 END
 END
 REACTION: Reaction 3
 Option = Single Step
 COMBUSTION MODEL:
 Option = Finite Rate Chemistry
 END
 FORWARD REACTION RATE:
 Option = Expression
 Reaction Rate = r3
 END
 PRODUCTS:
 Materials List = CO2,H2
 Option = Child Materials
 CHILD MATERIAL: CO2
 Option = Stoichiometric
 Stoichiometric Coefficient = 1.0
 END
 CHILD MATERIAL: H2
 Option = Stoichiometric
 Stoichiometric Coefficient = 4
 END
 END
 REACTANTS:
 Materials List = CH4,H2O
 Option = Child Materials
 CHILD MATERIAL: CH4
 Option = Stoichiometric
 Stoichiometric Coefficient = 1.0
 END
 CHILD MATERIAL: H2O


```

    Option = Stoichiometric
    Stoichiometric Coefficient = 2
  END
END
END
END
FLOW: Flow Analysis 1
SOLUTION UNITS:
  Angle Units = [rad]
  Length Units = [m]
  Mass Units = [kg]
  Solid Angle Units = [sr]
  Temperature Units = [K]
  Time Units = [s]
END
ANALYSIS TYPE:
  Option = Steady State
EXTERNAL SOLVER COUPLING:
  Option = None
END
END
DOMAIN: Domain 1
  Coord Frame = Coord 0
  Domain Type = Fluid
  Location = B8
BOUNDARY: Default Fluid Interface Side 1
  Boundary Type = INTERFACE
  Location = F40.8,F41.8,F42.8,F43.8
BOUNDARY CONDITIONS:
  COMPONENT: CH4
    Option = Conservative Interface Flux
  END
  COMPONENT: CO
    Option = Conservative Interface Flux
  END
  COMPONENT: CO2
    Option = Conservative Interface Flux
  END
  COMPONENT: H2
    Option = Conservative Interface Flux
  END
HEAT TRANSFER:
  Option = Conservative Interface Flux
  END
MASS AND MOMENTUM:
  Option = Conservative Interface Flux
  END
THERMAL RADIATION:
  Option = Conservative Interface Flux
  END
TURBULENCE:
  Option = Conservative Interface Flux
  END
END

```

```

END
BOUNDARY: inlet
  Boundary Type = INLET
  Location = inlet
BOUNDARY CONDITIONS:
  COMPONENT: CH4
    Mass Fraction = 0.1966
    Option = Mass Fraction
  END
  COMPONENT: CO
    Mass Fraction = 0.07
    Option = Mass Fraction
  END
  COMPONENT: CO2
    Mass Fraction = 0.1753
    Option = Mass Fraction
  END
  COMPONENT: H2
    Mass Fraction = 0.05
    Option = Mass Fraction
  END
FLOW REGIME:
  Option = Subsonic
END
HEAT TRANSFER:
  Option = Static Temperature
  Static Temperature = 1000 [K]
END
MASS AND MOMENTUM:
  Normal Speed = 3.2 [m s^-1]
  Option = Normal Speed
END
THERMAL RADIATION:
  Option = Local Temperature
END
TURBULENCE:
  Option = Medium Intensity and Eddy Viscosity Ratio
END
END
BOUNDARY: outlet
  Boundary Type = OUTLET
  Location = outlet
BOUNDARY CONDITIONS:
  FLOW REGIME:
    Option = Subsonic
  END
  MASS AND MOMENTUM:
    Option = Static Pressure
    Relative Pressure = 10 [atm]
  END
  THERMAL RADIATION:
    Option = Local Temperature
  END
END

```

```

END
END
BOUNDARY: wall
  Boundary Type = WALL
  Location = wall
BOUNDARY CONDITIONS:
  HEAT TRANSFER:
    Heat Flux in = 113300 [W m^-2]
    Option = Heat Flux
  END
  MASS AND MOMENTUM:
    Option = No Slip Wall
  END
  THERMAL RADIATION:
    Diffuse Fraction = 1.
    Emissivity = 1.
    Option = Opaque
  END
  WALL ROUGHNESS:
    Option = Smooth Wall
  END
END
END
DOMAIN MODELS:
  BUOYANCY MODEL:
    Option = Non Buoyant
  END
  DOMAIN MOTION:
    Option = Stationary
  END
  MESH DEFORMATION:
    Option = None
  END
  REFERENCE PRESSURE:
    Reference Pressure = 1 [atm]
  END
END
FLUID DEFINITION: Fluid 1
  Material = reactmixture2
  Option = Material Library
MORPHOLOGY:
  Option = Continuous Fluid
END
END
FLUID MODELS:
  ADDITIONAL VARIABLE: DDEN
    Additional Variable Value = DEN
    Option = Algebraic Equation
  END
  ADDITIONAL VARIABLE: KK1
    Additional Variable Value = K1
    Option = Algebraic Equation
  END
  ADDITIONAL VARIABLE: KK2

```

Additional Variable Value = K2
 Option = Algebraic Equation
 END
 ADDITIONAL VARIABLE: KK3
 Additional Variable Value = K3
 Option = Algebraic Equation
 END
 ADDITIONAL VARIABLE: KKch4
 Additional Variable Value = Kch4
 Option = Algebraic Equation
 END
 ADDITIONAL VARIABLE: KKco
 Additional Variable Value = Kco
 Option = Algebraic Equation
 END
 ADDITIONAL VARIABLE: KKh2
 Additional Variable Value = Kh2
 Option = Algebraic Equation
 END
 ADDITIONAL VARIABLE: KKh2o
 Additional Variable Value = Kh2o
 Option = Algebraic Equation
 END
 ADDITIONAL VARIABLE: PPch4
 Additional Variable Value = Pch4
 Option = Algebraic Equation
 END
 ADDITIONAL VARIABLE: PPco
 Additional Variable Value = Pco
 Option = Algebraic Equation
 END
 ADDITIONAL VARIABLE: PPco2
 Additional Variable Value = Pco2
 Option = Algebraic Equation
 END
 ADDITIONAL VARIABLE: PPh2
 Additional Variable Value = Ph2
 Option = Algebraic Equation
 END
 ADDITIONAL VARIABLE: PPh2o
 Additional Variable Value = Ph2o
 Option = Algebraic Equation
 END
 ADDITIONAL VARIABLE: kk1
 Additional Variable Value = k1
 Option = Algebraic Equation
 END
 ADDITIONAL VARIABLE: kk2
 Additional Variable Value = k2
 Option = Algebraic Equation
 END
 ADDITIONAL VARIABLE: kk3
 Additional Variable Value = k3
 Option = Algebraic Equation

```

END
ADDITIONAL VARIABLE: rr1
  Additional Variable Value = r1
  Option = Algebraic Equation
END
ADDITIONAL VARIABLE: rr2
  Additional Variable Value = r2
  Option = Algebraic Equation
END
ADDITIONAL VARIABLE: rr3
  Additional Variable Value = r3
  Option = Algebraic Equation
END
COMBUSTION MODEL:
  Chemical Timescale = 1.37E-4 [s]
  Option = Finite Rate Chemistry
END
COMPONENT: CH4
  Kinematic Diffusivity = 0.0000123 [m^2 s^-1]
  Option = Transport Equation
END
COMPONENT: CO
  Kinematic Diffusivity = 0.0000072 [m^2 s^-1]
  Option = Transport Equation
END
COMPONENT: CO2
  Kinematic Diffusivity = 0.0000049 [m^2 s^-1]
  Option = Transport Equation
END
COMPONENT: H2
  Kinematic Diffusivity = 0.0000225 [m^2 s^-1]
  Option = Transport Equation
END
COMPONENT: H2O
  Option = Constraint
END
HEAT TRANSFER MODEL:
  Option = Thermal Energy
END
THERMAL RADIATION MODEL:
  Option = P 1
SCATTERING MODEL:
  Option = None
END
SPECTRAL MODEL:
  Option = Gray
END
END
TURBULENCE MODEL:
  Option = k epsilon
END
TURBULENT WALL FUNCTIONS:
  Option = Scalable
END

```

```

END
END
DOMAIN: Domain 2
  Coord Frame = Coord 0
  Domain Type = solid
  Location = reactVol
BOUNDARY: Default Fluid Solid Interface Side 2
  Boundary Type = INTERFACE
  Location = F69.68,F70.68,F71.68,F72.68
BOUNDARY CONDITIONS:
  COMPONENT: CH4
    Option = Conservative Interface Flux
  END
  COMPONENT: CO
    Option = Conservative Interface Flux
  END
  COMPONENT: CO2
    Option = Conservative Interface Flux
  END
  COMPONENT: H2
    Option = Conservative Interface Flux
  END
  HEAT TRANSFER:
    Option = Conservative Interface Flux
  END
  MASS AND MOMENTUM:
    Option = Conservative Interface Flux
  END
  THERMAL RADIATION:
    Option = Conservative Interface Flux
  END
  TURBULENCE:
    Option = Conservative Interface Flux
  END
END
SOLID: solid
  BOUNDARY CONDITIONS:
    HEAT TRANSFER:
      Option = Adiabatic
    END
  END
END
DOMAIN MODELS:
  BUOYANCY MODEL:
    Option = Non Buoyant
  END
  DOMAIN MOTION:
    Option = Stationary
  END
  MESH DEFORMATION:
    Option = None
  END
  REFERENCE PRESSURE:

```

```

    Reference Pressure = 1 [atm]
  END
END
FLUID DEFINITION: Fluid 1
  Material = reactmixture2
  Option = Material Library
MORPHOLOGY:
  Option = Continuous Fluid
  END
END
FLUID MODELS:
  ADDITIONAL VARIABLE: DDEN
    Additional Variable Value = DEN
    Option = Algebraic Equation
  END
  ADDITIONAL VARIABLE: KK1
    Additional Variable Value = K1
    Option = Algebraic Equation
  END
  ADDITIONAL VARIABLE: KK2
    Additional Variable Value = K2
    Option = Algebraic Equation
  END
  ADDITIONAL VARIABLE: KK3
    Additional Variable Value = K3
    Option = Algebraic Equation
  END
  ADDITIONAL VARIABLE: KKch4
    Additional Variable Value = Kch4
    Option = Algebraic Equation
  END
  ADDITIONAL VARIABLE: KKco
    Additional Variable Value = Kco
    Option = Algebraic Equation
  END
  ADDITIONAL VARIABLE: KKh2
    Additional Variable Value = Kh2
    Option = Algebraic Equation
  END
  ADDITIONAL VARIABLE: KKh2o
    Additional Variable Value = Kh2o
    Option = Algebraic Equation
  END
  ADDITIONAL VARIABLE: PPch4
    Additional Variable Value = Pch4
    Option = Algebraic Equation
  END
  ADDITIONAL VARIABLE: PPco
    Additional Variable Value = Pco
    Option = Algebraic Equation
  END
  ADDITIONAL VARIABLE: PPco2
    Additional Variable Value = Pco2
    Option = Algebraic Equation

```

```

END
ADDITIONAL VARIABLE: PPh2
  Additional Variable Value = Ph2
  Option = Algebraic Equation
END
ADDITIONAL VARIABLE: PPh2o
  Additional Variable Value = Ph2o
  Option = Algebraic Equation
END
ADDITIONAL VARIABLE: kk1
  Additional Variable Value = k1
  Option = Algebraic Equation
END
ADDITIONAL VARIABLE: kk2
  Additional Variable Value = k2
  Option = Algebraic Equation
END
ADDITIONAL VARIABLE: kk3
  Additional Variable Value = k3
  Option = Algebraic Equation
END
ADDITIONAL VARIABLE: rr1
  Additional Variable Value = r1
  Option = Algebraic Equation
END
ADDITIONAL VARIABLE: rr2
  Additional Variable Value = r2
  Option = Algebraic Equation
END
ADDITIONAL VARIABLE: rr3
  Additional Variable Value = r3
  Option = Algebraic Equation
END
COMBUSTION MODEL:
  Chemical Timescale = 1.37E-4 [s]
  Option = Finite Rate Chemistry
END
COMPONENT: CH4
  Kinematic Diffusivity = 0.0000123 [m^2 s^-1]
  Option = Transport Equation
END
COMPONENT: CO
  Kinematic Diffusivity = 0.0000072 [m^2 s^-1]
  Option = Transport Equation
END
COMPONENT: CO2
  Kinematic Diffusivity = 0.0000049 [m^2 s^-1]
  Option = Transport Equation
END
COMPONENT: H2
  Kinematic Diffusivity = 0.0000225 [m^2 s^-1]
  Option = Transport Equation
END
COMPONENT: H2O

```



```

    Option = Constraint
END
HEAT TRANSFER MODEL:
    Option = Thermal Energy
END
THERMAL RADIATION MODEL:
    Option = P 1
SCATTERING MODEL:
    Option = None
END
SPECTRAL MODEL:
    Option = Gray
END
END
TURBULENCE MODEL:
    Option = k epsilon
END
TURBULENT WALL FUNCTIONS:
    Option = Scalable
END
END
END
SOLID DEFINITION: solid
    Material = solid support
    Option = Material Library
MORPHOLOGY:
    Option = Continuous Solid
END
END
SOLID MODELS:
    HEAT TRANSFER MODEL:
        Option = Thermal Energy
    END
    THERMAL RADIATION MODEL:
        Option = None
    END
END
END
DOMAIN INTERFACE: Default Fluid Solid Interface
    Boundary List1 = Default Fluid Solid Interface Side 1
    Boundary List2 = Default Fluid Solid Interface Side 2
    Interface Type = Fluid Solid
INTERFACE MODELS:
    Option = General Connection
FRAME CHANGE:
    Option = None
END
MASS AND MOMENTUM:
    Option = Conservative Interface Flux
MOMENTUM INTERFACE MODEL:
    Option = None
END
END
PITCH CHANGE:

```

```

    Option = None
END
END
MESH CONNECTION:
    Option = GGI
END
SOLID INTERFACE MODELS:
    HEAT TRANSFER:
        Option = Side Dependent
    END
END
END
INITIALISATION:
    Option = Automatic
INITIAL CONDITIONS:
    Velocity Type = Cartesian
    CARTESIAN VELOCITY COMPONENTS:
        Option = Automatic with Value
        U = 0 [m s^-1]
        V = -3.2 [m s^-1]
        W = 0 [m s^-1]
    END
    COMPONENT: CH4
        Mass Fraction = 0.1966
        Option = Automatic with Value
    END
    COMPONENT: CO
        Mass Fraction = 0.07
        Option = Automatic with Value
    END
    COMPONENT: CO2
        Mass Fraction = 0.1753
        Option = Automatic with Value
    END
    COMPONENT: H2
        Mass Fraction = 0.05
        Option = Automatic with Value
    END
    RADIATION INTENSITY:
        Option = Automatic
    END
    STATIC PRESSURE:
        Option = Automatic with Value
        Relative Pressure = 10 [atm]
    END
    TEMPERATURE:
        Option = Automatic with Value
        Temperature = 1000 [K]
    END
    TURBULENCE INITIAL CONDITIONS:
        Option = Medium Intensity and Eddy Viscosity Ratio
    END
END
SOLID: solid

```

```
INITIAL CONDITIONS:
  TEMPERATURE:
    Option = Automatic with Value
    Temperature = 1000 [K]
  END
END
END
OUTPUT CONTROL:
  RESULTS:
    File Compression Level = Default
    Option = Standard
  END
END
SOLVER CONTROL:
  Turbulence Numerics = First Order
ADVECTION SCHEME:
  Option = High Resolution
END
CONVERGENCE CONTROL:
  Maximum Number of Iterations = 100
  Minimum Number of Iterations = 1
  Physical Timescale = 1 [s]
  Solid Timescale Control = Auto Timescale
  Timescale Control = Physical Timescale
END
CONVERGENCE CRITERIA:
  Residual Target = 1.E-4
  Residual Type = RMS
END
DYNAMIC MODEL CONTROL:
  Global Dynamic Model Control = On
END
END
END
COMMAND FILE:
  Version = 14.5
END
```

ANEXO 7
Gráficos de Residuales

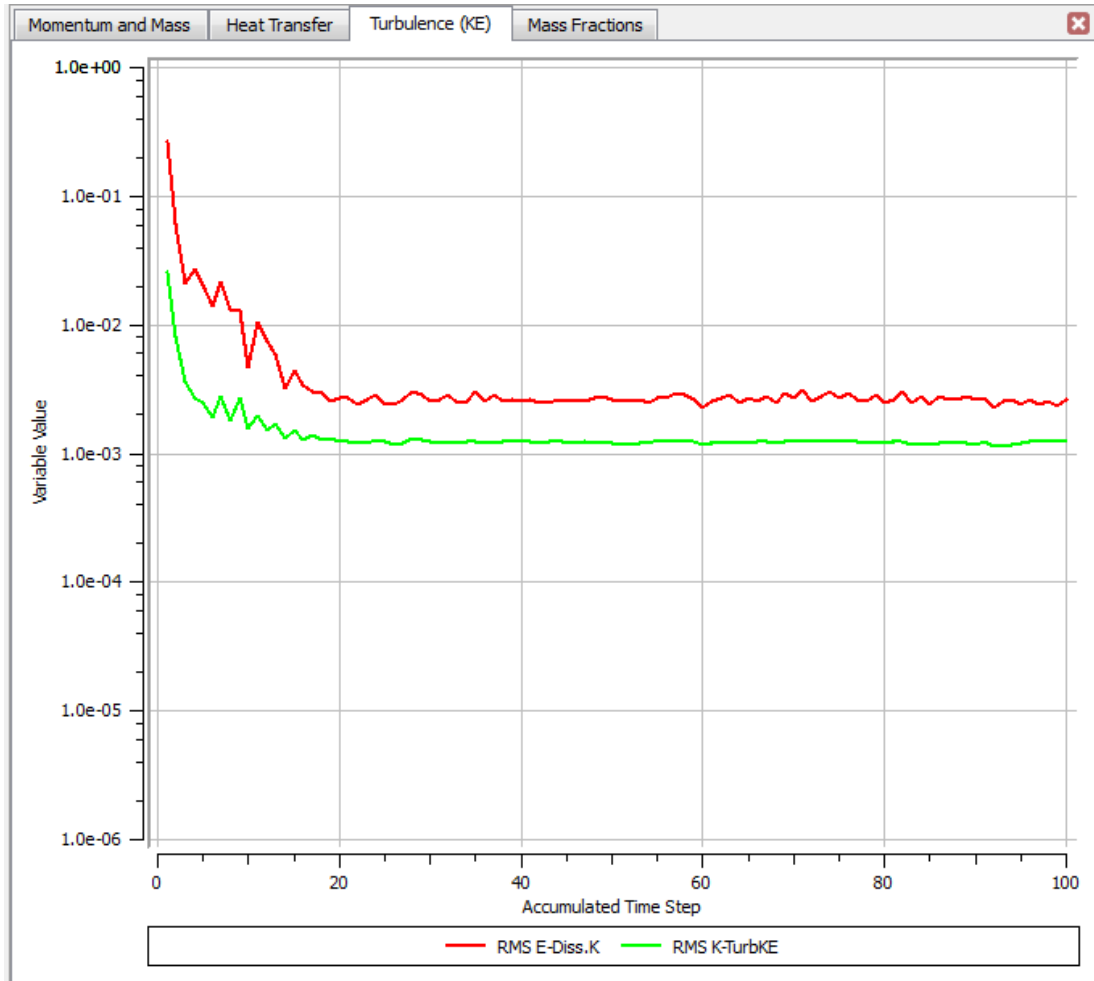


Figura 85: Residual de Turbulencia (OH)

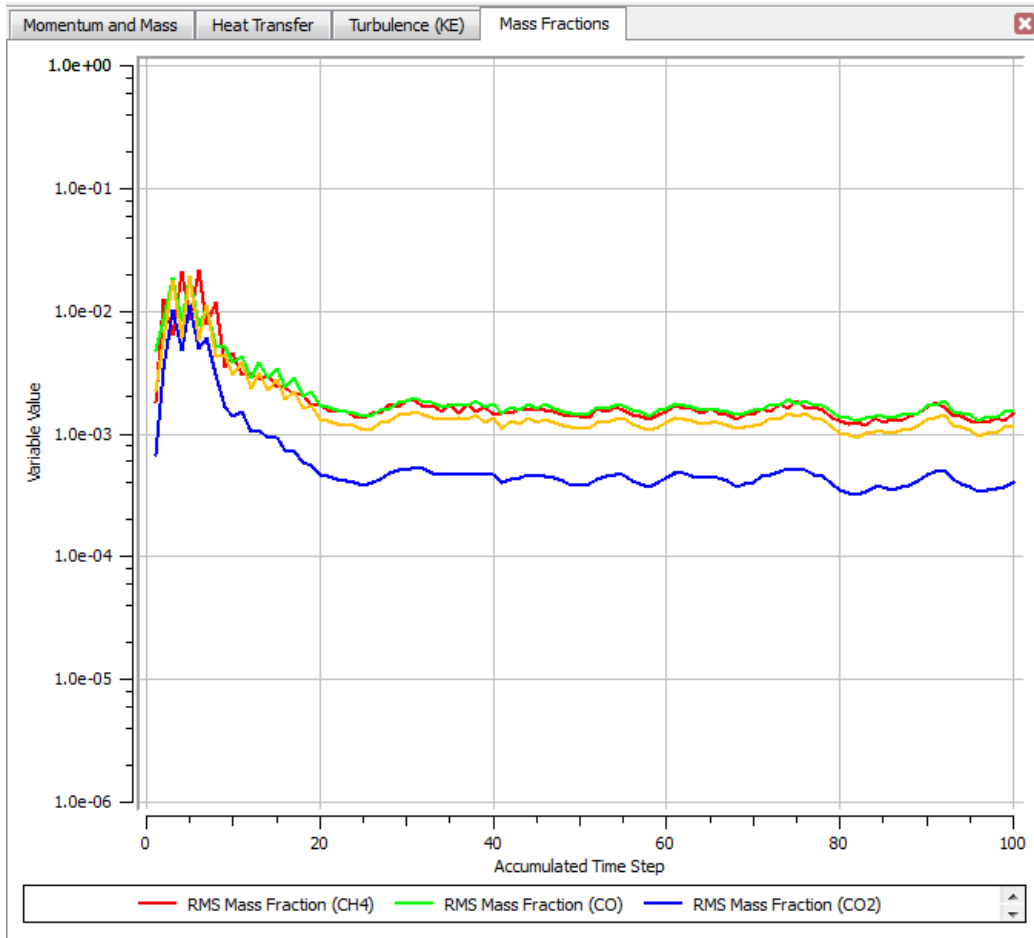


Figura 86: Residual de FM (OH)

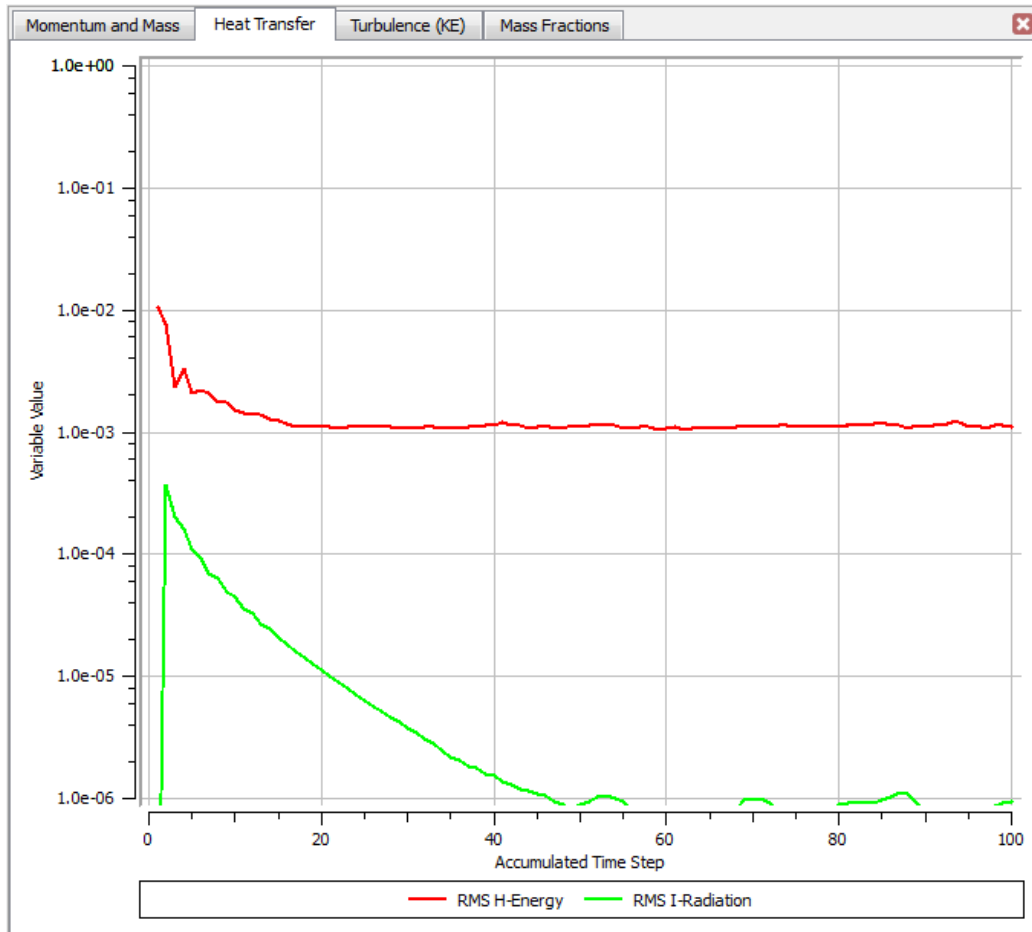


Figura 87: Residual de BE (1H)

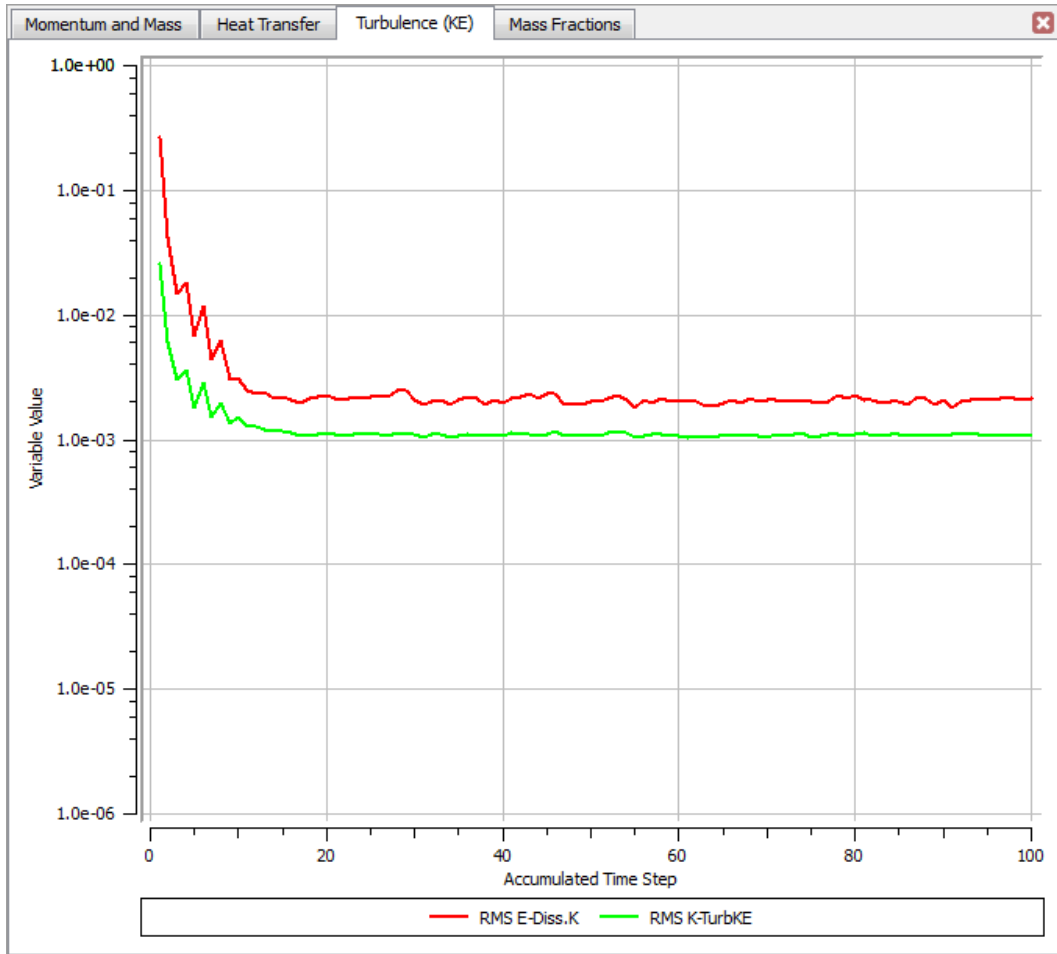


Figura 88: Residual de Turbulencia (1H)



Figura 89: Residual de FM (1H)

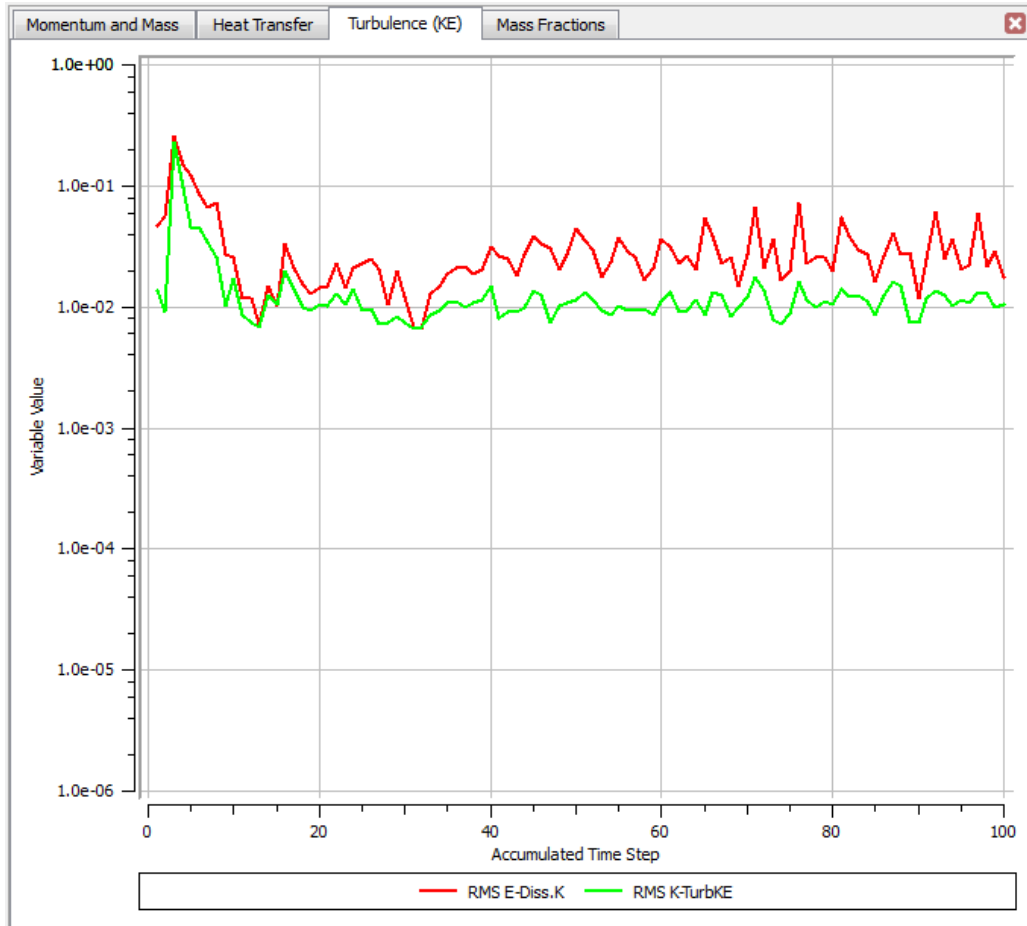


Figura 90: Residual de Turbulencia (4H)

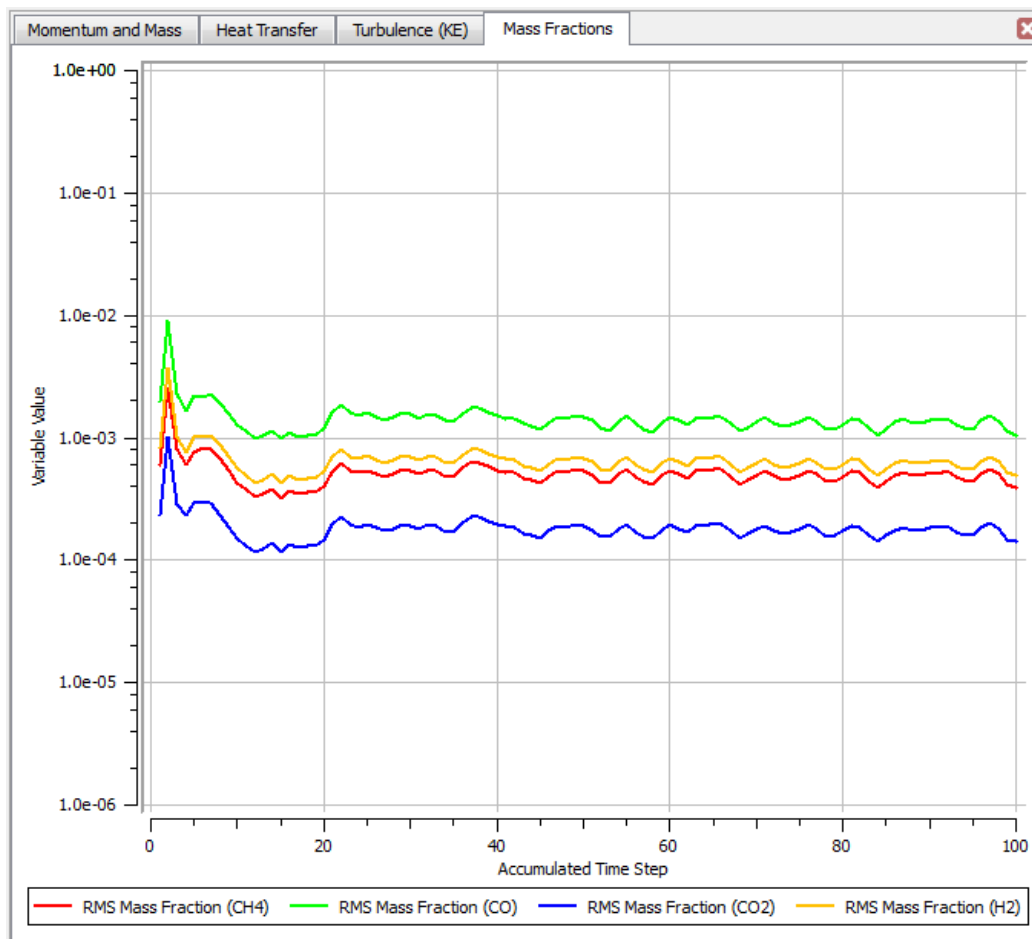


Figura 91: Residual de FM (4H)

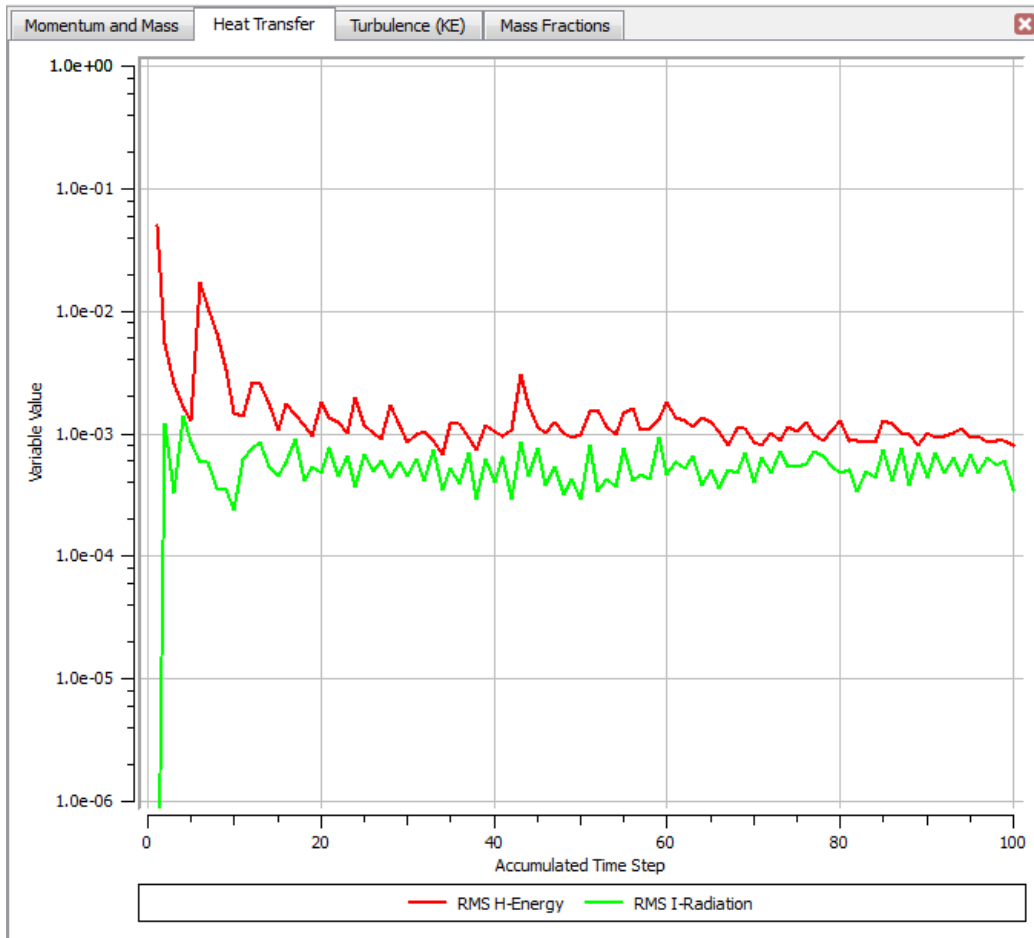


Figura 92: Residual de BE (ES)



Figura 93: Residual de Turbulencia (ES)

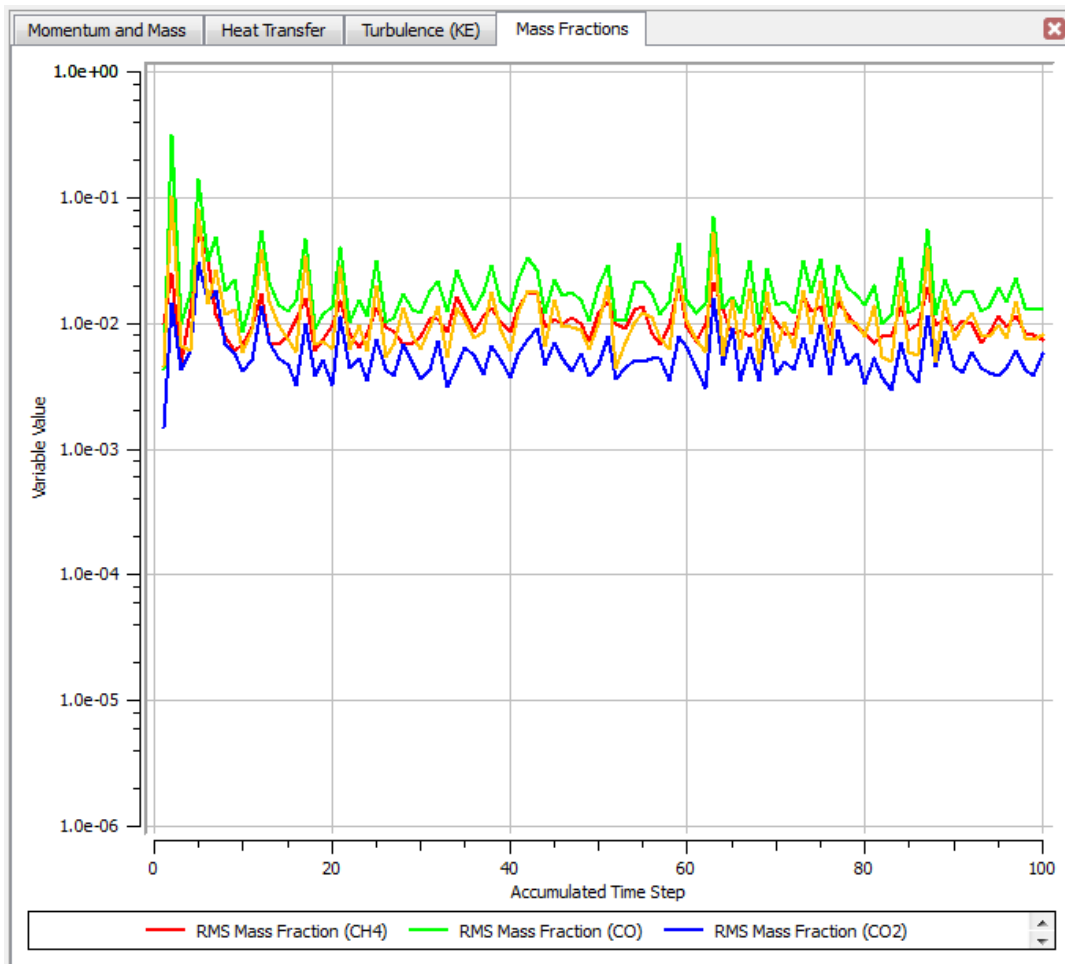


Figura 94: Residual de FM (ES)

ANEXO 8
Secciones de Lectura en el CFX-Post

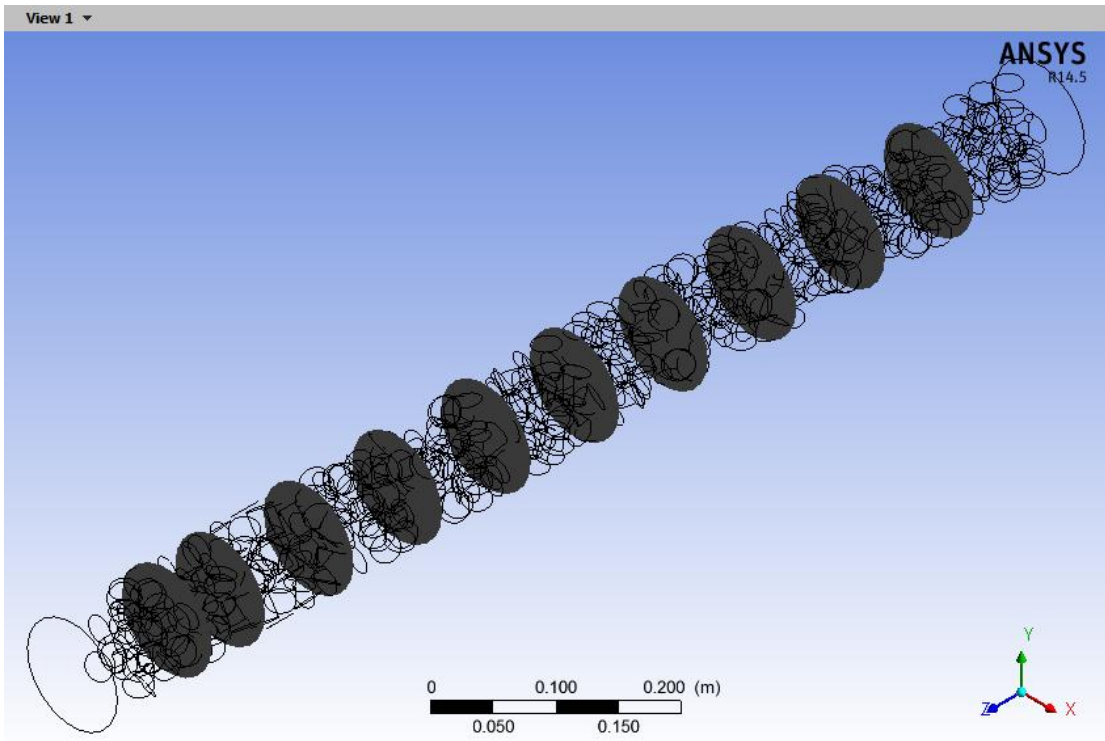


Figura 95: Planos de lectura empaque OH

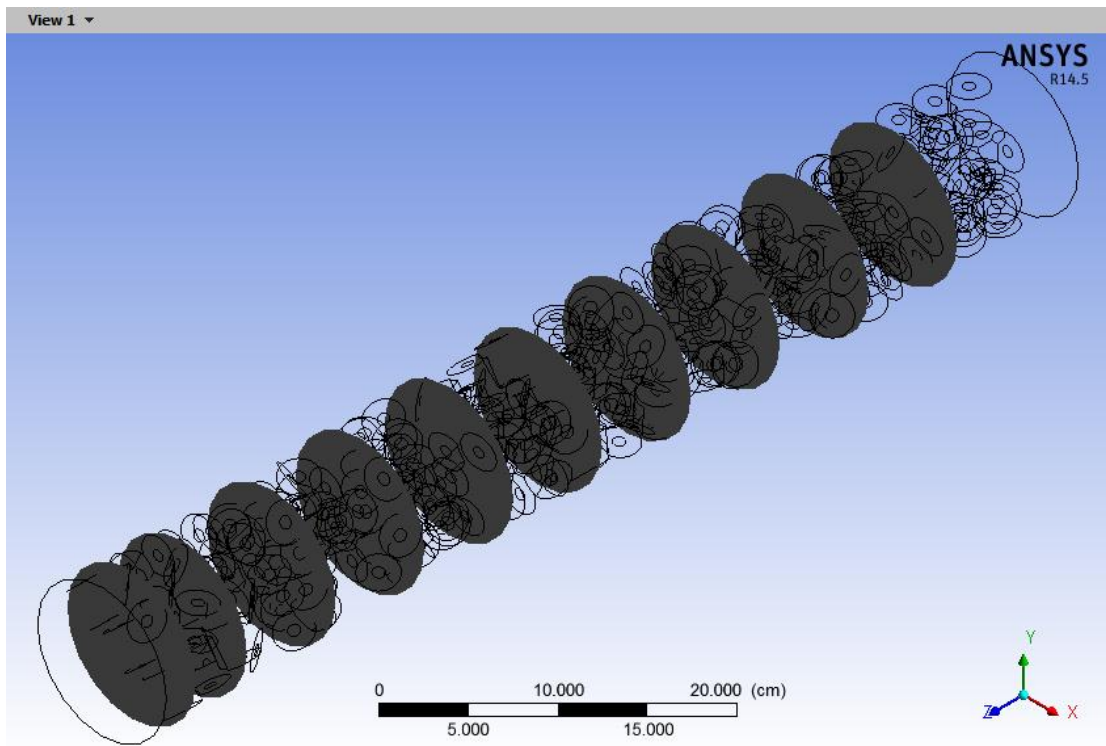


Figura 96: Planos de lectura empaque 1H

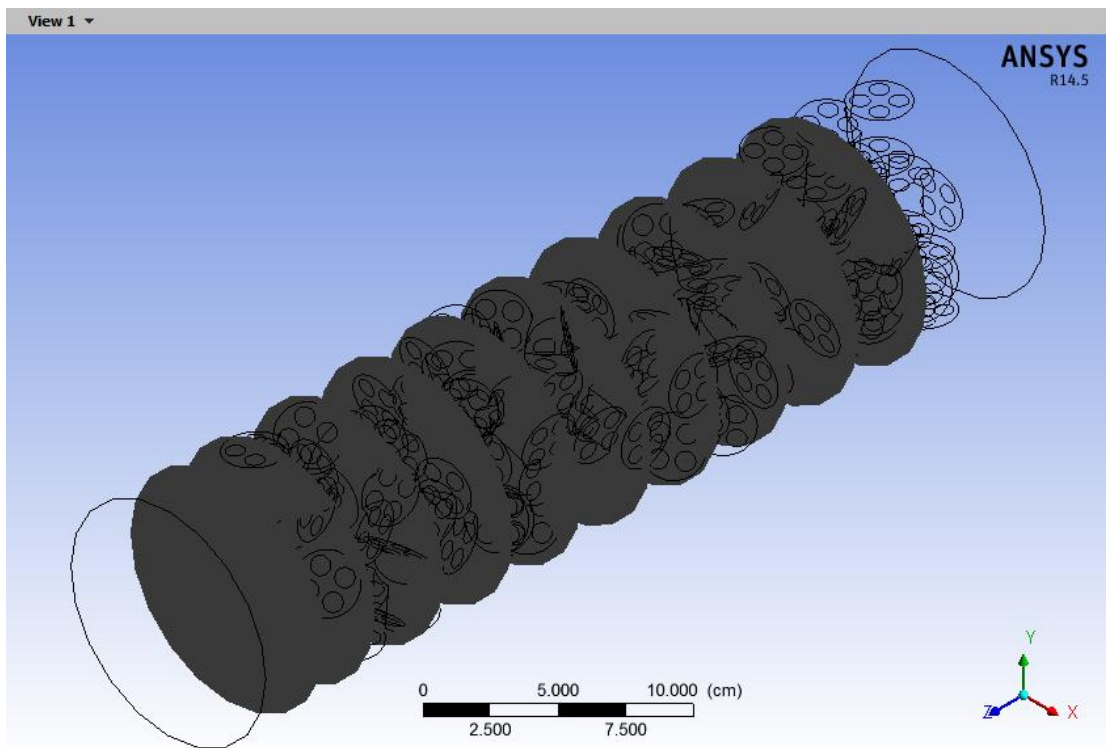


Figura 97: Planos de lectura empaque 4H

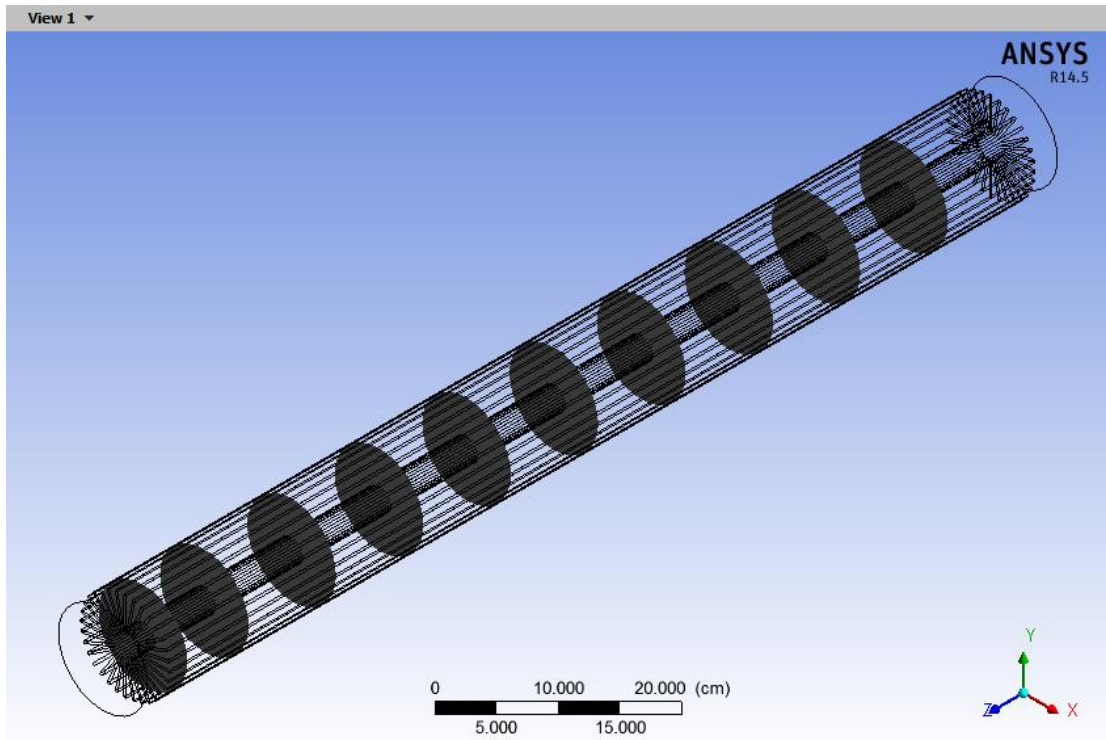


Figura 98: Planos de lectura empaque Estructurado