

**Estudio del Efecto de la Variabilidad del Poder Calorífico de las Mezclas de Gases en la
Combustión en Hornos de Refinería Mediante Dinámica de Fluidos Computacional (CFD)**

Sergio Andrés Morales Restrepo

Trabajo de grado para optar el título de: Magister en Ingeniería Química

Director

Dr.Sc. Viatcheslav Kafarov

Doctor en Ciencias Técnicas

Co-directores

Ph.d. Fabián Andrey Díaz Mateus

Doctor en Ingeniería Química

Ph.d. Helver Crispiniano Álvarez Castro

Doctor en Ingeniería Química

Universidad Industrial de Santander

Facultad de Ingenierías Físicoquímicas

Escuela de Ingeniería Química

Maestría en Ingeniería Química

Bucaramanga

2019

Agradecimientos

Al Dr. Viatcheslav Kafarov y al Centro de Investigación para el Desarrollo Sostenible en Industria y Energía (CIDES) por abrirme sus puertas y confiar en mi para el desarrollo de este proyecto.

A mis codirectores Fabián Díaz y Helver Álvarez por todo su apoyo durante este proceso.

A COLCIENCIAS y la Red RECIEE por la financiación recibida que permitió disponer de las herramientas necesarias para la ejecución del proyecto.

Tabla de Contenido

Introducción	12
1 Marco Teórico y Estado del Arte.....	15
1.1 Generalidades de los hornos industriales de refinería.....	15
1.2 Descripción de la técnica CFD.....	18
1.3 Modelamiento matemático.....	20
1.4 Simulación de hornos mediante CFD	30
2 Hipótesis	36
3 Objetivos	37
3.1 Objetivo general	37
3.2 Objetivos específicos	37
4 Metodología.....	38
4.1 Fase I: Pre-proceso	38
4.2 Fase II: Solución	39
4.3 Fase III: Post-proceso.....	41
4.4 Fase IV: Análisis y verificación.....	41
5 Simulación en CFD del Horno de Refinería.....	43
5.1 Definición del dominio y geometría.....	43
5.2 Generación de la malla computacional	44
5.3 Condiciones de frontera y de operación.....	46
5.4 Solución.....	49
5.5 Post-proceso y análisis de resultados	53

5.5.1	Verificación de los resultados obtenidos	54
5.5.2	Perfil de flujo	55
5.5.3	Perfil de temperatura	55
5.5.4	Temperatura pico de piel de tubo	57
5.5.5	Perfiles de concentración de especies químicas	58
6	Estudio Paramétrico Mediante Casos Comparativos	62
6.1	Comparación de perfiles de flujo	65
6.2	Comparación de perfiles de temperatura.....	68
6.3	Comparación de temperaturas pico de piel de tubo	70
6.4	Comparación de perfiles de concentración de especies químicas.....	72
8	Conclusiones	80
9	Divulgación de Resultados	84
	Referencias Bibliográficas	85

Lista de Tablas

Tabla 1. Parámetros del horno.....	17
Tabla 2. Composición molar del combustible.....	47
Tabla 3. Resumen de los residuales de las etapas de simulación.....	52
Tabla 4. Comparación de resultados obtenidos con datos de literatura científica.....	54
Tabla 5. Composiciones en porcentaje de las mezclas de gases de refinería usadas en los casos comparativos.....	62
Tabla 6. Condiciones de flujo de gas y aire en cada uno de los casos simulados.....	65

Lista de Figuras

Figura 1. Esquema general de un horno tipo cabina con serpentín horizontal.	16
Figura 2. Etapas para el desarrollo de los objetivos planteado	38
Figura 3. Geometría del segmento del horno a simular con un quemador	44
Figura 4. Vista frontal del segmento del horno a simular	45
Figura 5. Geometría del quemador tipo John Zink y su eje de simetría	45
Figura 6. Malla computacional generada para el horno	46
Figura 7. Coeficientes de transferencia de calor y temperaturas usadas en la simulación.....	48
Figura 8. Residuales de la primera etapa de la simulación.....	50
Figura 9. Residuales de la segunda etapa de la simulación.. ..	51
Figura 10. Residuales de la tercera etapa de la simulación.....	51
Figura 11. Comportamiento de la temperatura a lo largo del eje de simetría	53
Figura 12. Contorno de Y^+ en las paredes del horno... ..	54
Figura 13. Perfil de flujo con líneas de corriente al interior del horno en el caso base	56
Figura 14. Perfil de temperatura al interior del horno en el caso base.....	57
Figura 15. Temperatura pico de piel de tubo en el caso base.....	58
Figura 16. Perfil de fracción molar de CO_2 en el caso base	59
Figura 17. Fracción molar de CO_2 en función de la altura en el centro del quemador	60
Figura 18. Perfil de fracción molar de NO en el caso base.....	61
Figura 19. Aire teórico requerido para cada mezcla	63
Figura 20. Comparación de perfiles de flujo en los casos simulados	66
Figura 21. Comparación de perfiles de temperatura en los casos simulados.....	69

Figura 22. Comparación de temperaturas pico de piel de tubo en los casos simulados	71
Figura 23. Comparación de perfiles de fracción molar de CO ₂ en los casos simulados	74
Figura 24. Fracción molar de CO ₂ en el centro del quemador en los casos simulados.....	76
Figura 25. Fracción molar de NO obtenido en los casos simulados	78

Resumen

Título:

Estudio del Efecto de la Variabilidad del Poder Calorífico de las Mezclas de Gases en la Combustión en Hornos de Refinería Mediante Dinámica de Fluidos Computacional (CFD)¹

Autor:

Sergio Andrés Morales Restrepo²

Palabras Clave:

Combustión, Hornos De Refinería, Simulación, Dinámica de Fluidos Computacional

Descripción:

En los procesos de refinación de petróleo se generan diversas mezclas de gases residuales también llamados “gases de refinería (GR)”, estas mezclas de gases constituyen una fuente de ahorro de gas natural, con el cual se mezclan, o se utilizan directamente en los equipos, especialmente en los hornos. Sin embargo, la composición de estas mezclas de gases no es homogénea, lo cual genera alteraciones en el poder calorífico y en el proceso de combustión.

La simulación numérica mediante Dinámica de Fluidos Computacional (CFD, por sus siglas en inglés) ha demostrado ser una técnica de alta precisión para modelamiento y simulación de hornos de refinería, que puede ofrecer y predecir información detallada de operación de hornos. En la literatura se han reportado muy pocos estudios de simulación en CFD donde se investigue el efecto de la variación de la composición del combustible sobre la distribución de los perfiles de velocidad, temperatura y especies químicas al interior de hornos de refinería y sus principales variables operacionales.

Teniendo en cuenta lo anterior, en este proyecto se estudió el efecto de la variabilidad del poder calorífico de mezclas de gases de refinería en el proceso de combustión en hornos mediante CFD simulando casos comparativos con los cuales se pudo evidenciar que al aumentar el poder calorífico de la mezcla de gases, se presenta un incremento en la temperatura pico de piel de tubo en la zona inferior del horno, las emisiones de CO₂ y de NO. Por otro lado, si el poder calorífico disminuye, la temperatura pico de piel de tubo en la zona inferior se reduce y lo mismo ocurre con las emisiones de CO₂ y NO. En síntesis, se determinó que el uso de mezclas de alto poder calorífico puede convertirse en una desventaja operativa y ambiental en los hornos de refinería.

¹ Trabajo de grado de Maestría.

² Facultad de Ingenierías Físicoquímicas. Escuela de Ingeniería Química. Dr.Sc. Viatcheslav Kafarov. Codirector: Ph.D. Fabián Díaz Mateus. Codirector: M.Sc. Helver Álvarez Castro.

Abstract

Title:

Study of the Effect of the Variability of the Calorific Power of Gas Mixtures in Combustion in Refinery Furnaces Using Computational Fluid Dynamics (CFD)³

Author:

Sergio Andres Morales Restrepo⁴

Keywords:

Combustion, Refinery Furnace, Simulation, Computational Fluid Dynamics

Description:

In the petroleum refining processes various mixtures of waste gases are generated, also called "refinery gases (GR)", these gas mixtures constitute a source of natural gas savings, with which they are mixed, or used directly in the equipment, especially in ovens. However, the composition of these gas mixtures is not homogeneous, which generates alterations in the calorific value and in the combustion process.

The numerical simulation by Computational Fluid Dynamics (CFD) has proven to be a highly accurate technique for modeling and simulation of refinery furnaces, which can offer and predict detailed furnace operation information. In the literature, very few CFD simulation studies have been reported where the effect of the variation of fuel composition on the distribution of velocity, temperature and chemical profiles within refinery furnaces and their main operational variables is investigated.

Taking into account the above, this project studied the effect of the calorific power variability of refinery gas mixtures in the combustion process in furnaces by means of CFD simulating comparative cases with which it was possible to demonstrate that by increasing the calorific power of the gas mixture, there is an increase in the peak skin tube temperature in the inferior zone of the furnace, the CO₂ and NO emissions also increase. On the other hand, if the calorific value decreases, the peak tube skin temperature in the inferior zone is reduced and the same occurs with CO₂ and NO emissions. In summary, it was determined that the use of mixtures of high calorific power can become an operational and environmental disadvantage in refinery furnaces.

³ Master's Degree Work.

⁴ Faculty of Physical-Chemical Engineering. School of Chemical Engineering. Director: Dr.Sc. Viatcheslav Kafarov. Codirector: Ph.D. Fabián Díaz Mateus. Codirector: M.Sc. Helver Álvarez Castro.

Introducción

En la industria petrolera la combustión es un mecanismo de transformación de energía a través de equipos industriales como: hornos, calderas, etc., La mayoría de ellos son diseñados para utilizar gas natural como combustible (Mullinger & Jenkins, 2008b). En los procesos de refinación de petróleo se generan diversas mezclas de gases residuales también llamados “gases de refinería (GR)”, los cual son usados a medida que se producen debido a su costo de almacenamiento (Cala, 2014); estas mezclas de gases constituyen una fuente de ahorro de gas natural, con el cual se mezclan, o se utilizan directamente en los equipos, especialmente en los hornos, los cuales son considerados un equipo clave en las refinerías, ya que suministran el calor necesario para llevar a cabo diversos procesos tales como: destilación, hidrocraqueo, separación, entre otros (Meriño, 2015).

Sin embargo, la composición del GR no es homogénea y varía dependiendo de la corriente de proceso de la cual provenga, normalmente con altos contenidos de metano, hidrógeno, etano, etileno, propano y propileno. Estas variaciones en la composición del GR alteran su poder calorífico, presentando cambios en un rango entre 800-2500 BTU/pe³ (Cala, Meriño, Kafarov y Saavedra, 2013) obligando a manipular el flujo de combustible alimentado al horno para controlar la carga de calor suministrada al equipo. Además, se presentan alteraciones en el proceso de combustión, lo cual modifica el grado de conversión y genera productos indeseados afectando la seguridad operacional y aumentando las emisiones de contaminantes.

El proceso de combustión de gases comprende un conjunto de disciplinas que están fuertemente asociadas entre sí: la cinética, la termodinámica, las interacciones turbulentas y los fenómenos de transporte en cada una de sus situaciones (masa, momento o energía) (Cala, 2014). Estos fenómenos se pueden representar utilizando las ecuaciones fundamentales de conservación de masa, momento y energía. Sin embargo, se debe tener en cuenta la introducción de ecuaciones de turbulencia, que junto con las ecuaciones fundamentales de conservación, solo pueden resolverse analíticamente en casos muy simplificados.

En este contexto, la simulación numérica mediante Dinámica de Fluidos Computacional (CFD, por sus siglas en inglés) ha demostrado ser una técnica de alta precisión que puede ofrecer y predecir información que, en la mayoría de los casos, puede ser costosa y difícil de obtener experimentalmente, ya que no es necesario invertir recursos en un producto final y pruebas experimentales, en otras palabras, es una excelente herramienta para obtener información detallada acerca de los procesos de operación en hornos (Cancino, Restrepo y Oliveira, 2007; Mullinger & Jenkins, 2008c, p. 6).

En la literatura se han publicado diversos estudios de modelamiento de procesos de combustión en hornos típicos de la industria de refinación de petróleo usando CFD, en los cuales se obtuvieron perfiles de velocidad, temperatura y concentración de especies químicas usando combustibles con composición definida, pero se han reportado pocos estudios donde se investigue el efecto de la variación de la composición del combustible sobre la distribución de los perfiles mencionados anteriormente al interior de hornos industriales de refinería y sus principales variables operacionales.

Existen muchas dificultades asociadas al manejo de la combustión mediante CFD ya que en ella intervienen flujos turbulentos y una gran cantidad de etapas de las reacciones químicas. No obstante, todos los tipos de combustión se gobiernan por el mismo conjunto de leyes de conservación de masa, momento, energía y especies químicas a nivel fundamental, por lo cual es posible superar esta barrera mediante la definición de modelos simplificados que permitan resolver numéricamente las ecuaciones fundamentales (Chung, 2002; Tu, Yeoh, & Liu, 2013).

Con base en lo expuesto anteriormente, se plantea analizar el efecto de la variación de la composición del gas de alimentación del horno en los perfiles de flujo, temperatura y concentración de especies químicas al interior del horno y en algunas de sus principales variables de operación contando de esta manera con una herramienta de apoyo en la toma decisiones con respecto a mejoras en la operación, optimización y disminución de emisiones.

En ese orden de ideas, el presente documento expone inicialmente una descripción del marco teórico acerca de las generalidades de los hornos, etapas de una simulación en CFD y los modelos matemáticos utilizados en este tipo de simulaciones. Adicionalmente, se muestra el estado del arte de la simulación y modelamiento de la combustión en hornos de refinería mediante CFD.

Después de contextualizar los conceptos, modelos matemáticos y trabajos publicados a nivel mundial, se presentan los objetivos planteados en el proyecto, seguido de la metodología implementada para su cumplimiento y los diferentes parámetros tenidos en cuenta durante la simulación. Finalmente, se presentan los resultados obtenidos y su respectivo análisis, terminando con las conclusiones generales del proyecto.

1 Marco Teórico y Estado del Arte

1.1 Generalidades de los hornos industriales de refinería

En los procesos de refinación de petróleo, los hornos son los equipos encargados de transferir calor a un fluido de proceso mediante radiación y convección por los gases calientes producto de la quema de un combustible (generalmente gas natural o mezcla de gases de refinería). Las zonas de los hornos se pueden dividir en zona radiante y zona de convección, llamadas así por el mecanismo de transferencia de calor predominante en cada una de ellas (Mullinger & Jenkins, 2008a).

En la zona radiante, el proceso de transferencia de calor por radiación se lleva a cabo dentro de la cámara de combustión, donde los quemadores se encuentran ubicados en el piso y el serpentín en las paredes del horno. En la zona convectiva, el proceso de transferencia de calor por convección ocurre en el banco de convección donde generalmente los tubos se encuentran dispuestos de forma horizontal y escalonada. En la zona de choque o escudo la transferencia de calor se da por convección y radiación en la misma medida y está compuesta por la primera fila de tubos de la zona convectiva y se encuentran desnudos igual que en la zona de radiante (Sandoval Hinds, JA, 2007).

En los hornos de refinería, los gases de combustión circulan en sentido opuesto al fluido de proceso. Es decir, el fluido de proceso circula primero por la zona conectiva y luego por la zona radiante, para posteriormente salir del horno, mientras que los gases de combustión van en sentido opuesto y se liberan en la chimenea.

Para el desarrollo del presente proyecto, se simulará un horno de refinería tipo cabina con serpentín horizontal en zona de radiación, típico en la industria de refinación de petróleo, el mismo utilizado por Díaz-Mateus & Castro-Gualdrón (2011) en su estudio. En la figura 1 se observa el esquema general y zonas de un horno tipo cabina con serpentín horizontal.

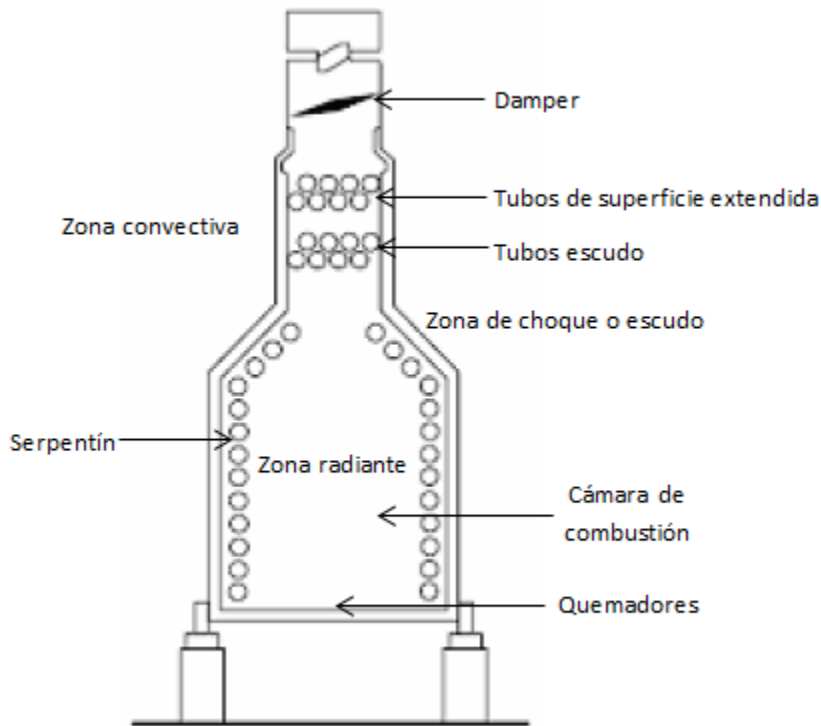


Figura 1. Esquema general de un horno tipo cabina con serpentín horizontal (Sandoval Hinds, JA, 2007).

Es importante mencionar que en este trabajo se va a simular únicamente la zona radiante del horno debido a que allí se encuentra la cámara de combustión y es la zona de mayor transferencia de calor en este tipo de hornos de refinería. En la tabla 1 se muestran las dimensiones y condiciones de operación del horno objeto de estudio.

Tabla 1. Parámetros del horno

Fuente: (Díaz-Mateus & Castro-Gualdrón, 2011)

Parámetro	Dato
Zona radiante	
Alto	8 m
Largo	3 m
Ancho	17 m
Serpentín	
Número de tubos	44
Número de pasos	2
Diámetro exterior de tubo	0,1683 m
Diámetro interior de tubo	0,219 m
Condiciones de combustión	
Combustible	Mezcla de gases
Flujo de combustible	0,0692 kg/s
Flujo de aire	1,3351 kg/s
Aire teórico	11%
Número de quemadores	12
Propiedades del material	
Emisividad de tubos	0,85
Emisividad refractario	0,6
Conductividad térmica tubos	31,35 W/m*K
Conductividad térmica refractario	0,3172 W/m*K

Algunos de los procesos de refinación de petróleo en los cuales se utilizan hornos son: hidrocraqueo, destilación, reformado con vapor, isomerización, coquización, hidrodesulfurización, entre otros (Torres Robles, R. y Castro Arellano, J., 2002).

Los hornos de refinería pueden presentar diversos tipos de problemas que pueden alterar sus parámetros de operación, algunos de estos son: sobrecalentamiento de los tubos, acumulación de coque, corrosión, entre otros.

En este aspecto, la simulación numérica por CFD ha contribuido a la solución de algunas de estas problemáticas ya que permite obtener información detallada de la operación de un horno a través de los perfiles de velocidad, temperatura y especies químicas obtenidos por medio de esta técnica, además de servir como herramienta de diseño, ya que se pueden evaluar distintas configuraciones geométricas y determinar su influencia en los parámetros de operación y eficiencia de los hornos y así identificar posibles mejoras.

1.2 Descripción de la técnica CFD

El término Dinámica de Fluidos Computacional hace referencia a la utilización de computadores y técnicas numéricas para la solución de una amplia gama de problemas físicos o fisicoquímicos relacionados con movimiento de fluidos, transferencia de calor, reacciones químicas, arrastre de sólidos, entre otros. Lo anterior implica que la técnica de CFD tiene aplicaciones en diversas áreas del conocimiento de la ingeniería e industrias, entre las cuales se destacan: automovilismo, industria aeroespacial, generación de energía, electrónica, etc. (Oro, 2012; Xamán & Gijón-Rivera, 2016)

En general, la estrategia utilizada en CFD consiste en sustituir el problema a resolver sobre un dominio continuo por un dominio discreto, es decir, discretizar el problema a partir de una malla compuesta por un número finito de puntos. En el dominio continuo las variables características de los fenómenos de transporte (masa, cantidad de movimiento y energía) están definidas en todos los puntos del espacio. Por otro lado, en el dominio discreto las variables mencionadas anteriormente están definidas únicamente en los puntos (nodos) que conforman la malla (Ferziger & Perić, 2002).

En la actualidad, la mayoría de los software comerciales de CFD (FLUENT, CFX, CD-Adapco, etc) utilizan el método de los volúmenes finitos para resolver numéricamente las ecuaciones fundamentales de conservación que determinan las variables de los fenómenos de transporte. Adicionalmente, cuentan con una interfaz amigable donde el usuario realiza el modelamiento de la geometría e introduce los parámetros necesarios para el análisis y otras herramientas que facilitan la presentación de los resultados. Por lo tanto, estos códigos proporcionan un análisis completo de CFD cuya estructura se compone de 3 elementos principales (Oro, 2012; Tu et al., 2013)

- **Pre-proceso:** En este módulo el usuario introduce los datos de entrada necesarios, define los fenómenos físicos o químicos a modelar, crea la geometría, genera la malla y establece las propiedades del flujo y condiciones iniciales y de frontera.
- **Solver:** Es la parte central del programa y es el encargado de resolver de forma iterativa las ecuaciones planteadas anteriormente. El usuario lanza la ejecución del código y espera que los recursos computacionales disponibles resuelvan el caso planteado. Esto puede tardar

desde minutos hasta meses dependiendo de la complejidad del modelo y el tamaño de la malla establecida.

- Post-proceso: En este módulo se incluyen herramientas gráficas que permiten el análisis de los resultados obtenidos, entre las cuales se incluyen: gráficas del dominio y la malla, mapas de contorno de las variables, líneas de corriente vectoriales, gráficos de superficies en 2D y 3D, animaciones, así como la posibilidad de exportar estos resultados a otros formatos.

1.3 Modelamiento matemático

En la simulación de procesos de combustión mediante CFD es necesario establecer modelos matemáticos que describan el comportamiento de los fenómenos asociados a este proceso. Estos fenómenos son la turbulencia, la combustión y la radiación, para cada uno de estos existen diversos modelos, los cuales se presentan a continuación.

1.3.1 Ecuaciones de conservación. Antes de establecer los modelos matemáticos que describen los fenómenos asociados a la combustión, es importante conocer las ecuaciones fundamentales de conservación y posteriormente plantearlas en régimen turbulento. A continuación se observan las ecuaciones de conservación de masa o de continuidad, momento y energía en estado estable con el modelo RANS para flujos compresibles (ANSYS INC, 2013; Guihua, Honggang, & Feng, 2011).

Ecuación de conservación de masa o de continuidad: establece de forma general que el incremento de masa en el interior de un elemento de fluido es consecuencia del flujo neto de masa que entra en dicho elemento. La ecuación en un punto para un fluido general es:

“ x_j ” (Coordenada en la dirección j , m)	“ δ_{ij} ” (Delta Kronecker)
“ k_{eff} ” (Conductividad efectiva, w/m k)	“ S_h ” (Término fuente de la ecuación de energía, J/m ³ /s)
“ T ” (Temperatura local, K)	

Ecuación de conservación de las especies: representa el efecto del transporte de masa por difusión molecular y la producción debido a reacción para cada especie química. Se puede expresar de la siguiente manera:

$$\frac{\partial \rho u_j Y_i}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\rho D_{i,m} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial Y_i}{\partial x_j} \right] + R_i \quad \text{Ec. 1-4}$$

Donde:

“ ρ ” (Densidad, kg/m ³)	“ $D_{i,m}$ ” (Coeficiente de difusión de la especie i en la mezcla, m ² /s)
“ u_j ” (Componente de la velocidad en la dirección j , m/s)	“ μ_t ” (Viscosidad turbulenta, kg/m s)
“ Y_i ” (Fracción másica de la especie j)	“ Sc_t ” (Número Schmidt turbulento, $Sc_t=0,7$)
“ x_j ” (Coordenada en la dirección j , m)	“ R_i ” (Producción neta de la especie i por reacción química, kgmol/m ³ /s)

1.3.2 Modelos de turbulencia. La turbulencia se puede definir como un estado irregular y caótico del movimiento de un fluido, generado por la aparición de irregularidades en las condiciones iniciales o de frontera de la corriente de fluido. Los procesos de combustión en hornos generalmente son de naturaleza turbulenta.

Las técnicas numéricas para el tratamiento de la turbulencia se pueden abordar desde distintos niveles de aproximación, proporcionando descripciones del flujo con mayor o menor detalle. En general se distinguen tres aproximaciones: la simulación numérica directa (DNS), que se basa en una malla extremadamente fina para resolver todas las escalas de la turbulencia, la simulación de vórtices grandes o *Large Eddy Simulation* (LES), basada en mallas menos densas que permiten resolver únicamente torbellinos grandes que transportan entre el 50% y 80% de la energía cinética turbulenta y por último la simulación de las ecuaciones de Navier-Stokes promediadas

por Reynolds (RANS) mediante el modelo k-épsilon ($k-\epsilon$) y sus variantes, en los que se modelizan todas las escalas mediante la utilización de modelos turbulentos.

Este último ha sido ampliamente utilizado y validado en diversas aplicaciones industriales, incluyendo procesos de combustión confinados con un costo computacional menor a los modelos DNS y LES (Blazek, 2015). El modelo $k-\epsilon$ presenta las siguientes variantes: modelo $k-\epsilon$ estándar, modelo $k-\epsilon$ RNG (*Renormalization Group Theory*) y el modelo $k-\epsilon$ *Realizable*. Los 3 modelos tienen la misma estructura de 2 ecuaciones para los términos k y ϵ pero presentan algunas diferencias como la forma de cálculo de la viscosidad turbulenta, los números de Prandtl turbulentos que gobiernan la difusión turbulenta de k y ϵ y los términos de generación y destrucción en la ecuación de ϵ .

Tanto el modelo RNG como el *Realizable* han demostrado mejoras sustanciales con respecto al modelo estándar cuando las características del flujo incluyen líneas de corriente con curvaturas fuertes, vórtices y rotación (ANSYS INC, 2013). Sin embargo, el modelo $k-\epsilon$ *Realizable* es el más reciente de los 3 y diversos estudios han demostrado que este modelo es el que presenta mejor comportamiento. Por esta razón, para el desarrollo de este proyecto se implementará la aproximación basada en las ecuaciones RANS con el modelo $k-\epsilon$ *Realizable* de 2 ecuaciones de SHIH *et al* para modelar la turbulencia (Shih, T.H., Liou, W. W., Shabbir, A. & Zhu, J., 1995) .

Adicionalmente, es necesario establecer las 2 ecuaciones del modelo $k-\epsilon$ *Realizable*. El término k representa la energía cinética turbulenta y el término ϵ representa la tasa de disipación de energía turbulenta. A continuación se presentan las ecuaciones del modelo $k-\epsilon$ *Realizable*.

Ecuación de k :

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho k u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M + S_k \quad \text{Ec. 1-5}$$

Donde:

“ x_j ” (Coordenada en la dirección j, m)	“ G_k ” (Generación de energía cinética turbulenta por gradiente de velocidad, $J/m^3/s$)
“ ρ ” (Densidad, kg/m^3)	“ G_b ” (Generación de energía cinética turbulenta por flotabilidad, $J/m^3/s$)
“ k ” (Energía cinética turbulenta, m^2/s^2)	“ ε ” (Disipación de energía cinética turbulenta, m^2/s^3)
“ u_j ” (Componente de la velocidad en la dirección j, m/s)	“ Y_M ” (Generación de energía cinética turbulenta por flotabilidad, $J/m^3/s$)
“ μ ” (Viscosidad de las moléculas de gas, $kg/m \cdot s$)	“ S_k ” (Término fuente)
“ μ_t ” (Viscosidad turbulenta, $kg/m \cdot s$)	
“ σ_k ” (Número de Prandtl turbulento)	

Ecuación de ε :

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \varepsilon u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + \rho C_1 S_\varepsilon - \rho C_2 \frac{\varepsilon^2}{k + \sqrt{\nu \varepsilon}} + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} C_{3\varepsilon} G_b + S_\varepsilon \quad \text{Ec. 1-6}$$

Donde:

“ x_j ” (Coordenada en la dirección j, m)	“ σ_ε ” (Número de Prandtl turbulento)
“ ρ ” (Densidad, kg/m^3)	“ C_1 ” (Constante del modelo k- ε)
“ ε ” (Disipación de energía cinética turbulenta, m^2/s^3)	“ C_2 ” (Constante del modelo k- ε)
“ u_j ” (Componente de la velocidad en la dirección j, m/s)	“ k ” (Energía cinética turbulenta, m^2/s^2)
“ μ ” (Viscosidad de las moléculas de gas, $kg/m \cdot s$)	“ ν ” (Viscosidad cinemática, m^2/s)
“ μ_t ” (Viscosidad turbulenta, $kg/m \cdot s$)	“ C_3 ” (Constante del modelo k- ε)
	“ G_b ” (Generación de energía cinética turbulenta por flotabilidad, $J/m^3/s$)
	“ S_ε ” (Término fuente)

Las constantes definidas para el modelo k- ε *Realizable* son las siguientes:

$$C_{1\varepsilon} = 1,44; C_2 = 1,9; \sigma_k = 1,0; \sigma_\varepsilon = 1,2$$

En estas ecuaciones G_k representa la generación de energía cinética turbulenta debida a los gradientes de velocidad media, el termino G_b es la generación de energía cinética turbulenta debida a la flotabilidad y Y_M representa la contribución de la dilatación fluctuante en turbulencia compresible a la tasa total de disipación. Los términos C_1 y C_2 son constantes y σ_k y σ_ε son los

números de Prandtl turbulentos para k y ε respectivamente y S_k y S_ε son términos fuente (ANSYS INC, 2013).

1.3.3 Modelos de combustión. En la literatura existen diversos modelos para representar la combustión en el modelamiento CFD, pero se pueden agrupar principalmente en 3 categorías (ANSYS INC, 2013; Stefanidis, Merci, Heynderickx, & Marin, 2006).

La primera abarca un enfoque estadístico, es decir, los valores promedio de los escalares se extraen a través de una función de densidad de probabilidad conocida, de manera que las reacciones químicas turbulentas se predicen a partir de propiedades promediadas en el tiempo (Stefanidis et al., 2006). En esta categoría se ubica el Modelo *Probability Density Function (PDF) Mixture Fraction*.

La segunda categoría está basada en un análisis geométrico de la llama, que está relacionado con la suposición *flamelet*. Esta suposición considera que la llama está compuesta por un arreglo de estructuras de llama laminares muy pequeñas, isotrópicas y unidimensionales llamadas *flamelets*. En esta categoría se ubica el Modelo *Laminar Flamelet*.

La tercera categoría se basa en relacionar las velocidades de reacción efectivas con los niveles de mezclado debido a la turbulencia. En esta categoría se encuentran los siguientes modelos: *Eddy Break-up Model (EBU)* y el *Eddy Dissipation Concept (EDC)*. Estos modelos son muy populares debido a que proporcionan soluciones bastante robustas y rápidas.

La combustión del horno objeto de este estudio es no premezclada, es decir el combustible y el oxidante entran a la zona de reacción a través de corrientes separadas. Uno de los modelos más populares para abordar el proceso de combustión sin premezcla es el *PDF/Mixture Fraction* o

Fracción de mezcla, el cual es un buen enfoque para flujos turbulentos donde la convección turbulenta es dominante sobre la difusión molecular. Otros modelos como el EBU o el EDC, que también pueden ser usados en combustión sin premezcla, requieren resolver una ecuación para cada especie involucrada en el proceso de combustión y como el combustible es una mezcla de diferentes gases, el número de ecuaciones generaría un gran costo computacional.

Por otro lado, con el modelo PDF/Fracción de mezcla únicamente se deben resolver 2 ecuaciones, una para la fracción de mezcla promedio y una para la varianza de la fracción de mezcla y las fracciones másicas de todas las especies, densidades y temperaturas están contenidas en una tabla de PDF (Díaz-Mateus & Castro-Gualdrón, 2011). Por lo tanto, se selecciona el modelo PDF para modelar la combustión turbulenta. Este modelo asume que la reacción es infinitamente rápida e irreversible, las especies del combustible y el oxidante nunca coexisten en el espacio y se da la conversión completa a productos finales en una sola etapa (Habibi, Merci, & Heynderickx, 2007b).

A continuación se presentan las ecuaciones que describen el modelo de fracción de mezcla (Díaz-Mateus & Castro-Gualdrón, 2011; Habibi et al., 2007b).

Ecuación de fracción de mezcla:

$$f = \frac{m_f}{m_f + m_o} \quad \text{Ec. 1-7}$$

Donde m_f y m_o son las fracciones másicas del combustible y oxidante respectivamente.

Ecuación de fracción de mezcla promedio:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \bar{f}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j \bar{f}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_f} \frac{\partial \bar{f}}{\partial x_j} \right) \quad \text{Ec. 1-8}$$

Donde:

“t” (Tiempo, s)	“u _j ” (Componente de la velocidad en la dirección j, m/s)
“ρ” (Densidad, kg/m ³)	“μ _t ” (Viscosidad turbulenta, kg/m s)
“f̄” (Fracción de mezcla)	“σ _f ” (Constante del modelo PDF)
“x _j ” (Coordenada en la dirección j, m)	

Ecuación de la varianza de fracción de mezcla promedio:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \overline{f'^2}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j \overline{f'^2}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_{f'^2}} \frac{\partial \overline{f'^2}}{\partial x_j} \right) + C_g \mu_e \left(\frac{\partial \bar{f}}{\partial x_j} \right)^2 - C_d \rho \frac{\varepsilon}{k} \overline{f'^2} \quad \text{Ec. 1-9}$$

Donde:

“t” (Tiempo, s)	“σ _f ” (Constante del modelo PDF)
“ρ” (Densidad, kg/m ³)	“C _g ” (Constante del modelo PDF)
“f'^2” (Varianza de fracción de mezcla)	“μ _e ” (Viscosidad efectiva, kg/m s)
“x _j ” (Coordenada en la dirección j, m)	“f̄” (Fracción de mezcla)
“u _j ” (Componente de la velocidad en la dirección j, m/s)	“C _d ” (Constante del modelo PDF)
“μ _t ” (Viscosidad turbulenta, kg/m s)	“ε” (Disipación de energía cinética turbulenta, m ² /s ³)
“σ _{f'^2} ” (Constante del modelo PDF)	“k” (Energía cinética turbulenta, m ² /s ²)

Los valores de las constantes del modelo son: σ_f = 0,7; σ_{f'^2} = 0,7; C_g = 2,86; C_d = 2,0.

Como se mencionó anteriormente, con este modelo no se requiere resolver ecuaciones individuales para cada especie, ya que los valores instantáneos de las fracciones másicas, densidad y temperatura dependen únicamente de la fracción de mezcla instantánea.

1.3.4 Modelos de radiación. El modelamiento de la radiación es muy importante en la simulación de la combustión en hornos mediante CFD. Como se mencionó anteriormente, en la industria petroquímica, los hornos industriales se componen de la zona convectiva y zona radiante, llamadas así por el mecanismo de transferencia de calor dominante. Por ejemplo, en los hornos de refinación de vacío, la zona radiante ocupa más del 80% de la carga total de calor e involucra condiciones de calentamiento mucho más complejas que las de la zona convectiva.

Existen varios modelos de radiación que se pueden utilizar para la simulación de hornos, entre ellos se destacan los siguientes: Modelo de transferencia discreta de radiación (DTRM), el

cual se basa en la suposición que la radiación que deja un elemento superficial se puede aproximar con un solo rayo (Yeoh & Yuen, 2009) ; el modelo de ordenadas discretas (DOM), que se obtiene por discretización de todo el ángulo sólido utilizando un número finito de direcciones de ordenadas y factores de peso correspondientes y el Modelo P-1 basado en la expansión de la intensidad de la radiación en una serie ortogonal de armónicos esféricos (Herrera Múnera, Amell Arrieta, & Cadavid Sierra, 2009).

El modelo de radiación con mayor rango de aplicación es el modelo DOM, ya que permite resolver problemas que van desde radiación superficie a superficie hasta radiación participante en procesos de combustión y se adapta a todos los rangos de espesor óptico (Herrera Múnera et al., 2009). Por lo tanto, el presente trabajo se basará en el modelo DOM para representar la radiación del proceso de combustión. Este modelo resuelve la ecuación de transferencia radiativa (RTE) para un número finito de ángulos sólidos discretos, cada uno asociado a un vector de dirección fijo en el sistema cartesiano (x, y, z) . El modelo de radiación DO se representa con la siguiente ecuación (ANSYS INC, 2013; Díaz-Mateus & Castro-Gualdrón, 2011; Herrera Múnera et al., 2009)

Ecuación del Modelo *Discrete Ordinate Model*:

$$\nabla \cdot (I(\vec{r}, \vec{s}) \vec{s}) + aI(\vec{r}, \vec{s}) = an^2 \frac{\sigma T^4}{\pi} \quad \text{Ec. 1-10}$$

Donde:

“ I ” (Intensidad de radiación, J/m ² / s)	“ n ” (Coeficiente de absorción, m ⁻¹)
“ \vec{r} ” (Vector posición)	“ σ ” (Coeficiente de Stefan-Boltzmann, J/s/m ² /K ⁴)
“ \vec{s} ” (Vector dirección)	“ T ” (Temperatura, K)
“ a ” (Coeficiente de absorción, m ⁻¹)	

Por otro lado, es importante tener en cuenta que los gases también participan en la radiación ya que pueden absorber o emitir energía. En el caso de la combustión de gas natural, los productos de combustión que más contribuyen a la radiación son el vapor de agua y el CO₂. No obstante, existen modelos que permiten calcular las propiedades radiantes de los productos de la combustión y uno de ellos es el modelo *Weighted sum of gray gases model* (WSGGM) o suma ponderada de gases grises propuesto por Hottel y Sarofim (Habibi, Merci, & Heynderickx, 2007a; HOTTEL, H. C. & SAROFIM, A. F., 1967).

En este modelo se reemplaza la mezcla gaseosa por un determinado número de gases grises y se calcula el intercambio de radiación para cada uno. El *flux* total se obtiene al sumar el *flux* de cada gas junto con un factor de ponderación. La ecuación que representa este modelo es la siguiente:

Ecuación del modelo *Weighted sum of gray gases model* (WSGGM):

$$\varepsilon_m = \sum_{i=0}^I a_{\varepsilon,i} I(T) (1 - e^{-k_i p s}) \quad \text{Ec. 1-11}$$

Donde:

“ ε_m ” (Emisividad)	“ k_i ” (Coeficiente de absorción para el i-ésimo gas gris,
“ $a_{\varepsilon,i}$ ” (Factor de ponderación para la emisividad)	1/m)
“ I ” (Intensidad de radiación, J/m ² /s)	“ p ” (Suma de las presiones parciales, Pa)
“ T ” (Temperatura, K)	“ s ” (Longitud de la trayectoria, m)

Donde el término entre paréntesis es la emisividad del n-ésimo gas gris, k_i es el coeficiente de absorción para el n-ésimo gas gris, p es la suma de las presiones parciales de todos los gases absorbentes, s es la longitud de la trayectoria y $a_{\varepsilon,i}$ es el factor de ponderación para la emisividad del n-ésimo gas gris. La dependencia de $a_{\varepsilon,i}$ de la temperatura se puede aproximar como:

$$a_{\varepsilon,i} = \sum_{j=0}^J b_{\varepsilon,i,j} T^{j-1} \quad \text{Ec.1-12}$$

Donde $b_{\varepsilon,i,j}$ son los coeficientes polinómicos de la emisividad del gas a determinada temperatura.

1.4 Simulación de hornos mediante CFD

En la literatura se reportan diversas investigaciones acerca de la aplicación de la técnica CFD para la simulación de hornos industriales. En 2001 G.J Heynderickx *et al* desarrollaron un modelo de simulación 3D en CFD para hornos de *cracking* con quemadores de llama larga. La simulación CFD utilizó la combinación de un modelo para los tubos de cracking y un modelo de radiación para la transferencia de calor radiante en la cabina del horno. No se observaron perfiles de flujo con recirculación verticales, pero si se obtuvieron perfiles de flujo asimétricos debido a la posición asimétrica de las salidas de gas de combustión (Heynderickx, Oprins, Marin, & Dick, 2001)

Posteriormente, también en 2001, los mismos autores publicaron un estudio similar sobre perfiles 3D asimétricos de flujo y temperatura en hornos de *cracking*. En este estudio se simuló el horno bajo condiciones de calentamiento no uniforme (boquilla de salida de gas de combustión en posición asimétrica), se evidenció que el calentamiento no uniforme puede mejorar la eficiencia térmica del horno y el proceso de *craqueo* (Arno J. M. Oprins, Heynderickx, & Marin, 2001).

En 2003, Oprins y Heynderickx realizaron la simulación en CFD de la zona radiante de un horno industrial de craqueo térmico, obteniendo perfiles de flujo y presión. En su trabajo concluyeron que la utilización de una malla tetraédrica no-estructurada permite evitar problemas y errores en el cálculo de los perfiles de presión cuando se usa una malla prismática semi-estructurada para la solución de las ecuaciones de flujo (A.J.M. Oprins & Heynderickx, 2003).

En 2006, Stefanidis *et al* realizaron la simulación en CFD de la combustión en un horno de *cracking* utilizando diferentes modelos de combustión. Se obtuvieron perfiles de flujo, temperatura y concentración de especies químicas en la zona radiante de un horno industrial de *cracking* mediante la utilización de 2 modelos de combustión: el *Eddy Dissipation Concept* con cinética de reacción detallada y el *Eddy Break Up Model* con cinética de reacción simplificada. Al comparar los resultados obtenidos con ambos modelos, sugieren que se deben utilizar modelos de combustión más sofisticados como el *Eddy Dissipation Concept* con cinética de reacción detallada para el modelamiento de la combustión en hornos de *cracking* bajo condiciones normales de operación (Stefanidis et al., 2006).

En 2007, X. Lan *et al* realizaron la simulación numérica de los procesos de transferencia de calor y reacción en hornos de etileno. Los resultados de la simulación mostraron información detallada de los perfiles de flujo, temperatura, distribución del *flux* de calor y distribución de concentración de especies, los cuales permiten entender los diferentes procesos y comportamientos presentes en la operación de hornos de etileno, ya que además del proceso de combustión se simuló el proceso de reacción, lo cual se conoce como simulación acoplada. Este tipo de simulaciones es una herramienta muy valiosa para la optimización y diseño de hornos (Lan, Gao, Xu, & Zhang, 2007).

Posteriormente, en 2010 Aminian *et al* realizaron una investigación sobre los perfiles de temperatura y flujo en un diseño alternativo de un horno industrial de craqueo usando CFD. En el estudio utilizaron el modelo RNG k- ϵ para modelar la turbulencia, los modelos P1 y DO para representar la radiación y el *Eddy Dissipation Model* para la combustión. Se evidenció que los modelos P1 y DO son apropiados como método de solución para la ecuación de transferencia por radiación y el *Eddy Dissipation Model* para la combustión en hornos industriales de craqueo.

Asimismo, se simuló un diseño alternativo para investigar el mejoramiento de la recirculación del gas de combustión y la distribución de temperatura al interior del horno.

El diseño alternativo mostró una mejor distribución de los perfiles de temperatura en los tubos del reactor, así como una menor temperatura pico de llama (Aminian J., Shahhosseini SH., Bayat M., 2010).

En 2011, Díaz-Mateus y Castro-Gualdrón realizaron la simulación de la zona radiante de dos hornos de refinería usando CFD y obtuvieron perfiles de temperatura al interior del horno y temperatura pico en la superficie de los tubos. Los resultados fueron validados usando datos industriales de refinería obteniendo buena concordancia. Adicionalmente, compararon los valores de temperatura de piel de tubo obtenidos por medio CFD con valores obtenidos usando la metodología *Zone Method*, concluyendo que los valores obtenidos con CFD estuvieron más acordes a las mediciones reales (Díaz-Mateus & Castro-Gualdrón, 2011).

En 2012, Yang J *et al* realizaron la simulación numérica acoplada de la combustión y el proceso en hornos de coquización. Los perfiles obtenidos coincidieron con mediciones industriales. Adicionalmente, se investigó el efecto de la estructura del horno en la distribución de campos físicos y condiciones del lado de proceso simulando un caso comparativo con un mayor espacio entre los quemadores y las paredes. Los resultados mostraron que el caso comparativo mejora la uniformidad de la distribución del *flux* de calor (Yang, Tai, Wang, Xiao, & Yang, 2012).

Posteriormente, también en 2012, Hachem *et al* realizaron el modelamiento de la transferencia de calor y fluidos turbulentos al interior de hornos industriales. El enfoque del trabajo fue el modelamiento matemático de sólidos calentados al interior del horno. Para resolver

las ecuaciones de los fenómenos de transporte se utilizó el método de los elementos finitos y para simular la interacción solido-fluido se utilizó el método de volumen inmerso combinado con adaptación anisotrópica de la malla computacional. El modelo planteado puede producir soluciones numéricas acertadas a los flujos laminares y turbulentos que pueden ser comparados en algunos casos con resultados reportados en la literatura (Hachem et al., 2013).

En 2013, A. Rebola *et al* realizaron la simulación en CFD de un horno de laboratorio de combustión sin llama en la cual compararon los diferentes modelos de turbulencia, combustión y mecanismos de reacción. Los resultados fueron validados usando datos experimentales de laboratorio de la operación de un horno a pequeña escala con metano como combustible. En los que obtuvieron se evidenció que los diferentes modelos de turbulencia no presentan diferencias significativas en cuanto a la temperatura promedio y especies químicas principales.

Adicionalmente, los modelos de combustión basados en el concepto de *flamelet* mostraron un fuerte aumento en temperatura y fracción molar de CO_2 a lo largo del eje del quemador en comparación con datos experimentales, a pesar de que producen predicciones satisfactorias en otros lugares. Por otro lado, el modelo de combustión EDC usado junto con mecanismos de reacción detallada mostró buenas predicciones (A. Rebola, Coelho, & Costa, 2013).

En el año 2015, Xuegang *et al* realizaron la simulación numérica en CFD del lado de la combustión de un horno de refinación de vacío. Se simuló el flujo, la combustión, la transferencia de calor y la emisión de NO. También se investigó el efecto del exceso de aire en la distribución de la temperatura del gas de chimenea y las emisiones de NO mediante la simulación de casos comparativos (Li et al., 2015).

Luego en 2016, Ziani y Chaker estudiaron el efecto de la presión ambiental en la combustión turbulenta no premezclada de una mezcla de 20% hidrogeno y 20% metano usando un modelo 2D en CFD. Como principales resultados encontraron que el incremento en la presión ambiental provoca un aumento en la fracción másica de NO producido, una reducción en la distribución radial de la fracción másica de mezcla promedio y en la expansión radial y axial de la llama. En cuanto a la fracción másica de CO, se encontró que el incremento de presión ambiental no tiene un efecto significativo sobre este parámetro (Ziani & Chaker, 2016).

Más tarde en el año 2017, Bo Liu *et al* realizaron la simulación numérica tridimensional de un quemador industrial con combustible por etapas con el fin de optimizar los parámetros geométricos. El efecto del ángulo de inyección de gas primario, la inyección de gas por etapas el ángulo y la posición de la pistola de etapas en el tamaño de la llama y la emisión de NO se analizó en función de los perfiles de temperatura, fracción de mezcla estequiométrica, índice de NO térmico y la emisión global de NO. Los resultados obtenidos se validaron con datos experimentales del quemador a escala completa (1,4 MW) con diferentes factores de exceso de aire. Los resultados indican el factor más importante que afecta la emisión de NO es la posición de la pistola de etapas, seguida por el ángulo de inyección de gas por etapas y el ángulo de inyección de gas primario, respectivamente (B. Liu, Bao, Wang, & Xu, 2017).

Posteriormente también en el 2017, Z. Fang *et al* realizaron una simulación CFD acoplada para estudiar la pirolisis de la nafta en un horno tubular industrial. En su estudio implementaron el modelo zonal de recirculación bidimensional para la estimación del campo de flujo, lo cual redujo el tiempo de cálculo computacional. Los perfiles de temperatura obtenidos usando el método de la zona de recirculación son más uniformes que los obtenidos por el método estándar

y los resultados del método de la zona de recirculación muestran buena concordancia con los datos industriales (Fang, Qiu, & Zhou, 2017).

Luego en ese mismo año Denev *et al* realizó el diseño de un quemador para un horno industrial para postcombustión térmica mediante CFD. Este diseño permite variar el ángulo del cono y el número de remolinos de la mezcla entrante. Esto permite ajustar la posición de la llama y así mejorar la oxidación de los compuestos orgánicos y a su vez reduce el riesgo de daño térmico en el quemador. Finalmente compararon los perfiles de velocidad y temperatura obtenidos con el antiguo y el nuevo diseño del quemador concluyendo que el diseño optimizado permite utilizar mezclas de gases de amplio rango de poder calorífico y cargas térmicas (Denev, Dinkov, & Bockhorn, 2017).

A finales de 2017 se publicó la investigación de Iancu *et al*, donde realizó la simulación en CFD del proceso de combustión en hornos industriales usando mezclas de combustible con vapor de agua para reducir las emisiones de NOx. En este estudio concluyeron que a medida que se agrega vapor de agua al combustible hasta un máximo de 25%, se reduce la temperatura de únicamente 5 K a la salida del horno, mientras que la temperatura pico se reduce en 40 K. Sin embargo, el efecto de adición del vapor de agua se hizo más evidente fue en las emisiones de NOx, que se redujeron a la mitad (Iancu et al., 2017).

Según lo establecido anteriormente, se han publicado diversas investigaciones acerca de la simulación de procesos de combustión en hornos industriales en CFD, pero a la fecha no se reportan trabajos en la literatura que investiguen el efecto de la variación de la composición química del combustible (poder calorífico) sobre los perfiles de velocidad, temperatura, especies

y condiciones operativas del horno como temperatura de piel de tubo, eficiencia y emisiones contaminantes.

2 Hipótesis

Es posible que la variación en la composición química y el poder calorífico de las mezclas de gases provoquen alteraciones significativas en el proceso de combustión en hornos de refinería y en sus principales variables operacionales como temperatura de piel de tubo y emisiones contaminantes, estos efectos se pueden determinar mediante el análisis de los perfiles de flujo, temperatura y concentración de especies obtenidos por medio de CFD.

3 Objetivos

3.1 Objetivo general

Realizar un estudio paramétrico del efecto de la variabilidad del poder calorífico relacionado con el cambio en la composición química de las mezclas de gases en la combustión en hornos de refinería mediante dinámica de fluidos computacional (CFD).

3.2 Objetivos específicos

- Desarrollar una simulación en CFD que represente el proceso de combustión en la zona radiante de un horno típico de la industria de refinación de petróleo.
- Verificar los resultados obtenidos de la simulación utilizando datos industriales de operación del horno y/o datos de literatura científica.
- Evaluar el efecto de la variabilidad de la composición química del combustible en la combustión y las principales variables operacionales del horno mediante un análisis paramétrico simulando casos comparativos.

4 Metodología

A continuación se presenta la metodología utilizada para el cumplimiento de los objetivos específicos, la cual está basada en la estructura típica de un código CFD y se puede observar en la siguiente gráfica (Xamán & Gijón-Rivera, 2016)

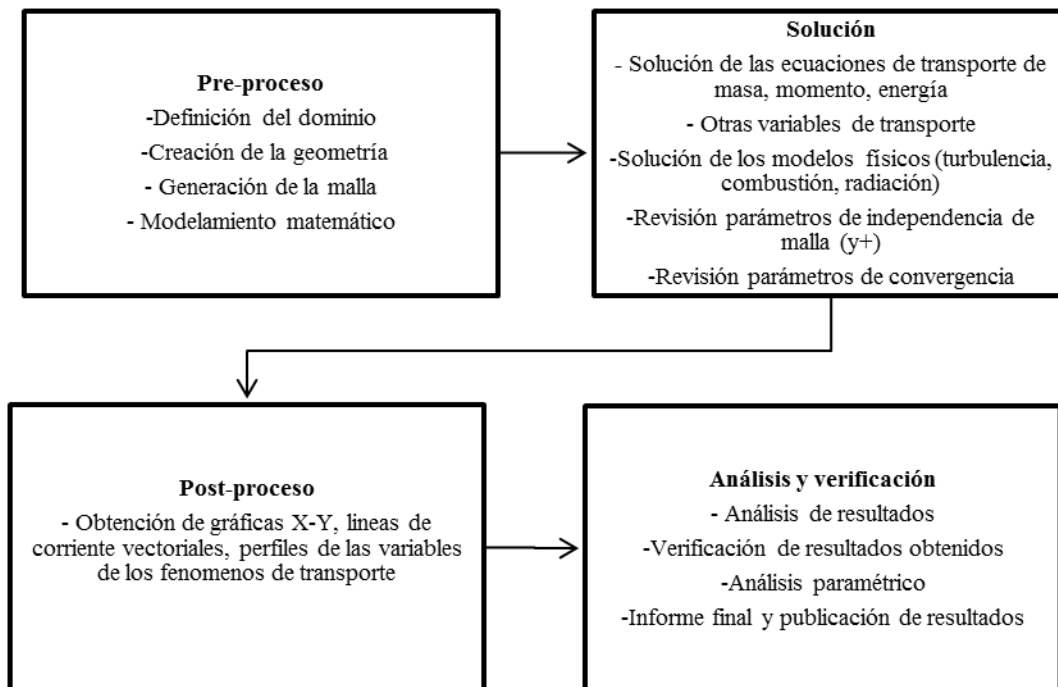


Figura 2. Etapas para el desarrollo de los objetivos planteados

4.1 Fase I: Pre-proceso

En esta primera fase se llevó a cabo una revisión bibliográfica acerca de las generalidades de la técnica CFD y su aplicación en el modelamiento de procesos de combustión, modelos matemáticos para representar la turbulencia, combustión y radiación y los estudios publicados acerca de modelamiento de hornos de refinería mediante CFD, la cual continuó a lo largo de toda la investigación. Al mismo tiempo, se realizaron las siguientes actividades:

- Selección del dominio a simular: La primera etapa en este análisis CFD fue la definición del dominio a simular. Como se mencionó anteriormente, en este proyecto se simuló un horno de refinería tipo cabina por lo cual el dominio está constituido por la sección del horno a simular. En esta etapa se hizo uso de algunas técnicas para reducir el tamaño del dominio, una de ellas es la simetría que consiste en fraccionar el dominio en partes simétricas. Para el desarrollo de este proyecto se utilizó el *software* comercial ANSYS FLUENT. Asimismo, se analizaron las condiciones de operación.
- Creación de la geometría: A continuación se realizó el dibujo de la geometría del horno a simular (CAD), lo cual se realiza dentro de la interfaz del *software*.
- Generación de la malla computacional: Posteriormente se procedió a generar la malla computacional y de esta manera discretizar el dominio del problema en un número finito de celdas o volúmenes de control.
- Modelamiento matemático: En esta etapa se plantearon y analizaron los modelos matemáticos seleccionados de los fenómenos de turbulencia, combustión y radiación junto con las ecuaciones fundamentales de conservación de los fenómenos de transporte, las cuales se resolvieron de forma iterativa en la etapa de solución.

4.2 Fase II: Solución

En esta fase se llevó a cabo la solución de la simulación del horno de refinería planteado y comprende las siguientes actividades:

- Condiciones de frontera: se establecieron las condiciones iniciales y de frontera para resolver la simulación.
- Solución de las ecuaciones de transporte y modelos de turbulencia, combustión y radiación: se ejecutó el *solver* del *software* y se dio inicio la solución iterativa de las ecuaciones fundamentales de conservación de los fenómenos de transporte junto con los modelos de turbulencia, combustión y radiación establecidos previamente.
- Revisión de parámetros de independencia de malla y (y^+): se verificó que la solución de las ecuaciones sea independiente de la malla, es decir que las soluciones numéricas obtenidas en diferentes tamaños de malla coincidan dentro de un nivel de tolerancia. Se seleccionó un tamaño de malla de inicial, que posteriormente fue refinada y se analizó el comportamiento de la temperatura a lo largo del eje de simetría hasta alcanzar el tamaño adecuado. Asimismo, las celdas de las paredes fueron dimensionadas para cumplir la condición de valores de y^+ (30-300) y poder así poder usar las *standard wall functions* del modelo $k-\epsilon$.
- Revisión de parámetros de convergencia: En esta etapa se establecieron los parámetros de convergencia para la solución iterativa de las ecuaciones de transporte y los modelos planteados. En este caso se estableció como criterio de convergencia que los residuales las variables lleguen a 10^{-4} , excepto el residual de energía cuyo límite se estableció en 10^{-6} .

4.3 Fase III: Post-proceso

Una vez resuelta la simulación, se realizaron las tareas de post-procesamiento, que incluyen las siguientes actividades:

- Obtención de gráficas XY, líneas de corriente vectoriales y perfiles de variables de los fenómenos de transporte: en esta etapa se mostraron gráficamente los resultados obtenidos del comportamiento de las variables características de los fenómenos de transporte a través de gráficas XY, líneas de corriente vectoriales, gráficas de contorno, entre otros.

4.4 Fase IV: Análisis y verificación

Finalmente, se realizará el análisis del modelo con las siguientes actividades:

- Análisis de resultados: el análisis de los resultados obtenidos se realizará con respecto a los perfiles obtenidos de flujo, temperatura y especies químicas junto con las emisiones contaminantes y la temperatura de piel de tubo, las cuales son las variables de operación más importantes de un horno de refinería. Los perfiles de velocidad y temperatura que presenten uniformidad conllevan a una distribución de calor uniforme a lo largo del horno, lo que favorece el proceso de transferencia de calor y previene la formación de coque en los tubos, lo cual mantiene su vida útil. En cuanto a la temperatura de piel de tubo, esta debe encontrarse cerca del límite establecido por el fabricante, que para este caso (Acero 5 Cr-0,5Mo) es alrededor de 922 K para evitar daños y disminución en la vida útil.

- Verificación de resultados obtenidos: se realizó la verificación de los resultados obtenidos de la simulación, lo cual se podía hacer de dos maneras, con datos de literatura científica o con datos industriales de operación. En la literatura diversos autores han reportado la verificación y validación de sus modelos y simulaciones de la combustión en hornos de refinería comparando los resultados obtenidos con datos industriales de operación. En este sentido, Guihua et al. (2011); Lan et al. (2007); Li et al. (2015) y Yang et al. (2012) compararon los resultados obtenidos con datos industriales de operación como temperatura de los gases de combustión a la salida de la zona de radiación, coeficiente de exceso de aire y porcentaje de oxígeno en el gas de combustión.

Asimismo, Díaz-Mateus & Castro-Gualdrón (2011) compararon la temperatura de los gases a la salida de la zona de radiación y los perfiles de temperatura de ciertas zonas de un horno obtenidos de la simulación con termografías, las cuales son imágenes obtenidas a través de un dispositivo conocido como cámara termográfica que permite captar la radiación infrarroja del espectro electromagnético sin necesidad de contacto físico con el objeto de estudio y así generar un perfil de temperatura con exactitud.

Por otro lado, los trabajos de (Habibi et al., 2007a, 2007b) y Aminian J., Shahhosseini SH., Bayat M. (2010) *et al* realizaron la verificación de los resultados obtenidos con datos reportados en la literatura. Debido a la poca disponibilidad de datos industriales de operación, en este trabajo se realizó la verificación usando datos de literatura científica basado en el trabajo realizado por Díaz-Mateus & Castro-Gualdrón (2011).

- Análisis paramétrico: Posteriormente, se simularon casos comparativos en los cuales se realizó el cambio en la composición química (poder calorífico) del gas combustible y se

analizó el efecto que produce sobre los perfiles mencionados anteriormente, la temperatura de piel de tubo y las emisiones contaminantes.

- Informe final y publicación de resultados: por último se realizó la escritura del informe final y la publicación de los resultados mediante la elaboración de un artículo científico y cuatro participaciones en eventos.

5 Simulación en CFD del Horno de Refinería

A continuación se presenta el procedimiento, características y consideraciones tenidas en cuenta durante la simulación del proceso de combustión en un horno típico de una refinería de petróleo realizada en ANSYS Fluent y su posterior análisis de resultados.

5.1 Definición del dominio y geometría

El horno seleccionado para la simulación es un horno tipo cabina de serpentín horizontal con quemadores en el piso. Debido a que el horno presenta un diseño simétrico, solamente es necesario simular una sección representativa del horno, que en este caso corresponde a 8 m de alto, 3 m de largo y 1,4 m de ancho y un solo quemador. El diseño CAD realizado se observa en las figuras 3 y 4. En la figura 5 se observa un *zoom* del quemador, el cual es de tipo *John Zink*, muy comunes en hornos de refinería. En este diseño el aire entra por el centro del quemador y el gas por las pequeñas aberturas circulares que se encuentran alrededor de la entrada de aire. En total son 6 aberturas de entrada de gas de $4,216 \cdot 10^{-3}$ m de diámetro y 1 entrada de aire 0,2158 m de diámetro. La altura del quemador es de 0,8 m.

5.2 Generación de la malla computacional

En esta etapa se generó la malla computacional de cálculo en formato .msh a partir de la geometría creada anteriormente. En este caso el enmallado se dividió en secciones con el fin de usar el mayor número de hexaedros posible, los cuales se usaron para enmallar la cámara de combustión. Para enmallar el quemador se usaron celdas no-estructuradas tetraédricas y poliédricas ya que estas se adaptan mejor a los pequeños detalles y curvaturas presentes en algunas partes del quemador y se pueden enmallar con mayor detalle.

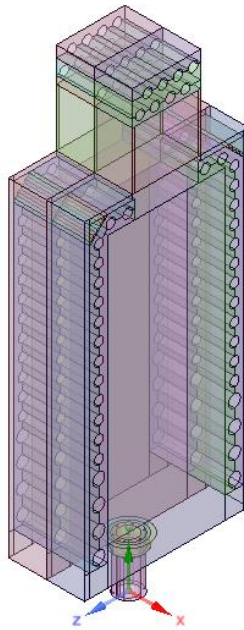


Figura 3. Geometría del segmento del horno a simular con un quemador

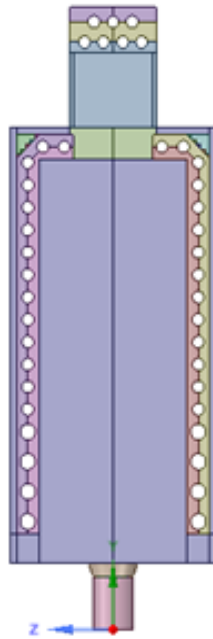


Figura 4. Vista frontal del segmento del horno a simular

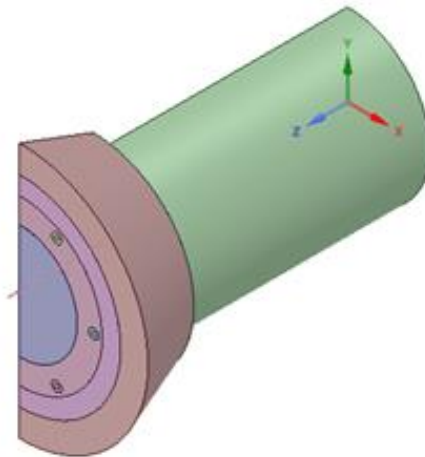


Figura 5. Geometría del quemador tipo *John Zink* y su eje de simetría.

En la figura 6 se observa la malla computacional generada para la geometría. Esta es la primera malla que se genera, la cual contiene 425665 nodos. En la etapa de solución se realizó el estudio de independencia de malla para hallar el tamaño adecuado.

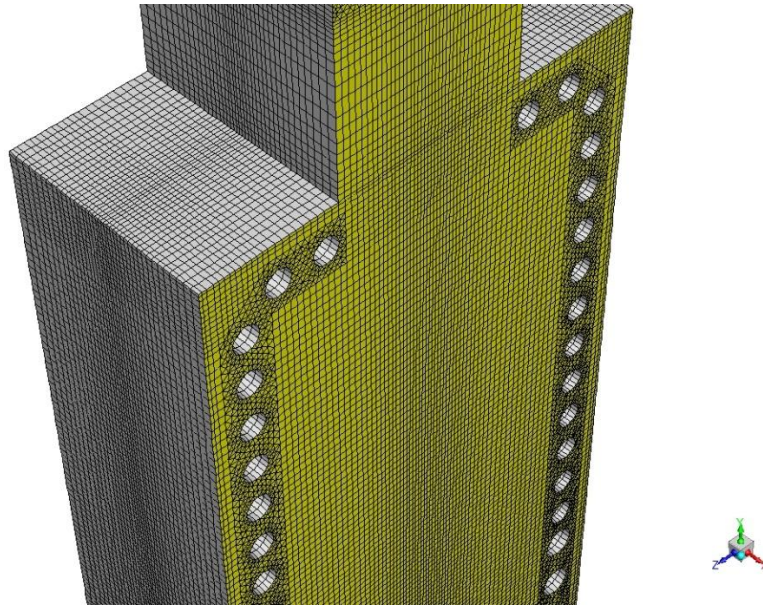


Figura 6. Malla computacional generada para el horno.

5.3 Condiciones de frontera y de operación

A continuación se describen las condiciones de frontera y de operación establecidas para la simulación del horno. Como se mencionó anteriormente, debido a la dificultad en la obtención de datos industriales de un horno de refinería, las condiciones de frontera y de operación se establecieron tomando como referencia el trabajo publicado por Díaz-Mateus & Castro-Gualdrón (2011).

De acuerdo con la información presentada en la Tabla 2 se establecieron las siguientes condiciones:

Entrada:

- Flujo másico de combustible: 0,0692 kg/s
- Flujo másico de aire: 1,3351 kg/s
- Aire teórico: 11%

- Poder calorífico inferior: 1150 BTU/ft³
- Temperatura entrada aire: 308,15 K
- Temperatura entrada gas: 308,15 K
- Quemadores simulados: 1
- Composición del gas combustible:

Tabla 2. Composición molar del combustible

Fuente: (Díaz-Mateus & Castro-Gualdrón, 2011)

Especie	Fracción Molar
CH ₄	0,27163
H ₂	0,2919
N ₂	0,04541
O ₂	0,0056
C ₃ H ₈	0,17461
C ₄ H ₁₀	0,03584
C ₅ H ₁₂	0,00489
C ₂ H ₆	0,15109
C ₆ H ₁₄	0,01904

Paredes: Se utilizaron las *standard wall functions* en las paredes de la cámara de combustión, así como la condición de no-deslizamiento. Las paredes están hechas de un material refractario de 0,6 de emisividad y coeficiente de transferencia de calor estimado en 10 W/m²-K. El grosor de las paredes laterales y del techo es de 0,127 m. El grosor de las paredes del quemador es de 0,2032 m.

Tubos: cuando se elaboró la geometría se dejó un hueco en la parte donde se encuentran los tubos, pero se crea una pequeña pared para simular la superficie de los mismos. Adicionalmente,

fue necesario suministrar otros parámetros para poder determinar la temperatura de piel de tubo. Estos son el grosor, $8,2 \cdot 10^{-3}$ m para los tubos 22 al 19 y $7,112 \cdot 10^{-3}$ m para los tubos restantes, la emisividad estimada en 0,94, los coeficientes de transferencia de calor y las temperaturas.

Estos dos últimos parámetros dependen del fluido de proceso que este circulando y se obtuvieron de acuerdo a la información presentada en la Figura 7. El horno contiene 44 tubos en 2 pasos de 22 tubos cada uno y como son totalmente simétricos solamente es necesario conocer los datos de un solo paso y se asume que son iguales para los tubos restantes del otro paso. Todos estos datos se introducen como condición de frontera de los tubos en el software.

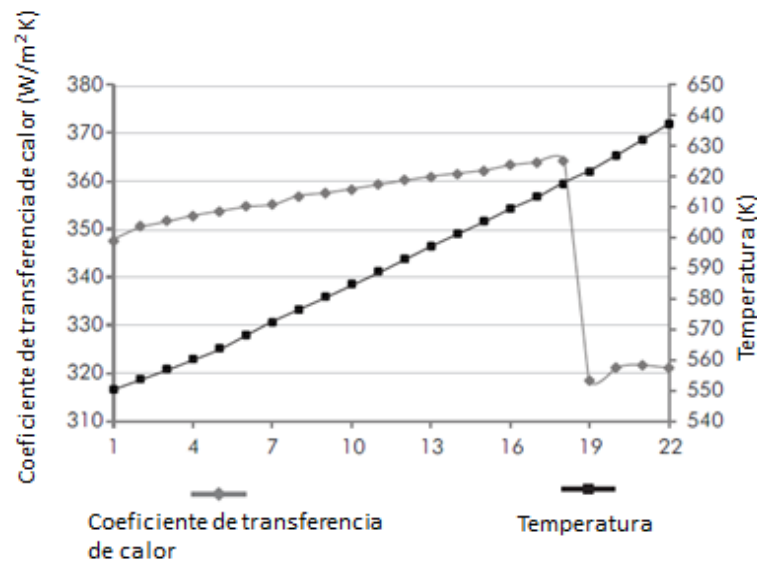


Figura 7. Coeficientes de transferencia de calor y temperaturas usadas en la simulación. (Díaz-Mateus & Castro-Gualdrón, 2011)

Salida: La condición de frontera a la salida es la de *pressure outlet* de cero y *backflow total temperature* de 900 K.

5.4 Solución

Luego de establecer las condiciones de frontera, se procedió a ejecutar el *solver* usando los modelos matemáticos y físicos seleccionados y descritos anteriormente. Adicionalmente, se utilizó el esquema UPWIND de segundo orden para la discretización del término convectivo en las ecuaciones gobernantes, este esquema, a diferencia de los de primer orden, permite minimizar los errores de difusión y dispersión, proporcionando un error de truncamiento de segundo orden (Tu, Yeoh, & Liu, 2008). También se implementó el algoritmo SIMPLE para el acople presión-velocidad y el esquema PRESTO! para la discretización del término de presión.

Estos métodos son considerados como los más estables para este tipo de problemas y han sido ampliamente utilizados en trabajos similares, entre los cuales se destacan los de Habibi *et al* (2007a); Lan *et al* (2007); Yang *et al* (2012); Amândio Rebola, Costa, & Coelho (2013), entre otros. Las simulaciones se llevaron a cabo en un computador con procesador Intel Core i7 de sexta generación de 3,4 Ghz, 8 núcleos y 8GB de memoria RAM.

Para lograr una solución estable y convergida bajo estas condiciones, se usó un procedimiento de solución basado en 3 etapas. En primer lugar, se resuelven las ecuaciones de flujo, energía y especies con las reacciones desactivadas, también conocido como simulación en frío o *cold flow simulation*. En la segunda etapa se activan las reacciones para continuar los cálculos y finalmente en la tercera etapa se activa el modelo de radiación. Esta metodología de solución permite minimizar los errores numéricos y es más fácil identificarlos cuando estos se presentan.

A continuación se presentan cada una de las etapas de la simulación, iniciando con la simulación en frío (reacciones desactivadas) y 1500 iteraciones. En la figura 8 se observan los residuales de la primera etapa de solución. En trabajos similares reportados en la literatura se

propone como criterio de convergencia que los residuales de las ecuaciones alcancen como mínimo 10^{-4} , a excepción de la ecuación de energía cuyo residual debería llegar a 10^{-6} (Díaz-Mateus & Castro-Gualdrón, 2011; Habibi et al., 2007b; A. Rebola et al., 2013). Por lo tanto, estos serán los criterios a tener en cuenta con los residuales para la convergencia de la simulación.

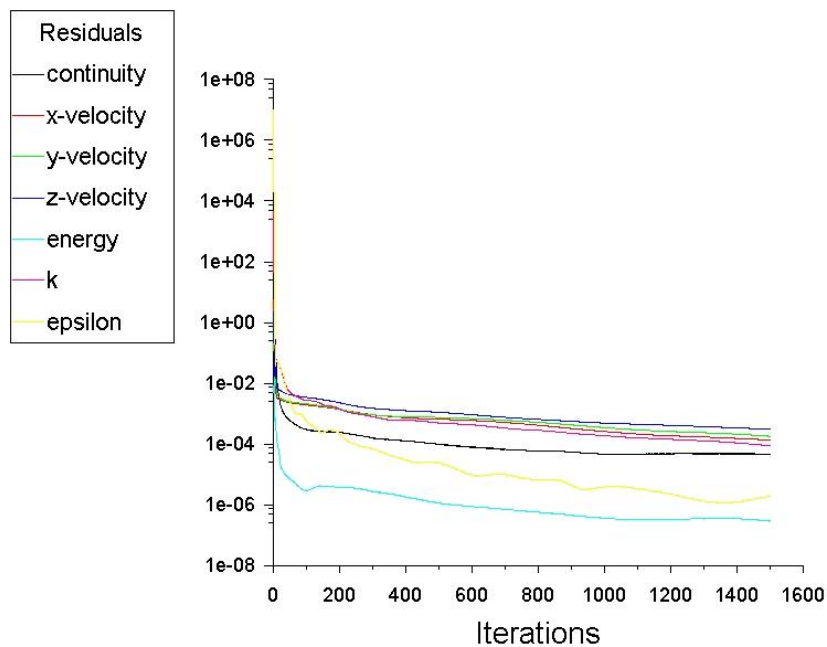


Figura 8. Residuales de la primera etapa de la simulación

En la segunda etapa de la simulación se activó la reacción de combustión sin premezcla para continuar los cálculos con otras 1.500 iteraciones, como se observa en la Figura 9. Finalmente, se activó el modelo de radiación para continuar con la última etapa de la solución. En este caso el modelo corrió por 5000 iteraciones adicionales debido a que se torna más complejo, requiriendo de más iteraciones para lograr la convergencia. En la Figura 10 se observan los residuales de las tres etapas de simulación y en la Tabla 3 el resumen de los valores de los residuales.

Aunque la simulación ya alcanzó la convergencia, es importante realizar un análisis de independencia de malla para hallar el tamaño adecuado y así usar el menor tiempo computacional sin afectar los resultados.

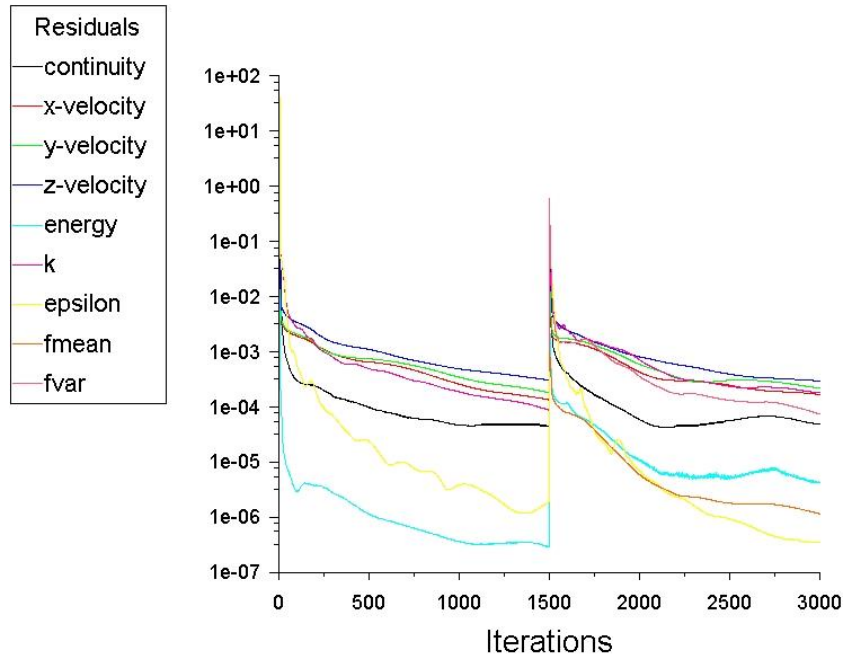


Figura 9. Residuales de la segunda etapa de la simulación

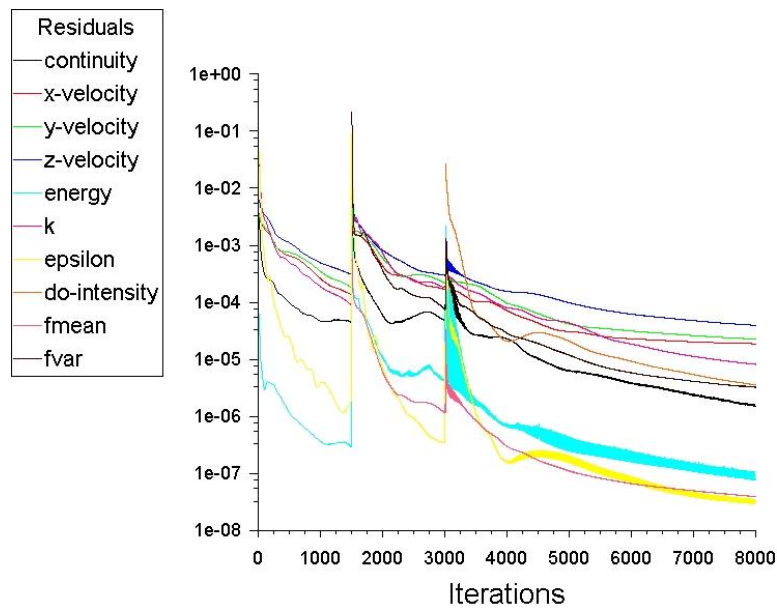


Figura 10. Residuales de la tercera etapa de la simulación

Para hallar el tamaño de malla adecuado se debe analizar el comportamiento una variable de interés, en este caso de la temperatura a lo largo del eje de simetría con distintos tamaños de malla. Estas mallas se obtuvieron realizando un proceso de refinamiento donde se incrementó el número de nodos subdividiendo los nodos ya existentes en las regiones donde se presentan los mayores gradientes de temperatura, que en este caso es el centro del horno, donde se desarrolla la llama y las zonas cercanas a los tubos en las paredes laterales. El primer tamaño es el de 425.665 nodos, el segundo de 1.660.754 nodos y el tercero de 1.963.630 nodos; al realizar estas 2 nuevas simulaciones con las mallas refinadas se repite el mismo procedimiento de simulación por etapas realizado inicialmente con la malla de 425.665 nodos.

Tabla 3. Resumen de los residuales de las etapas de simulación

Variable	Iteraciones		
	1500	3000	8000
Continuidad	4,4288e-05	4,8351e-05	1,5202e-06
Veloc. X	1,3479e-04	1,6757e-04	1,8740e-05
Veloc. Y	1,7997e-04	2,1835e-04	2,2693e-05
Veloc. Z	3,0678e-04	2,9609e-04	3,9516e-05
Energía	2,8954e-07	4,1991e-06	7,7089e-08
K	8,7526e-05	1,8539e-04	8,1420e-06
Epsilon	1,8941e-06	3,4989e-07	3,0045e-08
Frac.Promedio	n.a	1,1613e-06	3,8865e-08
Frac.Varianza	n.a	7,4300e-05	3,2704e-06
Do-Intensidad	n.a	n.a	3,5728e-06

En la figura 11 se observa el comportamiento de la temperatura a lo largo del eje de simetría en función de la altura. La temperatura a lo largo del eje de simetría con la malla 2 y 3 es casi igual por lo tanto se selecciona el tamaño de malla 2 para realizar las simulaciones del presente trabajo ya que requiere un menor tiempo computacional que la malla 3.

Por otro lado, es importante mencionar que las celdas en las paredes de la geometría fueron cuidadosamente dimensionadas para cumplir con la condición del rango de valores de y^+ , que

debe ser entre 30 y 300 para poder usar las *standard wall functions* en los modelos k- ϵ , incluido el k- ϵ realizable.

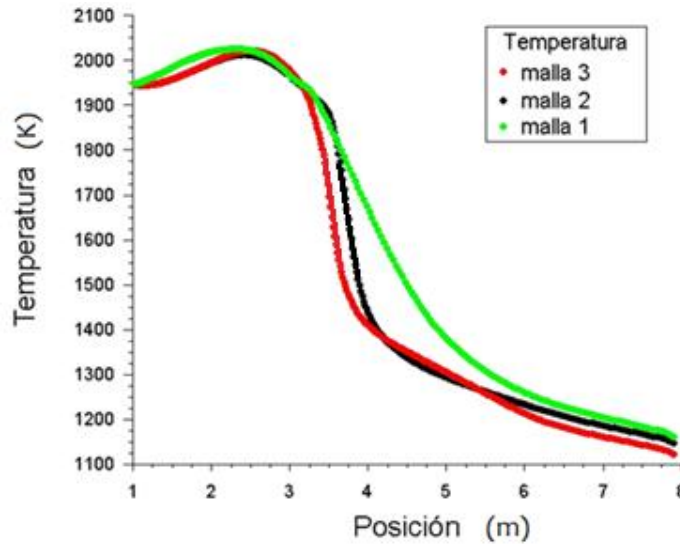


Figura 11. Comportamiento de la temperatura a lo largo del eje de simetría

En la figura 12 se observan los contornos de Y^+ en las paredes del horno donde se evidencia que se cumple el límite máximo de 300.

5.5 Post-proceso y análisis de resultados

En esta etapa se analizan los resultados obtenidos de la simulación, lo cual incluye perfiles de flujo, temperatura, concentración de especies químicas, emisiones contaminantes y temperatura de piel de tubo. Inicialmente se analizarán los resultados de la primera simulación (caso base), en la cual se utilizó el gas combustible con la composición definida en la Tabla 5-2 con su respectiva verificación usando datos de literatura científica conocidos. Posteriormente se analizarán los resultados de las simulaciones con las distintas mezclas de gases.

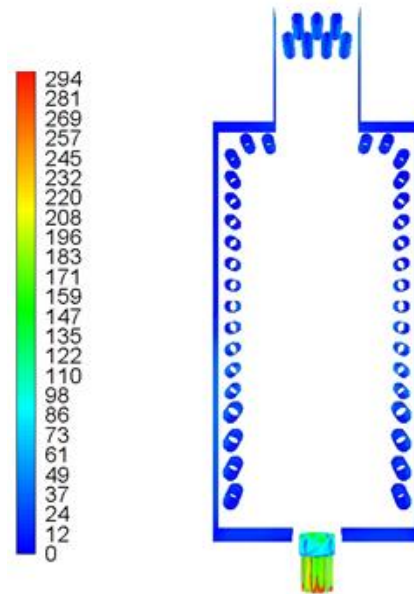


Figura 12. Contorno de Y+ en las paredes del horno.

5.5.1 Verificación de los resultados obtenidos. Para verificar los resultados obtenidos de la simulación del caso base, se utilizaron los datos reportados en el trabajo realizado por Díaz-Mateus & Castro-Gualdrón (2011), en donde compararon la temperatura de los gases de combustión a la salida de la zona de radiación con datos industriales obtenidos por medio de termocuplas ubicadas en dicha zona. Como se mencionó anteriormente, diversos autores también reportaron la validación y/o verificación de sus simulaciones implementando esta estrategia. En la tabla 4 se presenta la comparación de las temperaturas obtenidas y su respectivo margen de error.

Tabla 4. Comparación de resultados obtenidos con datos de literatura científica

Parámetro	Resultado simulación	Resultado simulación*	Error (%)	Medición real*	Error (%)
Temperatura de gases de combustión a la salida(K)	1142,25	1220,1	6,38	1205,3	5,23

*Datos reportados por Díaz-Mateus & Castro-Gualdrón (2011).

De acuerdo a la información presentada en la tabla 4, se observa que la temperatura de los gases a la salida obtenida de la simulación esta en concordancia con los datos reportados en la literatura, con un margen de error de 6,38% con respecto a los datos de la simulación y un 5,23% con respecto a datos industriales (medición real).

5.5.2 Perfil de flujo. En la figura 13 se observa el perfil de flujo al interior del horno en el plano de simetría. Se puede evidenciar que en las inmediaciones del quemador, se forman 2 zonas de recirculación en ambas paredes laterales que se extienden hasta la mitad del horno, esto es debido a la velocidad con la que entran el aire y el gas y a la reacción de combustión que ocurre. Este efecto disminuye a lo largo de la altura del horno debido a que se aleja cada vez más del quemador, aunque en las esquinas superiores también se observa una pequeña zona de recirculación, pero esta se forma debido a que estas paredes representan una obstrucción para el flujo de los gases de combustión.

No obstante, un mayor tiempo de residencia del gas de combustión en las zonas de recirculación implica un incremento significativo en la transferencia de calor de la llama hacia los tubos, lo cual en condiciones normales es algo de esperarse y que se tiene en cuenta a la hora de diseñar este tipo de hornos (Lan et al., 2007).

5.5.3 Perfil de temperatura. La figura 14 muestra el perfil de temperatura al interior del horno para el caso base. Se observa que el perfil de temperatura obtenido está en concordancia con el perfil de flujo mostrado anteriormente, ya que este tiene una fuerte influencia sobre la temperatura.

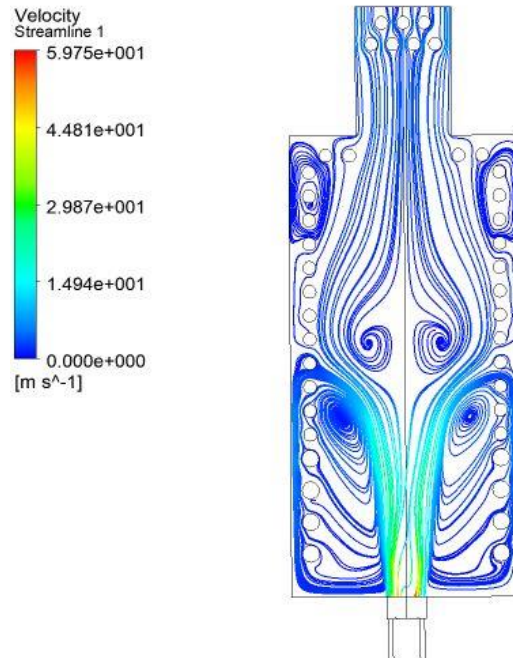


Figura 13. Perfil de flujo con líneas de corriente al interior del horno en el caso base

La región donde se concentra la mayor parte del calor es en el centro donde se desarrolla la llama, que presenta un patrón regular, sin alteraciones y la distribución de calor es homogénea. Sin embargo, también se observa que el calor tiende a dirigirse hacia las paredes laterales en la mitad del horno, por lo cual es de esperarse que la temperatura de piel de los tubos ubicados desde el piso hasta la mitad de la altura sea mayor que el resto de los tubos del horno. Esta es una característica típica de los hornos tipo cabina, donde el fluido de proceso circula en sentido contrario (de arriba hacia abajo) a los gases de combustión (de abajo hacia arriba), por lo cual los tubos ubicados desde la mitad del horno hasta el piso siempre deben estar a mayor temperatura que los demás.

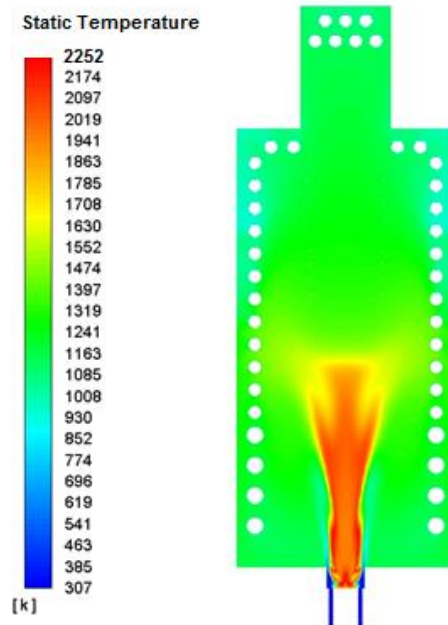


Figura 14. Perfil de temperatura al interior del horno en el caso base

5.5.4 Temperatura pico de piel de tubo. La temperatura pico de piel de tubo es uno de los parámetros operacionales más importantes de un horno de refinería, ya que determina la vida útil de los tubos y la duración del tiempo de operación. En algunas ocasiones, se puede presentar ruptura o daño en los tubos cuando se excede el límite de temperatura establecido por el fabricante, el cual depende del material de fabricación. Para el horno objeto de este estudio, el límite de temperatura es alrededor de 922 K. En la figura 15 se observa la temperatura pico de piel de tubo en 1 paso del horno que corresponde a 22 tubos del lado izquierdo, enumerados desde la esquina inferior hasta la fila de 4 tubos ubicada en la zona de choque, cerca de la chimenea.

La información presentada concuerda con el perfil de temperatura observado en la figura 14, donde se evidencia que los tubos con mayor temperatura de piel son los que están ubicados más cerca de la llama, que corresponden a los tubos 1 al 9 y a medida que se alejan la temperatura disminuye.

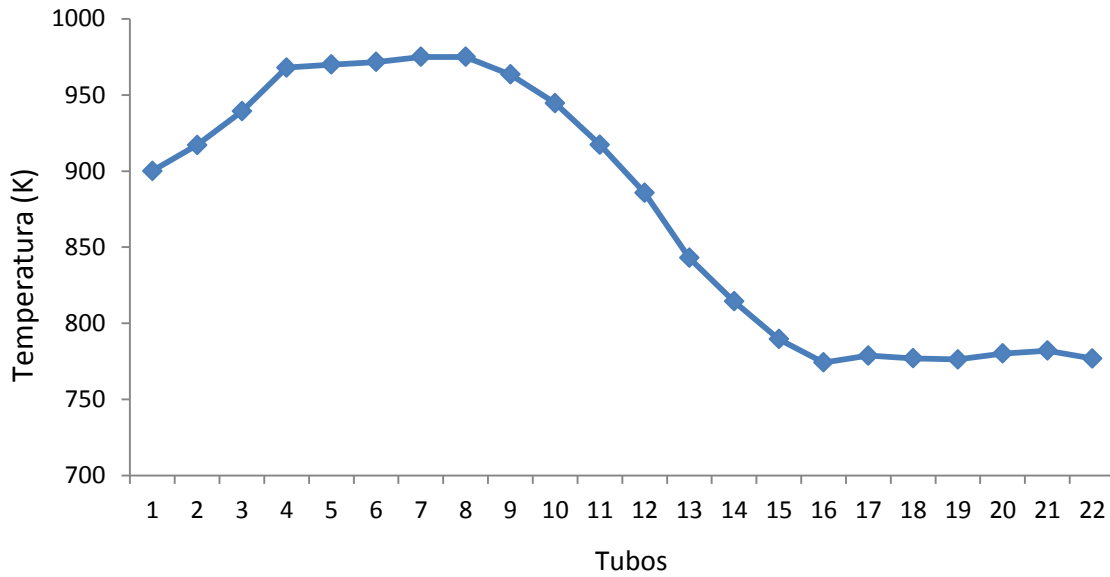


Figura 15. Temperatura pico de piel de tubo en el caso base

También se observa que se excede el límite de 922 K establecido para el material de los tubos, llegando a 960 K y aunque la diferencia es de solo 38 K, es conveniente realizar inspecciones que permitan determinar si con este exceso de temperatura está ocurriendo algún tipo de deterioro en los tubos más cercanos a la llama.

5.5.5 Perfiles de concentración de especies químicas. El análisis de los perfiles de concentración de especies químicas en los gases de combustión se realiza teniendo en cuenta los productos de combustión más importantes que son CO_2 y los NO_x que son contaminantes formados en procesos de combustión a alta temperatura (alrededor de 1300 K). En este trabajo no se tuvo en cuenta la concentración de CO debido a que el modelo PDF de fracción de mezcla, que fue seleccionado para modelar la combustión, calcula las especies químicas bajo la suposición de equilibrio químico, es decir que no calcula con precisión especies intermedias como CO.

La figura 16 muestra el perfil de fracción molar de CO_2 al interior del horno en el caso base. A diferencia del perfil de CO , se puede observar que existe una concentración significativa de CO_2 dentro del horno, con un valor máximo de aproximadamente 0,0990, la presencia de este producto final de combustión indica que esta se llevó a cabo de manera completa.

Asimismo, algunos autores han reportado estudios de la estructura de llama usando el valor de la fracción molar de CO_2 en trabajos de simulación de hornos de refinería mediante CFD (Guihua et al., 2011; G. D. Stefanidis et al., 2006). En la figura 17 se observa el valor de la fracción molar de CO_2 en función de la altura en una línea trazada en el centro del quemador.

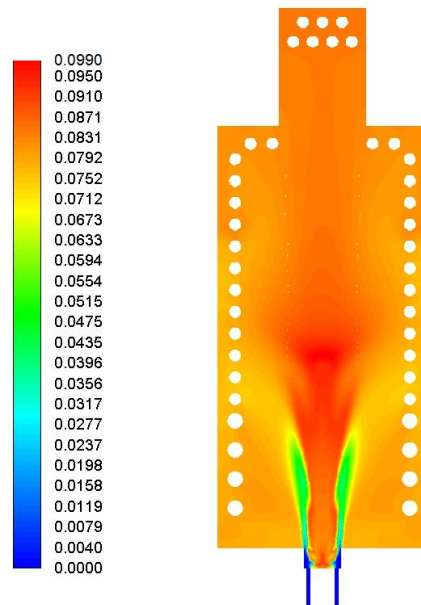


Figura 16. Perfil de fracción molar de CO_2 en el caso base

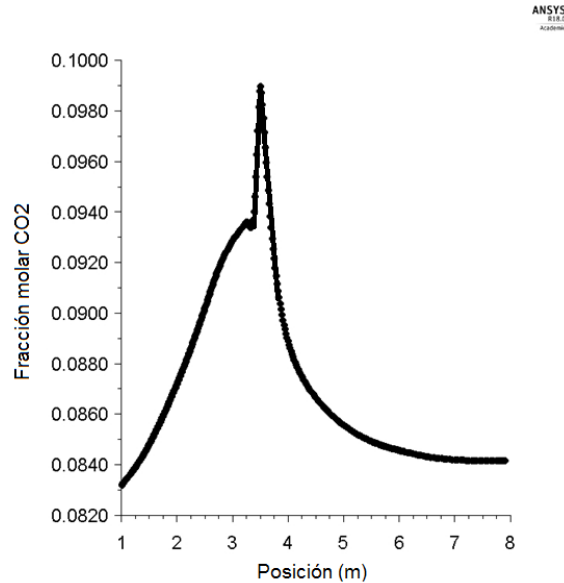


Figura 17. Fracción molar de CO₂ en función de la altura en el centro del quemador

Según la información reportada por los autores mencionados anteriormente, es posible determinar la altura máxima de la llama trazando una línea vertical en el centro del quemador y analizando la variación de la fracción molar de CO₂ en función de la altura. El valor máximo de la fracción molar indica la altura máxima de la llama, en este caso de acuerdo a la información de la figura 17, la altura máxima de la llama es de aproximadamente 3,55 m donde la fracción molar llega a 0,0990. Posteriormente la fracción molar disminuye rápidamente hasta llegar a un valor constante aproximado de 0,0840, lo cual concuerda con la información presentada en la figura 16.

Otro aspecto importante a tener en cuenta en el análisis de especies químicas en las simulaciones de hornos de refinería es la concentración de NO, la cual se observa en la figura 18.

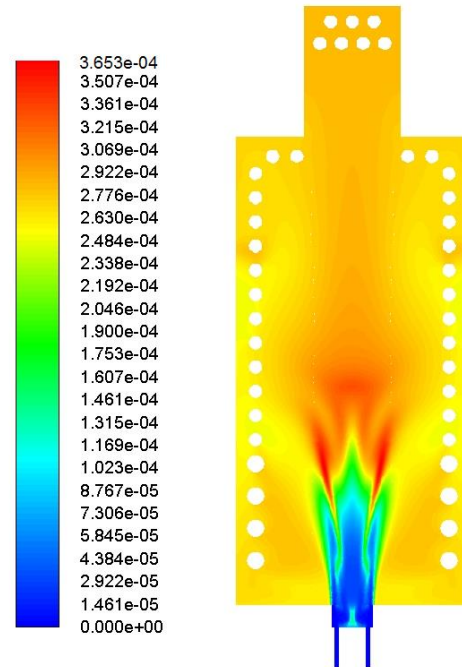


Figura 18. Perfil de fracción molar de NO en el caso base

La formación de NO es un proceso complejo que comprende diferentes mecanismos de formación, que incluyen el NO térmico, NO rápido, *fuel nitrogen*, *reburn*, entre otros. El cálculo de la concentración de esta especie se lleva a cabo en la etapa de post-proceso cuando la simulación ya está totalmente convergida y en este caso se tuvo en cuenta el mecanismo de formación NO térmico ya que es el predominante en procesos de combustión con temperaturas mayores a 1300 K (Li et al., 2015). A estas temperaturas el NO es iniciado por la formación de tres radicales libres: oxígeno, nitrógeno y OH, que provienen de la oxidación del nitrógeno circundante bajo el calor liberado en la combustión, que reaccionan con las moléculas de aire, llevando a una rápida formación de NO.

En la figura 18 se puede evidenciar que se está formando NO debido a que la temperatura de combustión sobrepasa los 1300 K y su valor máximo se encuentra en la parte superior de la llama. El valor de la concentración de NO en ppm a la salida del horno se calculó en 31,03 ppm,

este valor sirve como base para comparar con los demás casos y establecer en cuál de ellos se genera la mayor cantidad de este contaminante.

6 Estudio Paramétrico Mediante Casos Comparativos

Para investigar el efecto del uso de mezclas de gases de refinería de diferente composición y poder calorífico, se simularon 4 casos comparativos usando 4 mezclas de gases obtenidas del trabajo realizado por Cala *et al* (2013) que hace parte de un estudio llevado a cabo anteriormente dentro del grupo de investigación CIDES. Los 4 casos comparativos fueron simulados usando las mezclas de gases de refinería mostradas en la tabla 5, que corresponden a dos mezclas de bajo poder calorífico (mezclas GR1 y GR2) y dos de alto poder calorífico (mezclas GR3 y GR4).

Tabla 5. Composiciones en porcentaje de las mezclas de gases de refinería usadas en los casos comparativos

Fuente: Cala et al (2013)

Especie	GR1	GR2	GR3	GR4
CH ₄	97	55	25	35
C ₂ H ₆	1	10	38	3
C ₃ H ₈	1	0	25	35
C ₄ H ₁₀	0	4	10	12
C ₂ H ₄	0,5	5	10	7
C ₃ H ₆	0,5	2	5	8
H ₂ S	0	4	2	0
H ₂	0	20	12	0
Poder calorífico inferior (BTU/ft ³)	913	955	1530	1800

Adicionalmente, en el estudio mencionado anteriormente también se determinó la cantidad de aire teórico necesario para garantizar la combustión completa para cada una de las mezclas, lo cuales es importante tener en cuenta a la hora de llevar a cabo las simulaciones. En la figura 19 se observa la relación de aire teórico requerido para cada una de las mezclas de la tabla 5.

Se determinó que para 1 kmol de GR1 es necesario suministrar alrededor de 9,8 kmol de aire, mientras que para 1 kmol de GR4 se deben suministrar cerca de 18,5 kmol de aire. Este aumento se presenta porque las mezclas de alto poder calorífico generalmente tienen mayores concentraciones de propano, butano y propileno, es decir hidrocarburos de alto peso molecular (Cala et al., 2013). Este es un aspecto muy importante a tener en cuenta al realizar las simulaciones para no correr el riesgo de presentar combustión incompleta.

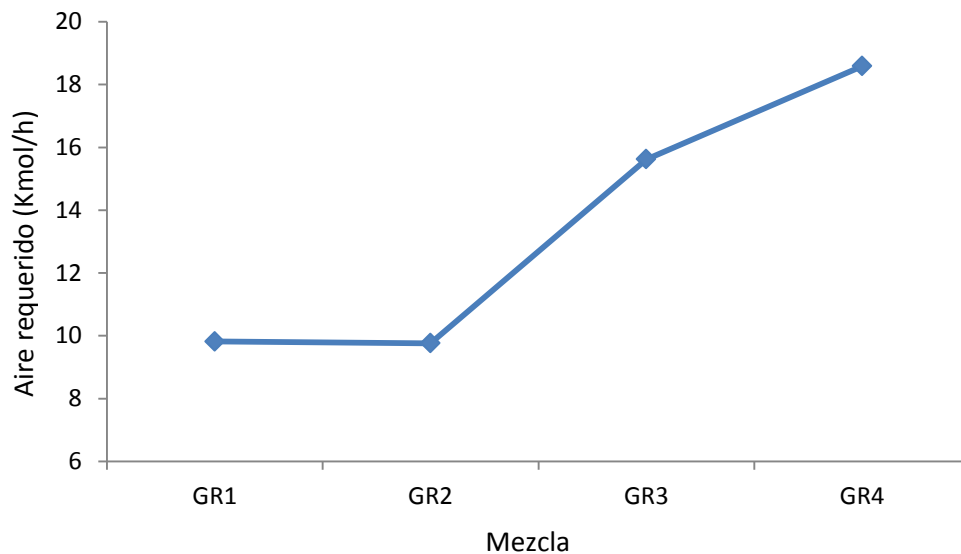


Figura 19. Aire teórico requerido para cada mezcla

Sin embargo, en el horno de refinería objeto de este estudio se monitorea constantemente el porcentaje de oxígeno en los gases de combustión a la salida mientras está operación, este parámetro se mantiene en un rango de valores entre 2% - 3% para que el horno opere de manera

óptima y se garantice la combustión completa, por lo cual el flujo de aire de cada caso simulado también cumplió con esta condición.

En cada una de las simulaciones de los 4 casos comparativos se mantuvieron constantes todos los parámetros de la simulación del caso base, a excepción de tres condiciones de frontera que son la composición del combustible, el flujo de gas y el flujo de aire a la entrada.

Estos dos últimos parámetros se ajustaron simultáneamente con el fin de conservar la estructura de llama lo más parecida posible al caso base, debido a que los quemadores están diseñados para generar un *swirl* (remolino) en la parte superior de llama, que se forma al inyectar el gas en dirección tangencial y el aire en dirección vertical, con una relación aire/combustible estimada en el rango de 18,46 y 19,25, de acuerdo con el caso base. Si esta condición no se cumple, no se genera el *swirl* y se produce un patrón de llama completamente diferente que se acerca demasiado a los tubos inferiores ocasionando un sobrecalentamiento excesivo de estos.

Teniendo en cuenta lo anterior, en los casos 1 y 2, que son los de bajo poder calorífico, se debe aumentar el flujo de gas y aire, ya que las mezclas GR1 y GR2 usadas en estos casos entregan menos cantidad de energía por unidad de volumen. Este cambio se realiza en la misma proporción de la variación del poder calorífico, que disminuye 20,6% en el caso 1 y 17% en el caso 2 con respecto al caso base, por lo cual se debió incrementar el flujo de gas en 20,6% y 17% respectivamente y mantener la relación aire/combustible de 18,46.

Por otro lado, en los casos 3 y 4 que son los de alto poder calorífico, se debe reducir el flujo de gas y aire, debido a que los gases de refinería GR3 y GR4 poseen mayor cantidad de energía por unidad de volumen y se debe de evitar un incremento en la temperatura de control al interior del horno. En el caso 3 el poder calorífico se incrementa en 33% y en el caso 4 56,5% con

respecto al caso base, no obstante, el flujo de gas no se puede reducir en la misma magnitud porque se altera el patrón de llama y no se genera el *swirl* en la parte superior, provocando un sobrecalentamiento excesivo de tubos.

Teniendo en cuenta esta restricción, mediante la realización de varias simulaciones se pudo encontrar que para el horno objeto de este estudio, con las condiciones de frontera definidas anteriormente, es posible reducir el flujo de gas como máximo 30% con respecto al caso base, con el fin de conservar la estructura de llama. Por lo tanto, los flujos de gas de los casos 3 y 4 se redujeron en 25% y 30 % respectivamente y también se mantuvo la relación aire/combustible de 18,46 como en los casos 1 y 2. En la tabla 6 se muestran las nuevas condiciones de flujo de aire y gas utilizadas en cada uno de los casos simulados.

Tabla 6. Condiciones de flujo de gas y aire en cada uno de los casos simulados

Parámetro	Caso 1	Caso 2	Caso 3	Caso 4
Combustible	GR1	GR2	GR3	GR4
Flujo de gas (kg/s)	0,08716	0,08316	0,05188	0,04842
Flujo de aire (kg/s)	1,609	1,532	0,9577	0,8939

6.1 Comparación de perfiles de flujo

La figura 20 muestra los perfiles de flujo obtenidos de las simulaciones del caso base (a), caso 1 (b), caso 2 (c), caso 3 (d) y caso 4 (e).

Al observar la información presentada en la gráfica se pueden evidenciar varias diferencias entre los perfiles de flujo de los diferentes casos. En primer lugar se puede notar que en los casos 1 (b) y 2 (c), que son los de gases de refinera de bajo poder calorífico, los perfiles de flujo son muy similares entre sí.

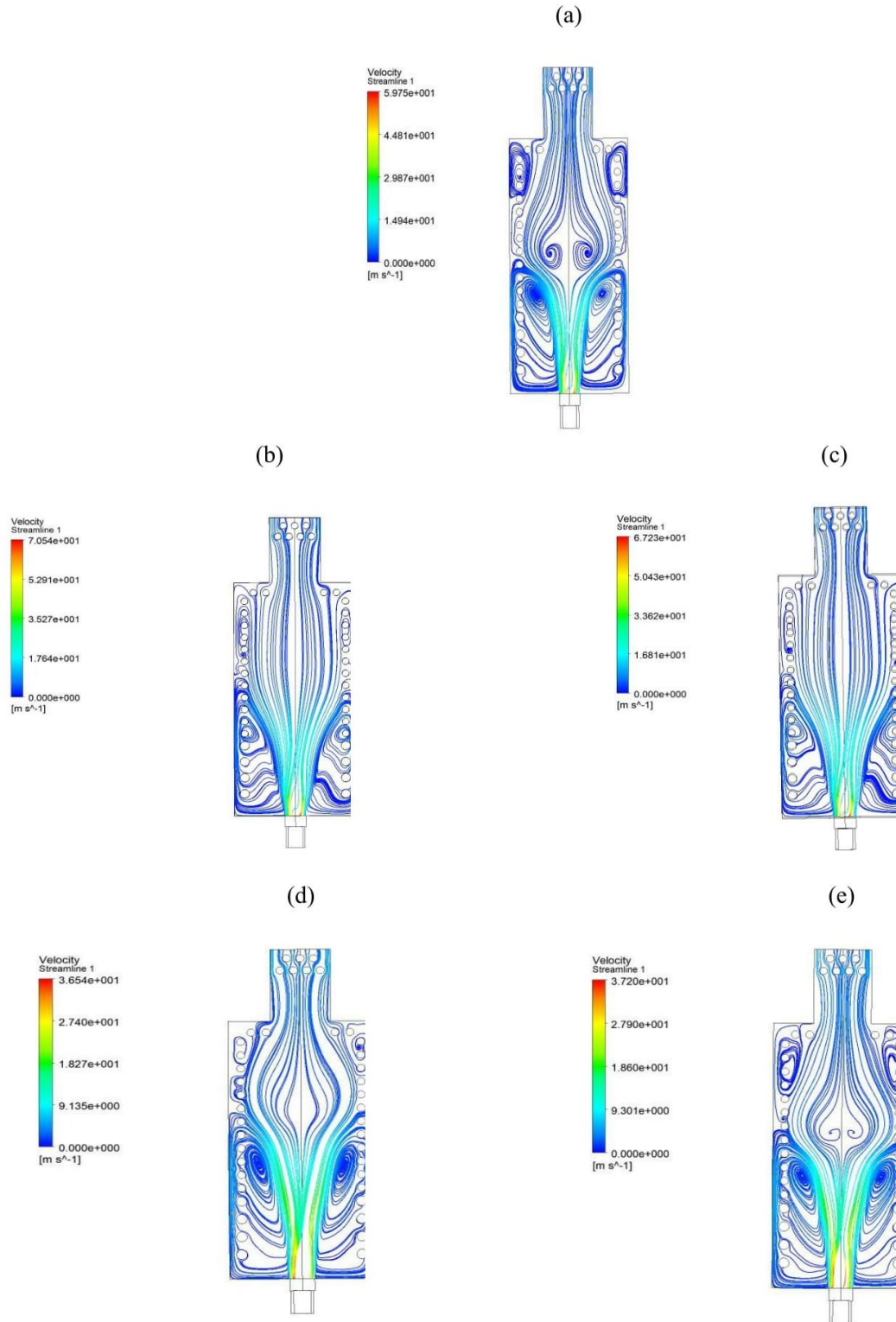


Figura 20. Comparación de perfiles de flujo en los casos simulados

Esto es debido a que sus condiciones de flujo de gas, aire y poder calorífico también son muy similares y por consiguiente es de esperarse que los perfiles de las demás variables se comporten de la misma manera en estos dos casos.

Asimismo, no se forman zonas de recirculación, mientras que en el caso base esto ocurre a la altura del sexto tubo, pero si se observa un componente vertical en los perfiles de flujo, es decir que predomina el flujo de gases de combustión hacia la parte superior del horno, lo cual afecta la distribución de temperatura, ya que se desvía gran parte del calor hacia arriba, provocando un incremento en la temperatura de los tubos superiores con respecto al caso base. Esto se debe a que en los casos 1 (b) y 2 (c) los flujos de gas y aire son mayores a los del caso base.

Por otro lado, en los casos 3 (d) y 4 (e), que son los de alto poder calorífico, los perfiles de flujo forman la zona de recirculación a la altura del sexto tubo, muy parecido al caso base (a) y además de esto, se observa que el flujo presenta menor componente vertical, lo que indica que puede haber un incremento en la temperatura de los tubos inferiores y una menor temperatura en los tubos superiores, ya que la mayor parte del calor se distribuye en las regiones cercanas a las zonas de recirculación. El caso 4 (e) es el que presenta menor flujo de gas, aire y mayor poder calorífico, por lo tanto es de esperarse que presente las mayores temperaturas en los tubos inferiores.

En síntesis, la composición química y el poder calorífico de las mezclas de gases de refinería afectan los perfiles de flujo al interior del horno, lo que a su vez afecta el tamaño de la llama y la distribución de calor, generando un sobrecalentamiento en las zonas donde se forma la recirculación cerca del quemador. Esto se puede corroborar de manera más detallada con los perfiles de temperatura y la temperatura pico de piel de tubo.

6.2 Comparación de perfiles de temperatura

La figura 21 muestra los perfiles de temperatura obtenidos de las simulaciones del caso base (a), caso 1 (b), caso 2 (c), caso 3 (d) y caso 4 (e).

De acuerdo a la información presentada en la figura 21, se observa que en los casos 1 (b) y 2 (c) se genera un patrón de llama ligeramente diferente al caso base, es decir que aunque se ajusten los flujos de gas y aire para compensar la disminución de poder calorífico, no se logra una llama totalmente igual a la del caso base, pero tampoco se observan alteraciones significativas que puedan afectar la distribución de calor.

Por otro lado, en los casos 3 (d) y 4 (e) se observa un patrón de llama muy parecido al caso base con un perfil de temperatura homogéneo y sin alteraciones, aunque se puede detectar una pequeña diferencia en el tamaño de llama, que en el caso base llega hasta el séptimo tubo, en el caso 3 hasta el octavo tubo y en el caso 4 hasta el noveno tubo. Por lo tanto, se puede afirmar que con las cuatro mezclas se genera un perfil de temperatura cercano al generado en el caso base, solo con ligeras diferencias en los casos 1(b) y 2(c) pero sin alteraciones que afecten la distribución de calor, aunque si se observan llamas de mayor tamaño.

Sin embargo, es posible que se presente calentamiento excesivo en los tubos en los casos 3 (d) y 4 (e), porque estas llamas liberan mayor cantidad de calor. Esto concuerda con la información presentada en los perfiles de flujo, donde se observan zonas de recirculación, las cuales indican los tubos que están expuestos a las temperaturas más altas.

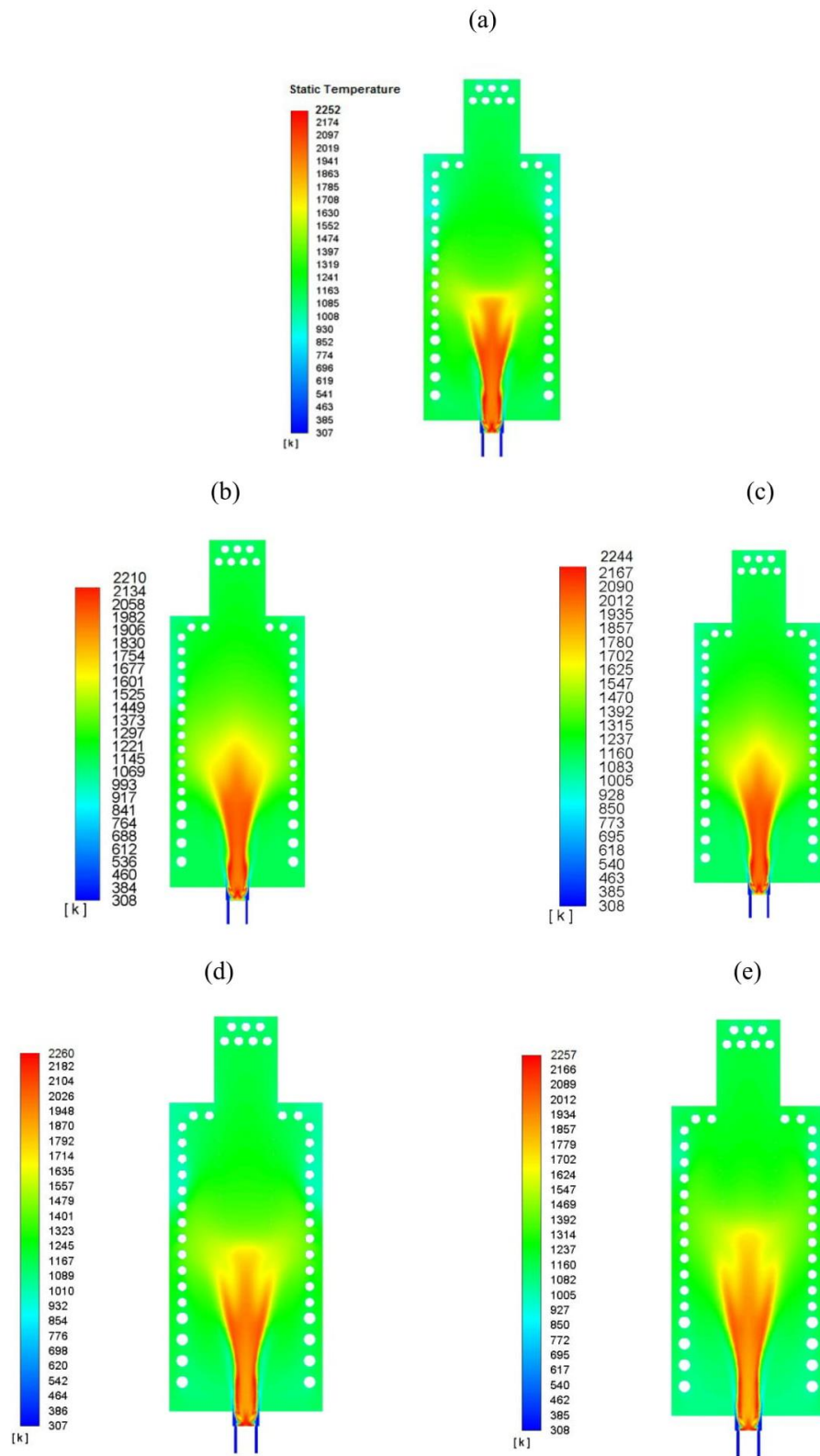


Figura 21. Comparación de perfiles de temperatura en los casos simulados

También se observa que las temperaturas máximas de los casos base, 3 (d) y 4(e) son muy similares entre sí, siendo la más alta 2260 K en el caso 3 (d), lo cual coincide con los resultados reportados por Cala *et al* (2013), donde se evidenció que la temperatura no aumenta directamente con el poder calorífico del gas y obtuvo igualmente la temperatura más alta con la mezcla del caso 3 (d).

6.3 Comparación de temperaturas pico de piel de tubo

En la figura 22 se presenta la comparación de las temperaturas pico de piel de tubo de cada uno de los casos simulados. Como se mencionó anteriormente, la temperatura pico de piel de tubo es uno de los parámetros operacionales más importante en un horno de refinería, por lo cual es conveniente que este se mantenga dentro del límite establecido por el fabricante, que para este caso es alrededor de 922 K.

La operación continua del horno por encima de este límite genera inconvenientes como disminución de la vida útil, incremento en la formación de coque y paradas por limpieza, favorece los mecanismos de corrosión a alta temperatura como oxidación, sulfidación, carburación y formación de polvo metálico y en el peor de los casos un posible rompimiento que genera un alto riesgo de explosión (Díaz-Mateus & Castro-Gualdrón, 2011; Guihua et al., 2011).

La figura 22 muestra claramente la diferencia que existe en la temperatura pico de los tubos 1 al 9 entre el caso base y los casos 1 y 2, que son los de bajo poder calorífico, se observa que la temperatura en estos casos disminuye por debajo del caso base, pero al mismo tiempo la temperatura de los tubos superiores aumenta. Esto coincide con los perfiles de flujo observados anteriormente, donde se evidencia que hay una mayor cantidad de flujo vertical de gases de

combustión, desviando a su vez el calor en esta dirección, lo cual incrementa la temperatura de estos tubos, mientras que en los tubos inferiores la temperatura disminuye con respecto al caso base debido a que las mezclas de gases liberan menos energía.

Por otro lado, los casos 3 y 4, que son los de alto poder calorífico, presentan temperaturas superiores en los tubos 1 al 9 con respecto al caso base. Esto concuerda con los perfiles de flujo y temperatura mostrada anteriormente, donde se evidenció que los casos de alto poder calorífico desarrollan una llama un poco más grande que los demás y con zonas de recirculación formadas a la altura del sexto tubo, generando un sobrecalentamiento en los tubos cercanos a la llama.

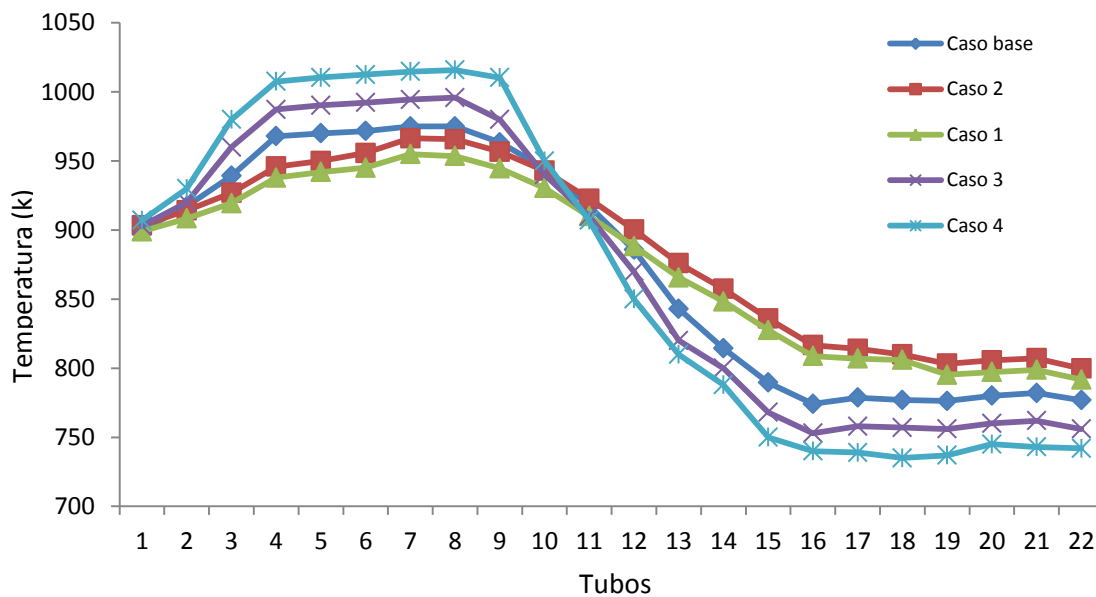


Figura 22. Comparación de temperaturas pico de piel de tubo en los casos simulados

Asimismo, en esta gráfica se observa la magnitud del sobrecalentamiento, ya que por ejemplo, en el caso 4, la temperatura pico del tubo 8 es de alrededor de 1015 K, es decir 93 K por encima del límite establecido por el fabricante, lo que se considera excesivo en comparación con los demás casos y conlleva a un riesgo de daño o posible ruptura.

Por otro lado, se pudo determinar que los casos 1 y 2 presentan temperaturas pico de piel de tubo muy similares entre sí, siendo el caso 1 el que presenta las temperaturas más cercanas al límite de 922 K, en este caso la temperatura más alta registrada es de 953 K en el tubo 8.

Con base en lo anterior, se puede afirmar que una disminución del poder calorífico del caso base de 17% y 20% que ocurre en los casos 1 y 2 respectivamente, mantiene la temperatura de piel de tubo al mismo nivel o incluso menor que el caso base, cumpliendo con el límite establecido por el fabricante, es decir el horno se encuentra en un punto de operación más seguro. En contraste, un aumento del poder calorífico del caso base de 33% y 56,5% que ocurre en los casos 3 y 4 respectivamente, afecta negativamente la temperatura pico en los tubos 1 al 9, llevando el horno a un punto de operación inseguro.

A partir del tubo 10, la temperatura pico de piel de tubo disminuye progresivamente en los casos base, 3 y 4, mientras que en los casos 1 y 2 se incrementa, pero esto no tiene ningún efecto negativo porque la temperatura se mantiene en un nivel máximo de 800 K, 122 K por debajo del límite de 922 K, lo que se considera seguro de acuerdo a los límites del material.

6.4 Comparación de perfiles de concentración de especies químicas

En la figura 23 se observan los perfiles de fracción molar de CO_2 al interior del horno obtenidos de todos los casos simulados.

De acuerdo con la información presentada en esta figura, se observa que en todos los casos existe una distribución significativa de CO_2 al interior del horno, ya que este es un producto final de combustión. El valor mínimo indica el punto donde se forma la llama y el valor máximo el punto más alto de la llama, como ya se mencionó anteriormente.

También se observa que los casos base (a), 3 (d) y 4(e) presentan perfiles muy similares, mientras que los casos 1 (b) y 2 (c) difieren levemente con respecto al caso base. Esto es de esperarse pues estas mismas diferencias se observaron en los perfiles de flujo, temperatura y temperaturas de piel de tubo.

En cuanto a los valores promedio de fracción molar de CO_2 en los gases de combustión calculados a la salida del horno, se determinó que en el caso base (a) este valor fue de 0,084068, en el caso 1 (b) 0,0796745 en el caso 2 (c) 0,078272, en el caso 3 (d) 0,095360 y en el caso 4 (e) 0,098716.

Estos resultados se pueden explicar teniendo en cuenta el trabajo realizado por Cala *et al* (2013), donde concluyeron que las mezclas de gases de refinería con mayores contenidos de propano, butano y demás hidrocarburos de alto peso molecular en su composición química producen mayores emisiones de CO_2 . Por lo tanto, es de esperarse que los casos 3 (d) y 4 (e) sean los que presenten mayor concentración de CO_2 en los gases de combustión a la salida, ya que estos son los que tienen el mayor contenido de estos hidrocarburos, como se observa en la tabla 6-1, lo que podría convertirse en una desventaja ambiental.

Por otro lado, los casos 1 (b) y 2 (c) son los que presentan la menor fracción molar promedio de CO_2 en los gases de combustión a la salida del horno, lo cual se explica debido a su alto contenido de hidrogeno, que es 20% en el caso 2, como se mostró en las tabla 5, ya que la combustión de hidrogeno no produce CO_2 y al bajo contenido de hidrocarburos de alto peso molecular como propano, butano, propileno, entre otros.

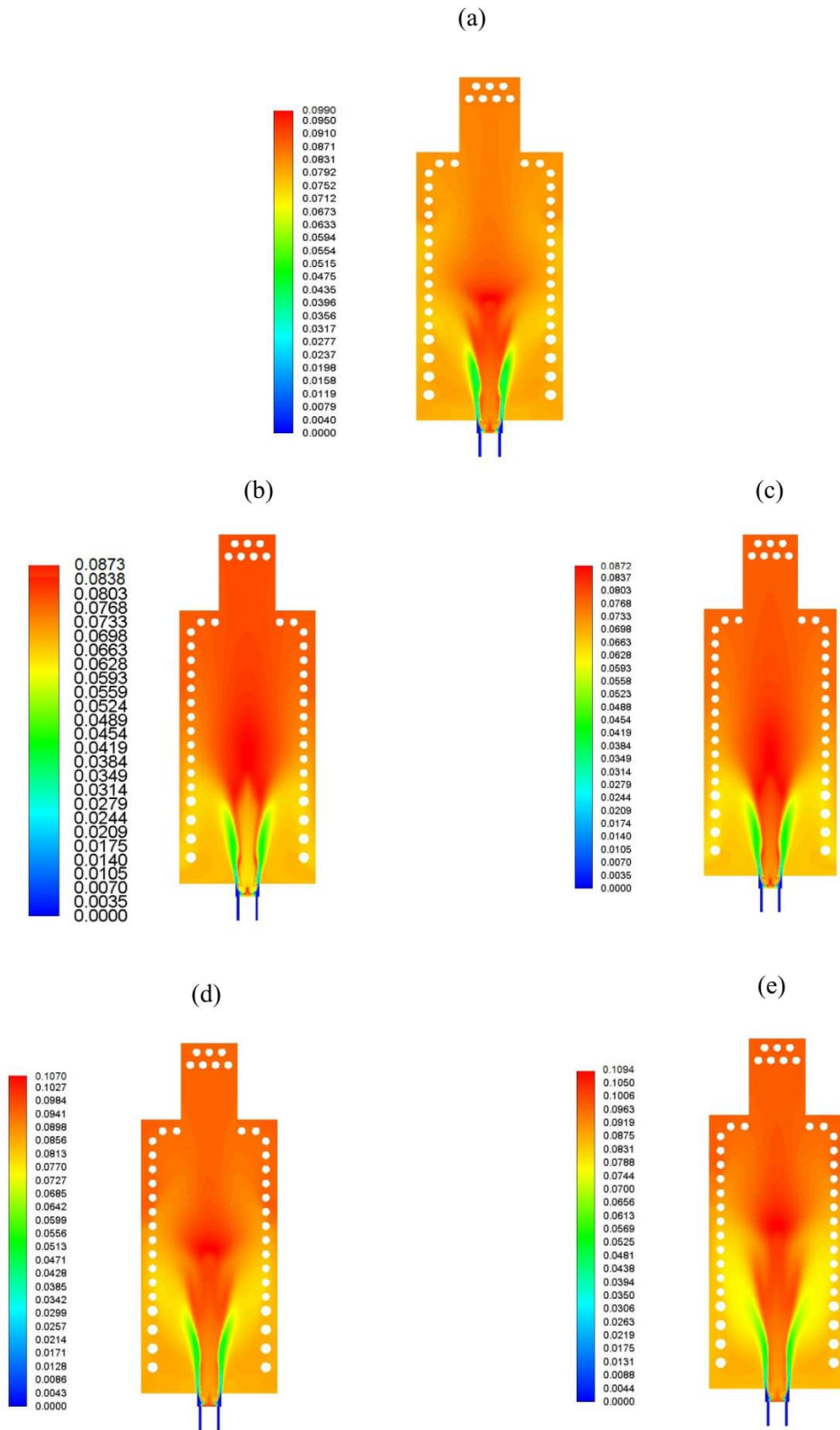


Figura 23. Comparación de perfiles de fracción molar de CO₂ en los casos simulados

Por último, se puede afirmar que el caso base (a) presenta un valor de fracción molar de CO_2 a la salida intermedio entre los casos mencionados anteriormente, lo que se debe a su alto porcentaje de hidrocarburos de mayor peso molecular (>32%) y de hidrogeno (29%) en su composición química.

Otro resultado interesante a analizar usando la fracción molar de CO_2 es la altura máxima que alcanza la llama en cada uno de los casos simulados, que se puede determinar trazando una línea vertical en el centro del quemador y calculando el valor de la fracción molar a lo largo de esa línea. En la figura 24 se observa el valor de la fracción molar de CO_2 en función de la altura en una línea vertical trazada en el centro del quemador en todos los casos simulados.

De acuerdo a la información presentada en esta figura, se puede afirmar que la llama que alcanza la mayor altura es la del caso 4 (e), que alcanza los 4,25 m, seguida del caso 3 (d) que llega a 4 m, luego el caso base (a) con 3,55 y finalmente los casos 1 (b) y 2 (m) con 3,2 m y 3,25 m respectivamente. Esto demuestra que la altura de la llama está relacionada con el poder calorífico de la mezcla utilizada, mientras mayor es el poder calorífico mayor es la altura de la llama y si el poder calorífico es menor, la altura de la llama también.

No obstante, esta diferencia no puede apreciarse mucho al comparar los casos 1 (b) y 2 (c) debido a que el poder calorífico de las mezclas utilizadas en esos casos es muy similar, de acuerdo con la información de la tabla 5. En síntesis, los casos 3 (d) y 4 (e), que son los de alto poder calorífico, presentan las llamas con mayor altura, las cuales generan sobrecalentamiento excesivo en los tubos 4 al 9 como ya se mencionó anteriormente, lo cual es una desventaja desde el punto de vista operacional.

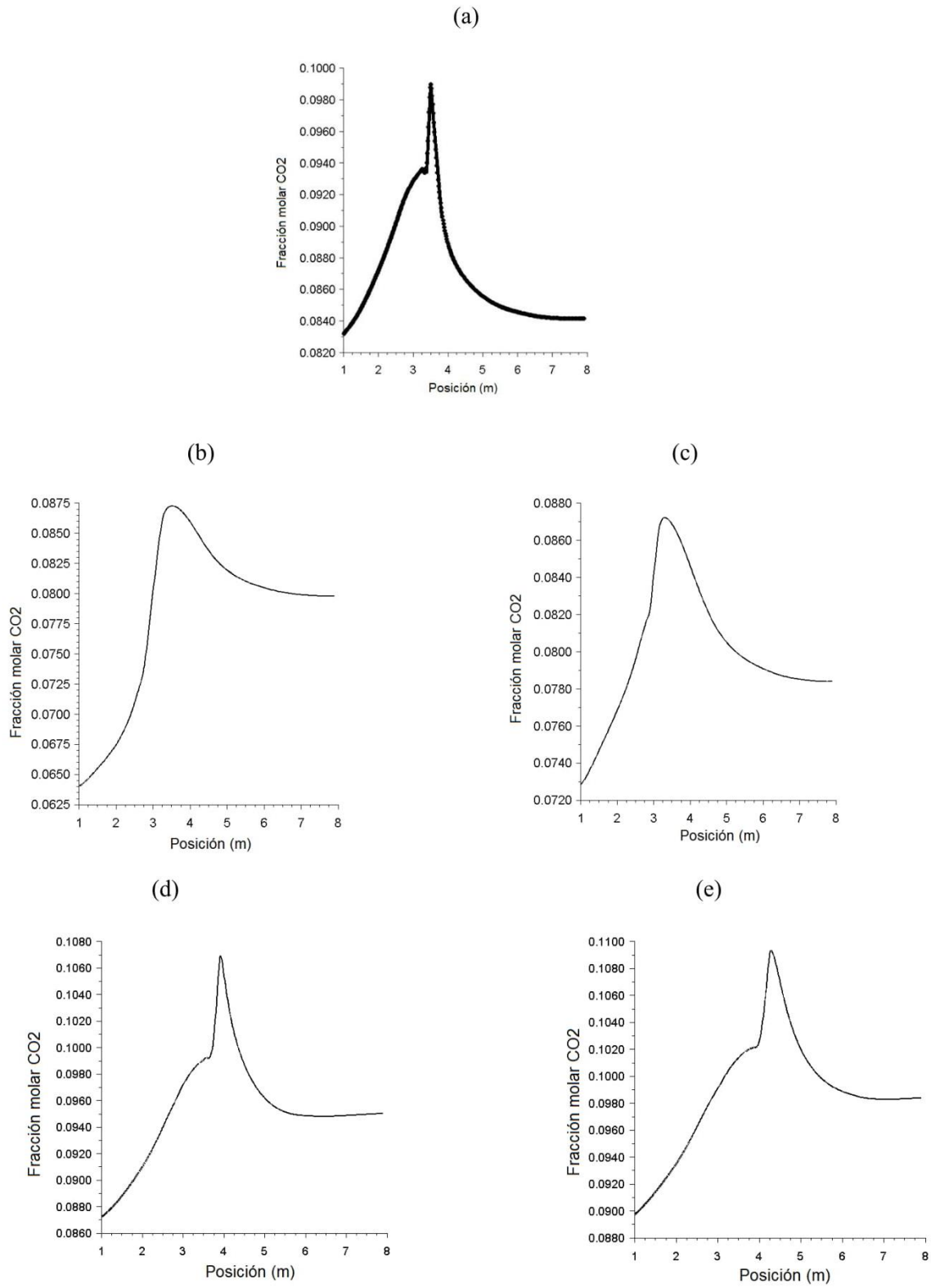


Figura 24. Fracción molar de CO₂ en el centro del quemador en los casos simulados

Por último, en la figura 25 se muestran los perfiles de fracción molar de NO al interior del horno en todos los casos simulados. Con base en la figura se puede afirmar que los casos con mayor fracción molar de NO al interior del horno son en orden descendente, el caso 4 (e), caso 3 (d), caso base, caso 2 (c) y el caso 1 (b). Esto se explica debido a que, como se mencionó anteriormente, los casos que forman las llamas más grandes son los casos de alto poder calorífico, es decir los 3 (d) y 4 (e), lo que coincide con los resultados reportados por Li *et al* (2015), donde afirmaron que la concentración de NO en los gases de combustión se incrementa con el poder calorífico del combustible, la temperatura y el tamaño de la llama.

Por otro lado, los casos 1 (b) y 2 (c) que son los de bajo poder calorífico, generan la menor cantidad de NO debido a que la llama que forman es de menor tamaño, mientras que el caso base (a) genera una concentración de NO al interior del horno intermedia entre los casos de alto y bajo poder calorífico.

Es importante mencionar que aunque el NO es generado constantemente a medida que los gases de combustión fluyen de abajo hacia arriba y este se va acumulando, la concentración de este elemento también se va diluyendo debido al flujo turbulento y las zonas de recirculación de los gases de combustión, especialmente en la parte superior del horno, razón por la cual se debe analizar la concentración de este contaminante a la salida del horno.

Las cantidades calculadas por medio de Fluent en partes por millón (ppm) a la salida del horno fueron las siguientes: caso 3 (d) 37,74 ppm, caso 4 (e) 35,08 ppm, caso base (a) 31 ppm, caso 1 (b) 14,52 ppm y caso 2 (c) 23,45 ppm.

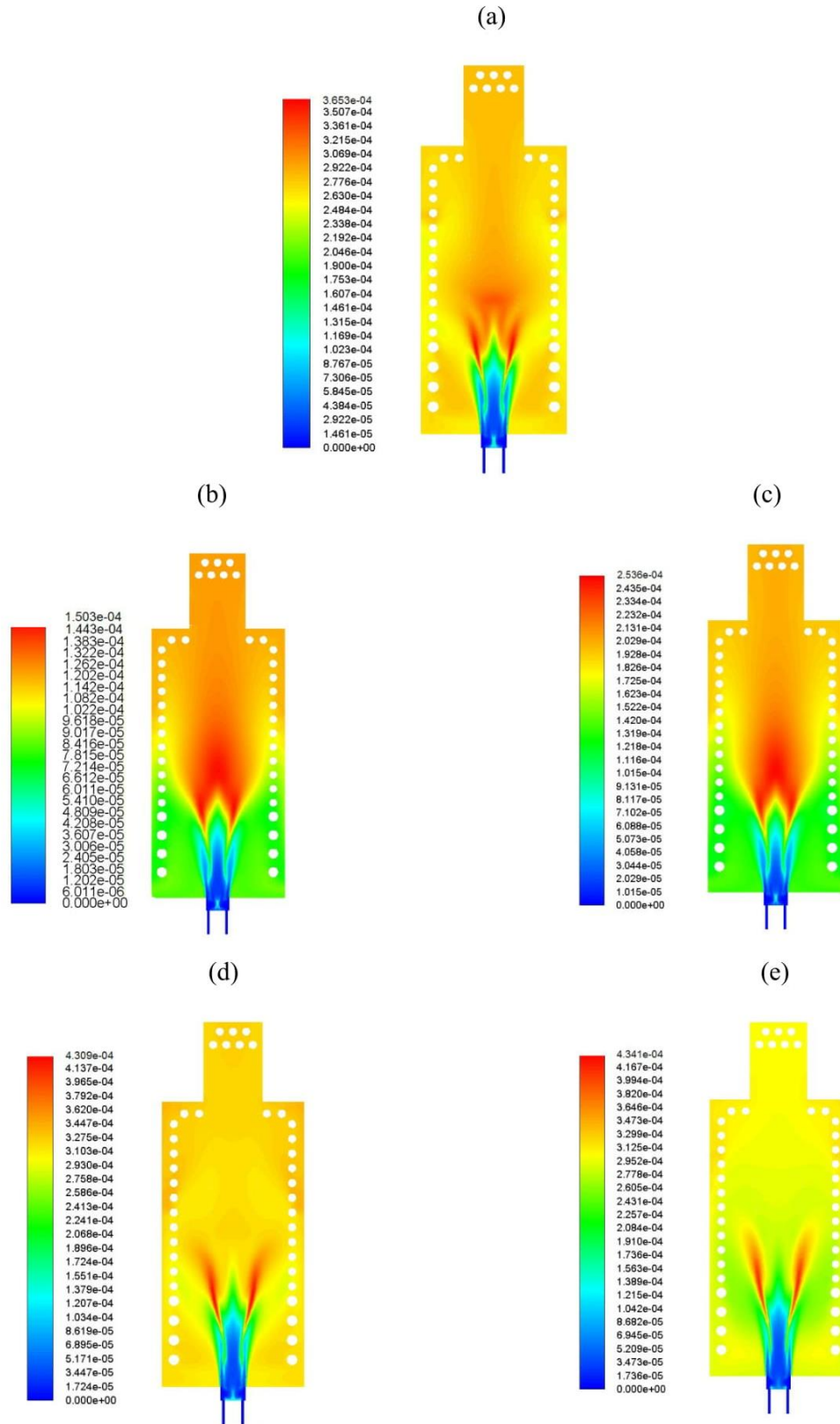


Figura 25. Fracción molar de NO obtenido en los casos simulados

Esto deja en evidencia que los casos 3 (d) y 4 (e) además de producir sobrecalentamiento excesivo de los tubos, son los que generan mayor cantidad de emisiones de CO₂ y NO. En los casos 1 (b) y 2 (c) ocurre lo contrario, la llama es más pequeña, no generan sobrecalentamiento excesivo y las emisiones de CO₂ y NO son menores. El caso base (a) genera una llama de tamaño similar a los casos 3 (d) y 4 (e), no genera sobrecalentamiento y produce menos emisiones, aunque la diferencia es de solo 4 – 6 ppm.

8 Conclusiones

En este trabajo se realizó una simulación tridimensional en CFD en estado estable que representa el proceso de combustión sin premezcla en un horno típico de refinería, por medio de la cual se obtuvo información detallada acerca su operación a través de perfiles de flujo, temperatura, concentración de especies químicas y temperaturas pico de piel de tubo.

Los resultados obtenidos presentan un buen nivel de confianza debido al estudio de independencia de malla y a la verificación usando datos de literatura científica, donde se observó buena concordancia, logrando márgenes de error de 5,23 % y 6,38 con respecto a la medición real y a la simulación respectivamente, de acuerdo con los datos reportados por Díaz-Mateus & Castro-Gualdrón (2011).

Esto permitió establecer el caso base, en el cual se pudo observar por medio del perfil de flujo, que se forman zonas de recirculación a ambos lados del horno a la altura del tubo 4 que se extiende hasta el tubo 8, siendo estas las zonas de mayor transferencia de calor. Lo anterior coincidió con los perfiles de temperatura, donde se identificó la forma y tamaño de la llama, la cual no presenta alteraciones y se desarrolla de manera normal, alcanzando una altura máxima de 3,8 m.

Asimismo, se pudo determinar que la temperatura pico de piel de tubo máxima alcanzada fue de 960 K, lo que es 38 K por encima del límite de 922 K recomendado por el fabricante, que aunque no es mucho, puede generar inconvenientes a futuro como incremento en la acumulación de coque en los tubos, más paradas para limpieza y mantenimiento, disminución de la vida útil,

entre otros. En cuanto a emisiones contaminantes, se estableció que la fracción molar de CO_2 a la salida del horno fue de 0,084068, la concentración de NO fue 31 ppm.

Posteriormente, se realizó un estudio paramétrico simulando cuatro casos comparativos usando mezclas de gases de refinería de diferente composición y poder calorífico y se investigó el efecto que esta variación produce en los perfiles de flujo, temperatura, concentración de especies químicas y en el parámetro operacional más importante en un horno de refinería, que es la temperatura pico de piel de tubo.

Este análisis permitió comprobar que el uso de mezclas de gases con poder calorífico reducido en 17% y 20% (casos 1 y 2) con respecto al caso base, presentó diferencias en el perfil de flujo, donde se observó que la zona de recirculación se reduce en tamaño, generándose desde el tubo 4 hasta el tubo 6. También se demostró que una gran parte del flujo de los gases de combustión tiene dirección vertical, desviando el calor hacia arriba, esto evita que haya un sobrecalentamiento en los tubos inferiores del horno. Asimismo, la llama generada presentó una forma parecida al caso base, con una altura muy similar entre ambos casos llegando a 3,25 m aunque se tuvo que incrementar el flujo de gas en 17% (caso 2) y 20% (caso 1) para compensar la reducción de poder calorífico.

La temperatura pico de piel de tubo disminuyó en los tubos 1 al 9, llegando a una temperatura pico máxima de 960 K, lo que es 38 K por encima del límite de 922 K. Esto favorece la operación del horno ya que reduce el sobrecalentamiento en los tubos 1 al 9, llegando a temperaturas de piel de tubo menores a las alcanzadas en el caso base.

En cuanto a emisiones contaminantes, se identificó que se redujeron las emisiones de NO con respecto al caso base, pasando de 31 ppm a 14,5 ppm en el caso 1 y 23,45 ppm en el caso 2, que

corresponde a una reducción de 53,2% y 24,3% respectivamente, es decir que a menor poder calorífico, menores emisiones de NO. De la misma manera, se determinó que las emisiones de CO₂ también disminuyeron con respecto al caso base, pasando de 0,08406 en fracción molar en los gases de salida a 0,07967 en el caso 1 y 0,07827 en el caso 2, lo cual no llega ni al 10% de reducción

Por otro lado, se demostró que el uso de mezclas de gases con poder calorífico incrementado en 33% y 56,5% (casos 3 y 4) con respecto al caso base, generaron perfiles de flujo donde se observa la zona de recirculación extendida desde el tubo 5 hasta el 8, que es muy similar al caso base. Además, los perfiles de temperatura dejan en evidencia que las llamas generadas en los casos 3 y 4 no presentan alteraciones en cuanto a forma, aunque con el perfil de CO₂ fue posible determinar que estas si tienen mayor altura, llegando a 4 m en el caso 3 y 4,25 m en el caso 4.

También se comprobó que la temperatura pico de piel de tubo se incrementó en ambos casos, alcanzando un máximo de 1015 K. En términos operacionales, esto puede generar serios inconvenientes como, formación desmedida de coque, aceleración de los mecanismos de corrosión a alta temperatura como oxidación, sulfidación, carburación y formación de polvo metálico. Asimismo, incrementa el riesgo de llegar a uno de los peores escenarios que se puede enfrentar en una refinería, que es un rompimiento de los tubos y una posible explosión que pondría en riesgo vidas humanas y toda la operación.

En términos ambientales, la fracción molar de CO₂ a la salida del horno se incrementó un 13,4% en el caso 3 y 17,4% en el caso 4, mientras que la concentración de NO creció en un 21,7% en el caso 3 y 13,1% en el caso 4. En otras palabras, en los casos 3 y 4 las temperaturas pico de piel

de tubo y las emisiones se incrementan, afectando la operación segura del horno, especialmente desde el punto de vista de las temperaturas.

Con base en lo expuesto anteriormente, se determinó que para la operación de un horno tipo cabina bajo las condiciones establecidas en este estudio, es posible afirmar que un rango seguro de poderes caloríficos para el uso de combustibles, va desde 900 BTU/ft^3 - 1200 BTU/ft^3 bajo los cuales es posible usar el horno sin mayores inconvenientes desde el punto de vista operacional, manteniendo la temperatura pico de piel de tubo muy cercana e incluso menor a los valores del caso base y el límite de 922 K . Lo mismo ocurre con las emisiones de CO_2 y NO , aunque esto debe evaluarse respecto a las políticas ambientales de cada refinería y otras vigentes a nivel nacional.

9 Divulgación de Resultados

Participación en eventos:

- Autores: Morales, S; Barragan, D; V. Kafarov. Título: CFD Simulation of combustion in a furnace using mixture gases with variable calorific value. Evento: 10th International Conference on Sustainable Energy and Environmental Protection (SEEP2017). Junio 27-30 de 2017, Bled, Eslovenia.
- Autores: Morales, S; Barragan, D; V. Kafarov. Título: Simulación numérica de la combustión en hornos usando mezclas de gases con poder calorífico variable. Evento: XI Congreso colombiano de métodos numéricos (XI-CCMN). Agosto 16-18 de 2017, Bucaramanga, Colombia.
- Autores: Morales, S; Barragan, D; V. Kafarov. Título: Simulación de la combustión en hornos usando mezclas de gases con composición variable mediante CFD. Evento: Conferencia Internacional de Energías Sostenibles & Workshop Materiales para Nuevas Tecnologías de Energía (COIES), Universidad Industrial de Santander (UIS), Bucaramanga. Octubre de 2017.
- Autores: Morales, S; Barragan, D; V. Kafarov. Título: 3D CFD Simulation of Combustion in Furnaces Using Mixture Gases with Variable Composition. Evento: 21st Conference on Process Integration for Energy Saving and Pollution Reduction - *PRES 2018*, Agosto 25-29 2018, Praga, República Checa.

Artículos publicados:

- Autores: Morales, S; Barragan, D; V. Kafarov. Título: 3D CFD Simulation of Combustion in Furnaces Using Mixture Gases with Variable Composition. Revista Chemical Engineering Transactions, vol 70, 2018, p 121-126. ISBN 978-88-95608-67-9; ISSN 2283-9216

Referencias Bibliográficas

- AMINIAN J., SHAHHOSSEINI SH., BAYAT M. (2010). Investigation of temperature and flow fields in an alternative design of industrial cracking furnaces using CFD. *IRANIAN JOURNAL OF CHEMICAL ENGINEERING*, 7(3), 61–73.
- ANSYS INC, \iANSYS Fluent Theory Guide. Canonsburg, Pennsylvania, USA, 2013.
- Blazek, J. (2015). Chapter 7 - Turbulence Modeling. En J. Blazek (Ed.), *Computational Fluid Dynamics: Principles and Applications (Third Edition)* (pp. 213–252). Oxford: Butterworth-Heinemann. <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-099995-1.00007-5>
- Cala, O. M., Meriño, L., Kafarov, V., & Saavedra, J. (2013). Efecto de la composición del gas de refinería sobre las características del proceso de combustión. *Revista Ingenierías Universidad de Medellín*; Vol. 12, Núm. 23 (2013)DO - 10.22395/rium.v12n23a8. Recuperado de <http://revistas.udem.edu.co/index.php/ingenierias/article/view/700/867>
- CALA PARRA, OM. (2014). *Determinación de un índice de eficiencia energética para los procesos de combustión de mezcla de gases en refinería* (Tesis de Maestría en Ingeniería Química). Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia.
- Chung, T. J. (Ed.). (2002). Applications to Chemically Reactive Flows and Combustion. En *Computational Fluid Dynamics* (pp. 724–795). Cambridge: Cambridge University Press. <https://doi.org/10.1017/CBO9780511606205.028>

- Denev, J. A., Dinkov, I., & Bockhorn, H. (2017). Burner design for an industrial furnace for thermal post-combustion. *INFUB - 11th European Conference on Industrial Furnaces and Boilers, INFUB-11, 120*, 484–491. <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2017.07.171>
- F.-A. Díaz-Mateus y J.-A. Castro-Gualdrón, “CFD TECHNIQUE TO CALCULATE TUBE SKIN PEAK TEMPERATURES IN REFINERY FURNACES”, *ICTF - Cienc. Tecnol. Futuro*, vol. 4, pp. 73–88, 2011.
- Fang, Z., Qiu, T., & Zhou, W. (2017). Coupled simulation of recirculation zonal firebox model and detailed kinetic reactor model in an industrial ethylene cracking furnace. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 25(8), 1091–1100. <https://doi.org/10.1016/j.cjche.2017.03.020>
- Ferziger, J. H., & Perić, M. (2002). Basic Concepts of Fluid Flow. En J. H. Ferziger & M. Perić (Eds.), *Computational Methods for Fluid Dynamics* (pp. 1–20). Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg. https://doi.org/10.1007/978-3-642-56026-2_1
- H. Guihua, W. Honggang, y Q. Feng, “Numerical simulation on flow, combustion and heat transfer of ethylene cracking furnaces”, *Chem. Eng. Sci.*, vol. 66, núm. 8, pp. 1600–1611, abr. 2011.
- Habibi, A., Merci, B., & Heynderickx, G. J. (2007a). Impact of radiation models in CFD simulations of steam cracking furnaces. *Computers & Chemical Engineering*, 31(11), 1389–1406. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2006.11.009>

- Habibi, A., Merci, B., & Heynderickx, G. J. (2007b). Multiscale modeling of turbulent combustion and NO_x emission in steam crackers. *AIChE Journal*, 53(9), 2384–2398. <https://doi.org/10.1002/aic.11243>
- Hachem, E., Jannoun, G., J. Veysset, Henri, M., Pierrot, R., Poitrault, I., ... Coupez, T. (2013). Modeling of heat transfer and turbulent flows inside industrial furnaces. *Simulation Modelling Practice and Theory*, 30, 35–53. <https://doi.org/10.1016/j.simpat.2012.07.013>
- Herrera Múnera, B. A., Amell Arrieta, A. A., & Cadavid Sierra, F. J. (2009). Modelos para el estudio fenomenológico de la combustión sin llama con simulación numérica. *Ingeniería e Investigación*, 29, 70–76.
- Heynderickx, G. J., Oprins, A. J. M., Marin, G. B., & Dick, E. (2001). Three-dimensional flow patterns in cracking furnaces with long-flame burners. *AIChE Journal*, 47(2), 388–400. <https://doi.org/10.1002/aic.690470215>
- HOTTEL, H. C. & SAROFIM, A. F., \iRadiative transfer. New York, USA: McGraw Hill, 1967.
- Iancu, P., Vilas-Bonafoux, S., Iglesias-Fernandez, J. M., Plesu, V., Bonet, J., Bonet Ruiz, A. E., & Llorens, J. (2017). Computational Fluid Dynamics (CFD) Simulation of Fuel Gas and Steam Mixtures to Decrease NO_x Emissions of Industrial Burners. En A. España, M. Graells, & L. Puigjaner (Eds.), *Computer Aided Chemical Engineering* (Vol. 40, pp. 565–570). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-63965-3.50096-9>
- Lan, X., Gao, J., Xu, C., & Zhang, H. (2007). Numerical Simulation of Transfer and Reaction Processes in Ethylene Furnaces. *Chemical Engineering Research and Design*, 85(12), 1565–1579. [https://doi.org/10.1016/S0263-8762\(07\)73201-X](https://doi.org/10.1016/S0263-8762(07)73201-X)

- Li, X., Zhang, L., Sun, Y., Jiang, B., Li, X., & Wang, J. (2015). Numerical simulation of the flue gas side of refining vacuum furnace using CFD. *Chemical Engineering Science*, 123, 70–80. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2014.11.001>
- Liu, B., Bao, B., Wang, Y., & Xu, H. (2017). Numerical simulation of flow, combustion and NO emission of a fuel-staged industrial gas burner. *Journal of the Energy Institute*, 90(3), 441–451. <https://doi.org/10.1016/j.joei.2016.03.005>
- MERIÑO STAND, LI. (2015). *Diseño de una metodología para lograr una combustión eco-eficiente y segura de mezclas de gases* (Tesis de Doctorado en Ingeniería Química). Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia.
- Mullinger, P., & Jenkins, B. (2008a). Chapter 1 - Introduction. En *Industrial and Process Furnaces* (pp. 1–30). Oxford: Butterworth-Heinemann. Recuperado de <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780750686921000016>
- Mullinger, P., & Jenkins, B. (2008b). Chapter 3 - Fuels for furnaces. En *Industrial and Process Furnaces* (pp. 67–88). Oxford: Butterworth-Heinemann. Recuperado de <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B978075068692100003X>
- Mullinger, P., & Jenkins, B. (2008c). Chapter 6 - Combustion and heat transfer modelling. En *Industrial and Process Furnaces* (pp. 209–242). Oxford: Butterworth-Heinemann. Recuperado de <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780750686921000065>
- Oprins, A.J.M., & Heynderickx, G. J. (2003). Calculation of three-dimensional flow and pressure fields in cracking furnaces. *International Symposium on Mathematics in Chemical Kinetics and Engineering*, 58(21), 4883–4893. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2002.12.006>

- Oprins, Arno J. M., Heynderickx, G. J., & Marin, G. B. (2001). Three-Dimensional Asymmetric Flow and Temperature Fields in Cracking Furnaces†. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 40(23), 5087–5094. <https://doi.org/10.1021/ie0010114>
- Oro, J. M. F. (2012). *Técnicas numéricas en ingeniería de fluidos: Introducción a la dinámica de fluidos computacional (CFD) por el método de volúmenes finitos*. Editorial Reverté. Recuperado de <https://books.google.com.co/books?id=-WGXtgAACAAJ>
- Rebola, A., Coelho, P. J., & Costa, M. (2013). Assessment of the Performance of Several Turbulence and Combustion Models in the Numerical Simulation of a Flameless Combustor. *Combustion Science and Technology*, 185(4), 600–626. <https://doi.org/10.1080/00102202.2012.739222>
- Rebola, Amândio, Costa, M., & Coelho, P. J. (2013). Experimental evaluation of the performance of a flameless combustor. *Applied Thermal Engineering*, 50(1), 805–815. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2012.07.027>
- SANDOVAL HINDS, JA, “Diseño de guía para especificación de hornos de refinería y simulación por HTRI-Xfh”, Informe de pasantía de Ingeniería mecánica, Universidad Simón Bolívar, Venezuela, 2007.
- Shih, T.H., Liou, W. W., Shabbir, A. & Zhu, J., “A new k-ε model eddy viscosity model for high Reynolds number turbulent flows model development and validation”, *Comput Fluids*, vol. 24, núm. 3, pp. 227–238, 1995.

- Stefanidis, G. D., Merci, B., Heynderickx, G. J., & Marin, G. B. (2006). CFD simulations of steam cracking furnaces using detailed combustion mechanisms. *Computers & Chemical Engineering*, 30(4), 635–649. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2005.11.010>
- TORRES ROBLES, R., CASTRO ARELLANO, J., \iAnálisis y simulación de procesos de refinación del petróleo. México: Instituto Politécnico Nacional, 2002.
- Tu, J., Yeoh, G. H., & Liu, C. (Eds.). (2008). Appendix B - Upwind Schemes. En *Computational Fluid Dynamics* (pp. 414–415). Burlington: Butterworth-Heinemann. <https://doi.org/10.1016/B978-075068563-4.50012-4>
- J. Tu, G.-H. Yeoh, y C. Liu, “Chapter 8 - Some Advanced Topics in CFD”, en \iComputational Fluid Dynamics (Second Edition), J. T.-H. Y. Liu, Ed. Butterworth-Heinemann, 2013, pp. 349–394.
- Xamán, J., & Gijón-Rivera, M. (2016). *Dinámica De Fluidos Computacional Para Ingenieros*. Palibrio. Recuperado de <https://books.google.com.co/books?id=dwIDDAAAQBAJ>
- Yang, J., Tai, N., Wang, L., Xiao, J., & Yang, C. (2012). Numerical Simulation of the Flue Gas and Process Side of Coking Furnaces. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 51(47), 15440–15447. <https://doi.org/10.1021/ie302248m>
- Yeoh, G. H., & Yuen, K. K. (Eds.). (2009). Chapter 3 - Additional Considerations in Field Modeling. En *Computational Fluid Dynamics in Fire Engineering* (pp. 135–266). Burlington: Butterworth-Heinemann. Recuperado de <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B978075068589400003X>

Ziani, L., & Chaker, A. (2016). Ambient pressure effect on non-premixed turbulent combustion of CH₄-H₂ mixture. *Special Issue: 1st International Conference on Hydrogen Energy, 20-22 July 2015, Aveiro, Portugal, 41(27)*, 11842–11847.
<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2015.11.167>