



ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIEROS
UNIVERSIDAD DE SEVILLA

Departamento de Ingeniería Energética
Grupo de Termotecnia

TESIS DOCTORAL



**METODOLOGÍA PARA EL DISEÑO Y
OPTIMIZACIÓN TÉRMICA DE
REACTORES SOLARES**

Doctorando: Elvira Tapia Martín

Directores: Dr. Manuel Felipe Rosa Iglesias
Dr. José Alfredo Iranzo Paricio
Dr. Francisco Javier Pino Lucena

Sevilla, Septiembre 2016

Departamento de Ingeniería Energética – Grupo Termotécnica
Escuela Superior de Ingenieros
Universidad de Sevilla

Tesis presentada por Elvira Tapia Martín para la obtención del Título de Doctor por la Universidad de Sevilla.

Vº Bº

Directores de la Tesis

Doctorando

Dr. Felipe Rosa Iglesias Dr. Alfredo Iranzo Paricio Dr. Javier Pino Lucena Elvira Tapia Martín

Agradecimientos

Son muchas las personas a las que debo mi agradecimiento en el desarrollo de la presente Tesis Doctoral. En primer lugar, a mis directores Alfredo Iranzo, Francisco Javier Pino y Felipe Rosa por su incondicional apoyo tanto en los buenos como en los malos momentos.

También agradezco la confianza depositada al resto del grupo de investigación formado por Don José Guerra, José Antonio Salva, Luis Valverde, José Santiago, Juan Rafael López y Christian Suarez así como a los compañeros de laboratorio Álvaro Ruiz, Rafael Salmerón y José Sánchez.

Estaré siempre en deuda con el Instituto IMDEA Energía por permitirme utilizar los datos experimentales de sus instalaciones para la validación de la metodología. En especial con Selvan Bellan y José González Aguilar por facilitarme todos los medios que disponen y aportarme su experiencia.

La Junta de Andalucía, que a partir de la Consejería de Economía, Innovación y Ciencia junto con el Programa Operativo FEDER de Andalucía 2007 – 2013, ha financiado mi contrato por parte del Vicerrectorado de la Universidad de Sevilla, así como los fondos necesarios para la investigación realizada. Del mismo, la Asociación de Investigación y Cooperación Industrial de Andalucía ha posibilitado también mi contratación por parte del Grupo Termotecnia.

En el plano personal, quiero dar un profundísimo agradecimiento a mis padres por ser los que siempre han confiado en mí y por todo lo que me han aportado a nivel de educación y de desarrollo como persona, sin ellos esta Tesis Doctoral no hubiese sido posible. A mi hermana Celia quería agradecerle que siempre haya estado conmigo convirtiendo los bajones en risas. Agradecer a Ricardo su motivación en la vida, por ser un modelo a seguir.

Por ocupar el lugar fundamental, el más sincero agradecimiento a Salva por ser la persona que más me ha apoyado en todo momento y que siente la necesidad de investigar de la misma forma que yo.

Gracias a todos.

Índice de contenido

1	INTRODUCCIÓN Y OBJETIVOS	1
1.1	ANTECEDENTES	1
1.2	NECESIDAD DE INVESTIGACIÓN EN PRODUCCIÓN DE HIDRÓGENO SOLAR	8
1.3	OBJETIVOS DE LA TESIS DOCTORAL	12
1.4	DESCRIPCIÓN DE LA METODOLOGÍA PARA EL DESARROLLO DE LA TESIS DOCTORAL	12
	Capítulo 2: Estado del arte	12
	Capítulo 3: Metodología	13
	Capítulo 4: Validación y Aplicaciones	13
	Capítulo 5: Conclusiones	13
2	ESTADO DEL ARTE	15
2.1	INTRODUCCIÓN	15
2.1.1	Termólisis	18
2.1.2	Reformado	18
2.1.3	Cracking	19
2.1.4	Gasificación	20
2.1.5	Ciclos termoquímicos	20
2.2	REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA: CICLOS TERMOQUÍMICOS	21
2.2.1	Ciclos termoquímicos de óxido de metal no volátil	23
2.2.1.1	Óxido de Cerio	24
2.2.1.2	Óxido de hierro	25
2.2.1.3	Sodio/ Manganeseo	25
2.2.1.4	Ferritas	26
	1. Ferritas de níquel-manganeseo	26
	2. Ferritas de zinc y manganeseo	27
	3. Ferritas de cobre-aluminio	27
	4. Ferritas de níquel	27

II | ÍNDICE DE CONTENIDO

5.	Ferritas de manganeso y óxido de calcio	28
6.	Ferritas de manganeso y carbonato sódico.....	28
7.	Ferritas soportadas sobre zirconia.....	30
2.2.2	Comparativa ciclos termoquímicos de óxidos metálicos no volátiles	34
2.3	ESTADO DEL ARTE REACTORES SOLARES.....	36
2.3.1	Reactores de intercambio directo	39
2.3.1.1	Reactores volumétricos	39
2.3.1.2	Reactores de partículas.....	40
2.3.2	Reactores de intercambio indirecto.....	41
2.3.2.1	Reactores tubulares	41
2.3.2.2	Reactores de doble cámara	42
2.3.3	Resumen estado del arte reactores solares	42
2.4	ESTADO DEL ARTE DEL MODELADO COMPUTACIONAL	45
2.4.1	Resumen estado del arte de modelado computacional	58
2.4.2	Conclusiones estado del arte de modelado computacional	59
2.5	LIMITACIONES DEL ESTADO DEL ARTE.....	60
3	METODOLOGÍA	63
3.1	CONSIDERACIONES PREVIAS.....	64
3.1.1	Introducción.....	64
3.1.2	Datos iniciales	66
3.1.2.1	Proceso termoquímico	67
3.1.2.2	Tipo de reactor solar	67
3.1.2.3	Sistema de concentración de energía solar.....	67
3.1.3	Selección de software comercial	69
3.2	SELECCIÓN DE MODELOS.....	71
3.2.1	Selección modelo de turbulencia	71
3.2.2	Selección de modelo de radiación	74
3.2.2.1	Selección del modelo de radiación para dependencia direccional	76
3.2.2.2	Selección del modelo de radiación para dependencia espectral	79
3.2.2.3	Propiedades radiantes	81
3.2.2.4	Medio participativo	83
3.2.3	Selección de modelos para medio poroso	84

3.2.3.1	Modelo de pérdida de carga en lechos fijos: Ley de Darcy	86
1.	Régimen laminar a través de lechos fijos: Ecuación de Blake – Kozeny	87
2.	Régimen turbulento a través de lechos fijos: Ecuación de Burke–Plummer	89
3.	Régimen de transición a través de lechos fijos: Ecuación de Ergun	89
3.2.3.2	Modelado de transferencia de calor en medios porosos	91
3.3	DESARROLLO DE LA METODOLOGÍA	92
3.3.1	Definición del diseño inicial	95
3.3.1.1	Radio de apertura	96
3.3.1.2	Incluir o no ventana de cuarzo	96
3.3.1.3	Forma de la cavidad.....	98
3.3.1.4	Tamaño cavidad (transitorios)	99
3.3.1.5	Inclinación de la cavidad	99
3.3.1.6	Posición del receptor	102
3.3.1.7	Conclusiones del diseño inicial.....	104
3.3.2	Desarrollo del modelo CFD.....	106
3.3.2.1	Diseño de la cavidad	106
1.	Definición de la geometría utilizada para la metodología	110
2.	Mallado computacional y análisis de malla	111
3.	Análisis número de histories.....	115
4.	Matriz de rayos	120
5.	Propiedades radiantes	122
6.	Aislamiento.....	123
7.	Conclusiones de diseño de la cavidad	125
3.3.2.2	Diseño del reactor solar	128
1.	Definición de malla del reactor	130
2.	Definición del lecho reactivo (medio poroso)	132
3.	Conclusiones de diseño del reactor solar	138
3.3.2.3	Análisis paramétrico.....	141
1.	Cavidad: materiales de la cavidad	142
2.	Cavidad: aislamiento	143
3.	Lecho reactivo: diámetro de partícula	144
4.	Gas de arrastre: caudal de arrastre	147
5.	Gas de arrastre: temperatura de entrada	149
6.	Potencia incidente: Perfil de radiación	151

IV | ÍNDICE DE CONTENIDO

7.	Conclusiones del análisis paramétrico	153
3.3.3	Pautas de la metodología	154
4	VALIDACIÓN Y APLICACIONES.....	159
4.1	VALIDACIÓN.....	160
4.1.1	Validación de la proyección del perfil de radiación sobre las paredes	160
4.1.1.1	Descripción de la geometría	160
4.1.1.2	Descripción del modelo	161
4.1.1.3	Análisis de resultados	162
4.1.2	Validación del modelo con resultados experimentales en un reactor solar.....	163
4.1.2.1	Descripción de la geometría	163
4.1.2.2	Descripción de la experimentación realizada por IMDEA Energía.....	163
4.1.2.3	Descripción del modelo	164
4.1.2.4	Análisis de resultados	165
4.1.3	Conclusiones.....	166
4.2	APLICACIONES.....	167
4.2.1	Reactor solar tubular de torre para ciclo termoquímico de ferrita tipo espuma (CONFIDENCIAL)	167
4.2.2	Reactor solar tubular de disco para ciclo termoquímico de ferrita tipo espuma....	167
4.2.2.1	Objetivos y condiciones de diseño	167
4.2.2.2	Diseño inicial.....	168
4.2.2.3	Iteraciones del diseño del reactor	169
	Iteración 1: Mejora sobre la cavidad.....	170
	Iteración 2: Aumento de la potencia de disco.....	171
	Iteración 3: Ventana de cuarzo	172
	Iteración 4: Precalentar gas de arrastre.....	173
4.2.2.4	Conclusiones diseño de reactor solar tubular en disco	174
4.2.3	Conclusiones de las aplicaciones.....	174
5	CONCLUSIONES.....	175
5.1	PRINCIPALES CONCLUSIONES	176
5.2	APORTACIÓN DE LA TESIS DOCTORAL AL ESTADO DEL CONOCIMIENTO	179
5.3	RESUMEN DE PUBLICACIONES Y PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN.....	180

5.4	LÍNEAS FUTURAS DE TRABAJO	182
	REFERENCIAS	183

VI | ÍNDICE DE CONTENIDO

Índice de Figuras

Figura 1. Modelo de demanda/distribución de energía asociado al hidrógeno [7].	3
Figura 2. Evolución de la tecnología del hidrógeno para pasar de un sistema energético basado en combustibles fósiles a uno basado en el hidrógeno [7], [8].	4
Figura 3. Evolución de la producción interior de energía y del grado de autoabastecimiento en España [9].	5
Figura 4. Sistema energético basado en el hidrógeno [18].	9
Figura 5. Costes de la producción de hidrógeno a partir de energías renovables en el presente y en el futuro [18].	11
Figura 6. Producción de hidrógeno en Europa [27].	16
Figura 7. Vías de producción de hidrógeno mediante energía solar concentrada [29].	17
Figura 8. Diagrama de bloques del reformado de metano con vapor solar [30].	18
Figura 9. Esquema del ciclo termoquímico $\text{MnFe}_2\text{O}_4\text{-Na}_2\text{CO}_3\text{-Fe}_2\text{O}_3$ [60].	29
Figura 10. Reactores solares ensayados en las últimas décadas y clasificados según la potencia y el sistema de absorción de la radiación (basada en [72]).	38
Figura 11. Resultados de distribución de velocidad y temperatura [109].	46
Figura 12. Reactor solar estudiado por Hirsch y Steinfeld [110], [111].	46
Figura 13. Resultados de distribución de temperatura y conversión $\text{CH}_4 \rightarrow \text{H}_2$ [113].	47
Figura 14. Esquema reactor solar estudiado por Chen [114].	48
Figura 15. Resultados de temperatura de la simulación (caudal 2.4 g/h con una carga de partículas de 4 g/m ³) y experimentales en las paredes [115].	49
Figura 16. Esquema de reactor tubular y resultados numéricos (líneas continuas) y experimentales (puntuales) [97].	50

VIII | ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 17. Esquema de reactor solar e intensidad de radiación en función del radio (a) PSI (b) PSA [116].	50
Figura 18. Esquema de la configuración del modelo [117].	51
Figura 19. Distribución de temperaturas para geometría con y sin ranuras talladas [118].	52
Figura 20. Geometría y resultados de distribución de temperatura A (en fluido) y B (en medio poroso) sin reacción química [42].	52
Figura 21. Resultados de distribución de radiación con TracePro [119].	54
Figura 22. Distribución de temperatura: Izq: Geometría tubular; Centro: Geometría cúbica; Drch: Geometría tubular con bafle [120].	54
Figura 23. Resultados distribución de temperatura y de velocidad y vectores de velocidad en los planos de corte vertical y horizontal [121], [122].	55
Figura 24. Geometría y distribución de temperatura tras 3400 s y 5000 s de calentamiento [123].	56
Figura 25. Geometría e imagen real de reactor solar [124], [125].	56
Figura 26. Geometría y comparación de resultados de temperatura según el modelo de radiación utilizado [126].	57
Figura 27. Izquierda: Reactor tubular; Derecha: Reactor volumétrico.	64
Figura 28. Clasificación de procesos termoquímicos solares (traducida de [108]).	65
Figura 29. Sistemas de concentración puntual: Izquierda: torre; Derecha: disco parabólico.	69
Figura 30. Comparación de modelos de turbulencia $k - \epsilon$ y SST [136].	72
Figura 31. Resultados de Nusselt frente al eje axial para los distintos modelos de turbulencia [130].	73
Figura 32. Geometría y detalle de la malla.	73
Figura 33. Comparación de modelos de turbulencias en el eje central (línea roja).	74
Figura 34. Distribución Y^+ en la superficie del tubo y del receptor.	74
Figura 35. Dependencia direccional de la radiación [138].	75
Figura 36. Dependencia espectral de la radiación para un cuerpo negro [138].	75

Figura 37. Comparación de modelos de radiación: temperatura en el tubo DO (morado) y MC (rojo).....	78
Figura 38. Distribución de temperaturas en tubo y receptor para los modelos de radiación DO (izquierda) y MC (derecha).	78
Figura 39. Emitancia en función de la longitud de onda para una temperatura de 1500 °C (azul) y 2000 °C (naranja).....	79
Figura 40. Dependencia espectral de la emisividad espectral y normal de algunos materiales [141].	80
Figura 41. Dependencia de la emisividad normal con la temperatura de algunos materiales [141].	82
Figura 42. Relación caída de presión – velocidad.....	85
Figura 43. Esquema de la metodología para el diseño CFD de un reactor solar.	93
Figura 44. Transmisividad del cuarzo [138].	97
Figura 45. Geometrías analizadas por Reddy en el estudio de pérdidas por convección [149].	98
Figura 46. Resultados para el diseño de una cavidad de reactor solar de disco [152].	98
Figura 47. Definición de ángulo de inclinación del reactor solar. Izq: viento de frente ($\alpha=0^\circ$); Drch: viento de lado ($\alpha=90^\circ$).	100
Figura 48. Resultados de pérdidas convectivas en función del ángulo de inclinación del reactor para distintas temperaturas [149].	100
Figura 49. Efecto de la dirección y velocidad del viento y el ángulo de inclinación de la cavidad sobre las pérdidas convectivas [153].	101
Figura 50. Dimensiones del ambiente exterior con respecto a la cavidad del reactor para análisis del viento [153].	102
Figura 51. Configuración de tubos para reactor multitubular [155].	103
Figura 52. Esquemas de reactores tubulares para instalaciones de disco parabólico (figura derecha [88]).	104
Figura 53. Balance de energía interior del tubo.	107
Figura 54. Esquema simplificado del cálculo de la temperatura requerida en diseño de cavidad.	108

X | ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 55. Etapas de la metodología del bloque de diseño de la cavidad en CFD.	109
Figura 56. Geometría definida para metodología.....	111
Figura 57. Detalle de la malla en las paredes para resolver la capa límite... 112	
Figura 58. Relación de aspecto entre malla de la cavidad y tubo.....	113
Figura 59. Distribución de temperatura y mallado del tubo-receptor. De izq a derch: Malla 1; Malla 2; Malla 3.	114
Figura 60. Resultados de temperatura del análisis de malla: línea longitudinal (roja).	114
Figura 61. Resultados de temperatura del análisis de malla: línea transversal (azul).....	115
Figura 62. Distribución de temperatura y mallado del tubo-receptor. De izq a derch: Malla 1; Malla 2; Malla 3*	117
Figura 63. Resultados de temperatura del análisis de malla con número de histories ajustado: línea longitudinal (roja).....	117
Figura 64. Resultados de temperatura del análisis de malla con número de histories ajustado: línea transversal (azul).	118
Figura 65. Distribución de temperatura para la malla 2 en función del número de histories en la línea longitudinal sobre el tubo (roja).....	118
Figura 66. Distribución de temperatura para la malla 2 en función del número de histories en la línea trasversal sobre el receptor (azul).....	119
Figura 67. Evolución del coste computación (azul) y % SD (naranja) con número de histories.	119
Figura 68. Condición de contorno de direccionalidad de los rayos en la apertura.	121
Figura 69. Distribución de temperaturas caso base con matriz de dirección de rayos.	122
Figura 70. Distribución de temperaturas para caso base, condiciones de cuerpo negro y materiales reales $\epsilon = 0.9$ tubo y $\epsilon = 0.4$ resto de paredes.	123
Figura 71. Distribución de temperaturas en tubo y receptor cuando se incluyen las pérdidas por conducción y convección al exterior.	125
Figura 72. Porosidad para lechos reactivos de partículas.....	131

Figura 73. Porosidad para un lecho de partículas de diámetro 0.1, 3 y 10 mm.	132
Figura 74. Detalles del mallado del tubo para un lecho de partículas.	132
Figura 75. Definición de medio poroso.	133
Figura 76. Conductividad de alúmina [125] y carburo de silicio [167] en función de la temperatura.	136
Figura 77. Distribución de la porosidad en el eje radial del tubo.	136
Figura 78. Distribución de temperatura tubo-receptor y medio poroso.	137
Figura 79. Distribución de velocidad en el eje radial del tubo a la entrada, salida y en el medio.	138
Figura 80. Distribución de temperatura y velocidad en el eje longitudinal del tubo.	138
Figura 81. Reparto de pérdidas de la cavidad para distinta emisividad en las paredes.	143
Figura 82. Reparto de pérdidas de la cavidad para distintos aislamiento.	144
Figura 83. Efecto del diámetro de partícula sobre la reacción química (basado en [168]).	145
Figura 84. Evolución de la temperatura a lo largo del eje longitudinal para valores de diámetro de partícula de 2, 3 (base), 4, 5 mm.	145
Figura 85. Comparación de pérdida de carga y porcentaje de volumen por encima de la temperatura requerida para valores de diámetro de partícula de 2, 3 (base), 4, 5 mm.	146
Figura 86. Evolución de la temperatura a lo largo del eje longitudinal para valores de caudal de nitrógeno de $mN2$ (base), $1.05 \cdot mN2$ y $1.25 \cdot mN2$	147
Figura 87. Variación de la temperatura requerida en la fase de oxidación del ciclo termoquímico de $FeSO_4$ en función del caudal de arrastre [166].	148
Figura 88. Comparación de pérdida de carga y porcentaje de volumen por encima de la temperatura requerida para valores de caudal de nitrógeno de $mN2$ (base), $1.05 \cdot mN2$ y $1.25 \cdot mN2$	148
Figura 89. Evolución de la temperatura a lo largo del eje longitudinal para valores de temperatura de nitrógeno de 300 K, 500 K (base) y 800 K.	150

XII | ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 90. Comparación de pérdida de carga y porcentaje de volumen por encima de la temperatura requerida para valores de temperatura de nitrógeno de 300 K, 500 K (base) y 800 K.	150
Figura 91. Evolución de la temperatura a lo largo del eje longitudinal para valores de intensidad de radiación 650 kW/m ² (11.5 kW), 850 kW/m ² (15kW) (base) y 1100 kW/m ² (19.4 kW).....	152
Figura 92. Comparación de pérdida de carga y porcentaje de volumen por encima de la temperatura requerida para valores de intensidad de radiación 650 kW/m ² , 850 kW/m ² (base) y 1100 kW/m ²	152
Figura 93. Geometría para validación modelo MC vs TracePro.	161
Figura 94. Intensidad de radiación en la apertura.	161
Figura 95. Isolíneas de intensidad de radiación en la pared del fondo de la cavidad. TracePro® 7.0 (Izquierda). ANSYS-CFX 14.0 (Derecha).	162
Figura 96. Geometría del reactor, cotas en mm.	163
Figura 97. Radiación incidente en el frustum y el frontal de la muestra [125].	164
Figura 120. Dirección de la radiación en la apertura para instalación de disco.	168
Figura 121. Geometría inicial para la cavidad de disco.	168
Figura 122. Distribución de temperaturas en los tubos tras modificar la cavidad. Izq: Vista frontal; Drch: Vista posterior.....	170
Figura 123. Distribución de temperaturas tras modificar potencia incidente. Izq: Vista frontal; Drch: Vista posterior.....	171
Figura 124. Distribución de temperaturas tras incluir ventana de cuarzo. Izq: Vista frontal; Drch: Vista posterior.....	172
Figura 125. Distribución de temperaturas tras incluir precalentador. Izq: Vista frontal; Drch: Vista posterior.	173

Índice de Tablas

Tabla 1. Principales proyectos en el ámbito de producción de hidrógeno con energías renovables. Fuente: Plataforma Tecnológica Española del Hidrógeno y Pilas de Combustibles.....	7
Tabla 2. Evolución de coste de la producción de hidrógeno [28].	16
Tabla 3. Producción de hidrógeno vía procesos termoquímicos [30].	21
Tabla 4. Ciclos termoquímicos de mayor importancia [30].	22
Tabla 5. Producciones de hidrógeno y conversiones de distintas ferritas soportadas sobre m-ZrO ₂ [64].	30
Tabla 6. Comparativa de ciclos termoquímicos de óxidos no volátiles.	34
Tabla 7. Resumen de los principales parámetros de los ciclos termoquímicos estudiados.....	35
Tabla 8. Tabla estado del arte reactores volumétricos.....	39
Tabla 9. Estado del arte de reactores de partículas.	40
Tabla 10. Estado del arte de reactores tubulares.....	41
Tabla 11. Estado del arte de reactores de doble cámara.....	42
Tabla 12. Resumen de características de reactores solares [106].	43
Tabla 13. Resultados de temperatura con Fluent [119].	53
Tabla 14. Resumen de las características de los modelos incluidos en herramientas CFD.	58
Tabla 15. Comparación herramientas CFD de ANSYS de acuerdo a diseño de reactores solares [133], [134].	70
Tabla 16. Consumo computacional en función del modelo de radiación.	79
Tabla 17. Definiciones de emisividad [141].	81
Tabla 18. Coeficientes modelado de pérdida de carga medio poroso.	90
Tabla 19. Comparación de correlaciones de Nusselt para medios porosos.....	91

XIV | ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 20. Características de mallas (n° de nodos y n° de elementos).	113
Tabla 21. Número de histories mínimo para cada malla.	116
Tabla 22. Coste computacional y número de histories para las distintas mallas.	118
Tabla 23. Parámetros de seguimiento para el diseño de la cavidad (caso base).	127
Tabla 24. Parámetros de seguimiento para el diseño del reactor.	140
Tabla 25. Balance de energía en la cavidad para distinta emisividad en las paredes.	142
Tabla 26. Balance de energía en la cavidad para distintos aislamientos.	143
Tabla 27. Balance de energía en el interior del tubo para valores de diámetro de partícula de 2, 3 (base), 4, 5 mm.	146
Tabla 28. Balance de energía en el interior del tubo para valores de caudal de nitrógeno de mN_2 (base), $1.05 \cdot mN_2$ y $1.25 \cdot mN_2$	149
Tabla 29. Balance de energía en el interior del tubo para valores de temperatura de nitrógeno de 300 K, 500 K (base) y 800 K.	151
Tabla 30. Balance de energía en el interior del tubo para valores de intensidad de radiación 650 kW/m ² , 850 kW/m ² (base) y 1100 kW/m ²	153
Tabla 31. Comparación resultados experimentales y simulación.	165
Tabla 34. Resumen de resultados de las mejoras implementadas en disco. ...	174

GLOSARIO

CFD. Fluidodinámica Computacional

CRNS. Community Resources Network Scotland

DO. Modelo de radiación Discrete Ordinate Transfer

ETH. Eidgenössische Technische Hochschule Zürich

MC. Modelo de radiación Monte Carlo

NREL. National Renewable Energy Laboratory (USA)

NSEC. Nacional Solar Energy Centre (Newcastle)

NSTTF. Nacional Solar Thermal Test Facility, Albuquerque (México)

PSA. Plataforma Solar de Almería (España)

PSI. Pual Scherrer Institut (Suiza)

RTE. Ecuación de Transferencia de Radiación Espectral

S2S. Modelo de radiación Surface to Surface, Modelo de radiación Surface to Surface, Modelo de radiación Surface to Surface, Modelo de radiación Surface to Surface

SST. Modelo de turbulencia Shear Stress Transport

TMQ. Ciclo termoquímico

α . absorptividad

ϵ . emisividad

γ . porosidad

“Pregúntate si lo que estás haciendo hoy te acerca al lugar donde quieres estar mañana.”

Walt Disney

1 INTRODUCCIÓN Y OBJETIVOS

1.1 ANTECEDENTES

La preocupación por la seguridad energética y las emisiones de CO₂, la disminución de las reservas de combustibles de origen fósil y la creciente demanda energética, plantean la necesidad de suplir los requerimientos de energía con sistemas renovables, sostenibles, energéticamente eficientes, económicamente viables y seguros. Es por ello, que el sector energético debe sufrir una profunda transformación en los próximos años con el objetivo de eliminar o minimizar los impactos negativos derivados, entre otros, del aumento

creciente de la demanda y las emisiones, los problemas de suministro de combustibles fósiles y su creciente coste [1]. Este cambio en el sistema energético ya ha comenzado y será un proceso imparable e irreversible [2].

La variación de las fuentes de energía a lo largo de la historia pone de manifiesto la búsqueda de combustibles con menor cantidad de emisiones de CO₂ por unidad de energía liberada, sin embargo, el consumo mundial de energía se ha incrementado de forma aún más rápida. Este factor, junto con el hecho de que los recursos fósiles son finitos, conlleva a una búsqueda de combustibles con alta relación H/C y otras fuentes de energía. Una forma de energía que permite cumplir con la creciente demanda de energía y la necesidad de la descarbonización del sistema energético es la tecnología del hidrógeno [3]–[5].

El hidrógeno como vector energético puede obtenerse a partir de cualquier fuente de energía y agua. Como combustible, puede emplearse en diversidad de aplicaciones, tales como la automoción o la producción de electricidad, generando agua como único producto. Por otro lado, las pilas de combustible son dispositivos que convierten la energía química de un combustible, preferentemente hidrógeno, directamente en electricidad, sin generar contaminantes, con un nivel de ruido inferior al de un motor convencional y una mayor eficiencia. Por ello, la combinación de hidrógeno y pilas de combustible responde a la tendencia hacia sistemas energéticos sostenibles, autosuficientes y no contaminantes. Debido a la magnitud del cambio tecnológico que supone, se ha llegado a afirmar que representan la tercera revolución industrial [6].

En el año 2003, Romano Prodi dijo que “Las tecnologías del hidrógeno y las pilas de combustible representan una elección estratégica para Europa. En los próximos 20 a 30 años cambiarán considerablemente los patrones de nuestra sociedad y nuestra economía, trayendo un modelo de producción y distribución de energía descentralizado y más limpio”. En la Figura 1 se muestra el esquema de demanda y distribución asociado al hidrógeno. Como se observa, el hidrógeno se puede producir a partir de diversas fuentes energéticas y consumirse en todos los sectores energéticos.

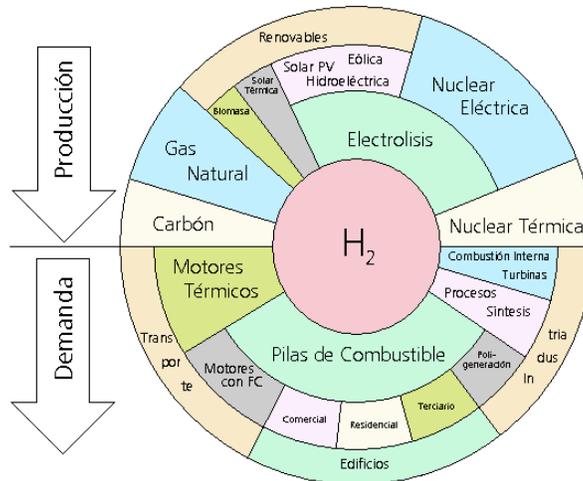


Figura 1. Modelo de demanda/distribución de energía asociado al hidrógeno [7].

La economía del hidrógeno, término empleado por primera vez por General Motors en 1970, es un sistema que utiliza el hidrógeno como medio de transporte de energía en el ciclo de abastecimiento energético. El concepto del hidrógeno como sistema de energía se ha desarrollado a lo largo de los últimos 30 años por la Plataforma Europea del Hidrógeno [7], siendo la evolución prevista para el desarrollo hasta alcanzar esta tecnología la que se presenta en la Figura 2:

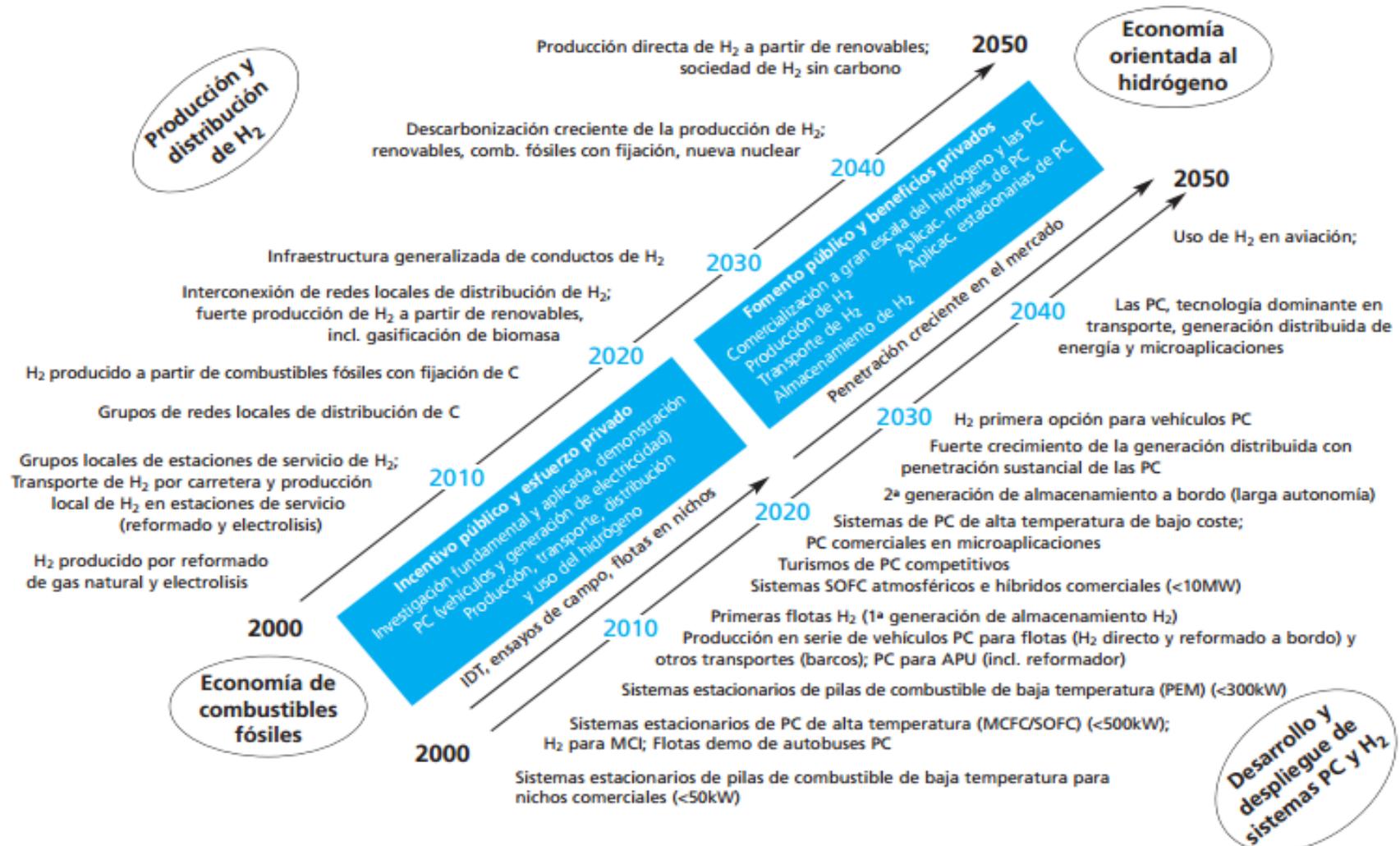
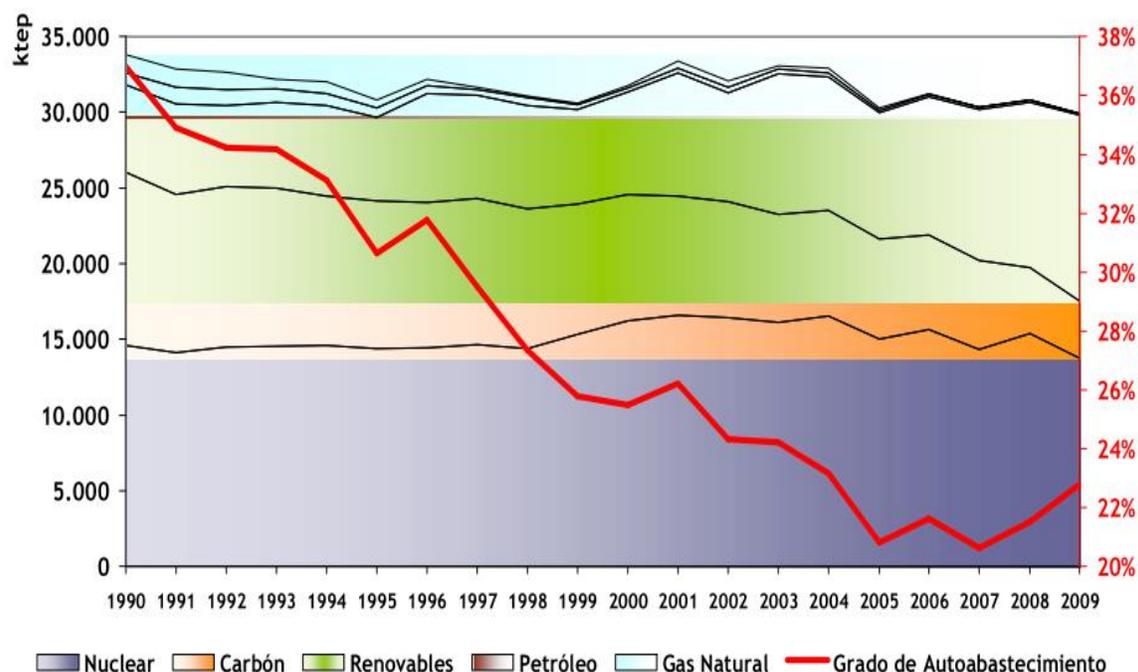


Figura 2. Evolución de la tecnología del hidrógeno para pasar de un sistema energético basado en combustibles fósiles a uno basado en el hidrógeno [7], [8].

Por otro lado, los análisis realizados para el sistema energético español indican que los beneficios de las energías renovables son elevados y estables. Durante 2009, las tecnologías renovables supusieron alrededor del 25 % de la generación eléctrica total nacional como se presenta en la Figura 3. Asimismo, las energías renovables representaron un 12.2 % de la energía final bruta consumida en España. Es importante aumentar este porcentaje con el objetivo de disminuir el consumo energético bruto importado en España, el cual se encontraba entorno al 70.5 % en 2013 [9].



Fuente: MITyC/IDAE

Figura 3. Evolución de la producción interior de energía y del grado de autoabastecimiento en España [9].

El desarrollo acelerado de la economía del hidrógeno conlleva al progreso de tecnologías innovadoras para la producción de este vector en cantidades masivas, sin emisiones contaminantes y a precios competitivos. En la Tabla 1 basada en la elaborada por la Plataforma Tecnológica Española del Hidrógeno y Pilas de Combustibles se muestran los principales proyectos en los últimos años en el ámbito de producción de hidrógeno con energías renovables en los que participa alguna entidad española.

Título	Entidades	Objetivos	Inicio-Final (Ámbito)
<u>HYDROSOL-3D: Scale Up of Thermochemical HYDROgen Production in a SOLar Monolithic Reactor: a 3rd Generation Design Study.</u>	CIEMAT; CENTRE FOR RESEARCH AND TECHNOLOGY HELLAS; DEUTSCHES ZENTRUM FÜR LUFT- UND RAUMFAHRT E.V.; TOTAL S.A.; HYGear B.V.	Demostración de un sistema de producción de H ₂ libre de emisiones de CO ₂ y de toda la tecnología relacionada, utilizando ciclos termoquímicos de dos etapas para descomponer agua utilizando radiación solar concentrada.	2010-2012 (Europeo)
<u>PRIMOLYZER: PResurIzed PEM electrOLYZER.</u>	HYNERGREEN TECHNOLOGIES S.A; IRD FUEL CELLS A/S; FUMA-TECH GESELLSCHAFT FUER FUNKTIONELLE MEMBRANEN UND ANLAGENTECHNOLOGIE MBH; ABO AKADEMI; TEKNOLOGIAN TUTKIMUSKESKUS VTT; STICHTING ENERGIEONDERZOEK CENTRUM NEDERLAND	Desarrollo, construcción y ensayo de un electrolizador con stack PEM, eficiente y duradero pero de bajo coste, orientado a su integración en sistemas domésticos de cogeneración.	2010-2012 (Europeo)
<u>Producción de H₂ con fijación de CO₂ atmosférico por descomposición catalítica de productos derivados de biomasa.</u>	UNIVERSIDAD REY JUAN CARLOS. DPTO. TECNOLOGIA QUIMICA Y AMBIENTAL	Producción de H ₂ con fijación de CO ₂ atmosférico por descomposición catalítica de productos derivados de la biomasa.	2009-2011 (Nacional)
<u>CENIT ConSOLI+Da. Actividad 11: H₂ Solar.</u>	HYNERGREEN TECHNOLOGIES S.A; IMDEA Energía; CIDAUT; Universidad Rey Juan Carlos; CIEMAT; Instituto Tecnológico de Canarias (ITC); MC3	Análisis de viabilidad de los ciclos TMQ para la producción de H ₂ sobre la base del estado del arte y la experimentación básica. Desarrollo de ciclos que presenten gran potencial para su integración con la energía solar de alta temperatura. Incluyendo selección del ciclo, análisis termodinámico y cinético de las reacciones, y diseño de reactor adecuado.	2008-2011 (Nacional)
<u>Modelado e integración de sistemas híbridos basados en energías renovables (H₂ como vector energético).</u>	Universidad de Castilla-La Mancha (UCLM)	Modelado e integración de sistemas híbridos basados en energías renovables usando el H ₂ como vector energético	2008-2009 (Regional)

<u>HYCYCLES: Materials and components for H₂ production by sulphur based thermochemical cycles</u>	EMPRESARIOS AGRUPADOS INTERNACIONAL SA; Deutsches Zentrum Für Luft- und Raumfahrt E.V.; BOOSTEC SA; Joint Research Center, European Commission; Commissariat a l'energie Atomique; Eidgenössische Technische Hochschule Zürich; University of Sheffield; Agenzia Nazionale per le Nuove Tecnologie, l'energia e lo Sviluppo Economico Sostenibile; Centre for Research and Technology	Acercar los métodos de descomposición termoquímica del agua a su aplicación práctica, mejorando su eficiencia, estabilidad, aspectos prácticos y coste de los componentes clave elaborando detalladas soluciones de ingeniería.	2008-2011 (Europeo)
<u>NUCAT4HYDROGENH₂ from bio-alcohols: An efficient route for H₂ production via novel reforming catalysts.</u>	Universidad de Barcelona; Institute of Chemical Engineering and High Temperature Chemical Processes (Grecia); Universidad Marie Curie- Sklodowska; ADVENT; HYGEAR B.V.	Producción de H ₂ a partir de bioalcoholes.	2008-2011 (Europeo)
<u>RENOVAH2: Producción eficiente de H₂ a partir de agua y energías renovables autóctonas.</u>	IMDEA Energía; Instituto Tecnológico de Canarias; HYNERGREEN TECHNOLOGIES S.A.	Investigación y desarrollo de tecnologías de producción de H ₂ eficiente y competitivo que permita la implantación de la economía del H ₂ en España, en los sectores del transporte y de consumo estacionario, a partir de fuentes renovables, autóctonas y abundantes.	2008-2008 (Nacional)
<u>SOLARH2: European solar-fuel initiative. Renewable H₂ from sun and H₂O: science linking molecular biomimetics and genetics</u>	Fundacio Privada Institut Catala d'investigacio Quimica; Uppsala Universitetsverige; University of Turku; Wageningen Universiteit; Max Planck Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften E.V.; Universitaet Bielefeld; Freie Universitaet Berlin; Commissariat a l'energie Atomique; Ruhr-Universitaet Bochum; Universite de Genève; Magyar Tudományok Akademia Szegedi Biológiai Központja; Centre National de la Recherche Scientifique	Conseguir producir H ₂ renovable a partir de recursos medioambientalmente seguros.	2008-2012 (Europeo)
<u>TOHPN: Towards the optimization of H₂ production by nitrogenasa.</u>	Universidad Politécnica de Madrid (UPM); Fundación IMDEA Energía	Proporcionar nuevas estrategias eco-eficientes destinadas a la producción de H ₂ como biocombustible. Enfocado en el estudio de la síntesis de la nitrogenasa y en su optimización como enzima productora de H ₂ .	2008-2013 (Europeo)

Tabla 1. Principales proyectos en el ámbito de producción de hidrógeno con energías renovables. Fuente: Plataforma Tecnológica Española del Hidrógeno y Pilas de Combustibles.

A nivel mundial, en 2013, el uso de hidrógeno ascendió a un total de 7.2 EJ (1 EJ = 10^{18} J) [10]. Hasta la fecha, este hidrógeno no se ha utilizado como un portador de energía sino que ha sido utilizado principalmente como materia prima en la refinería y en las industrias químicas.

El uso del hidrógeno como vector energético está comenzando a emerger. Aunque los primeros vehículos eléctricos de pilas de combustible se desarrollaron en la década de 1960, sólo en los últimos diez años, la tecnología se ha desarrollado hasta el punto de que ciertos fabricantes de automóviles han presentado en el mercado dichos vehículos.

Una tendencia similar se observa en el campo de aplicaciones de almacenamiento de energía. Un número creciente de proyectos de demostración de almacenamiento de energía a gran escala basados en el hidrógeno se está poniendo en marcha, con una notable concentración de la actividad en Alemania, motivado por el intento de explorar los beneficios de la integración de las energías renovables [11].

En China, se están construyendo plantas a gran escala para seguir el ritmo de la demanda de consumo del mercado interno. Por ejemplo, la planta más grande de una sola línea a base de hidrocarburos, que produce 4.8 millones $\text{Nm}^3/\text{día}$, se puso en funcionamiento en enero de 2014 por la empresa Sinopec Maoming [12].

En la Unión Europea, el proyecto Infraestructura de Hidrógeno para el Transporte (HIT) tiene como objetivo el desarrollo de un plan de implementación sincronizada de estaciones de repostaje de hidrógeno a lo largo de 1000 km desde Gotemburgo (Suecia) hasta Rotterdam (Holanda) [13].

1.2 NECESIDAD DE INVESTIGACIÓN EN PRODUCCIÓN DE HIDRÓGENO SOLAR

De acuerdo con los antecedentes descritos, se pone de manifiesto la necesidad de desarrollar las tecnologías asociadas al uso de hidrógeno como fuente de energía alternativa a los combustibles fósiles. Este nuevo sistema energético debe desarrollar unos medios de producción, transporte y utilización de energía más racionales y sostenibles. En este contexto se hace necesario abordar la generación de energía desde fuentes renovables, que sin embargo, presentan una serie de inconvenientes debidos principalmente a su falta de gestionabilidad, ya que los recursos (eólico, solar, etc.) son, en general, intermitentes. El hecho de que la tecnología del hidrógeno permita el almacenamiento de las energías renovables intermitentes hace que aumente el número de adeptos esta tecnología [6].

Por ello, la conversión de energía solar en energía química y el atractivo método de almacenamiento de energía solar que supone el hidrógeno es uno de los factores que ha impulsado a que la energía del hidrógeno haya sido aceptada como energía sostenible y se hayan conseguido numerosos avances significativos en el área de investigación y desarrollo durante los últimos 30 años [8], [14]–[16]. Según J. O'M. Bockris [15] y T. Ohta [17], el hidrógeno debería utilizarse como medio de almacenamiento y transporte de las energías renovables para largas distancias y grandes cantidades.

El hidrógeno no se encuentra libre en la naturaleza, sino formando parte de compuestos como los hidrocarburos y el agua [17]. Por tanto, puede ser producido a partir de estas materias primas mediante aporte de energía a través de numerosos procesos químicos bien establecidos, como la electrólisis del agua o el reformado del gas natural, lo cual responde a una posible necesidad o tendencia hacia la autosuficiencia energética (escala local o escala de sistema energético (Ver Figura 4)) [18].

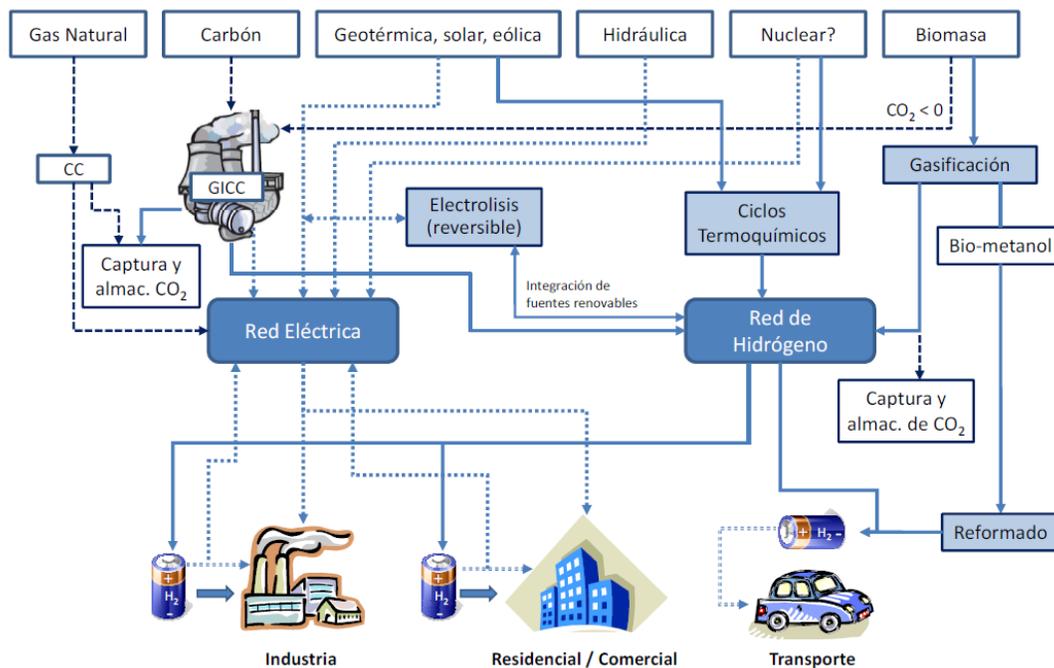


Figura 4. Sistema energético basado en el hidrógeno [18].

Posteriormente, durante el consumo de hidrógeno para la producción de energía, se libera agua, sin producir ninguna otra emisión. De este modo, no puede ser destruido, simplemente cambia de estado. Por ello, se considera una solución a largo plazo para reducir las emisiones ambientales [19].

A pesar de las ventajas mencionadas sobre la tecnología del hidrógeno existen a día de hoy muchos desafíos técnicos, sociales y políticos por superar. Es por ello

que se requiere de un esfuerzo en estos términos, como se destaca en las guías básicas y las vías de transición que ofrece la edición de ETP 2010 de la IEA, cuyo objetivo es superar los obstáculos existentes y estimular la necesaria IDD&D (investigación, desarrollo y demostración-despliegue) a corto y largo plazo [1].

Actualmente, los principales problemas técnicos asociados a la producción de hidrógeno limpio son el coste y la necesidad de una mayor integración energética. Por ello, es de vital importancia la necesidad de desarrollar las tecnologías asociadas como son los procesos de producción, los materiales, etc. para reducir los costes y mejorar la eficiencia de la integración de forma que el hidrógeno sea más competitivo.

Los esfuerzos por reducir los costes asociados a la producción de hidrógeno se enfocan en mejorar los procesos de producción por vías distintas al proceso de reformado de gas natural. Rutas como la electrólisis y la biomasa todavía requieren un factor de dos para la reducción de costes a gran escala para ser competitivos [20]. Paralelamente, se está trabajando en reducir las emisiones de gases de efecto invernadero en todos los procesos.

El coste de producir y hacer llegar hidrógeno limpio a los usuarios finales debe reducirse aún más. Por ello, debe considerarse la construcción de estaciones de abastecimiento de hidrógeno para uso del consumidor, además de mejorar los métodos libres de emisiones para la producción de hidrógeno.

En Estados Unidos, el coste de la producción de hidrógeno a gran escala debe estar en el rango de 2 – 4 \$/gge (1 gge = 1.019 kg H₂) para ser competitivo con otras tecnologías existentes [8].

En la Figura 5, se muestran los costes asociados a la producción de hidrógeno mediante energías renovables. La gráfica se divide en dos partes, a la izquierda se encuentran los costes actuales en azul el precio inferior y en morado el máximo para cada tecnología y a la derecha los precios futuros. Se puede apreciar que los costes actuales se encuentran muy por encima a los combustibles fósiles, pero se prevé que en el futuro, esta tecnología pueda ser competitiva debido a dos motivos principalmente:

- Disminuye el coste de hidrógeno debido a las mejoras tecnológicas
- Aumenta el coste de los combustibles fósiles al disminuir sus reservas.

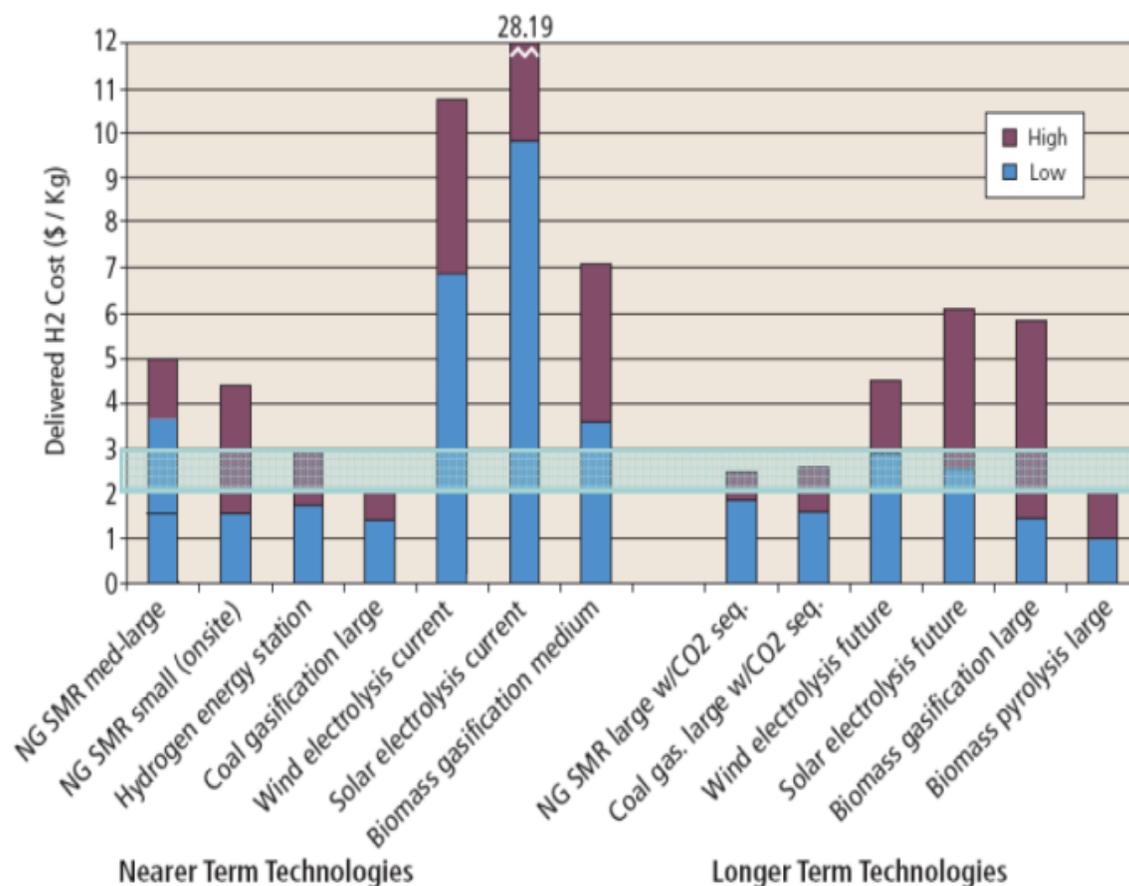


Figura 5. Costes de la producción de hidrógeno a partir de energías renovables en el presente y en el futuro [18].

Con los parámetros anteriores, se demuestra que las técnicas de producción de hidrógeno a partir de energías renovables son viables, aunque el coste actual de estos procesos supone un obstáculo frente al coste de los combustibles fósiles en la actualidad y por ello hay que continuar con el desarrollo de estas técnicas.

La producción de hidrógeno solar mediante ciclos termoquímicos a partir de metal/metal oxidado supone entre 10.5 – 29.7 ct€/kWhH₂, asumiendo que el coste de la electricidad solar es de 10 ct€/kWh y el del agua de 1.09 €/m³ [21]. Se prevé que el coste de la producción de hidrógeno en el 2017 en EEUU sea de 3 \$/gge y en Europa en el 2020 de 3.5 €/kg [16]. Un kilogramo de hidrógeno provee aproximadamente la misma energía que 2.78 kg de gasolina [22].

En numerosos artículos se resalta que si se incorporase como parte del coste de producción los efectos negativos en el medioambiente generados por el uso de combustibles fósiles, la economía del hidrógeno podría resultar más competitiva a corto y medio plazo [14], [15], [21], [23], [24].

1.3 OBJETIVOS DE LA TESIS DOCTORAL

El principal objetivo de esta Tesis Doctoral consiste en el desarrollo de una **metodología para el diseño/optimización térmico de reactores solares para la producción de hidrógeno mediante técnicas de cálculo de Fluidodinámica Computacional (CFD)**. Para lograr este objetivo se plantean objetivos intermedios que facilitan el desarrollo de la misma. Estos objetivos se describen a continuación:

1. Documentar el estado y desarrollo actual de los ciclos termoquímicos, reactores solares y métodos desarrollados para el diseño de los equipos.
2. Desarrollo de una metodología detallada para el diseño térmico de un reactor solar, evaluando los resultados de interés para una geometría sencilla que permita la reproducibilidad de las simulaciones.
3. Análisis paramétrico de los principales factores de diseño para mejorar la eficiencia térmica del mismo.
4. Validación de la metodología con resultados experimentales.
5. Aplicación de la metodología en distintos proyectos públicos y privados.

1.4 DESCRIPCIÓN DE LA METODOLOGÍA PARA EL DESARROLLO DE LA TESIS DOCTORAL

Para el desarrollo de la Tesis Doctoral y alcanzar los objetivos descritos en el apartado 1.3, este documento se divide en los siguientes capítulos:

Capítulo 2: Estado del arte

En primer lugar, se realiza un estudio bibliográfico sobre la producción de hidrógeno solar. Para ello, se analizan todos los procesos de producción tanto a partir de hidrocarburos como del agua pero debido a la necesidad de reducir el uso de combustibles fósiles y las emisiones de CO₂, la revisión bibliográfica se enfoca a la producción de hidrógeno mediante ciclos termoquímicos.

En segundo lugar, se analiza la situación actual de los reactores solares existentes registrando las principales ventajas, inconvenientes y fase de desarrollo de los mismos.

Por último, se realiza una revisión del uso de herramientas CFD para la optimización de reactores solares. De forma que se analizan los programas y modelos utilizados en la literatura.

Capítulo 3: Metodología

Este capítulo se corresponde con el núcleo de la presente Tesis Doctoral. En él se desarrolla la metodología detallada para el diseño de un reactor solar mediante técnicas CFD. En este capítulo, se presenta:

- Consideraciones previas al diseño, donde se indican los aspectos que se deben conocer inicialmente para el diseño.
- A continuación se comparan los distintos modelos que pueden ser implementados en la metodología de acuerdo al tipo de reactor y características del mismo.
- Por último, se presentan los pasos a seguir en la herramienta CFD para el modelado térmico de un reactor solar. Estos apartados se describen detalladamente y se presentan los resultados para un caso base ilustrativo.

Capítulo 4: Validación y Aplicaciones

Este apartado se divide en dos secciones: en primer lugar, se presenta la validación principalmente del modelo de radiación a partir de resultados experimentales y resultados obtenidos con la herramienta TracePro®, ambos resultados proporcionados por IMDEA Energía. En segundo lugar, se muestran los resultados obtenidos para el diseño de un reactor solar tubular para producir hidrógeno a partir de ciclos termoquímicos de ferrita instalado en una instalación de torre y en una instalación de disco.

Capítulo 5: Conclusiones

Finalmente, se recapitulan las principales conclusiones de acuerdo a la metodología obtenidas en el desarrollo de la Tesis Doctoral y líneas futuras de trabajo.

“El agua será un día empleada como combustible, el hidrógeno y el oxígeno que la constituyen, usados solos o juntos, proporcionarán una fuente inagotable de calor y de luz, y con una intensidad que el carbón no alcanza. El agua es el carbón del mañana.”

1874 Cyrus Smith personaje de La isla misteriosa de Julio Verne.

2 ESTADO DEL ARTE

2.1 INTRODUCCIÓN

Se pronostica que el consumo mundial de hidrógeno comercial y para consumo propio aumentará un 3,5 % anual hasta alcanzar 290000 millones Nm³ en 2018 [25]. A día de hoy, el 96 % de la producción proviene de combustibles fósiles y el resto (4 %) de la electrólisis del agua. En la Figura 6 se observa la evolución a lo largo de los últimos años de la producción de hidrógeno en Europa, la cual, se destina en un 72 % a fines industriales, aplicaciones químicas, principalmente producción de amoníaco, y petroquímicas, mientras que el resto se emplea en metalurgia, en electrónica y en propulsión de vehículos espaciales. La producción de hidrógeno a partir de electrólisis del agua se emplea en la industria alimentaria, principalmente para la hidrogenación de alimentos [19], [26].

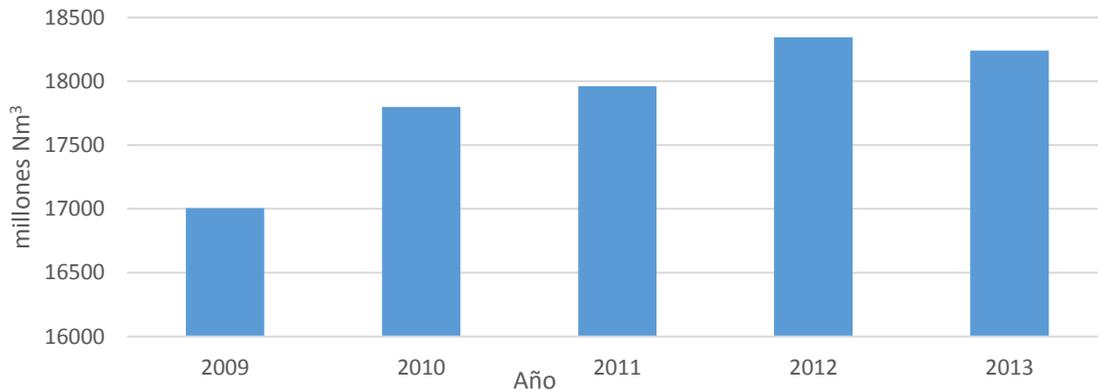


Figura 6. Producción de hidrógeno en Europa [27].

En la actualidad, el sistema de producción de hidrógeno está basado principalmente en combustibles fósiles como materia prima. Por ello, para tener una fuente de energía sin emisiones de CO₂ en el desarrollo de la Tesis Doctoral se fomenta la producción de hidrógeno a partir del agua.

Se estima que las tecnologías de producción de hidrógeno a partir de fuentes de energía renovables experimentarán una reducción significativa de precio en los próximos años, y por el contrario, la producción a partir de combustibles fósiles experimentará un incremento sostenido de costes a pesar de la situación actual del bajo precio del petróleo, con lo que llegará el momento en que la producción renovable será competitiva. (Ver Tabla 2). La situación actual del precio del petróleo se debe principalmente al actual auge del esquisto en EE.UU lo que supone un incremento en la oferta junto a que la demanda en Europa se ha reducido y a que la OPEP no ha intervenido para reducir la producción de forma que no es posible mantener el coste del barril.

	\$/gge (production costs only)	2011 Status	2015 Target	2020 Target	Ultimate Production Target
Distributed	Electrolysis from grid electricity	\$4.20	\$3.90	\$2.30	\$1-\$2
	Bio-derived Liquids (based on ethanol reforming case)	\$6.60	\$5.90	\$2.30	
Central	Electrolysis From renewable electricity	\$4.10	\$3.00	\$2.00	
	Biomass Gasification	\$2.20	\$2.10	\$2.00	
	Solar Thermochemical	NA	\$14.80	\$3.70	
	Photoelectrochemical	NA	\$17.30	\$5.70	
	Biological	NA	NA	\$9.20	

Tabla 2. Evolución de coste de la producción de hidrógeno [28].

Existen diversas vías para la producción de hidrógeno utilizando la energía solar concentrada. Estos métodos se muestran en el siguiente esquema:

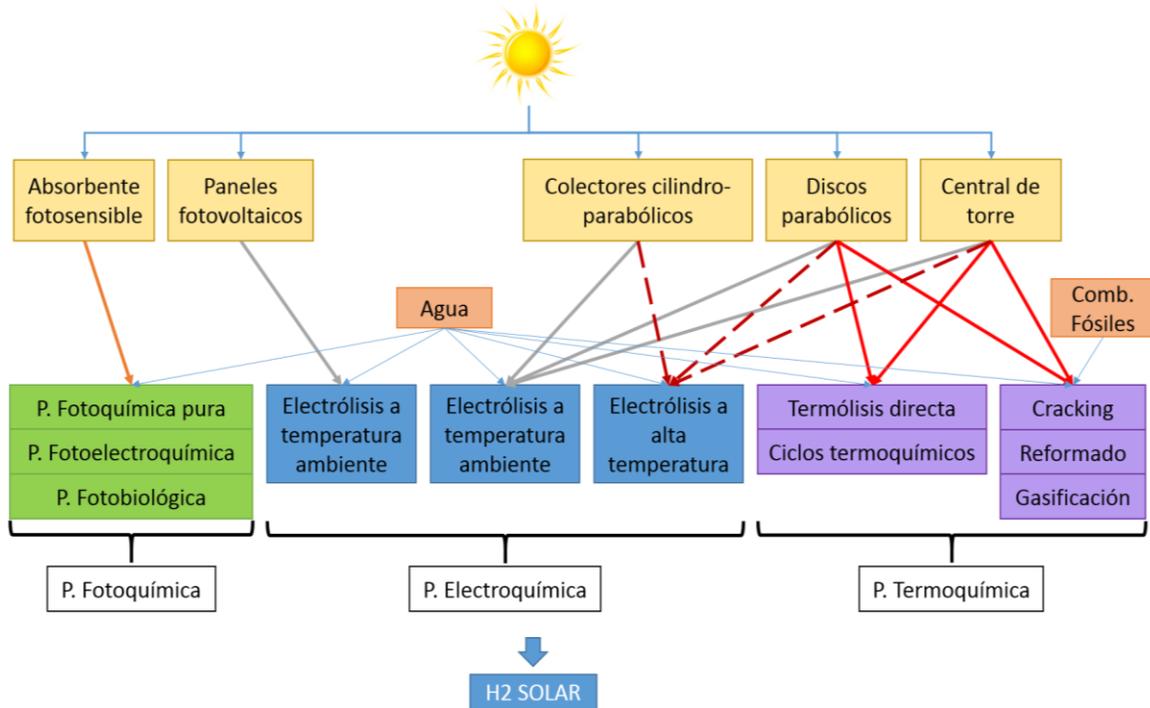


Figura 7. Vías de producción de hidrógeno mediante energía solar concentrada [29].

En el esquema se pueden diferenciar dos grupos en función de la materia prima utilizada:

- En primer lugar, se encuentran los procesos en los cuales la producción de hidrógeno se realiza a partir de la disociación de agua. Estos son los procesos electroquímicos y fotoquímicos además de la termólisis y los ciclos termoquímicos.
- Por otro lado, están los procesos que requieren de combustibles fósiles para la producción de hidrógeno, estos son el reformado, el cracking y la gasificación solar.

La producción de hidrógeno también se puede clasificar en función de la forma de aprovechamiento de la energía solar [26]:

- Fotoquímica: Mediante este fenómeno se puede producir hidrógeno a partir de los rayos del sol o fotones. La fotólisis no está limitada al espectro visible, cualquier fotón con suficiente energía puede afectar a los enlaces químicos de un compuesto [18].
- Electroquímica: Se utiliza la electricidad obtenida mediante energía solar a partir de plantas fotovoltaicas o sistemas de concentración solar y a partir de esta se lleva a cabo el proceso de la electrólisis [21], [30].
- Termoquímica: Estos procesos aprovechan la energía térmica obtenida mediante la concentración de la energía solar para llevar a cabo la

reacción química necesaria para la producción de hidrógeno, es decir, convierte la energía térmica en energía química.

A continuación se resumen las principales características de los procesos de producción de hidrógeno vía termoquímica dado que son aquellos que aprovechan la energía térmica para llevar a cabo la reacción química necesaria para la producción de hidrógeno. En este grupo se engloban los siguientes procesos: termólisis, reformado, cracking, gasificación y ciclos termoquímicos.

2.1.1 Termólisis

La producción de hidrógeno mediante este proceso es el concepto más sencillo. Consiste en la disociación directa del agua en hidrógeno y oxígeno. Existen dos problemas importantes para este proceso: en primer lugar, se necesitan elevadas temperaturas (> 2500 K), lo que conlleva problemas en la selección de materiales. En segundo lugar, la necesidad de una técnica efectiva de separación del hidrógeno y el oxígeno, para evitar una mezcla explosiva. Debido a estos problemas, hoy en día no existe ninguna planta piloto con este método para la producción de hidrógeno y a partir de esta idea surgen las distintas formas de producir hidrógeno termoquímico por otros métodos.

2.1.2 Reformado

Es el procedimiento más utilizado en la actualidad, supone un 96 % de la producción actual. Este proceso consiste en la descarbonización de hidrocarburos ligeros (gaseosos) y se puede realizar de diversas formas en función del componente con el que reacciona el metano (principal componente del gas natural, además de ser el hidrocarburo más abundante y el que tiene mayor contenido en hidrógeno):

Reformado con vapor de agua: proceso que se produce de acuerdo con la Figura 8 para la producción de hidrógeno.

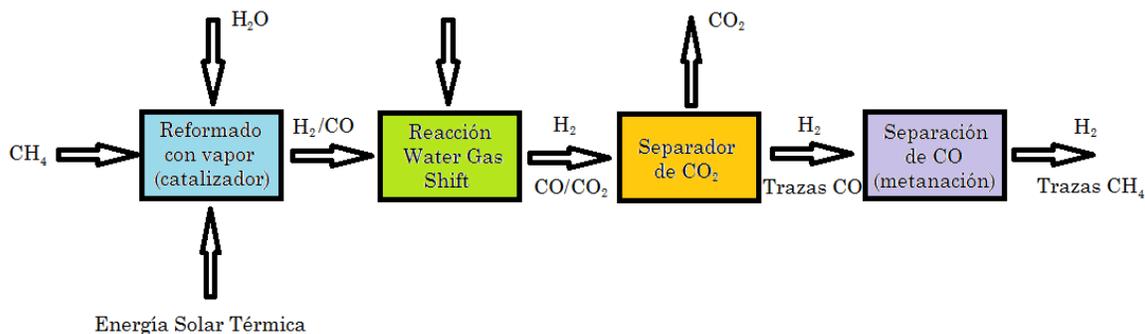


Figura 8. Diagrama de bloques del reformado de metano con vapor solar [30].

Cuando este proceso se lleva a cabo a partir de energía solar, se eliminan las emisiones de CO_2 de la etapa de reformado (reacción endotérmica catalizada a 1123 K) dado que se utiliza energía solar para obtener el calor necesario. En segundo lugar, se lleva a cabo la etapa de water gas shift para aumentar el rendimiento en hidrógeno y facilitar la separación posterior. La separación del hidrógeno del gas de síntesis es difícil y se puede realizar de diversas formas:

- Medios físicos: Una opción es enfriar la mezcla por debajo de la temperatura de condensación del CO_2 (195 K) muy diferente a la del H_2 (20 K).
- Medios químicos: El CO_2 es un óxido ácido que reacciona con una disolución de carbonato potásico para dar el carbonato ácido de potasio. Calentando este se puede regenerar el carbonato.

Hoy en día, la forma más utilizada para la separación es mediante una unidad de PSA (Pressure Swing Adsorption) este método se basan en el hecho de que bajo presión, los gases tienden a ser atraídos hacia las superficies sólidas, o adsorbidos.

Una alternativa al metano es la utilización de cualquier otro hidrocarburo o incluso carbón. Se puede obtener un gas de síntesis con un 75 % de hidrógeno y el resto de óxidos de carbono principalmente.

Reformado por oxidación parcial: La reacción principal consiste en la combustión incompleta del hidrocarburo en presencia de oxígeno, de forma que se produce monóxido de carbono e hidrógeno y como subproductos se obtienen dióxido de carbono y agua. A diferencia del reformado de vapor al tratarse de un proceso exotérmico, en este proceso el consumo de energía es nulo. En este proceso no es estrictamente necesario el uso de catalizador porque las reacciones son muy rápidas (varios órdenes de magnitud respecto al proceso con vapor de agua). Por otro lado, no es necesario calentar agua, pero si es necesario disponer de una planta de oxígeno. Con este proceso se obtiene hidrógeno a menor temperatura pero el grado de conversión es menor.

Reformado auto-térmico: es una combinación de los dos procesos anteriores.

En cualquiera de estos procesos se obtiene CO_2 .

2.1.3 Cracking

Este proceso consiste en la descomposición térmica de hidrocarburos ligeros, es decir, en la disociación del hidrocarburo a partir de energía térmica, la cual se produce a 2073 K para el caso del metano. Los requerimientos térmicos se aportan a partir de la energía solar concentrada [21].

2.1.4 Gasificación

La gasificación es un proceso para la obtención de hidrógeno mediante la descarbonización de hidrocarburos pesados (especialmente líquidos). La gasificación del carbón consta de tres etapas:

- Tratamiento de la alimentación del carbón a alta temperatura: consiste en descomponer el hidrocarburo químicamente calentándolo con vapor de agua en un reactor a alta temperatura (1603 K) y presión, produciendo el gas de síntesis. A partir del carbón y el vapor se obtiene monóxido de carbono e hidrógeno principalmente. Es en esta etapa donde se aprovecha la energía solar concentrada para alcanzar las altas temperaturas necesarias.
- Shift reactor catalítico: En la segunda etapa el gas de síntesis pasa al reactor shift, en el cual el monóxido de carbono reacciona con vapor a 723 K para producir dióxido de carbono e hidrógeno.
- Purificación del hidrógeno: la última etapa consiste en separar el hidrógeno del dióxido de carbono e impurezas. Este paso se realiza en una unidad de PSA para separar el H_2S y en una torre de absorción secundaria para separar el CO_2 .

2.1.5 Ciclos termoquímicos

Como se ha comentado en el proceso de termólisis, la disociación térmica del agua en un paso es un proceso sencillo, pero requiere de una temperatura muy elevada (entre 900 y 2500 K). Por ello, surge la idea de los ciclos termoquímicos, la cual consiste en realizar este proceso en varias etapas a menor temperatura [30].

Estos ciclos, originalmente se desarrollaron utilizando el calor de alta temperatura generado a partir de energía nuclear pero en los últimos años se ha investigado en la producción de este calor a partir de energía solar térmica concentrada debido a que se han alcanzado temperaturas superiores a los 1273 K en instalaciones de torre central. La conversión de este calor directamente en hidrógeno mediante los ciclos termoquímicos es mucho más eficiente que transformando el calor en electricidad o realizando la electrólisis del agua [31].

Entre los diferentes métodos de producción de hidrógeno a partir de energía solar, dentro de los métodos de energía solar directa, los procesos termoquímicos, tiene el potencial de mayor rendimiento térmico, por ello, la mayoría de las investigaciones se dedican a estos procesos.

En la Tabla 3, se resumen estos métodos de producción de hidrógeno vía termoquímica en función de la temperatura del proceso.

Clase I			T ≤ 1000K
Proceso		Reacción endotérmica	T(K)
Ciclos termoquímicos de temperaturas "moderadas"	Ciclos de la familia del azufre	Descomposición del ácido sulfúrico $H_2SO_4(g) \rightarrow SO_2(g) + H_2O(g) + \frac{1}{2}O_2(g)$	T ≈ 1000
	Ciclos del tipo UT-3	Hidrólisis del bromuro de calcio y del bromuro de hierro $CaBr_2(s) + H_2O(g) \rightarrow CaO(s) + 2HBr(g)$ $3FeBr_2(s) + 4H_2O(g) \rightarrow Fe_3O_4(s) + 6HBr(g) + H_2(g)$	T ≈ 900
Clase II			1000K ≤ T ≤ 2500K
Proceso		Reacción endotérmica	T(K)
Ciclos termoquímicos de temperaturas elevadas	Reducción óxidos metálicos	Disociación del óxido metálico $M_2O_y \rightarrow xM + \frac{y}{2} \cdot O_2$	T ≈ 2500
Descarbonización de combustibles fósiles	Cracking	Descomposición térmica de hidrocarburos $C_2H_y \rightarrow xC(gr) + \frac{y}{2} \cdot H_2$	T ≈ 1000
	Reformado	Descarbonización de hidrocarburos ligeros $C_2H_y + xH_2O \rightarrow \left(\frac{y}{2} + x\right) \cdot H_2 + xCO$	T ≈ 1100
	Gasificación	Descarbonización de hidrocarburos pesados $C_2H_y + xH_2O \rightarrow \left(\frac{y}{2} + x\right) \cdot H_2 + xCO$	T ≈ 1100
Clase III			T > 2500K
Proceso		Reacción endotérmica	T(K)
Termólisis directa del agua		Disociación del agua $H_2O \rightarrow H_2 + \frac{1}{2}O_2$	T > 2500

Tabla 3. Producción de hidrógeno vía procesos termoquímicos [30].

2.2 REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA: CICLOS TERMOQUÍMICOS

Hoy en día, se conocen 115 ciclos termoquímicos para la producción de hidrógeno. Existen unos criterios para su clasificación a partir de los cuales se pueden determinar los más utilizados o adecuados según los requerimientos de la instalación. En esta Tesis Doctoral se presta mayor atención a los criterios definidos en la metodología numérica de Brown [32]–[34], de forma que los ciclos termoquímicos más idóneos son aquellos que resultan de una optimización conforme a los siguientes criterios:

- Menor número de reacciones.
- Menor número de etapas.
- Menor número de elementos involucrados en las reacciones.
- Mayor abundancia de los elementos en la atmósfera.
- Selecciones de elementos no corrosivos.
- Ciclos con fases gas y líquidas o sólidos en lecho fijo.
- Menores temperaturas máximas.
- Abundante documentación sobre el ciclo.
- Mayor escala y grado de demostración.
- Mayores eficiencias y menores costes asociados al ciclo.

En función de dichos parámetros, los ciclos más significativos son los que se describen en la Tabla 4, los cuales se clasifican en 4 grupos:

Ciclos de la familia del azufre			
	Pasos	Temperatura máxima (K)	Eficiencia (%)
Sulfúrico híbrido	2	1173 (1423 sin catalizador)	43
Sulfur-Iodine	3	1173 (1423 sin catalizador)	38
Sulfuro multivalente		1843	35
Ciclos de óxidos metálicos volátiles			
	Pasos	Temperatura máxima (K)	Eficiencia (%)
Zinc/óxido de zinc	2	2273	45
Cadmio híbrido	2	1873	42
Carbonato de cadmio		1873	43
Ciclos de óxidos metálicos no volátiles			
	Pasos	Temperatura máxima (K)	Eficiencia (%)
Óxido de hierro	2	2473	42
Óxido de cerio	2	2273	68
Sodio/manganeso	3	1833	49
Ferritas	2	1373-2073	43
Ciclos de bajas temperaturas			
	Pasos	Temperatura máxima (K)	Eficiencia (%)
Híbrido Cobre Clorhídrico	4	803	39

Tabla 4. Ciclos termoquímicos de mayor importancia [30].

La mayoría de los procesos de ciclos termoquímicos de la familia del azufre se basan en la división térmica del ácido sulfúrico en dióxido de azufre y oxígeno. [32], [34]–[36]. La descomposición del ácido sulfúrico se realiza a 1123 K (con catalizador) o 1423 K (sin catalizador), cerca del límite máximo de temperatura de los reactores nucleares de muy alta temperatura y en una atmósfera corrosiva, lo que constituye los principales problemas para la realización de estos ciclos además de la necesidad de reactores independientes para cada fase. Sin embargo, este ciclo también presenta numerosas ventajas dado que se conoce el proceso completo del ciclo, las reacciones secundarias son mínimas y la conversión de estos ciclos se encuentra entre el 38% - 40%. En la actualidad, el ciclo híbrido de azufre ha sido probado a escala de laboratorio y demostrado en una planta piloto. Por otro lado, la etapa de descomposición del ácido sulfúrico también ha sido demostrada utilizando energía solar en una instalación de torre.

Los ciclos termoquímicos de óxidos metálicos volátil principales son: óxido de zinc/zinc y óxido de cadmio/cadmio [31], [37]–[40]. Estos ciclos constan de dos etapas, en la primera el óxido metálico se oxida obteniéndose oxígeno y el metal en fase gaseosa y en la segunda fase se produce hidrógeno y se cierra el ciclo

recuperando el óxido metálico volátil. La principal diferencia del ciclo de óxido de cadmio con el ciclo de óxido de zinc es la temperatura máxima a la que tiene lugar la etapa de activación del óxido 1723 K y 2273 K respectivamente y la conversión 59 % y 35% respectivamente. Sin embargo, a pesar de las mejores prestaciones del ciclo de óxido de cadmio, este ciclo presenta una alta toxicidad debida al cadmio lo que dificulta su uso y no ocurre con el zinc. Otro inconveniente que presentan estos ciclos es la necesidad de realizar un enfriamiento rápido (quenching) de los productos de la etapa de activación de forma que se evite su recombinación, aunque este proceso implica un gasto extra de energía.

El ciclo termoquímico de cobre clorhídrico híbrido consta de 5 etapas [30], [41]. Consiste en tres reacciones térmicas en las que se generan hidrógeno, oxígeno y cloruro de hidrógeno, un paso electroquímico en el que el cloruro de cobre (I) se descompone en metal y cloruro de cobre (II) y un paso de secado del cloruro de cobre (II). El oxígeno se produce a partir del oxiclорuro de cobre entre 723 y 803 K, que es la mayor temperatura necesaria para este ciclo. La conversión ideal del ciclo está entre 41-43%. El ciclo de cloruro de cobre es uno de los ciclos de baja temperatura más prometedores. Actualmente, se hacen necesarios los estudios experimentales de las reacciones químicas para verificar la viabilidad práctica y para evaluar la cinética de las reacciones.

Dado que la Tesis Doctoral plantea una metodología para el diseño de reactores térmicos de alta temperatura en los cuales se pueden llevar a cabo las distintas etapas del ciclo termoquímico, en este apartado se analizan con mayor detalle los ciclos termoquímicos de óxidos metálicos no volátiles dado que son los que cumplen con los requisitos mencionados. Por otro lado, se observa que los ciclos termoquímicos de ferritas se encuentran en el punto medio de temperatura máxima de los ciclos que engloban esta categoría, es por ello, que las aplicaciones de la Tesis Doctoral se presentan con este ciclo termoquímico. Además, dichas aplicaciones están asociadas a proyectos cuyo ciclo seleccionado es el de ferrita.

2.2.1 Ciclos termoquímicos de óxido de metal no volátil

En general, estos ciclos termoquímicos se realizan en dos pasos y son menos corrosivos que los basados en ácidos sulfúricos aunque necesitan temperaturas más elevadas. Actualmente, con los sistemas ópticos de concentración solar se consiguen temperaturas estacionarias por encima de los 3000 K, alcanzando una conversión de la energía solar a energía térmica que permite obtener temperaturas del orden de los 2000 K y superiores [21].

Los ciclos termoquímicos en dos etapas utilizando óxidos metálicos redox conllevan:

- Una primera etapa, endotérmica, que consiste en la reducción mediante energía solar del óxido metálico (M_xO_y). La reducción puede ser al metal o a un óxido metálico de menor valencia.
- En una segunda etapa, que no requiere de energía solar, se produce la hidrólisis exotérmica del agua junto con la oxidación del metal, para formar el hidrógeno y recuperar el óxido metálico cerrando el ciclo.

Se ha comprobado experimentalmente que la reacción de separación de la molécula del agua ocurre de forma exotérmica cuando se hace pasar el vapor a través del metal oxidado, a temperaturas superiores a 700 K. Los materiales utilizados para los pares redox son metales multivalentes (Fe_3O_4/FeO , Mn_3O_4/MnO , etc).

La ventaja de producir hidrógeno mediante ciclos termoquímicos con óxidos metálicos no volátiles es que la disociación del agua tiene lugar en dos pasos a temperaturas inferiores a los 1073 K aunque la reducción del óxido tiene lugar a temperaturas comprendidas entre los 1273 K y los 2500 K. Se basan en los materiales que actúan como pares redox más eficientes para la disociación del agua.

Estos procesos han sido probados experimentalmente a partir de energía solar concentrada con los que se alcanzan temperaturas comprendidas entre 1573 K y 2273 K.

Un factor importante a considerar en los procesos termoquímicos es la recuperación de los reactivos y productos intermedios. Se estima que si por cada ciclo se recupera entre el 99.9% - 99.99% el ciclo es viable, de lo contrario el coste de la producción de hidrógeno aumenta debido a que hay que reponer los reactivos [17]. Por otro lado, este hecho puede ocasionar problemas ambientales. La mayor parte de las investigaciones de los últimos años se centran en los ciclos termoquímicos para la producción de hidrógeno debido a su eficiencia y a que está libre de emisión de contaminante.

2.2.1.1 Óxido de Cerio

Este ciclo consta de dos etapas en fase sólida. La etapa de activación del ciclo de CeO_2/Ce_2O_3 ha sido ensayada en un reactor solar a alta temperatura (2273 K) y a bajas presiones obteniendo una conversión del 68 %, mientras que la etapa de hidrólisis se ha llevado a cabo a escala de laboratorio [40].

El cerio se utiliza como catalizador en varios ciclos termoquímicos para la producción de hidrógeno. Por ejemplo, existen experimentos con difosfato de sodio a 1223 K que han obtenido conversiones del 39 %. Otro estudio de relevancia, es el óxido de cerio con ácido clorhídrico de Nacional Laboratory Los

Alamos aunque en el este caso el ciclo consta de 8 etapas y la conversión conseguida es del 54 % [30].

Dado que las etapas se realizan en fase sólida en lecho fijo, las dos etapas del ciclo se pueden realizar en el mismo reactor, reduciendo así los costes de instalación y mantenimiento. Por otro lado, este ciclo no contiene sustancias corrosivas y los rendimientos obtenidos son muy elevados. Otras ventajas son la rápida cinética de las reacciones, del orden de minutos, y que no existen reacciones secundarias.

El mayor inconveniente de este ciclo es la elevada temperatura máxima necesaria para realizar la etapa de oxidación. Este hecho conlleva dificultades para la selección de los materiales del reactor capaces de soportar las temperaturas requeridas en un proceso cíclico [40], [42].

2.2.1.2 Óxido de hierro

El ciclo de óxido de hierro fue inicialmente propuesto por Nakamura [43] y posteriormente probado en un horno solar de 2 kW [44], llegándose a alcanzar conversiones del 54 %, siendo el valor medio del orden del 42 % [45]. Este ciclo consta de dos etapas en fase líquida y por tanto se realizan en reactores independientes.

En este ciclo la producción teórica de hidrógeno es relativamente alta comparada con otros ciclos. Además, se evitan las reacciones de recombinación y la irreversibilidad asociada a los óxidos volátiles metálicos tales como los óxidos de zinc o cadmio. El ciclo termoquímico mediante óxido de hierro es el más estudiado y simple según la literatura [43].

El principal inconveniente asociado a este ciclo es la alta temperatura requerida en la fase de activación del óxido, 2473 K. Otros problemas asociados al óxido son la rápida desactivación de las partículas de óxido de hierro durante la reacción cíclica, la sinterización grave y la fusión durante la descomposición térmica de Fe_3O_4 con fuerte vaporización.

2.2.1.3 Sodio/ Manganese

El ciclo termoquímico de $\text{Mn}_2\text{O}_3/\text{MnO}$ consta de tres etapas de reacción para conseguir recuperar los reactivos iniciales y así completar el ciclo. Este ciclo fue propuesto por Sturzenegger, consiguiendo realizar las tres etapas por debajo de 1873 K. El hecho de que la segunda y tercera etapa del ciclo conlleven reacciones sólido-líquido implica que dichas etapas no se puedan implementar con facilidad en único reactor solar conjuntamente con la etapa de reducción del Mn_2O_3 . Por tanto, la única etapa que en la cual la temperatura necesaria se alcanza por

energía solar es la etapa de reducción del óxido de manganeso. La conversión de este ciclo es del 49 % [34].

La cinética de este ciclo es rápida, del orden de minutos, temperatura máxima del ciclo correspondiente a la etapa de activación del óxido de manganeso es relativamente baja y el rendimiento medio asociado a este ciclo es alto.

El principal inconveniente de este ciclo es el efecto corrosivo del NaOH a alta temperatura en los materiales de construcción y consecuentemente el elevado coste asociado.

2.2.1.4 Ferritas

La sustitución parcial de hierro en la magnetita por otros metales da lugar a la formación de óxidos mixtos $(\text{Fe}_{1-x}\text{M}_x)_3\text{O}_4$ capaces de reducirse a menor temperatura, para generar productos (fase reducida) $(\text{Fe}_{1-x}\text{M}_x)_{1-y}\text{O}$ capaces de disociar la molécula de agua y producir hidrógeno. Los principales metales utilizados para la sustitución parcial del hierro son el manganeso, el magnesio, el cobalto, el zinc y el níquel [46]. Sin embargo, existen ciertos inconvenientes asociados a esta técnica como son el necesario post procesado mediante *quenching* de los productos de descomposición, la posible sinterización de los productos sólidos y que en ocasiones la producción de hidrógeno es baja.

En este proceso se consiguen temperaturas máximas más bajas que para el ciclo de óxido de hierro. Por otro lado, las eficiencias alcanzadas por las ferritas más estudiadas son elevadas. Aunque incluyen fases sólidas, estas se presentan en lecho fijo por lo que el arrastre de partículas no supone un problema [47].

El principal problema de algunas ferritas consiste en el estado de desarrollo, dado que muchas de ellas se encuentran en fase de investigación, cálculo o escala de laboratorio.

La investigación desarrollada en este tema es bastante extensa, por lo que a continuación se describen varios ejemplos encontrados en la literatura.

1. Ferritas de níquel-manganeso

La ferrita cuya fórmula química es $\text{Ni}_{0,5}\text{Mn}_{0,5}\text{Fe}_2\text{O}_4$, es capaz de generar hidrógeno mediante un ciclo termoquímico ensayado en un horno solar de 15 kW donde la etapa de descomposición del óxido se realiza a 1373 K temperatura muy inferior a la asociada a esta etapa para el ciclo de óxido de hierro, 2273 K, y la etapa de hidrólisis se realiza a 873 K [48].

Cuando esta ferrita se dopa con exceso de cationes de níquel y manganeso, éstos se distribuyen en los huecos intersticiales de la estructura de espinela de la ferrita formándose una especie no estequiométrica de la forma

($\text{Ni}_{0,51(1+\epsilon)}\text{Mn}_{0,5(1+\epsilon)}\text{Fe}_{1,99(1+\epsilon)}\text{O}_4$) donde ϵ denota el grado de exceso de cationes de Ni y Mn en la ferrita [49]. En este caso, durante la etapa de descomposición del ciclo termoquímico se libera más oxígeno y por tanto, durante la etapa de hidrólisis la cantidad de hidrógeno producida es mayor.

2. Ferritas de zinc y manganeso

Se ha estudiado que la mezcla de zinc u óxido de zinc y magnetita (Fe_3O_4) puede dar lugar a la obtención de hidrógeno. La etapa de activación se produce a una temperatura superior a 1773 K [50], [51], siendo este valor inferior al correspondiente del ciclo de óxido de hierro. Mientras que la etapa de hidrólisis se lleva a cabo a una temperatura comprendida entre 873- 1073 K alcanzando conversiones del 60 % [52].

La etapa de descomposición térmica ha sido estudiada utilizando una lámpara de xenón o un horno solar acoplado a un concentrador de disco parabólico de 15 kW. A su vez, dependiendo de las condiciones experimentales utilizadas en esta etapa (atmósfera, *quenching*...) se favorece la obtención de zinc u óxido de zinc [53]. La conversión obtenida en la etapa de hidrólisis es de un 60 % para una temperatura de operación de 1273 K. Para esta ferrita no ha sido probado experimentalmente el ciclo completo. El principal inconveniente de este ciclo consiste en las deposiciones de óxido de zinc sobre las paredes del reactor en la etapa de producción de hidrógeno y recuperación de la ferrita [54].

3. Ferritas de cobre-aluminio

Las ferritas de cobre-aluminio poseen una estructura tipo espinela que permite producir hidrógeno a partir de agua. La etapa de descomposición térmica se produce a 1673 K, mientras que la etapa de hidrólisis que se produce a una temperatura comprendida entre los 1273 - 1673 K. Los rendimientos medios después de 4 ciclos, calculados en base al contenido de iones Fe^{3+} de la ferrita original, son bastante bajos: 1.6 % en la obtención de oxígeno y 0.37 % en la producción de hidrógeno [55].

4. Ferritas de níquel

El ciclo de la ferrita de níquel cuya fórmula es NiFe_2O_4 están constituidos por una etapa de descomposición a 1473 K en atmósfera de helio donde se genera oxígeno, seguida de una etapa de hidrólisis a 1073 K donde se libera el hidrógeno. Este ciclo es capaz de descomponer la molécula de agua llegando a producir una media de 0,442 cm^3 de H_2/g de material inicial por ciclo, lo que supone una conversión para la reacción de hidrólisis de un 28 %, considerando la estequiometría de la reacción de disociación de la molécula de agua. Ferritas de níquel-manganeso ($\text{Ni}_{0,5}\text{Mn}_{0,5}\text{Fe}_2\text{O}_4$), de cobre y de cobre-manganeso

($\text{Cu}_{0,5}\text{Mn}_{0,5}\text{Fe}_2\text{O}_4$) ha sido probadas en las mismas condiciones experimentales sin dar buenos resultados [56].

Este ciclo ha sido estudiado a escala de laboratorio. En dicho ensayo se descompuso la ferrita de níquel a 1673 K durante 30 minutos y posteriormente la segunda etapa de hidrólisis se llevó a cabo a una temperatura de 1273 K durante 60 minutos. Mediante un estudio por difracción de rayos X se ha observado que en la etapa de descomposición de la ferrita, parte de la misma se reduce transformándose en una fase tipo wustita (solución sólida de NiO y FeO), la cual se vuelve a transformar en la ferrita de partida produciendo una media de 5,8 N \cdot cm³ de H₂/g de ferrita por ciclo después de 6 ciclos consecutivos [57].

5. Ferritas de manganeso y óxido de calcio

Algunos investigadores han obtenido hidrógeno por disociación de agua a partir de una mezcla de la ferrita de manganeso (MnFe_2O_4) y óxido de calcio (CaO) a una temperatura máxima del ciclo de 1273 K.

La producción de hidrógeno se debe a la oxidación de Mn^{2+} a Mn^{3+} en la espinela, formándose un compuesto de tipo $\text{Ca}_3(\text{Fe}, \text{Mn})_3\text{O}_8$. Varias proporciones de los reactivos iniciales han sido probadas, llegándose a la conclusión de que para relaciones molares $\text{CaO}:\text{MnFe}_2\text{O}_4$ iguales a 3, se obtiene la máxima cantidad de hidrógeno, dicho valor se corresponde con 17,8 cm³ (298 K, 1 atm) de H₂/g de mezcla tras inyectar 1 cm³ de agua al sistema, debido a la oxidación de un 2 % de Mn^{2+} de la ferrita original. Si se utiliza como ferrita de partida $\text{Mn}_{0,5}\text{Fe}_{2,5}\text{O}_4$, la cantidad de hidrógeno obtenido en las mismas condiciones experimentales son 21.6 cm³ (298 K, 1 atm) de H₂/g de mezcla, debido en este caso a la oxidación de Mn^{2+} y Fe^{2+} . En este caso, queda por comprobar si en una posterior etapa de descomposición del sólido $\text{Ca}_3(\text{Fe}, \text{Mn})_3\text{O}_8$ a alta temperatura se regenerarían los reactivos originales y se obtendría oxígeno, completando así el ciclo termoquímico [58], [59].

6. Ferritas de manganeso y carbonato sódico

En 1999 se propuso un ciclo termoquímico basado en la mezcla de ferritas de manganeso y carbonato sódico cuyo esquema es el siguiente [58]:



El $\text{Na}(\text{Mn}_{1/3}\text{Fe}_{2/3})\text{O}_2$ es un material bastante estable, por lo que la reacción para obtener oxígeno genera bajos rendimientos. Recientemente se ha determinado que se favorece esta reacción para condiciones de temperaturas entre 973 y 1073 K y a presiones de CO₂ superiores a 0.8 atm [60]. Otra de las formas de favorecer

dicha reacción, es introducir $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ como reactivo, de tal forma que el ciclo termoquímico completo quedaría según se muestra en la Figura 9.

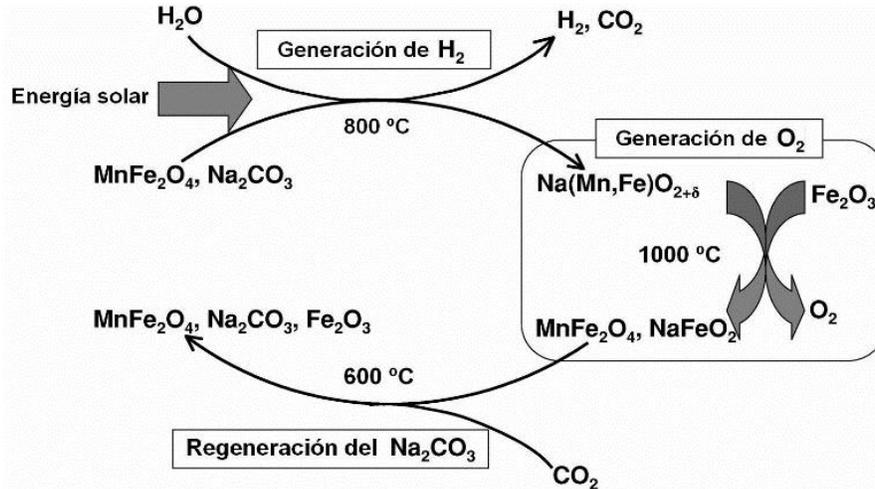


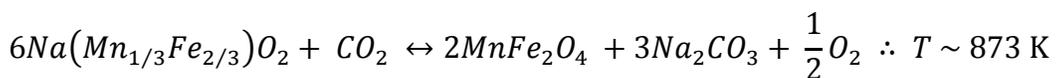
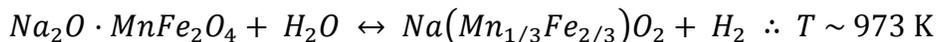
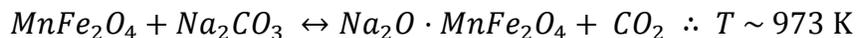
Figura 9. Esquema del ciclo termoquímico $\text{MnFe}_2\text{O}_4\text{-Na}_2\text{CO}_3\text{-Fe}_2\text{O}_3$ [60].

Para este ciclo, se ha determinado que el rendimiento de la reacción de recuperación del $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ a partir de NaFeO_2 es de un 71 % a 873 K.

Ventajas: este ciclo en comparación con el ciclo termoquímico de la ferrita aislada presenta una mayor generación de hidrógeno por gramo de ferrita y una temperatura máxima de proceso menor.

Inconvenientes: disminuye la eficiencia total, debido al mayor número de etapas y mayor número de procesos de separación de los productos formados en cada una de las etapas. Otro de los problemas que presenta este ciclo surge a la hora de separar el dióxido de carbono y el hidrógeno producidos en la reacción de hidrólisis. Para resolver este inconveniente se ha observado que la mezcla de MnFe_2O_4 y Na_2CO_3 desprende CO_2 durante la etapa de hidrólisis antes de comenzar a inyectar el vapor de agua en el sistema, por lo que se ha propuesto otra variante de este ciclo en 3 etapas para obtener el dióxido de carbono y el hidrógeno en etapas diferentes [61], [62].

La variación del ciclo propuesta para evitar la formación de dióxido de carbono e hidrógeno en la misma etapa se describe a continuación:



Al separar la formación de dióxido de carbono e hidrógeno se evita la pérdida de eficacia asociada al proceso de separación de los mismos.

7. Ferritas soportadas sobre zirconia

En los últimos años, la búsqueda de nuevos materiales basados en ferritas para obtener hidrógeno mediante ciclos termoquímicos se centra en sistemas donde se evite su sinterización durante la etapa de activación y se mantenga una producción de hidrógeno constante a lo largo de numerosos ciclos. Uno de los sistemas más desarrollados actualmente se basa en soportar ferritas sobre distintas matrices como por ejemplo, la zirconia.

Se ha desarrollado un ciclo termoquímico basado en ferritas soportadas sobre zirconia monoclinica ($m\text{-ZrO}_2$) (20 % en peso de ferrita). Estas ferritas se preparan mediante la calcinación de un precursor sintetizado sobre el soporte de zirconia (método de co-precipitación). La etapa de la descomposición térmica de la ferrita soportada sobre la zirconia en una atmósfera inerte se lleva a cabo a 1673 K, con el correspondiente desprendimiento de oxígeno. La etapa de hidrólisis se produce a 1273 K produciendo hidrógeno y regenerando la ferrita original. La presencia de zirconia evita la sinterización de los óxidos formados durante la etapa de descomposición, debido a la buena dispersión de la ferrita sobre el soporte. Así, durante la etapa de descomposición, parte de la ferrita se transforma en wustita, comprobándose que la cantidad de wustita formada está directamente relacionada con la cantidad de hidrógeno producido en la posterior etapa de hidrólisis [57]. Por otro lado, la ciclabilidad de sistemas basados en ferrita de manganeso, ferrita de cobalto y ferrita de níquel, todas ellas soportadas sobre $m\text{-ZrO}_2$ ha sido probada experimentalmente [57], [63], [64].

Material	% $m\text{-ZrO}_2$	Nº ciclos	$\text{Ncm}^3 \text{H}_2/\text{g}$ por ciclo	Conversión ferrita (%)*
$\text{Fe}_3\text{O}_4/m\text{-ZrO}_2$	20,0	6	6,4	33
$\text{Mn}_{0,36}\text{Fe}_{2,64}\text{O}_4/m\text{-ZrO}_2$	17,0	6	4,3	26
$\text{Mn}_{0,69}\text{Fe}_{2,31}\text{O}_4/m\text{-ZrO}_2$	19,0	6	7,5	41
$\text{MnFe}_2\text{O}_4/m\text{-ZrO}_2$	19,0	4	5,2	28
$\text{Mg}_{0,19}\text{Fe}_{2,81}\text{O}_4/m\text{-ZrO}_2$	17,0	4	6,7	40
$\text{Mg}_{0,56}\text{Fe}_{2,44}\text{O}_4/m\text{-ZrO}_2$	18,8	4	5,7	29
$\text{Co}_{0,19}\text{Mn}_{0,48}\text{Fe}_{2,33}\text{O}_4/m\text{-ZrO}_2$	19,4	6	7,8	42
$\text{Co}_{0,39}\text{Mn}_{0,10}\text{Fe}_{2,51}\text{O}_4/m\text{-ZrO}_2$	16,8	6	4,8	30
$\text{Co}_{0,39}\text{Mn}_{0,30}\text{Fe}_{2,31}\text{O}_4/m\text{-ZrO}_2$	15,7	6	6,6	44
$\text{Co}_{0,39}\text{Mn}_{0,52}\text{Fe}_{2,09}\text{O}_4/m\text{-ZrO}_2$	15,5	6	5,1	34
$\text{Co}_{0,56}\text{Mn}_{0,16}\text{Fe}_{2,28}\text{O}_4/m\text{-ZrO}_2$	18,0	6	7,2	42
$\text{Co}_{0,42}\text{Fe}_{2,58}\text{O}_4/m\text{-ZrO}_2$	16,7	6	6,2	39
$\text{Co}_{0,67}\text{Fe}_{2,33}\text{O}_4/m\text{-ZrO}_2$	20,2	6	8,9	46
$\text{CoFe}_2\text{O}_4/m\text{-ZrO}_2$	20,1	6	9,7	51
$\text{NiFe}_2\text{O}_4/m\text{-ZrO}_2$	19,2	6	12,2	69

Tabla 5. Producciones de hidrógeno y conversiones de distintas ferritas soportadas sobre $m\text{-ZrO}_2$ [64].

*Los valores representados en la Tabla 5 han sido calculados considerando que toda la wustita formada tras la activación se re-oxida a ferrita durante la hidrólisis [64].

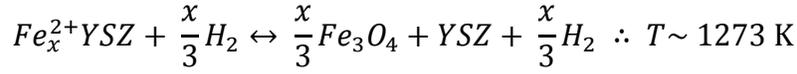
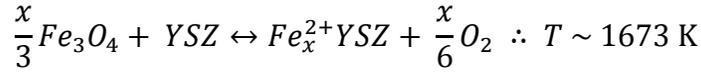
El sistema basado en ferrita de níquel sobre zirconia, NiFe_2O_4 (19,2 % en peso)/m- ZrO_2 , es el que presenta mayor conversión, en torno a un 69 % de transformación de ferrita en wustita, llegando a suministrar hasta 12,2 Ncm³ de H_2 /g de material inicial (ferrita + circona) por ciclo, después de varios ciclos. En este estudio, se ha probado aumentar el porcentaje de ferrita soportada sobre m- ZrO_2 , observando que la cantidad de hidrógeno obtenida disminuye frente a la obtenida con muestras cubiertas con un 20 % de ferrita. Esto podría deberse a que una mayor cantidad de ferrita existente sobre la superficie del soporte provocaría la sinterización de la fase wustita formada durante la etapa de activación y la consiguiente desactivación de la ferrita. Todos estos ensayos han sido realizados en un reactor de lecho fijo construido en un laboratorio [57].

El ciclo termoquímico Fe_3O_4 (20 % en peso)/m- ZrO_2 ha sido ensayado a escala de laboratorio, realizando la activación a temperaturas entre 1673 y 1873 K, seguida de un quenching de la muestra en nitrógeno líquido. De los resultados obtenidos se ha deducido que la transformación de magnetita en wustita aumenta en función de la temperatura de activación, de tal forma que a 1873 K se obtiene una conversión media del 60 %. La ciclabilidad de este material es buena, ya que la cantidad de hidrógeno producida se mantiene constante a lo largo de varios ciclos. La muestra activada a 1873 K es capaz de generar una media de 10,8 Ncm³ de H_2 /g por ciclo [65].

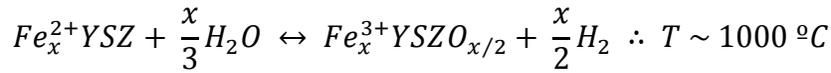
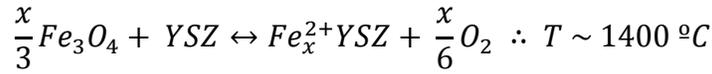
También se han realizado ensayos del ciclo termoquímico a partir del sistema NiFe_2O_4 /m- ZrO_2 , llevando a cabo la reacción de activación en un reactor solar de lecho fluidizado de circulación interna con tubo de aspiración, utilizando una lámpara de arco de xenón de 6 kW como simulador de la radiación solar. En estas condiciones, la conversión de ferrita en wustita durante la etapa de activación es de un 44 % para 30 minutos de irradiación. En este mismo sistema se ha estudiado el efecto del tamaño de partícula del material estudiado y de la temperatura de precalentamiento aplicada, observándose que la eficacia de esta reacción aumenta con la disminución del tamaño de partícula del material introducido y aplicando una mayor temperatura de precalentamiento al sistema [66].

En otros estudios se ha sustituido la zirconia monoclinica utilizada como soporte, por zirconia estabilizada con itrio (YSZ, *yttrium-stabilized-zirconia*), observándose un nuevo mecanismo de reacción, donde el hierro se introduce en la estructura, cúbica en este caso, del soporte de YSZ, evitándose la formación de wustita y por tanto la sinterización de la muestra. Además, este mecanismo de reacción depende de la cantidad de óxido de itrio (Y_2O_3) contenido en la zirconia. Así, para contenidos en óxido de itrio de hasta 8 % molar, lo que sucede es que

parte del Fe^{2+} de la magnetita se incorpora a la red cúbica de la circonia, regresando a su posición inicial en la ferrita durante la etapa de hidrólisis.



Sin embargo, si el contenido en óxido de itrio en la circonia es superior al 8 % molar, lo que sucede es que el exceso de óxido de itrio estabiliza el Fe^{3+} en la circonia durante la etapa de hidrólisis del primer ciclo, de manera que en los ciclos sucesivos durante la etapa de descomposición el Fe^{3+} se reduce a Fe^{2+} y en la etapa de producción de hidrógeno el Fe^{2+} formado se oxida a Fe^{3+} permaneciendo en el soporte de YSZ [67].



El grupo de Kodama [68] ha comparado la eficacia en la producción de hidrógeno y la ciclabilidad de magnetita soportada sobre m-ZrO₂ y sobre YSZ con un contenido igual o mayor al 8 % molar de Y₂O₃. Tras realizar los ensayos de los ciclos termoquímicos en un reactor de partículas construido en el laboratorio, se deduce que la magnetita soportada sobre m-ZrO₂ genera mayores volúmenes de hidrógeno por ciclo (7.5-8 N·cm³ de H₂/g de material en el primer ciclo, 35 % de conversión de ferrita inicial) que la soportada sobre YSZ (5.5-6 N·cm³ de H₂/g de material en el primer ciclo, 30 % de conversión de ferrita inicial). Sin embargo, este último sistema presenta una mejor ciclabilidad, ya que la cantidad de hidrógeno producida permanece constante, mientras que en el sistema de magnetita soportada sobre m-ZrO₂, la cantidad de hidrógeno disminuye al aumentar el número de ciclos. Los tiempos de reacción son de 30 y 60 minutos para las etapas de activación e hidrólisis, respectivamente.

Para mejorar el sistema descrito en el párrafo anterior se han ensayado ciclos termoquímicos sobre soluciones sólidas de magnetita y YSZ preparadas por el método de co-precipitación y por el método cerámico. Los materiales preparados por el método de co-precipitación forman una solución sólida de estructura cúbica cuando el contenido de iones hierro es menor del 15 % molar del total de cationes de la muestra (Fe^{3+} , Zr^{4+} y Y^{3+}) y los preparados por el método cerámico forman una solución sólida de estructura cúbica cuando el contenido de hierro es inferior a 20 % molar. Estos sistemas se ensayan en un reactor de lecho fluidizado

construido en el laboratorio a 1623 K durante 2 minutos (etapa de activación) y a 1273 K durante 5 minutos (etapa de hidrólisis). Los materiales preparados por el método de co-precipitación generan oxígeno de forma proporcional al contenido en hierro hasta un máximo del 15 %. De todos ellos, el que más cantidad de hidrógeno genera es el que contiene un 15 % de Fe, el cual produce 1.2 mL O₂/g y 0.91 mL H₂/g por ciclo. Para los sistemas que contienen un 20% de Fe, el preparado por co-precipitación genera 0.80 mL O₂/g y 0.59 mL H₂/g por ciclo, mientras que el preparado por el método cerámico genera 0.82 mL O₂/g y 0.92 mL H₂/g por ciclo, siendo la relación H₂/O₂ mayor en este último caso [69]. Este mismo sistema ha sido preparado con ferrita de níquel utilizando el método cerámico, de tal forma que el material ensayado en ciclos termoquímicos tiene una relación (Ni, Fe):Zr de 0.26:1. Tras realizar 10 ciclos seguidos a 1500 °C durante 2 minutos para la etapa de activación y 1473 K durante 5 minutos para la etapa de hidrólisis, se obtiene una media de 1.9 cm³ de O₂/g y 3.8 cm³ de H₂/g por ciclo, siendo la relación H₂/O₂ estequiométrica, considerando la estequiometría de la reacción de disociación del agua. Además mediante DRX se observa que este material no sufre cambios en su estructura a lo largo de los ciclos.

También ha sido probado soportar el sistema de Fe₃O₄/YSZ (8 % molar de Y₂O₃) sobre un disco de espuma de circonita parcialmente estabilizada con magnesio (MPSZ), de forma que al realizar los ensayos de ciclos termoquímicos se evita el tener que moler la muestra entre reacción y reacción. Este nuevo sistema ensayado a escala de laboratorio genera una media de 2.7 Ncm³ de H₂/g de disco por ciclo después de 13 ciclos (30 – 35 % de conversión de ferrita), valor aceptable considerando la poca cantidad de magnetita que contiene el sistema (7.7 % en peso). El principal inconveniente de utilizar el disco de espuma de MPSZ, es la baja resistencia al choque térmico, lo que provoca su ruptura tras ensayar 13 ciclos termoquímicos consecutivos. En este caso la etapa de activación se realiza a 1673 – 1723 K durante 30 – 60 minutos y la hidrólisis se realiza a 1373 K durante 80 minutos. En experimentos posteriores, se han preparado discos de MPSZ con un contenido total de 4.0; 6.9 y 10.5 % en peso de Fe₃O₄ en forma de Fe₃O₄/YSZ de tal forma que, al aumentar la cantidad de magnetita por sistema aumenta la cantidad de hidrógeno por ciclo obtenida y el número de ciclos que soporta el disco. Además, en todos los casos se observa que la cantidad de hidrógeno por ciclo oscila mucho durante los 11 primeros ciclos y es constante durante los ciclos siguientes. Así, el sistema con un 10.5 % en peso de Fe₃O₄ genera una media de 2.3 N cm³ de H₂/g de disco y por ciclo, a partir del doceavo ciclo, lo que supone un 20 – 27 % de conversión de la magnetita. Este disco se fractura después de 32 ciclos [68].

2.2.2 Comparativa ciclos termoquímicos de óxidos metálicos no volátiles

De acuerdo con los criterios anteriormente mencionados, en la Tabla 6 se comparan los ciclos termoquímicos de óxidos no volátiles descritos:

	Óxido de Cerio	Óxido de Hierro	Sodio/ Manganeso	Ferritas
Nº etapas			* Mayor número de etapas	
Elementos involucrados	✓ Menos elementos	✓ Menos elementos		* Más elementos
Abundancia		✓ Mayor abundancia	✓ Mayor abundancia	
Corrosión			* Corrosión (sodio)	
Fases	✓ Fases gas-sólido	* Fase líquida	* Fases líquidas	✓ Fases gas-sólido
Temperatura máxima		* Mayor temperatura máxima		✓ Menor temperatura máxima
Referencias		✓ Más documentado		
Grado de demostración				* Investigación escala de laboratorio
Conversión/ Costes	✓ Mayor eficiencia	* Menor eficiencia		

Tabla 6. Comparativa de ciclos termoquímicos de óxidos no volátiles.

Tras la búsqueda realizada en la literatura, se concluye que los materiales más estudiados para obtener hidrógeno solar a partir de ciclos termoquímicos son los basados en óxidos de hierro o ferritas. En concreto, las investigaciones analizadas se dirigen en la búsqueda de ferritas modificadas de tal forma que se reduzca la temperatura de la etapa de activación, no se sintericen tras dicha etapa y sean capaces de generar una cantidad de hidrógeno constante a lo largo de un gran número de ciclos. En este sentido parece que las ferritas soportadas sobre zirconia son las que mejor cumplen estos objetivos.

Por último, en la Tabla 7 se muestra un resumen de los principales parámetros comentados en el apartado 2.2.1 con el fin de tener una idea generalizada del número de etapas, temperaturas máximas de operación, conversiones, número mínimo de equipos necesarios, fases y corrosión de los compuestos de los distintos ciclos termoquímicos.

	Nº Etapas	Temperatura Máxima (K)	Conv (%)	Coste (€/kg H ₂)	Nº Equipo	Fases	Corrosión	Referencia
Ciclo Híbrido de Azufre (Westinghouse)	2	1173	42	3.9 – 5.6	2	Fluido	Sí	[32], [35], [36]
Ciclo I-S (Yodo-Azufre)	3	1123	38	3.0 – 5.0	3	Fluido	Sí	[32], [35], [36]
Zinc/Óxido de Zinc	2	2273	29-36	5 -14.75	2	fluido/sólido	No	[29], [37]–[39], [70]
Óxido de Cadmio	2	1723	59		2	fluido/sólido	Tóxico	[34]
Óxido de Hierro	2	2473	42		2	Líquido	No	[43]–[45]
Óxido de Cerio	2	2273	68		1	sólido fijo	No	[30], [42], [71]
Sodio/Manganeso	3	1833	49		3	fluido/sólido	Sí	[34]
Ferritas	2	1073-1873	43		1	fluido/sólido	No	[47], [48], [50]–[68]
Híbrido Cobre/Clorhídrico	4	803	39		4	Acuoso	Sí	[30], [41]

Tabla 7. Resumen de los principales parámetros de los ciclos termoquímicos estudiados.

2.3 ESTADO DEL ARTE REACTORES SOLARES

En una instalación de energía solar, el receptor es el elemento que recibe la radiación solar concentrada y la transforma en energía térmica. Este proceso generalmente conlleva altas temperaturas y altos niveles de flujo incidente por lo que debe ser realizado con las menores pérdidas posibles, por radiación, convección o conducción, de la energía absorbida previamente y con el menor consumo eléctrico. La energía es absorbida por un fluido, un sólido o una combinación de ambos que se encuentra en el interior del receptor, y el diseño de este debe favorecer la transferencia de energía entre la radiación solar y el elemento absorbente. Si la energía térmica recibida se emplea para llevar a cabo una transformación química se habla de reactor solar.

El propio receptor puede actuar de reactor o bien ambos equipos pueden ser independientes. Los sistemas independientes son aquellos en los que un dispositivo actúa de receptor absorbiendo la radiación para calentar un fluido caloportador y que se lleva hasta un reactor independiente al que le cede calor mediante intercambio recuperativo. Este tipo de sistemas van a tener menos interés para aplicaciones químicas puesto que presentan una serie de inconvenientes:

- Pérdidas de energía en el intercambio de calor: el fluido caliente se lleva hasta un intercambiador de calor para ceder calor al reactor. Este hecho implica una serie de pérdidas.
- Mayor dificultad de operación: El sistema cuenta con al menos dos dispositivos independientes, además de las conducciones y otros elementos que componen el circuito hidráulico.
- Dificultad de diseño del intercambiador de calor: Tanto si el intercambio de calor se lleva a cabo en el reactor como si es en un intercambiador de calor independiente, los materiales deben seleccionarse cuidadosamente para soportar altas temperaturas y facilitar la transferencia térmica.

Debido a los inconvenientes que presentan los sistemas de receptor-reactor independientes, sólo se analizan los receptores reactores, esto es los reactores solares.

Existen distintas clasificaciones de los receptores/reactores solares dependiendo del criterio utilizado [72]:

- Tipo de material absorbedor de la radiación solar
- Principales mecanismos de intercambio de calor
- Diseño geométrico
- Naturaleza del tipo de fluido térmico utilizado

De acuerdo con el primer criterio, los reactores se pueden clasificar en directos e indirectos:

- En los reactores de irradiación directa, la radiación solar concentrada incide directamente sobre los reactivos químicos o la zona de reacción química. En este caso, se suelen utilizar fluidos con una alta capacidad de absorción de la radiación y opcionalmente cargados de partículas. Estos a su vez se pueden clasificar en volumétricos o de partículas.
- En los reactores indirectos se introduce un material intermedio que absorbe la radiación solar. En este caso, el absorbedor actúa como un elemento de transferencia de calor entre la radiación solar y el fluido o reacción de trabajo.

En las aplicaciones químicas de producción de combustibles solares es necesario preservar la estanqueidad en la zona de reacción, por lo que puede ser necesario utilizar ventanas transparentes.

En la Figura 10 se muestra la diversidad de configuraciones de reactores solares ensayados en las últimas décadas.

Por último, en los siguientes apartados se describen los principales reactores solares, indicando la escala de desarrollo y las principales características de los mismos. A lo largo del capítulo se observa la diversidad de los métodos mediante los cuales se puede llevar a cabo la producción de hidrógeno, sin embargo la mayoría de los procesos encontrados se corresponden con ciclos termoquímicos.

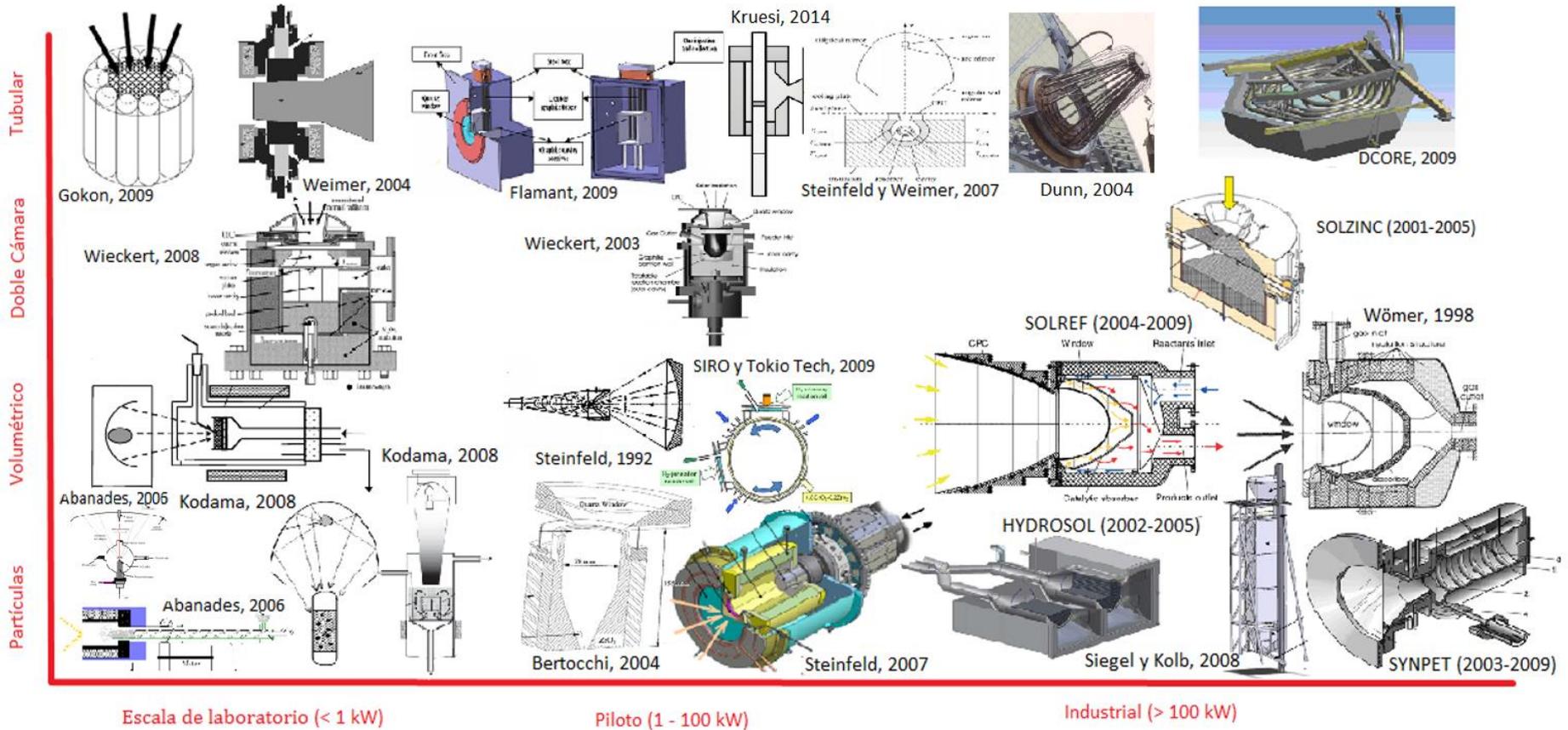


Figura 10. Reactores solares ensayados en las últimas décadas y clasificados según la potencia y el sistema de absorción de la radiación (basada en [72]).

2.3.1 Reactores de intercambio directo

Los reactores de radiación directa se clasifican en volumétricos o de partículas.

2.3.1.1 Reactores volumétricos

Los reactores volumétricos surgen como alternativa a los intercambios directos asumiendo que por su configuración son capaces de alcanzar temperaturas más elevadas en el gas caloportador. Esto es debido al modo de intercambio térmico que tiene lugar, el cual, se basa en que todos los procesos de transferencia de calor se realizan sobre la misma superficie [73]. Las primeras ideas de receptores volumétricos se produjeron a finales de los 70 para aplicaciones termoeléctricas. En los 80 aparecieron algunos conceptos innovadores respecto a la estructura absorbente, mientras que en los 90 se avanzó en la selección de los conceptos con mayor potencial, mejorando y escalando los receptores con mejores resultados.

A continuación en la Tabla 8 se incluyen las principales características de los reactores solares volumétricos encontrados en la literatura. Se indica la temperatura máxima, la conversión, la eficiencia, la potencia térmica y la instalación en la cual ha sido probado el reactor analizado. Definiendo la conversión como la relación energética del hidrógeno producido y el combustible introducido. Mientras que el rendimiento se define como el producto de la eficiencia térmica por la conversión.

Proyecto/ Autor	Año	Utilidad	Pot (kW)	Probado	Conv (%)	Rend (%)	Temp (K)	Ref
Wörner	1998	Reformado de CH ₄ ; Catalizador Rh en espuma Al ₂ O ₃ ¹	200 - 300	Instituto Weizmann	80	-	973- 1133	[74]
HYDROSOL	2002 - 2005	Ciclo TMQ soportado en multicanales cerámicos ²	10	-	-	-	1423 - 1473	[75]- [77]
SOLREF	2004 - 2009	Reformado de CH ₄ ; Catalizador Rh soportado en cerámico poroso	300 - 500	Instituto Weizmann	83.7	-	1100	[29], [78], [79]
HYDROSOL 2	2005 - 2009	Ciclo TMQ soportado en multicanales cerámicos	100	PSA	30	-	1423 - 1473	[75]- [77]
Gokon / Kodoma	2008	Ciclo TMQ ferrita Fe ₃ O ₄ /YSZ/MPSZ	< 1	Lámpara Xe 7kW _e	20-27	-	1673- 1773	[67]

Tabla 8. Tabla estado del arte reactores volumétricos

¹ Aparecen deposiciones de coque. ² Se han probado 50 ciclos.

2.3.1.2 Reactores de partículas

Los primeros receptores solares de partículas sólidas se estudiaron a principios de los 80 con el fin de desarrollar receptores de absorción directa de altas temperaturas (> 1173 K) en la generación de electricidad [80]. Los lechos de partículas son receptores directos que basan su funcionamiento en la irradiación directa sobre partículas sólidas. Las principales ventajas son: alta eficiencia debida a la absorción directa y elevadas temperaturas de operación alcanzadas. En estos reactores, las partículas pueden actuar como medio de almacenamiento de calor [81]. Los reactores de partículas presentan diversas configuraciones. Cuando este tipo de receptores funcionan como reactores, las partículas sólidas constituyen los reactivos que se transforman mediante la energía térmica absorbida. Puede existir un fluido que arrastre o mantenga las partículas en suspensión y que a su vez favorezca el intercambio de calor. En otros reactores solares de lecho de partículas, el reactivo corresponde a la fase gaseosa. Para favorecer la absorción de calor en el gas, se genera un lecho de partículas de un material poroso que consigue aportar una gran superficie de intercambio de calor. Esto genera un buen medio absorbente si el tamaño de partícula es elegido correctamente y el material tiene las propiedades ópticas apropiadas [82].

La Tabla 9 presenta las principales características de los reactores de partículas encontrados en la literatura.

Proyecto / Autor	Año	Tipo	Proceso	Pot (kW)	Prueba	Conv (%)	Rend (%)	Temp (K)	Ref
Steinfeld SYNMET	1998	Lecho arrastrado ¹	Reducción de ZnO con CH ₄	5	PSI	50		1300	[83]
SYNPET	2003 - 2009	Lecho arrastrado	Gasificación	5 - 300	PSA	87	24	1300 - 1800	[84]
Bertocchi	2004	Lecho Fluidizado	Reactor de ZrO ₂ con Al ₂ O ₃ -SiO ₃	10				1740-1980	[85]
Flamant	2006	Lecho Fijo ²	Ciclo TMQ CeO ₂	< 1				2273	[40]
Steinfeld	2007	Lecho Fluidizado	Ciclo TMQ ZnO	10	PSI		14.8		[39], [84]
Siegel/Kolb	2008	Lecho arrastrado ³	Alúminosilicato (7% Fe ₂ O ₃)	2000	NSTTF			523	[86]
Kodama	2008	Lecho Fluidizado ⁴	Ciclo TMQ ferrita	0.82			15	1273 - 1473	[87]
CSIRO+ TokioTech	2009	Lecho Fluidizado	Ciclo TMQ CeO ₂	10				1773 K	[88]
Koepf	2015	Lecho Fluidizado	Ciclo TMQ Zn/ZnO	100	PSI	61	3	2000 K	[89]

Tabla 9. Estado del arte de reactores de partículas.

¹ No se detecta deposición de C entre los productos. ² Reducción del óxido 0.2 – 0.5 g en 2 – 6 min respectivamente. ³ Se propone aumentar la concentración solar. ⁴ Producción de H₂ de 3.4 Ncm³/g ferrita.

2.3.2 Reactores de intercambio indirecto

Los reactores indirectos a su vez se clasifican en tubulares o de doble cámara.

2.3.2.1 Reactores tubulares

Los primeros dispositivos de intercambio indirecto empleados en energía solar fueron receptores tubulares con aplicaciones termoeléctricas. La naturaleza de la interfaz solar-proceso ha sido discutida por Bowman (1980), Galindo y Bilgen (1982), y Lin (1984) [90]. En 1985, Funk y England comienzan a considerar la posibilidad de utilizar la energía solar para la generación de hidrógeno y proponen un reactor tubular incluido en un receptor solar de cavidad. En sus estudios se contemplan las temperaturas alcanzadas en el interior del tubo y el flujo de calor incidente. En 1993, Kameyama se suma a la utilización de reactores tubulares, cuando modela un reactor solar desarrollado en GA Technologies Corporation en Estados Unidos para distintas aplicaciones químicas [91].

Estos receptores se basan en una cavidad opaca en la cual se introduce la energía solar a través de una apertura sobre una serie de tubos por cuyo interior circula un fluido que aumenta su energía térmica. Las primeras aplicaciones termoquímicas están basadas en el tratamiento de combustibles, principalmente reformado de metano, oxidación parcial y conversión de biomasa [92].

Proyecto / Autor	Año	Proceso	Pot (kW)	Probado	Conv (%)	Rend (%)	Temp (K)	Ref
Levitan	1989	Reformado de CH ₄ catalizador Rh o Fe	3	Instituto Weizmann			973 - 1273	[92]
Epstein/ Spiewak	1996	Reformado de CH ₄ sin catalizador	480	Lucas Heights				[93]
CSIRO -> MUSTR	1999	Reformado de CH ₄ con catalizador Ni ¹	25	NSEC	74	6	1123	[94]
Dunn	2004	Disociación NH ₃ ²	15	Australia University		39-56	1023	[95]
Weimer	2004	Reformado de CH ₄	9.5	NREL	90		2133	[96]
Steinfel/ Weimer	2007	Ciclo TMQ ZnO	5	Simulador Solar		28.5	2300	[97]
Gokon	2008 2009	Reformado de CH ₄ con catalizador ³	< 1	Horno eléctrico	< 90	50	1273	[87], [98]
CSIRO -> SCORE	2003	Reformado de CH ₄ con catalizador ⁴	30	Disco Solar	50	26	1123	[94]
CSIRO -> DCORE	2009	Reformado de CH ₄ con catalizador Ni	200	NSEC Torre			1123	[99]
Flamant	2009	Gasificación CH ₄	10	CRNS PROMES	98	90	1772 32 min	[100]
Kruesi	2014	Gasificación	1.5	ETH Zurich		21.6	1360	[101]

Tabla 10. Estado del arte de reactores tubulares.

¹ Eficiencia receptor 16 %. ² Escalado a disco de 500 m² en 2010. ³ Sin pared cerámica Conversión CH₄=80 % y 900 °C. ⁴ Eficiencia receptor 68.9 %.

En la Tabla 10 se ha incluido la temperatura máxima, la conversión, la eficiencia, la potencia térmica y la instalación en la cual ha sido probado de los reactores solares tubulares de la literatura.

2.3.2.2 Reactores de doble cámara

Los reactores de doble cámara se desarrollan en el año 2003 en el Paul Scherrer Institut (PSI, Suiza). Se basan en dos cámaras colocadas una encima de otra de forma que la cámara superior se comporta como el agente absorbedor y la cámara inferior como el lugar donde se produce la reacción química.

A continuación se presenta la Tabla 11 donde se incluyen las principales características de los reactores de doble cámara encontrados en la literatura. Se indica la temperatura máxima, la conversión, la eficiencia del sistema, la potencia térmica y la instalación en la cual ha sido probado el reactor analizado.

Proyecto /Autor	Año	Proceso	Pot (kW)	Probado	Conv (%)	Rend (%)	Temp (K)	Ref
SOLZINC	2001-2005	Carbonatación de ZnO con CH ₄	300	Instituto Weizmann	95	30	1273 - 1473	[102]–[104]
Weickert	2003	Carbonatación de ZnO con CH ₄	5	PSI	≈100	25	1550	[83], [102], [103]
Weickert	2008	Gasificación materiales carbonosos	5	PSI	-	17.3 - 29	1423 - 1523	[105]

Tabla 11. Estado del arte de reactores de doble cámara.

2.3.3 Resumen estado del arte reactores solares

Los reactores de intercambio directo, proporciona una transferencia de calor por radiación eficiente hacia la zona de reacción, es decir, aquella donde se necesita el aporte de energía, pasando por alto las limitaciones impuestas por el transporte de calor indirecto a través de los intercambiadores de calor. El principal inconveniente de estos reactores solares se produce cuando se trabaja con atmósferas inertes puesto que es requisito la necesidad de una ventana transparente, componente crítico y problemático en ambientes severos y a alta presión de gas. Por otro lado, los reactores solares indirectos, eliminan la necesidad de la ventana transparente. Sin embargo, las desventajas de estos reactores, están relacionadas con las limitaciones impuestas por los materiales de construcción de las paredes: limitaciones en la temperatura máxima de operación, conductividad térmica, absorción radiante, inercia, la resistencia a los choques térmicos y la adecuación para la operación transitoria. Por ello, en

función de las necesidades del método de producción de hidrógeno unos reactores u otros presentaran mejores características para el diseño.

En la Tabla 12 se muestra un cuadro resumen donde se esquematizan los principales parámetros comentados con el fin de tener una idea generalizada de los rangos de temperaturas, eficiencias térmicas y tamaños de los reactores. No obstante, hay que tener en cuenta que esta información está generalizada y que cada modelo particular que sea diseñado puede ser ajustado para mejorar cualquiera de sus parámetros de funcionamiento.

	Reactores de intercambio indirecto			Reactores de intercambio directo			
	Reformadores de metano tubulares	Reactores tubulares pirolíticos	Reactores de doble cámara	Reactores volumétricos	Reactores de partículas		
					Lecho arrastrado	Lecho fluidizado	Lecho fijo
Temperatura (K)	1273	1973	1473 - 1673	1973	2073	1473	2273
Conversión química (%)	100	90 - 98	-	30 - 40	90	95	-
Eficiencia térmica (%)	50	-	40	-	-	-	60 - 70
Tamaño máximo Construido (kW)	480	50	300	500	2000	50	10

Tabla 12. Resumen de características de reactores solares [106].

Respecto a los reactores volumétricos, su principal aplicación química ha sido el reformado de metano, para la cual presentan un buen comportamiento. Se debe destacar que para esta aplicación no se requiere de temperaturas muy elevadas. Por otro lado, en la reducción de óxidos metálicos se alcanzan temperaturas de hasta 1973 K, aunque los resultados obtenidos en cuanto a las conversiones no superan el 30 o 40 %. Los reactores volumétricos se han escalado hasta 400 – 500 kW de potencia máxima.

El mayor número de aplicaciones relativo a ciclos termoquímicos se encuentra enmarcado dentro de los reactores volumétricos, siendo el caso más significativo el realizado en el proyecto HYDROSOL, en el que las dos etapas de ciclo termoquímico, reducción y oxidación de óxidos metálicos, tienen lugar en dos cámaras volumétricas cuyas estructuras internas estaban formadas a partir de multicanales cerámicos donde se fija el óxido metálico.

Los reactores de partículas se postulan como la mejor opción para reacciones gas-sólido. Las partículas absorben la radiación y mejoran las transferencias

térmicas en el interior del reactor permitiendo alcanzar temperaturas más elevadas tanto en el gas como en las propias partículas.

Entre las aplicaciones específicas de reactores de lecho transportado para ciclos termoquímicos, cabe destacar el reactor solar propuesto por Steinfeld en 2007. Por otro lado, los reactores de lecho fijo son los reactores de partículas que alcanzan temperaturas más elevadas, hasta 2273 K a escala de laboratorio. Se proponen unos modelos adaptados a los ciclos termoquímicos de disociación del agua mediante óxidos metálicos que permiten realizar el ciclo completo, con las etapas de reducción y oxidación, en un mismo reactor. La eficiencia térmica en este caso es inversamente proporcional a la temperatura, pero a valores de temperatura entre 2073 y 2273 K la eficiencia está en un rango de 60 – 70 %. Estos reactores de lecho fijo han sido probados hasta una potencia de 10 kW.

Destacan los reactores de lecho fijo aplicados a ciclos termoquímicos de Moller (2001) y el Counter-Rotating-Ring de los laboratorios Sandia (2008).

Los reactores de intercambio indirecto más desarrollados son los reactores tubulares. Se han utilizado principalmente para la realización de reacciones catalíticas, como el reformado de metano o la disociación del amoniaco.

Estos sistemas de reacciones catalíticas, no requieren temperaturas superiores a los 1273 K y permiten trabajar bajo presión. En el mejor de los casos, estos reactores alcanzan eficiencias térmicas de hasta el 50 %. Para aplicaciones de reducción de óxidos de cinc, estos sistemas alcanzan una eficiencia del 30 %. Estos reactores se han construido a gran escala, llegando hasta los 500 kW térmicos.

Mediante los reactores tubulares aplicados a la pirolisis del gas natural, con los tubos fabricados en grafito, se puede calentar el gas hasta 1973 K si la potencia solar es suficientemente alta. En estos casos se alcanzan conversiones entre el 90 y el 98 %.

Los reactores de intercambio indirecto de doble cámara alcanzan temperaturas en torno a 1473 – 1673 K y rendimientos térmicos del 40 %. Se ha llegado a construir un modelo de 300 kW.

Aunque las temperaturas alcanzadas para los reactores tubulares son más bajas que para los reactores directos, se ha demostrado en la literatura que se pueden alcanzar temperaturas de hasta 1973 K.

Otra particularidad del reactor, reside en que al tratarse de un ciclo termoquímico de ferrita, el cual consta dos etapas de reacción para completar el ciclo y recuperar el reactivo de partida se ha seleccionado un único reactor solar para llevar a cabo las dos etapas. Esto es posible debido a que ambas etapas

consisten en reacciones del tipo gas-sólido. Este tipo de reactor permite que la ferrita reducida resultante de la primera etapa permanezca disponible en el reactor solar como reactivo de partida para la siguiente etapa de reacción, pudiéndose extender la duración de cada una de las etapas el tiempo de reacción que se considere necesario para alcanzar una conversión alta.

2.4 ESTADO DEL ARTE DEL MODELADO COMPUTACIONAL

En los métodos numéricos se utilizan modelos matemáticos para la resolución de fenómenos físicos. Las principales ventajas de los cálculos teóricos frente a la investigación experimental son [107], [108]:

- Bajo coste dado que el coste de computación es de varios órdenes de magnitud inferior al coste de las investigaciones experimentales.
- Suministro de información completa y detallada, ya que la solución computacional proporciona valores de las variables relevantes en el dominio de interés.
- Capacidad de simular condiciones ideales, de forma que en el estudio de un fenómeno puedan evaluarse únicamente los parámetros que se consideren esenciales.
- Capacidad de simular condiciones reales muy distintas.
- Capacidad de simular condiciones extremas, inviables en la experimentación debido a que puede implicar riesgos de seguridad.

Con respecto a las desventajas del cálculo computacional, se destaca que la utilidad de dicho análisis depende de la validez de los modelos matemáticos y de la selección de los métodos numéricos.

Hoy en día, el diseño de reactores solares se encuentra en estado de transformación. En la revisión de procesos termoquímicos solares realizada por Yadav [108] se observa que actualmente los datos reales son limitados y que existe una incertidumbre significativa en el coste de la mayoría de los procesos termoquímicos solares de forma que, recomienda que los esfuerzos se dirijan en la reducción de la incertidumbre en dichos costes. Para ello, el siguiente paso debe ser el desarrollo de modelos estacionarios y de diseño además de la optimización y reducción de costes para reactores solares. De acuerdo con Yadav, se realiza una revisión de los modelos existentes para el diseño/optimización de reactores solares con herramientas CFD.

Uno de los primeros estudios realizados fue desarrollado por Meier [109] en 1996. Propone las herramientas CFD para la optimización de reactores solares y de sus condiciones de operación para la producción de hidrógeno a partir del ciclo

termoquímico de ferrita propuesto por Nakamura. En este estudio, se analizan los resultados de distribución de temperatura, presión y velocidad además de la trayectoria de las partículas cuando incide un flujo de radiación uniforme.

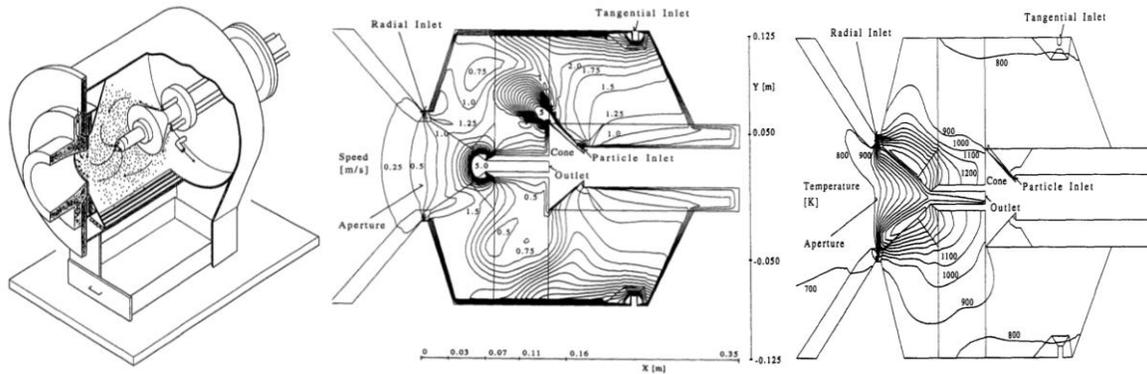


Figura 11. Resultados de distribución de velocidad y temperatura [109].

Para simular el flujo de aire y la nube de partículas en este reactor solar, se utiliza el código CFDS-FLOW3D (1994). Por otro lado, para resolver la turbulencia introducida por el swirl de aire y la nube de partículas se utiliza el modelo de turbulencia RNG $k - \epsilon$. En el caso de la distribución de velocidades, los resultados fluidodinámicos son obtenidos sin incluir la radiación en el modelo. Estos resultados se comparan con datos experimentales en condiciones de operación frías. Posteriormente, se analiza la convección en el interior del reactor introduciendo la radiación como una fuente de calor uniformemente distribuida en el volumen comprendido entre la apertura y la salida (3.3 kW/m^3), alcanzándose una temperatura máxima de 1900 K.

Este trabajo es pionero en el uso de herramientas CFD para el diseño de reactores solares obteniendo resultados del sistema fluidodinámicos y térmicos.

Hirsch y Steinfeld [110], [111] desarrollan un modelo CFD en 3D para predecir el comportamiento térmico y químico de un reactor solar de partículas para la producción de hidrógeno y carbono mediante la descomposición del metano.

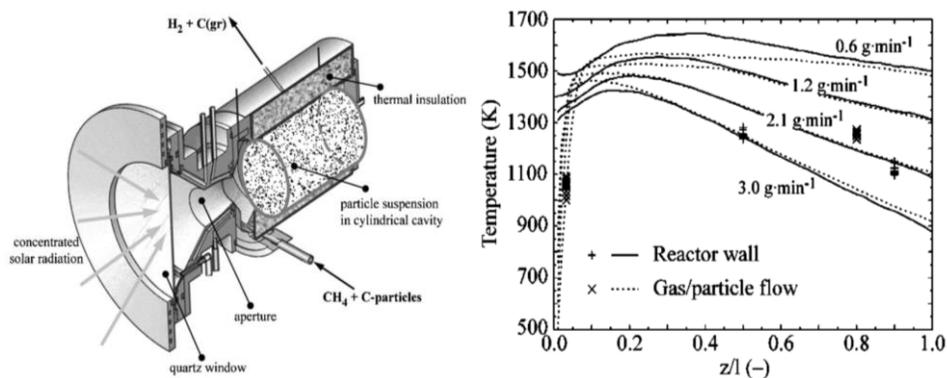


Figura 12. Reactor solar estudiado por Hirsch y Steinfeld [110], [111].

Para modelar la radiación, se utiliza el método de Monte Carlo considerando medio participativo dado que se incluye el intercambio de radiación con la nube de partículas. Para reducir el coste computación de la simulación, el volumen se subdivide en numerosos subdominios, algunos de los cuales se consideran isotermos, de forma que el intercambio radiante únicamente se resuelve entre las paredes internas de la cavidad y las partículas. Para esta simulación es necesario al menos 10^6 rayos en el modelo de Monte Carlo. Además, se incluye la reacción que se lleva a cabo para la producción de hidrógeno y carbono a partir de gas natural. Por tanto, los principales parámetros son: la radiación incidente, las propiedades radiantes de las paredes, la suspensión de partículas de C y CH_4 , los flujos másicos y los parámetros de la reacción. Los resultados obtenidos son comparados con datos experimentales en un horno solar de 5 kW.

En este estudio se realiza un análisis químico de un reactor de partículas y térmico en el que el intercambio radiante se considera únicamente entre las paredes y las partículas.

En 2006, Dersch et al. [112] realizan un estudio del comportamiento térmico de un reactor solar volumétrico de ciclos termoquímicos (HYDROSOL). Para ello, se realizan simulaciones 2D en el software libre Modelica/Dymola. En este caso, el perfil de radiación se incluye como una función de distribución Gaussiana en la apertura (3 kW). En este estudio se obtiene un modelo para predecir la producción de hidrógeno el cual se ajusta a los experimentos realizados.

Abanades y Flamant [113] realizan un estudio cuyo objetivo es el diseño, ensayo y simulación de un reactor tubular a escala de laboratorio (1 kW) para la producción de hidrógeno a partir del cracking de metano. Las simulaciones analizan el comportamiento del reactor solar evaluando la distribución de temperatura y la conversión química del mismo mediante un modelo CFD en 2D con el software comercial Fluent 6.2 y posteriormente se comparan los resultados con los obtenidos de forma experimental.

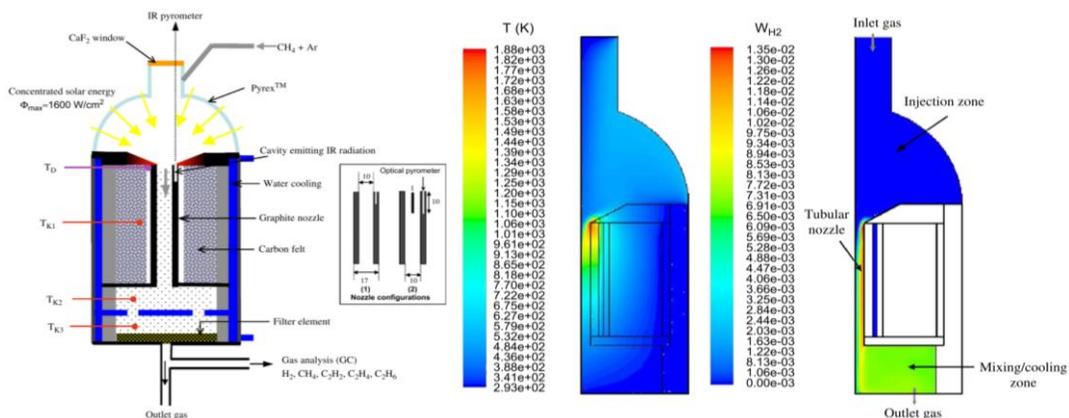


Figura 13. Resultados de distribución de temperatura y conversión $\text{CH}_4 \rightarrow \text{H}_2$ [113].

En este estudio se considera que el movimiento del fluido en el interior del reactor es laminar. Por otro lado, se utiliza el modelo DO para resolver la transferencia por radiación. La radiación en la apertura se considera una distribución Gaussiana a partir de la cual se determina que el flujo de radiación incidente en las paredes interiores de la cavidad es un valor en función de la profundidad. Las paredes se consideran grises y difusas. Se obtiene que la temperatura máxima es de 1890 K para las condiciones de operación utilizadas.

Chen et al. [114] presentan un estudio 3D de un reactor de partículas para producción de hidrógeno a partir del ciclo termoquímico de S – I, el cual consiste en comparar el comportamiento aerodinámico y térmico para dos geometrías (con y sin apertura inferior) mediante técnicas CFD (Fluent 6.2.16).

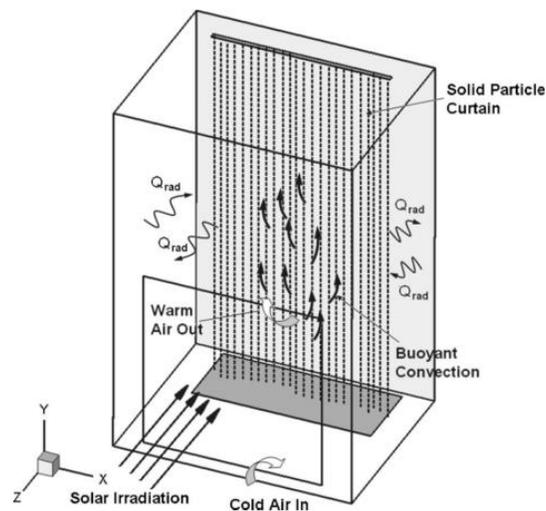


Figura 14. Esquema reactor solar estudiado por Chen [114].

Para ello, utiliza el modelo de radiación DO, mientras que la intensidad de radiación incidente es calculada a partir del modelo de carga solar de Fluent, que determina la intensidad en función de la posición del sol sobre las paredes del reactor. El modelo de turbulencia es *realizable k – ε*. En una primera simulación, no se considera la radiación sobre las partículas, se comparan los resultados obtenidos con datos experimentales y en la segunda parte del estudio, se comparan las dos geometrías seleccionadas incluyendo las partículas en el modelo (medio participativo). Como principal conclusión se obtiene que la geometría sin apertura inferior presenta mejores prestaciones dado que se tienen menos pérdidas convectivas y que para el mismo tamaño de partícula, la temperatura media de las partículas es mayor cuando no hay apertura inferior en la cavidad.

De este estudio cabe destacar tanto el uso del modelo de carga solar en función de la posición del sol para determinar la radiación incidente sobre las paredes

como el uso de una herramienta CFD para la optimización del diseño de acuerdo al parámetro de incluir o no una apertura en la parte inferior.

Klein et al. [115] analizan el comportamiento fluidodinámico y térmico de un reactor de partículas con una entrada radial de gas y otra de mezcla de gas y partículas bajo la apertura. (Ver Figura 15). En este proyecto, se utiliza el software comercial PHOENICS para simular el flujo tangencial a las paredes del reactor junto al código REXAN para resolver el intercambio radiante en las paredes y el código de volúmenes finitos DOTS para simular el intercambio radiante entre las partículas.

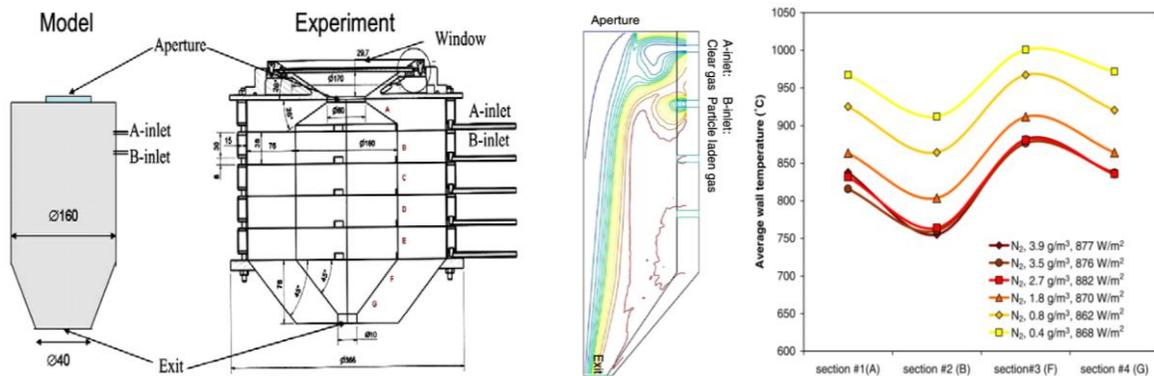


Figura 15. Resultados de temperatura de la simulación (caudal 2.4 g/h con una carga de partículas de 4 g/m³) y experimentales en las paredes [115].

La distribución de partículas se incluye según la teoría de Mie y se utiliza el método de MC como modelo de radiación en la cavidad. Por otro lado, el flujo de radiación incidente se introduce con una dirección y una intensidad uniforme en la apertura (potencia incidente de 9.2 kW). Para estas simulaciones en 2D se consideran paredes difusas y medio participativo. Comparando los resultados del modelo con datos experimentales, se obtienen resultados similares en las temperaturas de las paredes, sin embargo, la temperatura del fluido a la salida es 200 K inferior en la simulación que en los experimentos.

En 2008, Melchior et al. [97] analizan un reactor tubular para la producción de hidrógeno mediante ciclos termoquímicos. Para ello, se compara un modelo CFD en 2D desarrollado con el software comercial ANSYS – CFX 10.0 (2005) con los datos experimentales obtenidos.

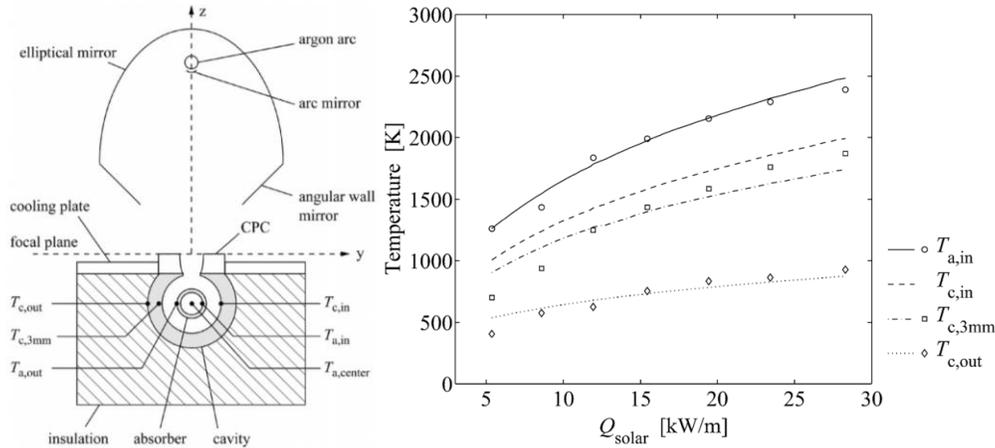


Figura 16. Esquema de reactor tubular y resultados numéricos (líneas continuas) y experimentales (puntuales) [97].

Para determinar el perfil de radiación incidente sobre las superficies de la cavidad y el tubo se utiliza el método de Monte Carlo en 3D, el cual lanza 10^5 rayos unidireccionales y con un flujo de potencia uniforme sobre el concentrador. Posteriormente, se realiza la simplificación de dividir el dominio del reactor en numerosos subdominios, los cuales se consideran isotermos, con paredes opacas y grises, para resolver el intercambio entre los mismos. En este estudio, se desacopla el cálculo de radiación incidente en las superficies del sistema del estudio térmico realizado con técnicas CFD.

Z'Graggen and Steinfeld [116] comparan un modelo computacional en 2D con los datos experimentales obtenidos en el PSI de un reactor de partículas prototipo de 5 kW con el objetivo de escalarlo a un reactor de 300 kW y probarlo en la PSA.

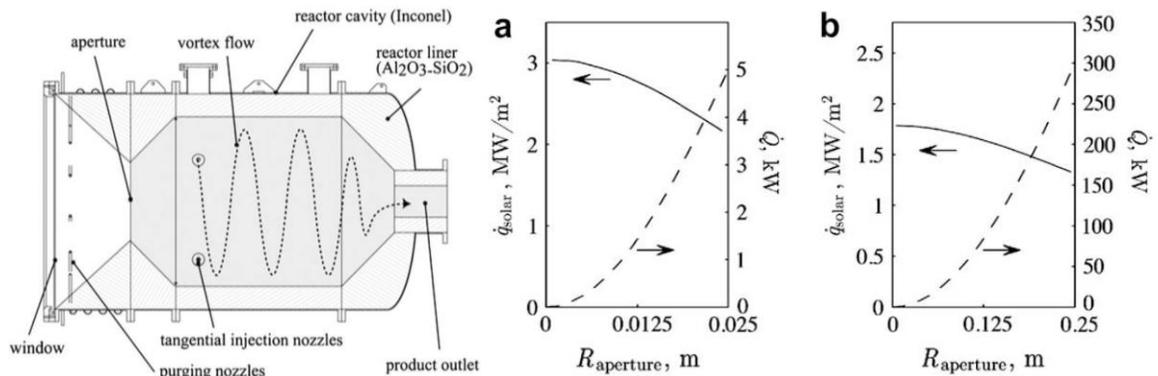


Figura 17. Esquema de reactor solar e intensidad de radiación en función del radio (a) PSI (b) PSA [116].

En primer lugar, con un método de Monte Carlo se determina la intensidad de radiación en la apertura en función del radio, incluyendo como datos de la instalación solar las características geométricas de los concentradores de PSI y PSA, el error de la reflexión especular y la dirección de los rayos. Posteriormente,

la función obtenida del perfil de radiación se incluye como condición de contorno en la simulación. En este caso, el medio es participativo (reactor de partículas) de forma que para resolver el intercambio radiante y conductivo se simplifica el caso dividiendo el dominio en pequeños volúmenes en función del gradiente térmico, los cuales se consideran isotermos y con una distribución homogénea de especies y partículas.

En este estudio cabe destacar el uso de herramientas CFD donde se incluye el perfil de radiación real en la apertura de un reactor solar de partículas en 2D.

Villafán-Vidales et al. [117] presentan un estudio sobre el modelado de un reactor solar de partículas para la producción de hidrógeno a partir del ciclo termoquímico de óxido de cerio.

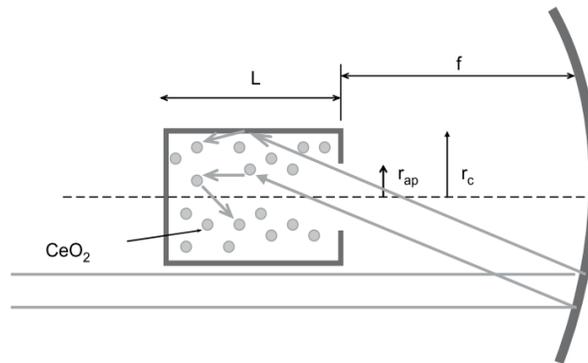


Figura 18. Esquema de la configuración del modelo [117].

Para ello, se divide el caso en 3 partes: en primer lugar se determina el perfil de radiación (intensidad y dirección) en la apertura de la cavidad que es concentrado por un disco parabólico. El modelo de radiación utilizado es el modelo de Monte-Carlo. En segundo lugar, una vez conocido el perfil de radiación se simula las reflexiones en las paredes de la cavidad y la absorción de las partículas y con ello, el intercambio entre elementos. Por último, se determina el coeficiente de scattering y de absorción en función de la longitud de onda.

En este estudio cabe destacar la necesidad de dividir en 3 etapas secuenciales el cálculo del intercambio radiante en el interior de un reactor solar de partículas.

Ozalp et al. [118] desarrollan un estudio para evaluar la influencia de la radiación incidente en un reactor solar de partículas para el cracking de metano a partir de técnicas CFD en 3D (Fluent 6.3).

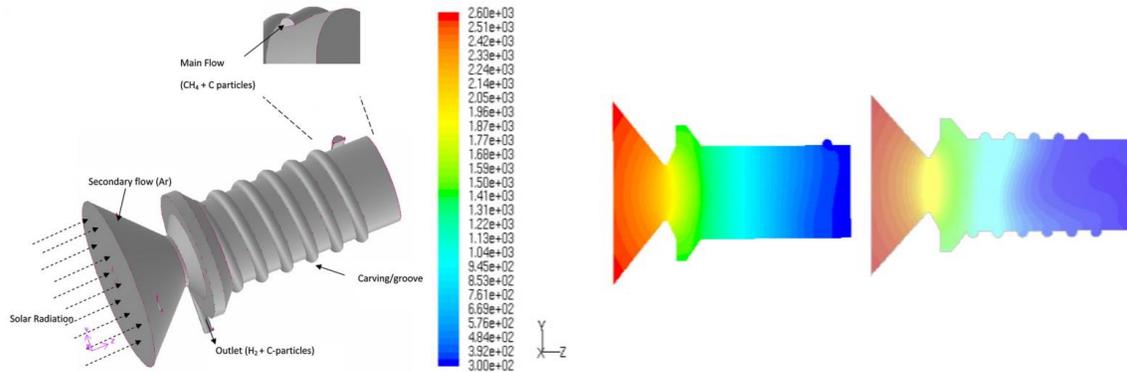


Figura 19. Distribución de temperaturas para geometría con y sin ranuras talladas [118].

Este estudio considera la radiación incidente de forma uniforme y se utiliza el modelo DO para resolver el campo de radiación en la cavidad. Además, para calcular el intercambio radiante con las partículas, se determinan los coeficientes de scattering y absorción a partir de la teoría de Mie donde dichos coeficientes depende de la longitud de onda en el espectro solar y del radio de las partículas. Las paredes del reactor se consideran difusas. Por otro lado, se comparan los resultados utilizando distintos modelos de turbulencia obteniendo los mejores resultados para el modelo RNG k- ϵ de turbulencia. A su vez los resultados de este estudio, temperatura de las paredes y del caudal de partículas/fluido, han sido comparados con datos experimentales.

En 2011 Abanades et al. [42] desarrolla un modelo CFD en 2D para predecir las condiciones de operación necesarias para la producción de hidrógeno en un reactor solar volumétrico teniendo en cuenta la reacción química. Se utiliza el software comercial Fluent para resolver, en primer lugar, el comportamiento térmico de un reactor volumétrico para la producción de hidrógeno mediante ciclos termoquímicos de ferrita (medio poroso) y en segundo lugar, se incluye la reacción química que se lleva a cabo.

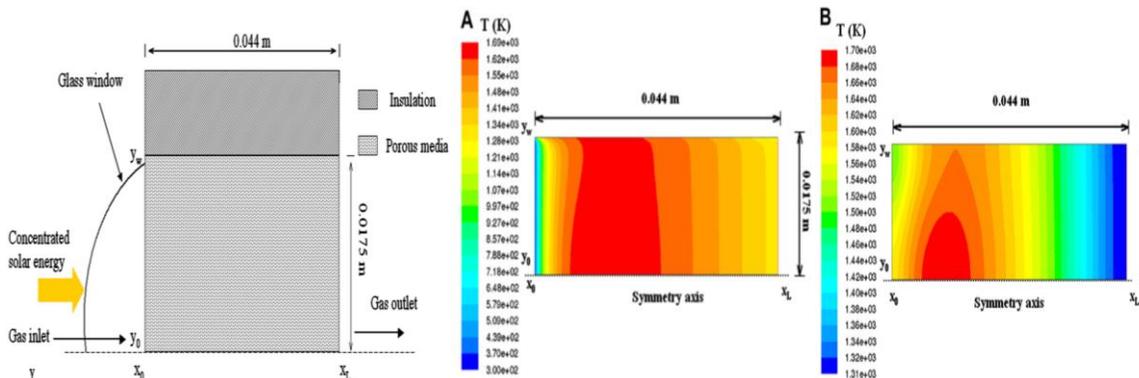


Figura 20. Geometría y resultados de distribución de temperatura A (en fluido) y B (en medio poroso) sin reacción química [42].

En este estudio, la radiación se modela a partir del método de P1. Se incluye como condición de operación un flujo de radiación constante de 1040 kW/m^2 . En la primera parte del estudio se obtiene como resultado un rango de caudal de gas inerte para el cual se opera en el rango de temperatura permitido y además se concluye que variaciones en la porosidad influyen principalmente en la distribución de temperatura. Finalmente, los resultados obtenidos se validan con datos experimentales.

Este estudio, plantea la herramienta CFD como un elemento capaz de predecir las condiciones de operación de un reactor solar para la producción de hidrógeno.

En el estudio realizado por Ozalp et al. [119] se analiza el efecto de la geometría de la cavidad de un reactor volumétrico para la producción de hidrógeno a partir de metano. En primer lugar, se analiza la distribución de temperatura en las dos geometrías propuestas (esférica y cilíndrica) en 3D con Fluent 12.1. Las simulaciones se realizan con un perfil de radiación uniforme de: 50 kW/m^2 , 100 kW/m^2 , 200 W/m^2 y 500 kW/m^2 , utilizando el modelo de DO para resolver el intercambio radiante. Además, se considera medio participativo y se incluye la reacción que se lleva a cabo para producir el hidrógeno a partir del metano. Los resultados obtenidos se observan en la Tabla 13, obteniéndose como principal conclusión que la temperatura alcanzada en la geometría esférica es mayor y más uniforme debido a que las pérdidas por la apertura son menores (22 % frente a 32 %) ya que la configuración esférica presenta mayores reflexiones en su interior.

Table 1 – Hydrogen production in different reactor configurations for different incoming solar flux.																	
Solar flux, kW/m^2	50				100				200				500				
Geometry	Spherical		Cylindrical		Spherical		Cylindrical		Spherical		Cylindrical		Spherical		Cylindrical		
Average temp, K	904.11	887	1090.4	1074.10	1312.1	1297.7	1670.9	1659.0									
Ideal reactor model	CSTR	PFR	CSTR	PFR	CSTR	PFR	CSTR	PFR	CSTR	PFR	CSTR	PFR	CSTR	PFR	CSTR	PFR	
H ₂ production, g/s	1.27	1.44	0.94	1.03	6.75	8.58	6.36	8.26	8.75	8.96	8.72	8.96	8.95	8.96	8.94	8.96	

Tabla 13. Resultados de temperatura con Fluent [119].

En segundo lugar, se analiza con TracePro 6.0 desde el punto de vista externo al reactor, es decir, se analiza el perfil de radiación incidente en la apertura teniendo en cuenta la geometría del disco solar. En este caso, se utiliza el método de Monte Carlo con 1 millón de rayos para determinar la radiación incidente en cada geometría. Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 13. Concluyendo que los resultados con consistentes con los obtenidos mediante herramientas CFD, consiguiendo en ambos casos mejores resultados para la geometría esférica.

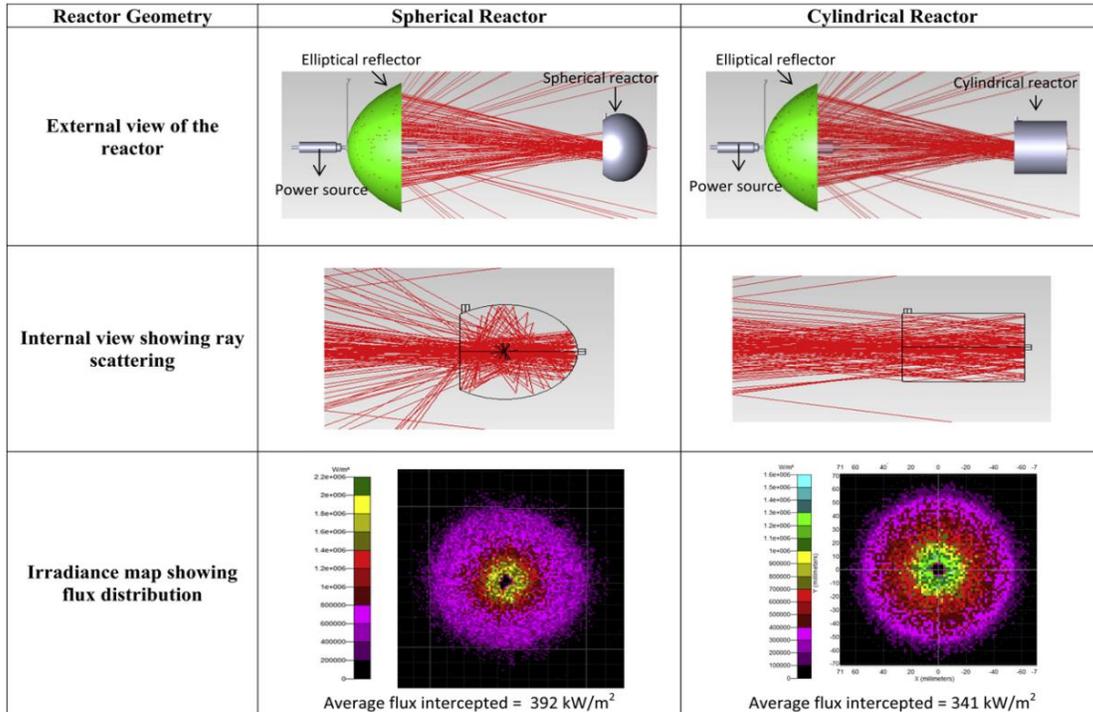


Figura 21. Resultados de distribución de radiación con TracePro [119].

Ozalp utiliza una herramienta CFD para optimizar la geometría de una cavidad de reactor solar para distintos flujos de radiación.

Isabel Roldán et al. [120] comparan los resultados obtenidos mediante técnicas CFD con el software comercial Fluent 6.2.16 para distintas configuraciones de reactor solar volumétrico y diferentes materiales y espesores de aislamiento.

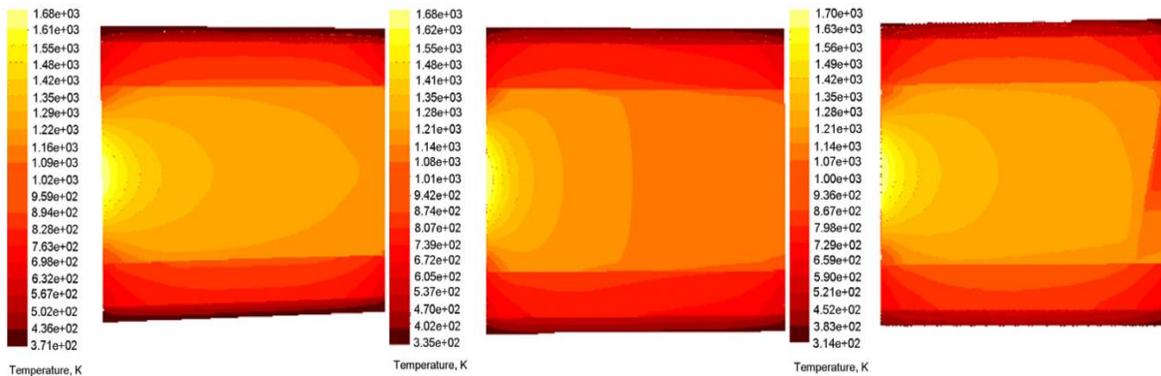


Figura 22. Distribución de temperatura: Izq: Geometría tubular; Centro: Geometría cúbica; Drch: Geometría tubular con baffle [120].

El modelo de turbulencia en estas simulaciones es RNG $k - \epsilon$ dado que el número de Reynolds se encuentra entre 3500 y 1200 los cuales se corresponden con un régimen laminar y transitorio. Por otro lado, el modelo de radiación es *Discrete Ordinate Transfer (DO)*. Para estas simulaciones el coeficiente de absorción del aire (con una humedad del 34 %) es de 0.018 y el perfil de radiación se introduce

a partir de la temperatura en la apertura la cual tiene una distribución Gaussiana. Esta temperatura se obtiene con MATLAB a partir del análisis de imágenes infrarrojas de la apertura.

En este estudio cabe destacar la comparativa del efecto de las pérdidas por conducción en un reactor volumétrico.

Weimer et al. [121], [122] resuelven el comportamiento térmico en un reactor tubular con herramientas CFD en simulaciones 3D. En este estudio se desacopla la radiación del resto de fenómenos, es decir, en primer lugar con SolTrace se determina el perfil de radiación incidente en las paredes/tubos de la cavidad del reactor utilizando el método de Monte Carlo (como mínimo 10^7 rayos son necesarios para tener un perfil preciso). Posteriormente, el perfil de radiación calculado se impone como condición de contorno (fuente de radiación absorbida por las paredes/tubos) para resolver el resto de fenómenos. Estas simulaciones se realizan con Fluent 6.3.26 y se considera régimen laminar, medio no participativo y todas las paredes opacas y difusas. Finalmente, los resultados se comparan con la medida experimental de temperaturas obteniéndose errores inferiores al 4 %.

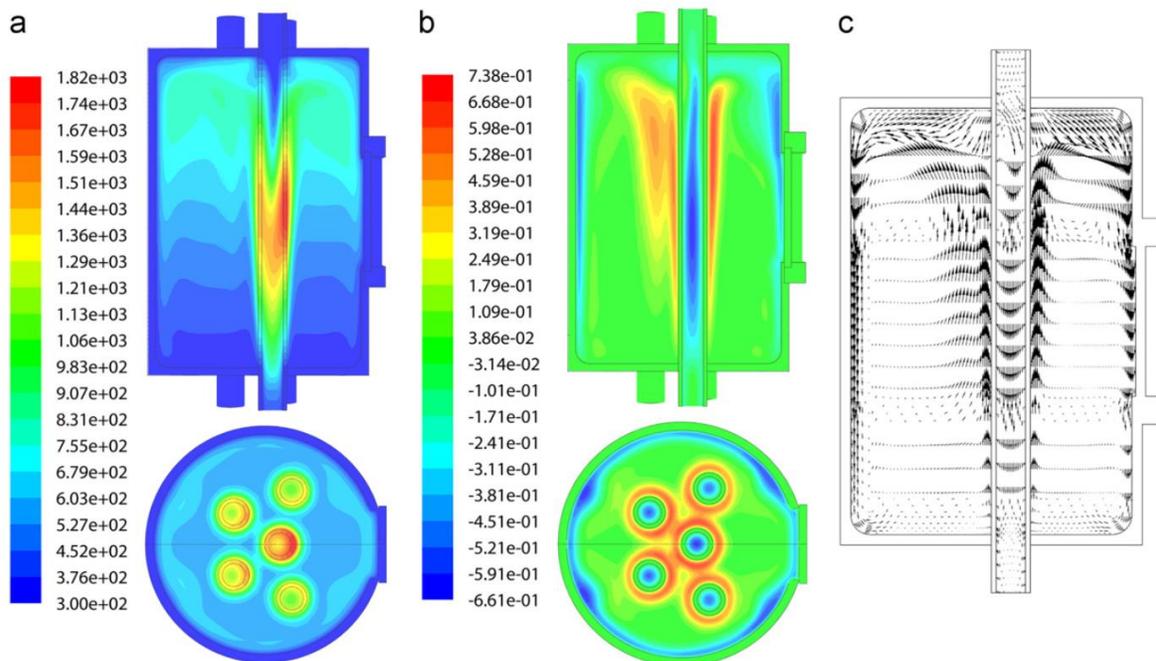


Figura 23. Resultados distribución de temperatura y de velocidad y vectores de velocidad en los planos de corte vertical y horizontal [121], [122].

Reddy et al. [123] modelan en 3D con ANSYS - Fluent 14 y analizan los resultados validándolos con datos experimentales un reactor solar rotativo para la producción de hidrógeno a partir del ciclo termoquímico de óxido de Zinc.

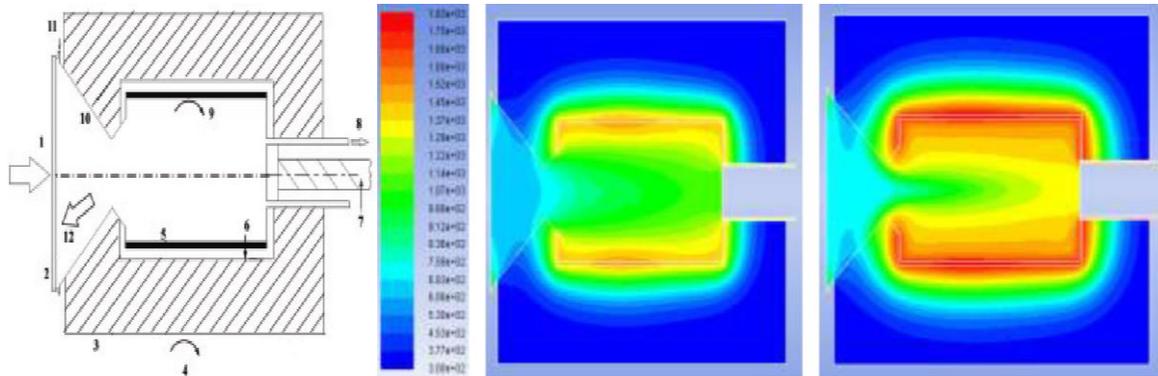


Figura 24. Geometría y distribución de temperatura tras 3400 s y 5000 s de calentamiento [123].

Para estas simulaciones se considera que en el interior de la cavidad hay una parte fluida formada por una mezcla de Zn , O_2 y Ar y una parte sólida formada por ZnO , implementado el modelo de turbulencia RNG $k - \epsilon$ para resolver el movimiento entre estas fases. Para la radiación se utiliza el método DO, incluyendo la condición de contorno de radiación como un flujo incidente en la apertura (ventana de cuarzo) con una distribución Gaussiana y considerando todas paredes grises. Los resultados obtenidos numéricamente son similares a los datos experimentales.

En 2013, González-Aguilar et al. [124], [125] realizan un estudio para analizar el comportamiento térmico de un reactor solar volumétrico, el cual ha sido diseñado para la producción de hidrógeno a partir de ciclos termoquímicos. En este trabajo se realizan simulaciones 3D con el software comercial COMSOL Multiphysics 4.2 (2012).

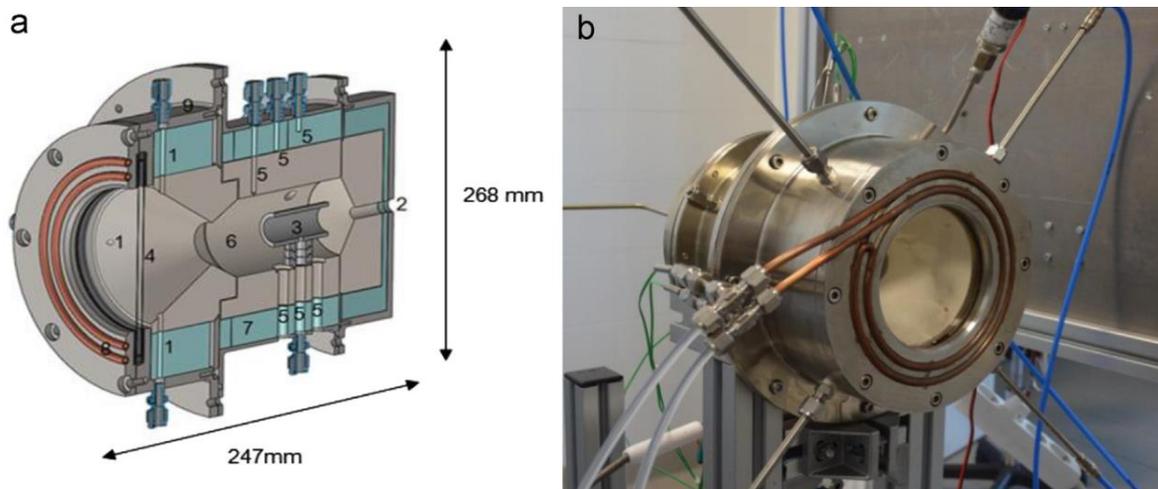


Figura 25. Geometría e imagen real de reactor solar [124], [125].

Se considera que el flujo en el interior de la cavidad es laminar, incompresible y transparente a la radiación (medio no participativo), mientras que las paredes

de la cavidad son opacas y difusas. En estas simulaciones se utiliza el modelo DO y medio no participativo (S2S) para la radiación, la cual se impone como condición de contorno sobre las paredes. Para resolver las simulaciones se incluye la siguiente simplificación: se realiza la media armónica de la conductividad térmica en la capa límite (zona inmediatamente adyacente a la superficie sólida) para evaluar el calor difusivo.

Este estudio concluye con un estudio de la posición y el caudal de gas de arrastre para alcanzar la temperatura requerida en la muestra, dicho modelo ha sido validado experimentalmente.

Tescari et al. [126] describen el comportamiento térmico de un reactor solar rotativo en función del radio de la apertura, la conductividad del aislamiento y el espesor del aislamiento.

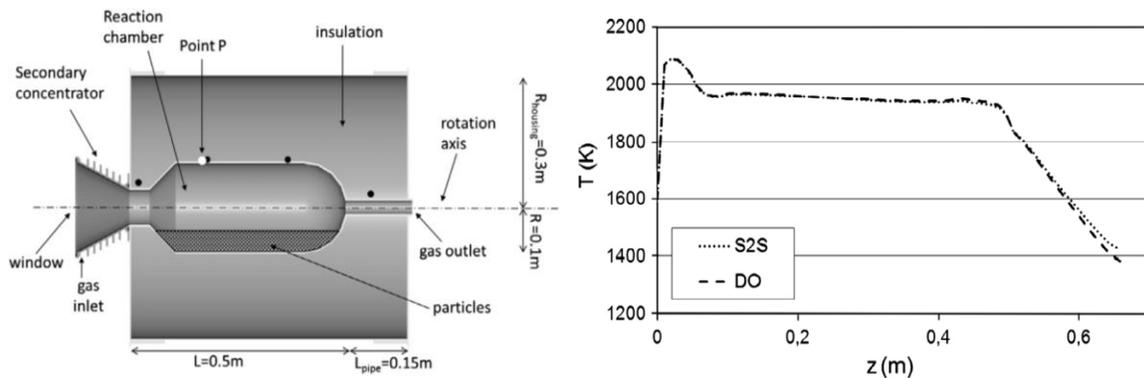


Figura 26. Geometría y comparación de resultados de temperatura según el modelo de radiación utilizado [126].

Es este trabajo se comparan los resultados de temperatura obtenidos en las paredes de la cavidad del reactor solar con y sin medio participativo. Los modelos de radiación utilizados son: en primer lugar, el modelo DO de forma que se considera medio participativo para modelar la apertura, la cual se simula como un volumen transparente de cuarzo y en segundo lugar, se utiliza el modelo S2S en el cual la apertura se simula como una superficie opaca negra con una temperatura equivalente impuesta. Se concluye que la aproximación realizada sobre la ventana de la apertura para eliminar el medio participativo reduce el coste computacional del orden de 50 veces con errores inferiores al 2 %.

2.4.1 Resumen estado del arte de modelado computacional

En la Tabla 14 se presenta un resumen de los modelos implementados en las distintas herramientas CFD utilizadas para analizar el comportamiento térmico de los reactores solares para la producción de hidrógeno.

Reactor	Modelo	Modelo Turbulencia	Modelo Radiación	Flujo incidente	Medio participativo	Programa	Año	Ref
Partículas	3D	RNG K - ϵ	-	Constante	✓	CFDS-FLOW3D	1996	[109]
Partículas	3D	-	MC	Constante	✓	-	2004	[110], [111]
Volumétrico	2D	-	-	Gaussiana	✗	MODELICA / DYMOLA	2006	[112]
Tubular	2D	Laminar	DO	Gaussiana	✗	FLUENT 6.2	2006	[113]
Partículas	3D	Realizable K- ϵ	DO	Constante	✓	FLUENT 6.2.16	2007	[114]
Partículas	2D	-	MC	Lambertiana	✓	PHOENICS/ REXAN/DOTS	2007	[115]
Volumétrico	2D	-	-	Flujo calculado en las paredes	-	ANSYS CFX 10.0	2008	[97]
Partículas	2D	-	-	Flujo calculado con MC en la apertura	✓	-	2008	[116]
Partículas	-	-	MC	-	✓	-	2008	[117]
Partículas	3D	K- ϵ / RNG K- ϵ	DO	Constante	✓	FLUENT 6.3	2010	[118]
Volumétrico	2D	-	P1	Gaussiana	✗	ANSYS - FLUENT	2011	[42]
Volumétrico	3D	-	DO	Constante	✓	FLUENT 12.1	2012	[119]
Volumétrico	3D	RNG K - ϵ	DO	Perfil de temperatura en función del r_{apertura}	✗	FLUENT 6.2.16	2012	[120]
Tubular	3D	Laminar	-	Flujo impuesto sobre las paredes	✗	FLUENT 6.3.26	2012	[121], [122]
Rotativo	3D	RNG K - ϵ	DO	Gaussiana	✓	FLUENT 14	2013	[123]
Volumétrico	3D	Laminar	S2S	-	✗	COMSOL Multiphysics 4.2	2013	[124], [125]
Rotativo	3D	Laminar	DO / S2S	Uniforme / Gaussiana	✗	ANSYS-FLUENT	2013	[126]

Tabla 14. Resumen de las características de los modelos incluidos en herramientas CFD.

2.4.2 Conclusiones estado del arte de modelado computacional

Desde la década de los 90 se desarrollan análisis con herramientas CFD para evaluar el diseño para los distintos tipos de reactores solares y optimizar las condiciones de operación para la producción de hidrógeno, siendo los reactores de partículas los más investigados. En los primeros años la mayoría de los análisis realizados utilizaban geometrías 2D en sus modelos, sin embargo, en los últimos años se incluyen geometrías 3D para reducir las hipótesis y aumentar la precisión de los modelos dado el avance de las tecnologías (mayor memoria computacional).

A lo largo de la revisión bibliográfica de los modelos CFD aplicados al diseño de reactores solares se obtienen las siguientes conclusiones:

- El error máximo cometido en temperatura es aproximadamente del 10% de acuerdo a la revisión bibliográfica [66], [97], [115], [118]–[121], [125].
- El modelo de turbulencia más utilizado en la literatura es RNG $k - \epsilon$ siempre y cuando no se considere movimiento laminar en la cavidad [109], [118], [120], [123].
- En función del análisis realizado, se utiliza un modelo de radiación u otro. En principio, el modelo más utilizado es Discrete Ordinate (DO) dado que en la mayoría de los casos la condición de contorno del perfil de radiación se incluye como un flujo uniforme/distribución Gaussiana [113], [114], [118], [119], [123], [126]. Esto supone una simplificación del modelo que reduce considerablemente el coste computacional a costa de eliminar la direccionalidad del perfil de radiación y consecuentemente la precisión local de los puntos fríos/calientes del sistema.
- En los reactores volumétricos se analiza el intercambio radiante entre partículas y entre las partículas y las paredes por ello se incluye medio participativo en el modelo [42], [109], [111], [114]–[117], [127], sin embargo, para el resto de los reactores no se considera medio participativo sino intercambio entre superficies (S2S) dado que el aire o los gases inertes que se encuentran en el interior de la cavidad no influye en la dirección/intensidad de la radiación [42], [112], [113], [121], [122], [125], [126].
- Se observa que el software comercial más utilizado es Fluent y la versión más actual es Fluent 14.0 de 2011.

2.5 LIMITACIONES DEL ESTADO DEL ARTE

Tras la revisión bibliográfica de los reactores solares existentes queda patente la necesidad de desarrollar una metodología con herramientas CFD que permita el diseño de reactores solares o la evaluación de condiciones de operación previas a la experimentación de forma precisa. La utilización de estas herramientas reduce los costes asociados a la producción de hidrógeno tanto en la instalación/diseño como durante la operación/proceso. Es por ello, que se requiere de una metodología clara y precisa para el modelado de diseño de reactores, principal objetivo de la presente Tesis Doctoral.

Desde este punto de vista se ha realizado la revisión bibliográfica de modelado CFD en reactores solares en la cual se han presentado una serie de limitaciones que permiten abordar la presente Tesis Doctoral. Dichas limitaciones se indican a continuación:

En cuanto a la transferencia por radiación, se observa que el modelo de radiación más utilizado es el modelo DO, esto se debe principalmente a que el coste computación requerido es mucho menor que el necesario para la misma simulación con el modelo de MC. Sin embargo, dado que el objetivo de esta metodología es diseñar un reactor solar se propone utilizar como condición de entrada un único perfil de radiación, el cual puede ser calculado con herramientas como TracePro® o puede ser medido experimentalmente si la instalación solar en la que se quiere incluir el reactor está construida. El modelo de MC presenta la ventaja de poder incluir la definición del perfil de radiación en la apertura y resolver en la propia simulación CFD la incidencia en las paredes cuando se incluye la dirección de los rayos. Mientras que con el método DO el perfil de radiación se incluye directamente sobre las paredes [119], [121], [125] de forma que sería necesario recalcular esta condición de entrada cada vez que se modifique la geometría de la cavidad o en la apertura considerándose en este caso un perfil difuso. Por otro lado, únicamente podría utilizarse un perfil calculado.

El modelado de la turbulencia en los reactores solares de la literatura se centra principalmente en el modelo $k - \epsilon$, el cual se ha venido utilizando tradicionalmente, sin embargo, en los últimos años se ha comprobado que este modelo no resuelve bien la capa límite en determinados casos, lo que perjudica la precisión del cálculo de la transferencia de calor por convección en la cavidad. El modelo SST utiliza una función de paso para resolver en volumen con el modelo $k - \epsilon$ y en la capa límite con el modelo $k - \omega$. Este modelo ha sido validado [128], [129] y se presenta como el más preciso de acuerdo a la convección en los trabajos realizados por Wang [130] y Vieser [131].

Por último, existen algunos estudios donde se analiza la transferencia de calor por conducción y convección para un lecho reactivo tipo espuma/monolito (porosidad constante), sin embargo no se incluye para lechos de partículas en reactores tubulares (donde la porosidad varía radialmente debido al ordenamiento de las partículas). Se detecta por tanto una limitación del estado del arte en cuanto a estudios donde se acople el diseño térmico del reactor solar con un tratamiento detallado del lecho reactivo formado por partículas o pellets.

“Una persona que nunca ha cometido un error nunca intenta nada nuevo.”

Albert Einstein

3 METODOLOGÍA

En este capítulo se describe la metodología desarrollada en la Tesis Doctoral. El objetivo final es definir de forma detallada los pasos necesarios para el diseño térmico de un reactor solar con técnicas CFD. Para ello, esta sección está dividida en tres apartados. En el primero de ellos, se indican las consideraciones necesarias antes de comenzar con el diseño térmico, tales como identificar las aplicaciones que permiten utilizar esta metodología, seleccionar el software de simulación, conocer los datos iniciales, los principales modelos y las condiciones de contorno a utilizar. En el segundo apartado, se describe en primer lugar, de forma general la metodología propuesta y posteriormente se realiza una descripción detallada, donde se utiliza una geometría sencilla como caso base,

para ilustrar los resultados obtenidos en las distintas etapas del diseño térmico del reactor. Por último, se recopilan las principales pautas de la metodología para el diseño térmico de un reactor solar con técnicas CFD.

3.1 CONSIDERACIONES PREVIAS

En este apartado se listan las distintas consideraciones que deben realizarse antes de comenzar con la metodología.

3.1.1 Introducción

La metodología desarrollada en el presente capítulo para el diseño/optimización térmico de reactores solares es válida, desde el punto de vista del equipo, para las siguientes configuraciones de reactor (Figura 27):

- Reactores solares de intercambio indirecto de tipo tubular.
- Reactores solares de intercambio directo tipo volumétrico.

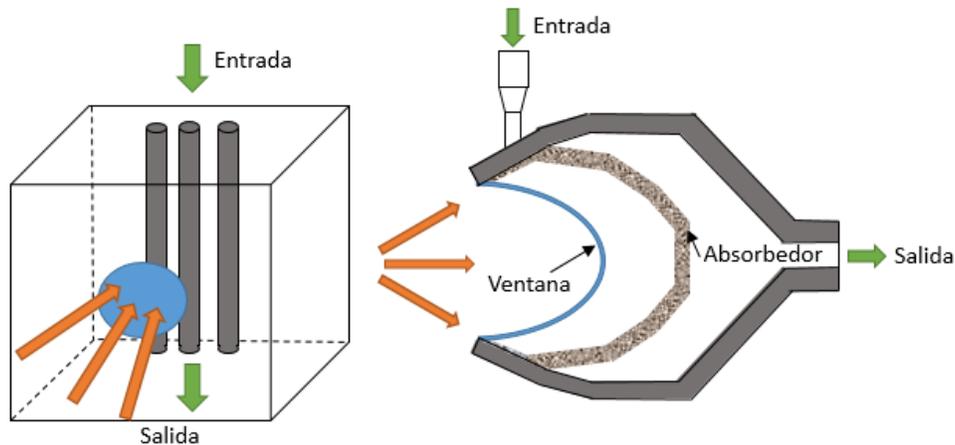


Figura 27. Izquierda: Reactor tubular; Derecha: Reactor volumétrico.

Los reactores solares pueden ser abiertos o cerrados, es decir, con o sin ventana de cuarzo. En general, en los reactores solares de intercambio directo se incluye una ventana de cuarzo para cerrar la cavidad y trabajar en atmósferas a presión.

Esta metodología no es aplicable para el diseño u optimización de reactores solares de partículas de lecho fluidizado o de arrastre dado que no se considera la participación radiante del medio ni el movimiento de las partículas.

En la Figura 28 se presenta la clasificación de Yadav [108] para los procesos termoquímicos que se llevan a cabo en reactores solares en función del proceso para obtener combustibles (gas de síntesis o hidrógeno) y materias primas industriales.

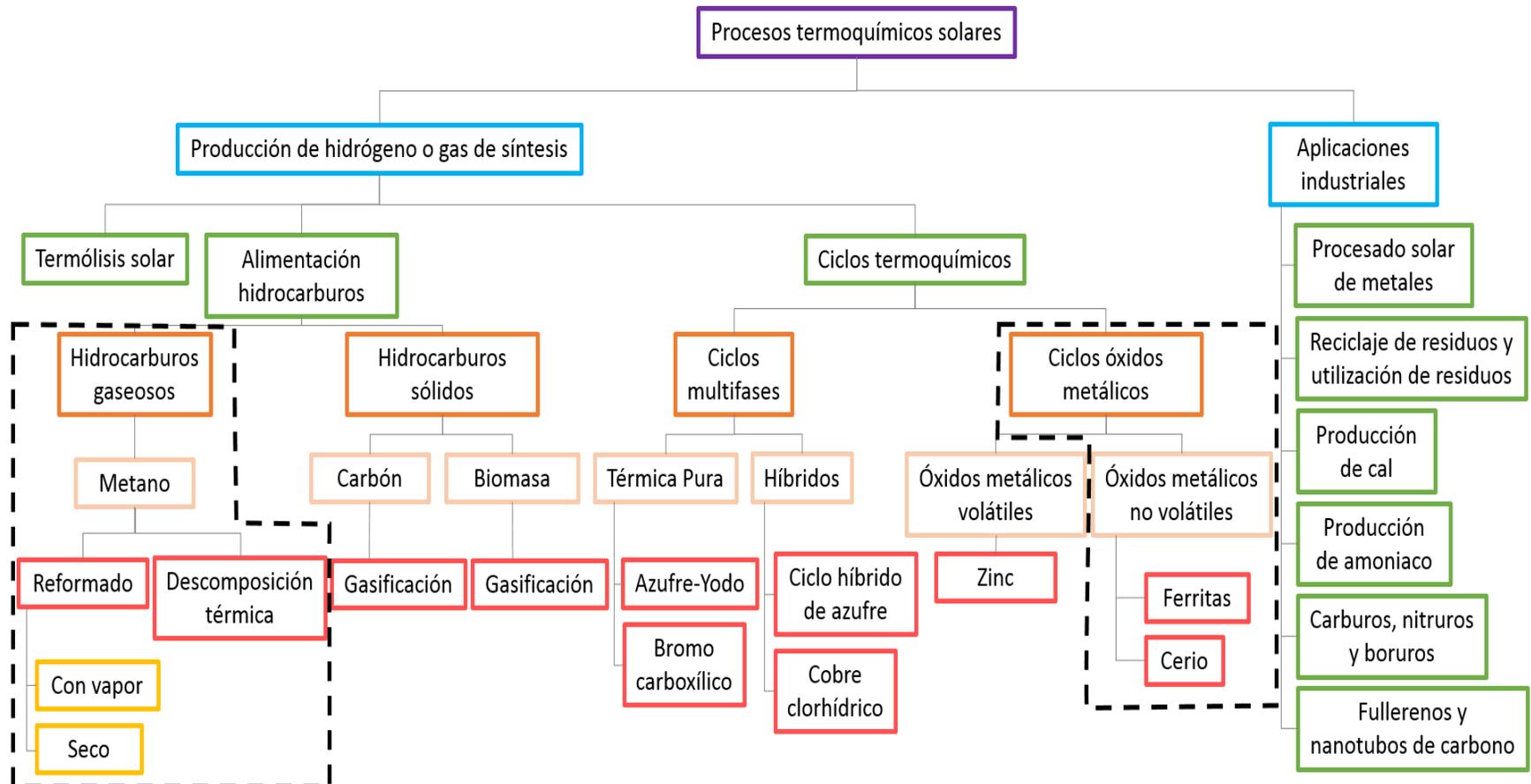


Figura 28. Clasificación de procesos termoquímicos solares (traducida de [108]).

Desde el punto de vista de los procesos termoquímicos, esta metodología es válida para la producción de combustibles solares, gas de síntesis e hidrógeno, los cuales permiten almacenar y transportar la energía solar de carácter intermitente. De acuerdo, con lo anterior, la metodología es válida para las siguientes aplicaciones (resaltadas en negro en la Figura 28):

- Producción de hidrógeno a partir de ciclos termoquímicos de óxidos metálicos no volátiles.
- Producción de gas de síntesis a partir de reformado con catalizador.

En función del sistema de producción de hidrógeno, esta metodología está limitada a ciclos termoquímicos que se producen en fase sólido/gas que permiten realizar las distintas etapas del ciclo en un único reactor solar. Esto se corresponde principalmente con los ciclos termoquímicos de óxidos metálicos no volátiles. Para otros ciclos termoquímicos, se puede evaluar térmicamente el diseño óptico de la cavidad para obtener una distribución de temperaturas homogénea cuya temperatura mínima sea superior a la temperatura requerida por el ciclo. Sin embargo, la metodología no describe los modelos a implementar para reactivos fluidos o en movimiento.

La producción de gas de síntesis mediante reformado sigue los mismos principios en cuanto al modelado de los fenómenos que se producen considerando el catalizador equivalente al compuesto del ciclo termoquímico y la mezcla de vapor y combustible gas equivalente al gas de arrastre o vapor según la etapa del ciclo termoquímico.

Con las consideraciones descritas, se garantiza el diseño térmico y el análisis paramétrico de la geometría y de las condiciones de operación donde se considera el intercambio por conducción, radiación y convección del reactor, pudiéndose mejorar la eficiencia del reactor en los distintos aspectos a medida que se avanza en la metodología. No se tienen en cuenta las pérdidas por desbordamiento dado que el dato a usar es la radiación incidente en la apertura y el volumen de control de diseño considerado es únicamente el reactor.

3.1.2 Datos iniciales

En este apartado se recogen los conocimientos previos necesarios para el diseño térmico del reactor solar:

- Proceso termoquímico
- Tipo de reactor solar
- Sistema de concentración de energía solar

3.1.2.1 Proceso termoquímico

La metodología es válida para el reformado de hidrocarburos ligeros, y para cualquier ciclo termoquímico de óxidos metálicos no volátiles (fase sólido/gas), dado que se plantea el diseño térmico de un reactor solar donde las distintas etapas del ciclo termoquímico se pueden realizar en un mismo equipo. Es importante seleccionar desde el principio el proceso termoquímico debido a que cada uno de ellos presenta unos requisitos de temperatura de operación distintos variando la temperatura máxima de operación entre 1000 y 1873 K.

Los ciclos termoquímicos constan de dos o más etapas, siendo la etapa de activación, etapa en la que se produce la reducción del óxido, la que se produce a mayor temperatura. Por tanto, es la temperatura de esta etapa la que se debe considerar para el diseño térmico del reactor solar como temperatura mínima que debe alcanzarse en el lecho reactivo de la forma más uniforme posible. En el caso de reformado de hidrocarburos el proceso se lleva a cabo en una única etapa.

Las simulaciones del caso base ilustrativo de la metodología de esta Tesis Doctoral se realizan para un ciclo termoquímico de ferrita cuya temperatura máxima de operación correspondiente a la fase de reducción del óxido es de 1450 K. Esta temperatura seleccionada se corresponde con la temperatura máxima media entre los distintos ciclos termoquímicos de ferrita.

3.1.2.2 Tipo de reactor solar

Otro aspecto importante a tener en cuenta antes de comenzar la metodología es el tipo de reactor a diseñar. Como se indicó anteriormente, la metodología es aplicable al diseño y/u optimización térmica de los reactores solares de intercambio indirecto tipo tubular y de intercambio directo tipo volumétricos.

La selección del tipo de reactor solar en función del proceso termoquímico que se lleva a cabo al final del primer bloque de la metodología, diseño inicial (apartado 3.3.1), una vez conocidos los requisitos del proceso y la potencia necesaria.

Las simulaciones realizadas en el desarrollo de la metodología de esta Tesis Doctoral se corresponden con un reactor solar tubular.

3.1.2.3 Sistema de concentración de energía solar

Estos dispositivos redireccionan la componente directa de la radiación solar que llega a la superficie de captación, para hacerla llegar a otra superficie de menor tamaño, llamada superficie de absorción. El cociente entre las áreas de estas dos superficies es uno de los indicadores más representativos del sistema; se llama razón de concentración geométrica. Las cuatro tipologías más utilizadas de

concentrador solar son: cilindro – parabólico, torre solar, Fresnel y disco parabólico.

La tecnología más extendida es la correspondiente a los cilindro – parabólicos, que concentran la radiación en una línea donde se sitúa el absorbedor. La misión del concentrador de canal parabólico es reflejar y redirigir la radiación solar directa incidente hacia el tubo absorbedor para hacerla llegar a la superficie del absorbedor, donde la radiación solar se transforma en energía térmica. La razón de concentración geométrica de los cilindros parabólicos es del orden de 100 y se alcanzan temperaturas en torno a los 673 K.

Le siguen en implantación los sistemas de receptor central o de torre. En este caso, la radiación concentrada procedente de un campo de heliostatos, se hace incidir sobre un punto en cuyas proximidades se coloca el absorbedor, el cual se sitúa en la parte alta de una torre. Los sistemas de receptor central concentran la radiación solar en tres dimensiones, teóricamente en un punto, por lo que pueden alcanzar un valor elevado de la razón de concentración (del orden de 1000) y, por tanto, operar a temperaturas altas, por encima de 1273 K.

Los concentradores lineales de Fresnel son una modificación de los captadores cilindro – parabólicos, que de la misma forma concentran la radiación en una línea donde se coloca el correspondiente absorbedor. El principal atractivo de la tecnología reside en su excelente aprovechamiento del terreno y bajo coste potencial, siempre que las temperaturas de operación lo permitan. Su limitada capacidad de concentración supone, sin embargo, una barrera a la obtención de rendimientos altos en la conversión de la energía de la radiación solar a electricidad (bajas temperaturas).

La última tecnología por orden de importancia en potencia instalada es la de discos parabólicos que, como la de receptor central, concentra la radiación en un punto donde se sitúa el correspondiente absorbedor o receptor. Los sistemas de discos parabólicos se componen básicamente de un reflector o un conjunto de reflectores, con forma de paraboloides de revolución, y un receptor situado en el foco de dicho paraboloides, que suele formar un único bloque con el receptor. La radiación solar concentrada por el paraboloides incide sobre el receptor, donde se convierte en energía térmica (razón de concentración geométrica superior a los concentradores de torre). Los discos parabólicos se caracterizan por un alto rendimiento, modularidad y autonomía.

Los sistemas de concentración de energía solar considerados para el diseño de reactores solares son los concentradores puntuales, ver Figura 29. Los sistemas de disco parabólico y sistemas de torre presentan un factor de concentración mayor que los concentradores lineales y por tanto permiten alcanzar

temperaturas más elevadas en el interior del reactor y acordes a los procesos considerados.

La posición del reactor será tal que la apertura del reactor se sitúa en el foco del sistema de concentración para obtener la mayor eficiencia desde el punto de vista óptico [132].

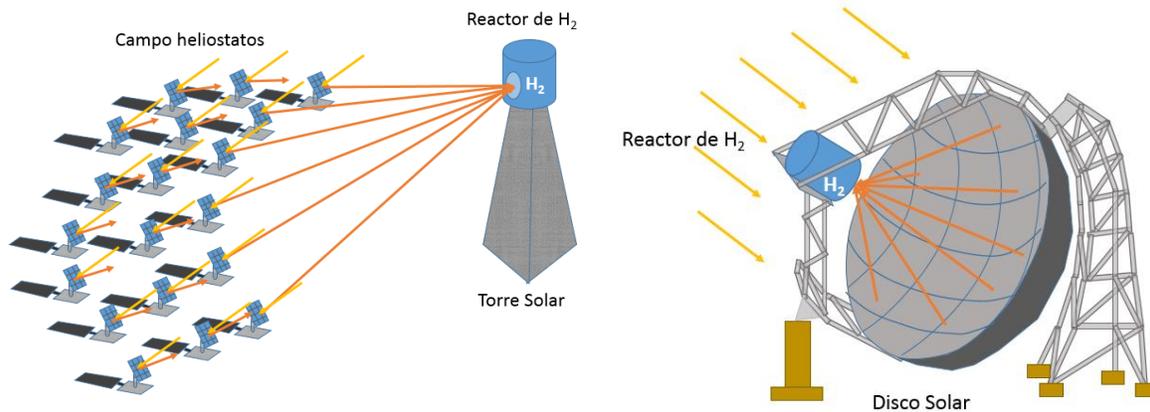


Figura 29. Sistemas de concentración puntual: Izquierda: torre; Derecha: disco parabólico.

En cuanto a la intensidad de radiación se considera, por un lado, que esta varía en función de la hora del día y por otro lado, que la instalación de concentración permite cierto juego para ajustar el perfil de radiación al requerido. Este segundo aspecto ocurre principalmente en las instalaciones de torre solar y el conjunto de heliostatos.

3.1.3 Selección de software comercial

A mediados de los 70 comenzaron a desarrollarse los algoritmos matemáticos necesarios para la resolución de las ecuaciones del flujo fluido y a completarse en códigos de Fluidodinámica Computacional o CFD (*Computational Fluid Dynamics*), que aparecieron a principios de los 80. Estos códigos requerían potentes ordenadores y por lo tanto las herramientas CFD eran únicamente utilizadas en investigación. Con el posterior desarrollo de los ordenadores y métodos de programación, estos códigos CFD han pasado a ser también una herramienta establecida en las fases del diseño industrial y optimización de procesos y equipos.

La Fluidodinámica Computacional consiste en la resolución mediante métodos numéricos de las ecuaciones que gobiernan el flujo de fluidos. El dominio de interés se subdivide en volúmenes de control (malla), donde las ecuaciones de cantidad de movimiento (Navier-Stokes) se discretizan y se resuelven de forma iterativa con condiciones especificadas en los contornos del dominio. Dichas

ecuaciones básicas se deben complementar con los modelos necesarios para representar correctamente los diferentes fenómenos que tienen lugar en el reactor.

Hoy en día, existen numeras herramientas CFD, siendo ANSYS, COMSOL Multiphysics, OpenFOAM y Star-CD los más utilizados. De acuerdo con el apartado 2.4, los códigos más utilizados para el diseño y optimización térmica de reactores solares son los de ANSYS: Fluent y CFX. Por ello, para seleccionar el software de esta metodología se comparan dichos códigos desde el punto de vista del diseño de reactores solares:

	ANSYS-Fluent	ANSYS-CFX
Modelo de turbulencia	- Incluye distintos modelos de turbulencia	- Incluye distintos modelos de turbulencia
Modelo de radiación	- Incluye algunos modelos de radiación (No incluye MC) - Permite intercambio radiante entre superficies (S2S)	- Incluye algunos modelos de radiación (Incluye MC) - Permite intercambio radiante entre superficies (S2S)
Condiciones de operación	- No permite incluir una fuente de radiación en un opening - No se puede incluir la direccionalidad de la fuente de radiación de forma directa - Se puede introducir matriz/función de intensidad de radiación - Se puede indicar la posición del Sol para determinar la dirección	- Permite incluir una fuente de radiación en el opening - Dirección de radiación como una matriz/vector - Se puede introducir función/matriz de intensidad de radiación - No incluye modelo de posición del Sol

Tabla 15. Comparación herramientas CFD de ANSYS de acuerdo a diseño de reactores solares [133], [134].

A partir de la comparación de la Tabla 15 se decide utilizar ANSYS-CFX para describir la metodología de esta Tesis Doctoral debido a que el modelo de radiación de Monte Carlo disponible en ANSYS – CFX permite incluir la direccionalidad del perfil de radiación directamente sobre la apertura de forma que se calcula el perfil de radiación proyectado sobre las paredes del reactor simultáneamente al intercambio radiante por temperatura. Además, la fuente de radiación se incluye como una única condición de contorno. Este modelo permite incluir la radiación incidente al reactor de forma mucho más sencilla que los modelos existentes de trazado de rayos en ANSYS – Fluent.

La justificación de la selección de los modelos incluidos en la metodología para el desarrollo de la turbulencia en la cavidad, intercambio radiante en la cavidad y

el transporte de cantidad de movimiento y transferencia de calor en el medio poroso se realiza en los apartados 3.2.1, 3.2.2 y 3.2.3 respectivamente.

3.2 SELECCIÓN DE MODELOS

3.2.1 Selección modelo de turbulencia

Existen diversos modelos para resolver la turbulencia del sistema. Los modelos de turbulencia de dos ecuaciones son ampliamente utilizados, ya que ofrecen un buen compromiso entre el coste y la precisión computacional. Los modelos de dos ecuaciones resuelven en primer lugar energía cinética turbulenta y en segundo, el ratio de disipación de la energía cinética turbulenta para los modelos $k - \varepsilon$ y la frecuencia de turbulencia para los modelos $k - \omega$ [135].

A continuación se comparan los modelos de turbulencia existentes de dos ecuaciones para seleccionar el más adecuado para resolver el movimiento del aire en el interior de la cavidad del reactor y en el lecho poroso. Los principales modelos son:

- Standard $k - \varepsilon$ model
- RNG $k - \varepsilon$ model
- Standard $k - \omega$ model
- Shear Stress Transport (SST)

El modelo $k - \varepsilon$ es un modelo semiempírico con dos ecuaciones de transporte para representar las propiedades turbulentas del flujo. La primera variable de este modelo es la energía cinética turbulenta (k), dicha variable determina la intensidad turbulenta, mientras que la segunda variable representa la disipación turbulenta (ε) [134]. El modelo $k - \varepsilon$ estándar se ha venido utilizando tradicionalmente en la predicción de la mayoría de los flujos turbulentos para aplicaciones industriales debido a su robustez, economía y precisión razonable para una amplia gama de aplicaciones. Sin embargo, el modelo reduce su precisión cuando se enfrentan con capas límite de no equilibrio. Tiende a predecir el desprendimiento de la capa límite demasiado tarde así como a subestimar el espesor de la misma lo que supone una predicción optimista del rendimiento de los sistemas. Por ello, el modelo $k - \varepsilon$ estándar es válido únicamente para flujos turbulentos completamente desarrollados donde los efectos de la viscosidad molecular son despreciables [128], [129], [136], [137].

El modelo de turbulencia RNG $k - \varepsilon$ se basa en el modelo anterior con las constantes empíricas recalculadas y normalizadas [134].

Una de las ventajas del modelo de turbulencia $k - \omega$ frente al modelo $k - \epsilon$ es el tratamiento que se realiza en las paredes para un Reynolds bajo, dado que no involucra las ecuaciones no lineales en el tratamiento de las paredes que requiere el modelo $k - \epsilon$. Sin embargo, se obtienen resultados menos precisos a medida que se aleja de las paredes.

El modelo SST combina los modelos $k - \epsilon$ y $k - \omega$ con la ayuda de una función de mezcla para pasar de un modelo a otro, es decir, se utiliza el modelo $k - \omega$ en la región próxima a la pared y el modelo $k - \epsilon$ para el resto de la corriente. Permite obtener la precisión del modelo del modelo $k - \omega$ en las paredes sin los errores potenciales resultantes de la sensibilidad en el resto de la corriente [128], [129], [134], [136], [137].

Además, el modelo de turbulencia debe calcular adecuadamente el flujo de calor por convección en las paredes del reactor para evaluar las pérdidas térmicas con precisión. En el estudio presentado por Vieser et al. [136] se comparan los resultados de transferencia de calor por convección natural entre dos placas a distinta temperatura utilizando los distintos modelos de turbulencia de dos ecuaciones. De dicho estudio se obtiene una validación del modelo SST dado que es el que mejor se ajusta a los experimentos como se observa en la Figura 30.

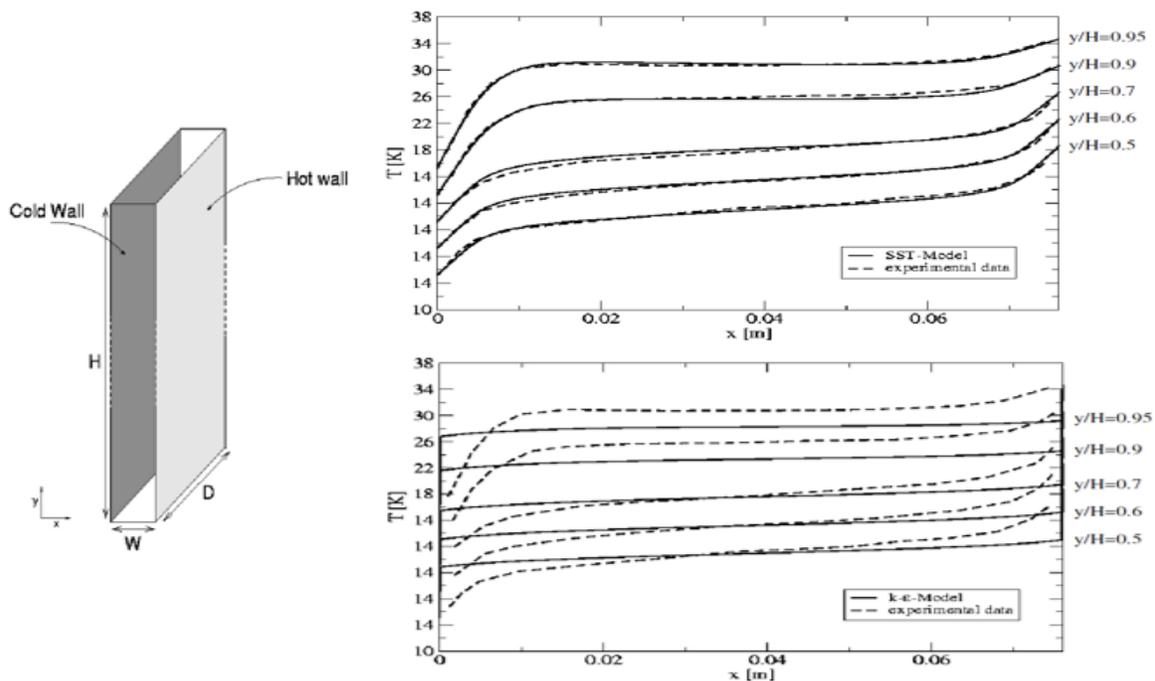


Figura 30. Comparación de modelos de turbulencia $k - \epsilon$ y SST [136].

Por otro lado, en el estudio presentado por Wang [130], se compara la transferencia de calor en un reactor solar para los distintos modelos de turbulencias disponibles en ANSYS-Fluent 14.0. En este caso, se obtiene el mejor

ajuste con respecto a la experimentación para el modelo de turbulencia SST (ver Figura 31). Wang concluye que los resultados del modelo de transferencia de calor, son independientes de la malla cuando y^+ es menor que 1, definido como la distancia adimensional de la pared (se utiliza para comprobar la distancia del primer nodo a una pared).

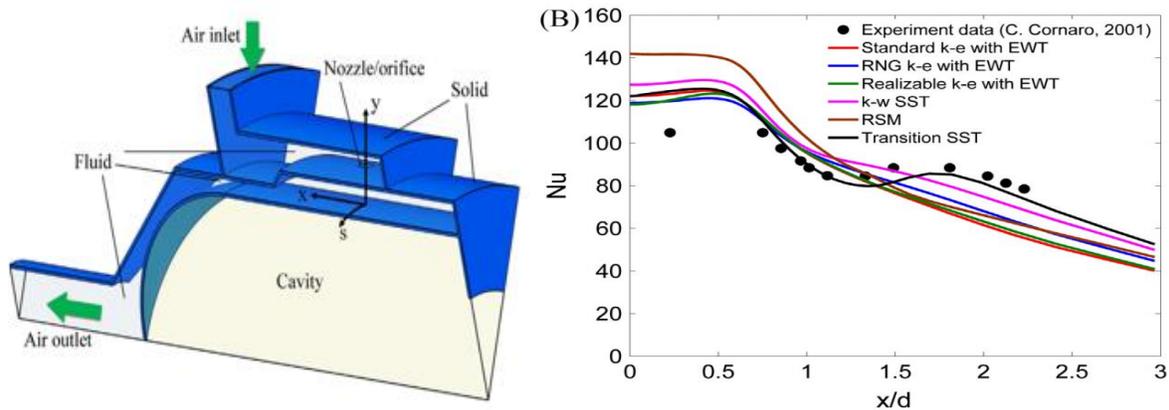


Figura 31. Resultados de Nusselt frente al eje axial para los distintos modelos de turbulencia [130].

De acuerdo con lo anterior [128]–[130], [136], [137], se selecciona el modelo SST para resolver las simulaciones de la metodología, obteniendo la mayor precisión posible en la capa límite de las paredes de la cavidad y por tanto en la transferencia de calor por convección.

A continuación se comparan los modelos $k - \epsilon$, más utilizado en la literatura y el modelo SST para la geometría del caso base a partir de la cual se ilustran los resultados de la metodología. Esta geometría consiste en una cavidad cúbica con un tubo en su interior. (Ver Figura 32).

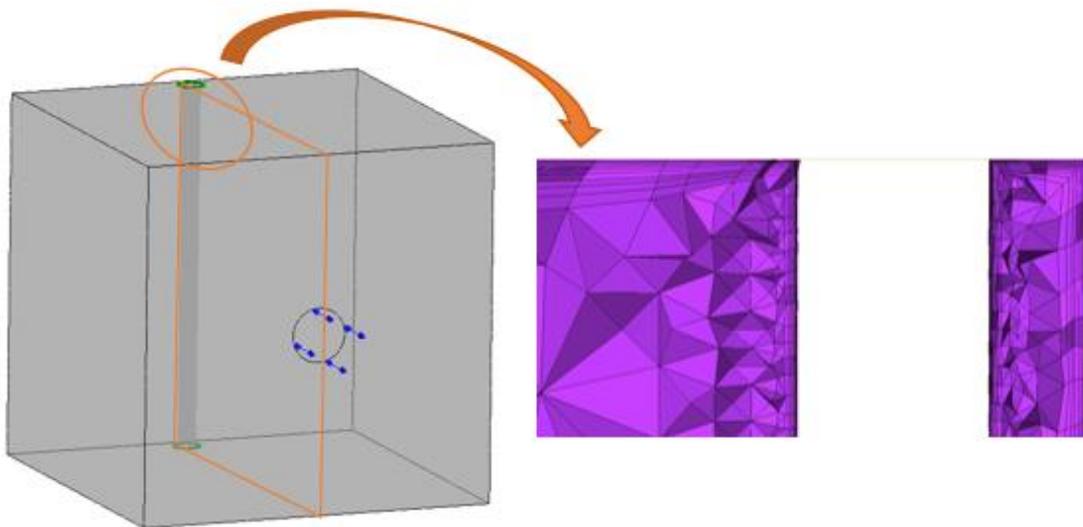


Figura 32. Geometría y detalle de la malla.

Comparando los resultados de temperatura en el eje central de la cavidad desde el punto medio de la apertura hasta el receptor para ambos modelos, se obtiene que para el modelo $k - \epsilon$, las temperaturas en el fluido de la cavidad y sobre la superficie del tubo son mayores que para el modelo SST. De esta forma, los resultados del modelo $k - \epsilon$ son menos conservadores con respecto al modelo SST frente al diseño térmico (ver Figura 33), al igual que se ha reportado en otros estudios [128], [129], [136].

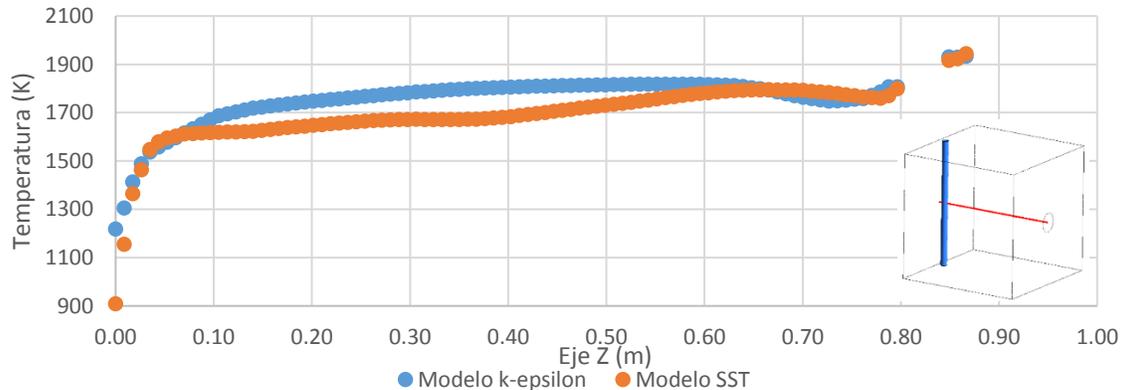


Figura 33. Comparación de modelos de turbulencias en el eje central (línea roja).

En la Figura 34 se presenta el y^+ en la superficie del tubo y del receptor donde se puede apreciar que el valor de este parámetro es inferior a 1 de forma que los resultados de convección son independientes de la malla de acuerdo con Wang [130].

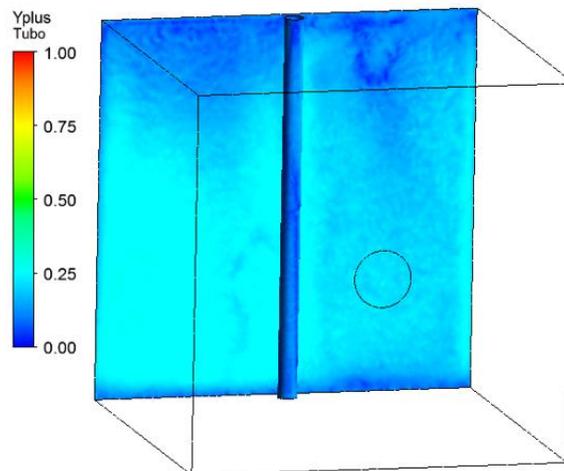


Figura 34. Distribución Y^+ en la superficie del tubo y del receptor.

3.2.2 Selección de modelo de radiación

La radiación térmica es un fenómeno de transferencia de calor debido a la temperatura finita de los cuerpos que emiten y reciben calor por ondas

electromagnéticas. Por su naturaleza no requiere de un medio material para propagarse. La radiación de tipo térmico se produce para una longitud de onda comprendida entre $(0.1 - 100) \mu\text{m}$, en este rango queda incluido parte de la región ultravioleta (UV), todo el espectro visible y la región infrarroja (IR).

Para cuantificar correctamente la transferencia de calor por radiación se tienen en cuenta los efectos:

- Direccional: una superficie puede emitir de forma relevante en ciertas direcciones.

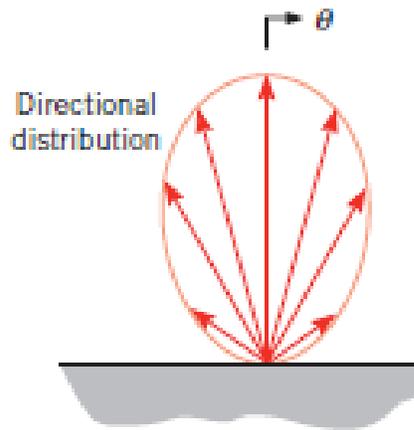


Figura 35. Dependencia direccional de la radiación [138].

- Espectral: la radiación varía con la naturaleza y temperatura de la superficie emisora.

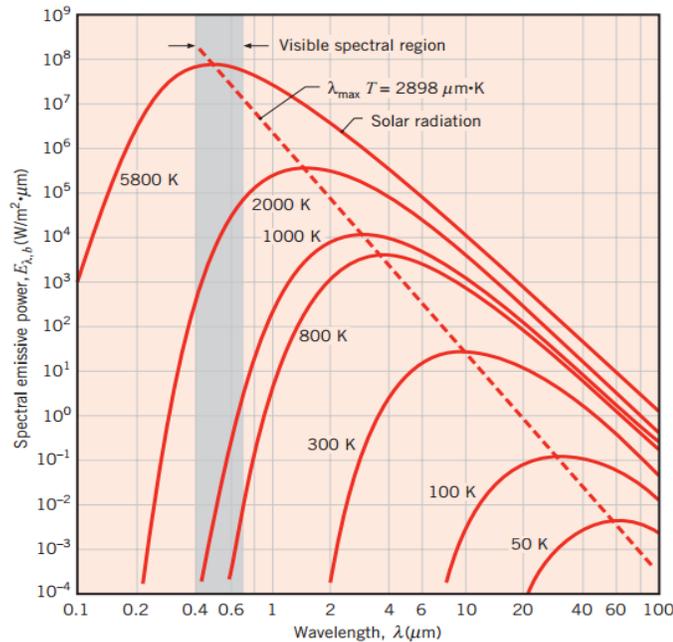


Figura 36. Dependencia espectral de la radiación para un cuerpo negro [138].

El software comercial ANSYS – CFX permite seleccionar diferentes modelos para resolver la radiación según las condiciones del problema. El objetivo del modelado de radiación en ANSYS – CFX es:

- Resolver sistema de ecuaciones radiante.
- Obtener el término de la fuente para la ecuación de energía.
- Obtener el flujo de calor de radiación en las paredes.

Debido a la dependencia en las 3 coordenadas espaciales, 2 coordenadas locales (dependencia direccional) y frecuencia (dependencia espectral), la solución de la ecuación de transferencia de radiación espectral (RTE) conlleva un gran coste computacional, es por ello que ANSYS – CFX utiliza modelos para el tratamiento de la dependencia direccional y espectral de la radiación.

Para el tratamiento de la dependencia direccional de la radiación, CFX incluye los siguientes modelos:

- Rosseland.
- P-1.
- *Discrete Ordinate Transfer (DO)*.
- Monte Carlo (MC).

Para el tratamiento de la dependencia espectral de la radiación, CFX incluye los modelos:

- Gris.
- Multibanda.
- *Weighted Sum of Gray Gases*.

Por otro lado, las herramientas CFD permiten seleccionar si el medio es participativo o no, resolviendo la ecuación RTE en volúmenes y superficies incluyendo las características radiantes del medio, o sólo intercambio entre superficies para medios transparentes a la radiación.

3.2.2.1 Selección del modelo de radiación para dependencia direccional

En casos donde se modela la radiación, la selección del modelo de radiación afectará no sólo a la exactitud de la solución, sino también al tiempo computacional que requiere.

En la literatura, el modelo de radiación más utilizado es el método de DO [113], [114], [118]–[120], [123], [126]. La principal limitación de estos estudios reside en que la radiación incidente se incluye, en general, directamente en las paredes ya sea de forma uniforme o variable en función de la posición, de forma que se desacopla el cálculo de la radiación incidente desde la apertura y el intercambio radiante por temperatura.

Sin embargo, en la metodología desarrollada en la presente Tesis Doctoral, el modelo de radiación utilizado es MC, utilizado en otros trabajos tales como los presentados por Hirsch [110], [111], o Klein [115], debido a que se incluye el perfil de radiación (intensidad y dirección) en la apertura del reactor. El perfil de radiación en la apertura presenta las ventajas anteriormente mencionadas:

- Mayor facilidad de obtener dicho perfil experimentalmente dado que para una instalación solar existente puede medirse sin necesidad de incluir el reactor solar.
- En caso de calcular el perfil de radiación para el diseño de un reactor solar, este no varía cuando se modifica el diseño de la cavidad.

A continuación se describe brevemente en qué consiste el método de MC y cómo se utiliza en aplicaciones de radiación térmica. El método de MC es un método de simulación estadística con el que se determina el comportamiento promedio de un sistema. Una de las ventajas de este método es que problemas complejos pueden ser resueltos con relativa facilidad y una desventaja es que por ser un método estadístico el resultado que se obtiene está sujeto a pequeñas desviaciones de la solución real [139]. El método de MC [140] resuelve los problemas de radiación térmica dividiendo la energía radiante uniformemente en un gran número de paquetes discretos de energía (fotones). Para cada fotón se traza su historia desde el punto de emisión hasta el punto de absorción. Para cada fotón emitido es necesario determinar aleatoriamente una dirección y una longitud de onda (si se consideran las propiedades espectrales). Una vez, conocidas la ubicación y la dirección de emisión, con las leyes de probabilidad y las propiedades del medio (si se considera medio participativo) se determina el destino final de cada fotón. El número de fotones (número de histories) depende de la exactitud deseada, el tiempo y los recursos computacionales.

En la metodología de la Tesis Doctoral únicamente se puede utilizar el método de MC dado que se incluye el perfil de radiación en la apertura del reactor y se considera la dirección de los distintos rayos procedentes del concentrador solar puntual. Sin embargo, a modo de análisis previo, se compara en esta sección dicho modelo con el modelo DO para el caso base definido en el apartado anterior (Figura 32) dado que este último es el más utilizado en la literatura.

En la comparación de modelos, se considera la radiación sin direccionalidad debido a que el modelo DO no permite incluir la dirección del perfil de radiación incidente. El objetivo de esta comparación es evaluar la viabilidad del modelo MC comparándolo con DO por ser el más utilizado en la literatura.

En la Figura 37, se compara la distribución de temperatura obtenida a partir de ambos modelos. La distribución de temperaturas se representa para la línea longitudinal en la vertical del tubo.

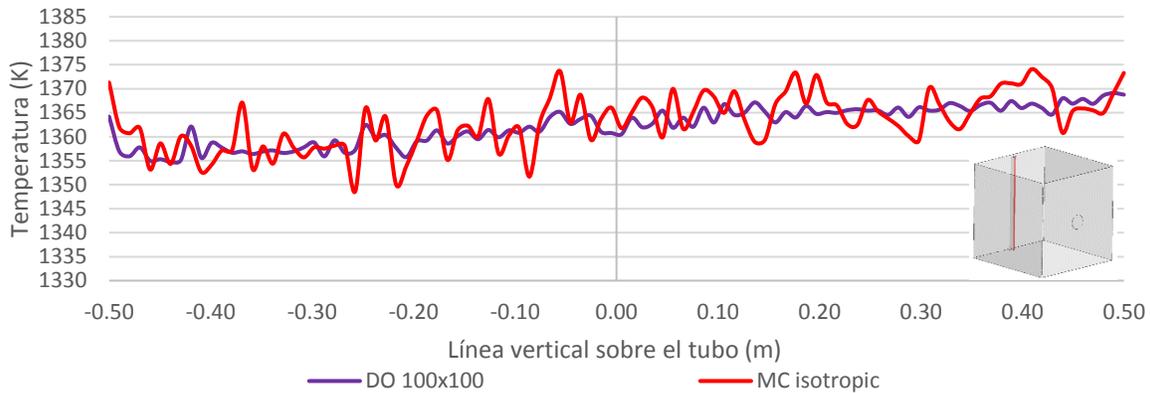


Figura 37. Comparación de modelos de radiación: temperatura en el tubo DO (morado) y MC (rojo).

Por otro lado, en la Figura 38 se muestran los perfiles de temperatura sobre las superficies del tubo y receptor.

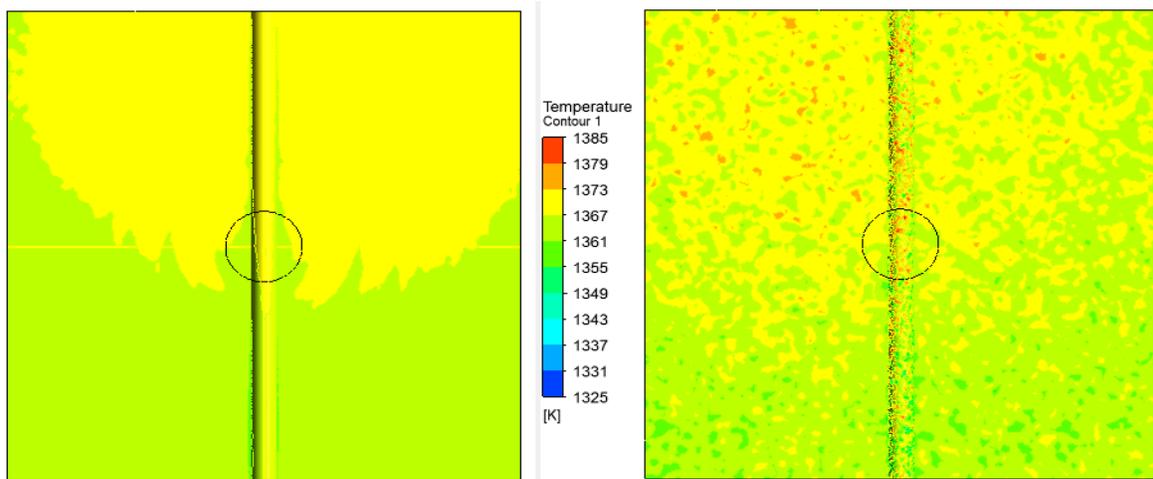


Figura 38. Distribución de temperaturas en tubo y receptor para los modelos de radiación DO (izquierda) y MC (derecha).

Los resultados para un perfil de radiación isotrópico en la apertura avalan la validez del modelo MC dado que se obtienen perfiles de temperatura similares en ambos modelos. Las temperaturas medias son similares, 1364.0 ± 7.7 K para DO y 1364.2 ± 26.7 K para MC, aunque la desviación es mayor para MC. Dicha desviación puede ser reducida aumentando el coste computacional (número de histories) de la simulación. En ambos modelos es necesario ajustar los parámetros, número de rayos en DO de 8 (valor por defecto) a 100 y número de histories en MC de 10000 (valor por defecto) a 65 millones. En la Tabla 16, se compara el coste computacional y se constata que para DO es menor. Sin embargo, este modelo no es aplicable a la metodología por no ser capaz de tratar la direccionalidad de la radiación en la apertura.

3 procesadores	Tiempo/iteración (s/it)
DO 100x100	34.79
MC 65 MH	308.26

Tabla 16. Consumo computacional en función del modelo de radiación.

Por ello, se concluye que a lo largo de la metodología de la presente Tesis Doctoral se utiliza el método de MC como modelo de radiación para aproximaciones direccionales. Este modelo ha sido validado comparando los resultados obtenidos en un caso base de reactor tubular con los obtenidos con el modelo DO (más utilizado en la literatura). Se selecciona este modelo porque permite incluir la direccionalidad de la radiación incidente en la cavidad aunque como inconveniente presenta un mayor coste computacional.

3.2.2.2 Selección del modelo de radiación para dependencia espectral

Para la selección del modelo de dependencia espectral de la radiación, se tienen en cuenta las temperaturas que se alcanzan en el reactor y la variación de la emisividad con la longitud de onda.

En la Figura 39 se observa que a medida que aumenta la temperatura en el sistema, la emitancia con respecto a la longitud de onda se desplaza hacia la izquierda, de forma que aumenta la emitancia en onda corta.

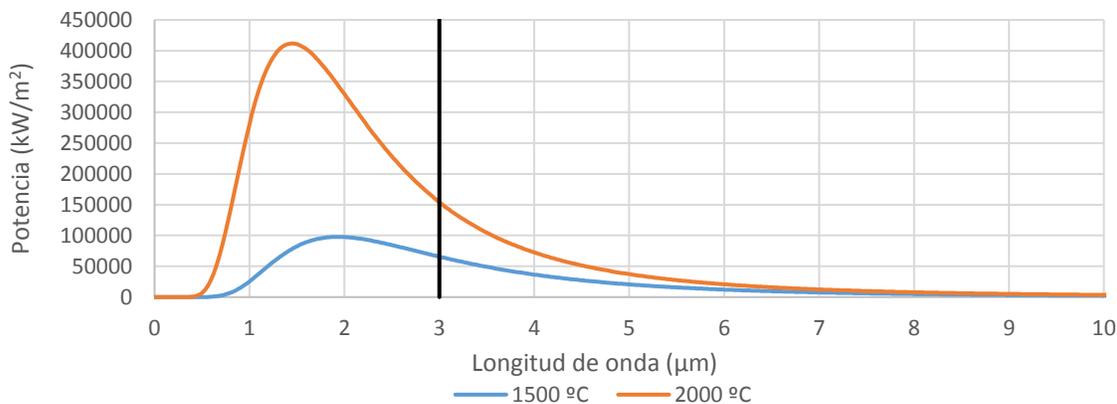


Figura 39. Emitancia en función de la longitud de onda para una temperatura de 1500 °C (azul) y 2000 °C (naranja).

Por otro lado, en la Figura 40 se presenta la variación de la emisividad de algunos materiales con la longitud de onda.

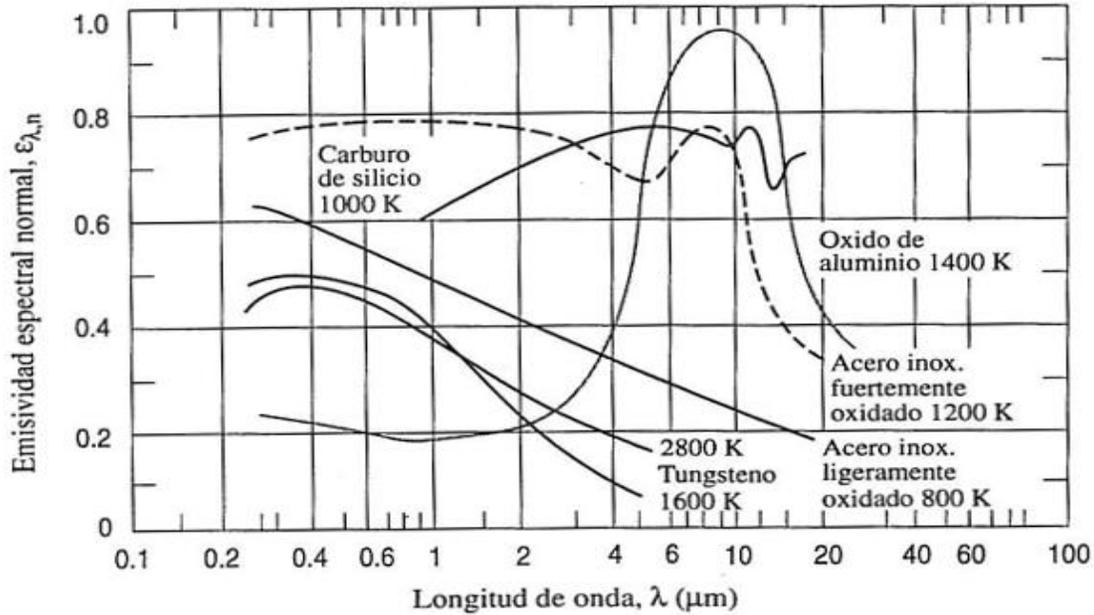


Figura 40. Dependencia espectral de la emisividad espectral y normal de algunos materiales [141].

De acuerdo con la Figura 40, se recomienda considerar los siguientes aspectos para la selección del modelo de dependencia espectral de la herramienta CFD en función de las propiedades radiantes del material:

- Para materiales que presentan comportamiento como el acero oxidable fuertemente oxidado, se observa que la emisividad es prácticamente constante hasta una longitud de onda de 10 μm , por tanto, se recomienda utilizar un modelo unibanda (gris), dado que para esta longitud de onda la emitancia a altas temperaturas es prácticamente nula.
- Para materiales que presentan un comportamiento como el óxido de aluminio, donde se observa un cambio brusco en la emisividad para una longitud de onda corta (2 μm), se recomienda utilizar modelos multibanda dado que la emitancia se concentra en longitudes de onda corta para altas temperaturas y es en este rango donde la emisividad del material presenta un fuerte cambio en su comportamiento.

Por otro lado, se desestima el uso de pinturas selectivas para el tipo de aplicaciones tratadas en la presente Tesis Doctoral. Las pinturas selectivas, por ejemplo Pyromark®, son un revestimiento a base de silicona que, desde el punto de vista térmico, están diseñadas con una capacidad de absorción solar de 0.95, lo que convierte al revestimiento en un absorbedor tipo caja negra casi perfecto. Sin embargo, el rango de temperaturas de operación de las mismas, a pesar de ser elevado, es bajo para aplicaciones de reactores solares debido a que está comprendido entre 873 K – 1273 K [142].

Para el caso base que se presenta para ilustrar el desarrollo del bloque CFD de la metodología, se utilizan modelo unibanda (superficies grises) dado que la temperatura de diseño del equipo es de 1450 K y el material propuesto es el carburo de silicio el cual no presenta un cambio brusco en su emisividad para distintas longitudes de onda.

3.2.2.3 Propiedades radiantes

La emisividad se define como la relación entre la radiación emitida por una superficie y la radiación emitida por un cuerpo negro a la misma temperatura, longitud de onda y/o dirección (Ver Tabla 17).

Emisividad espectral direccional	$\varepsilon_{\lambda\omega}(\lambda, \theta, \phi, T) = \frac{I_{\lambda,e}(\lambda, \theta, \phi, T)}{I_{\lambda,n}(\lambda, T)}$
Emisividad total direccional	$\varepsilon_{\omega}(\theta, \phi, T) = \frac{I_e(\theta, \phi, T)}{I_n(T)}$
Emisividad espectral hemisférica	$\varepsilon_{\lambda}(\lambda, T) = \frac{I_{\lambda}(\lambda, T)}{I_{\lambda,n}(\lambda, T)}$
Emisividad total hemisférica	$\varepsilon(T) = \frac{E(T)}{E_n(T)} = \frac{E(T)}{\sigma T^4} = \frac{\int_0^{\lambda} \varepsilon_{\lambda} E_{\lambda,n}(\lambda, T) d\lambda}{\sigma T^4}$

Tabla 17. Definiciones de emisividad [141].

En el apartado anterior, se presenta la variación de la emisividad con la longitud de onda (Figura 40) y se indican unas recomendaciones para tener en cuenta en el modelo. Por otro lado, en el modelo de la metodología también se puede incluir la dependencia de la emisividad con la temperatura para aquellos materiales cuya variación sea considerable. En la Figura 41 se muestra la evolución de la emisividad para algunos materiales con la temperatura.

Para la metodología se propone la siguiente recomendación: en el caso de cavidades con altos gradientes térmicos en su interior y materiales en las paredes como el óxido de aluminio, se recomienda incluir la dependencia de la emisividad respecto de la temperatura. Sin embargo, para materiales como el carburo de silicio donde la dependencia con la temperatura es menor y/o cuando la temperatura de la cavidad es uniforme (gradientes de temperaturas en el interior bajos), se recomienda incluir la emisividad constante.

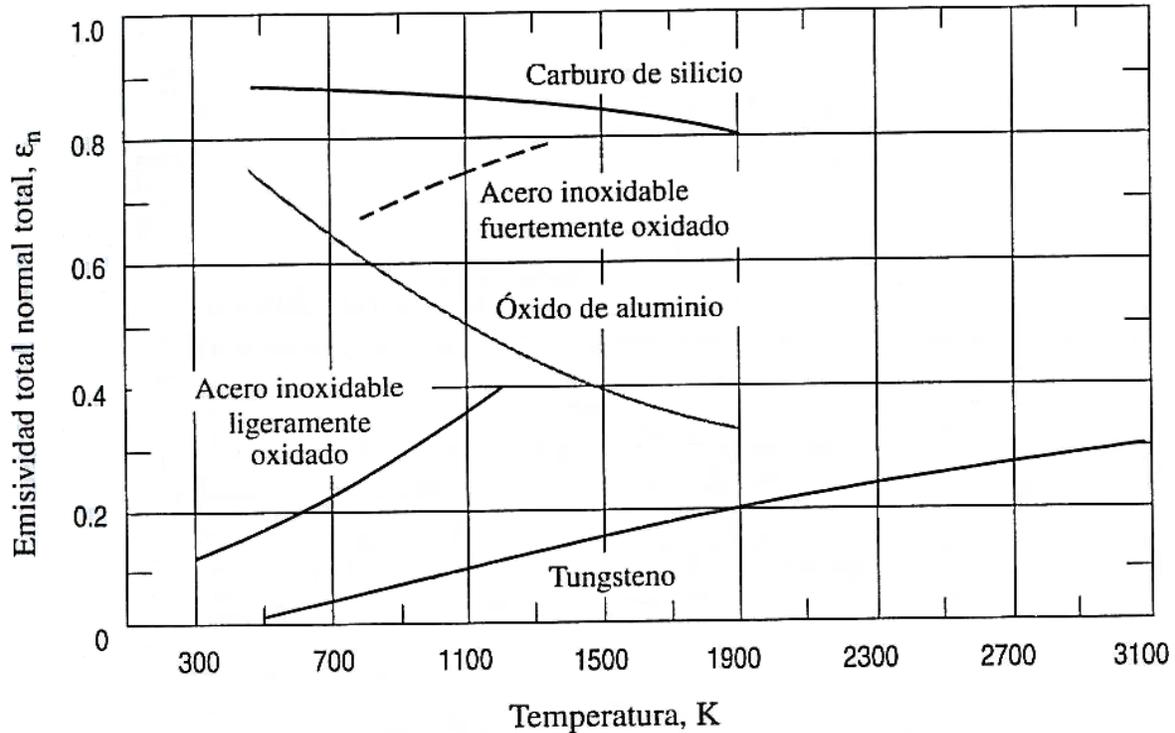


Figura 41. Dependencia de la emisividad normal con la temperatura de algunos materiales [141].

En el caso base para ilustrar la metodología se selecciona el carburo de silicio para las paredes, material comúnmente utilizado en la construcción de reactores solares por sus propiedades mecánicas a altas temperaturas. Para dicho material, se observa que la variación de la emisividad es muy pequeña en onda corta y temperaturas elevadas por lo que se considera constante e independiente de ambas variables.

La absorptividad, reflectividad y transmisividad son propiedades radiantes que dependen del material y de su acabado superficial, de la longitud de onda, de la dirección de la radiación incidente y de la temperatura de la superficie. La transmisividad y reflectividad, a su vez dependen de la dirección de la radiación saliente.

- Absortividad: Se define como la fracción de radiación incidente absorbida por la materia.
- Reflectividad: Se define como la fracción de radiación incidente reflejada por la materia.
- Transmisividad: Se define como la fracción de radiación incidente transmitida por la materia.

A partir de las definiciones anteriores se tiene:

$$\alpha_\lambda + \rho_\lambda + \tau_\lambda = 1$$

Si se promedian las propiedades sobre todo el espectro. Se tiene:

$$\alpha + \rho + \tau = 1$$

Si la superficie es opaca, entonces τ es nulo. Por tanto:

$$\alpha + \rho = 1$$

3.2.2.4 Medio participativo

Los modelos de radiación direccional también deben tener en cuenta si el medio es participativo o no. A continuación se clasifican los modelos de radiación direccional a utilizar de acuerdo al espesor óptico u opacidad de la masa de gas de la cavidad:

- Para problemas con opacidad alta, todos los modelos obtendrán resultados similares, y por tanto las mejores alternativas son los modelos de P-1 y Rosseland por tener un coste computacional menor.
- Para espesores ópticos próximos a 1, el modelo de P-1 es la alternativa con menor coste computación.
- Para casos de espesor óptico delgado y puramente transparente sólo son válidos los modelos de MC y DO.

De acuerdo con lo anterior, cuando el medio es muy participativos todos los modelos obtendrán resultados similares. Sin embargo, únicamente los modelos de radiación de DO y de MC presentan la opción de medio no participativo.

Por otro lado, Hottel [143] desarrolló un método para determinar la emisión de radiación de una masa de gas hemisférica, a una determinada temperatura (T_g) hacia un elemento de superficie dA_1 que se localiza en el centro de la base del hemisferio. La emisión de gas por unidad de área de la superficie se expresa como:

$$E_g = \varepsilon_g \sigma T_g^4$$

Donde la emisividad del gas (ε_g) se correlacionó en términos de temperatura del gas y la presión total del gas, la presión parcial de las especies radiantes y el radio L del hemisferio.

Cuando aparecen juntos el vapor de agua y el dióxido de carbono en una mezcla de gases, la emisividad total del gas se puede expresar como:

$$\varepsilon_g = \varepsilon_w + \varepsilon_c - \Delta\varepsilon$$

Donde $\Delta\varepsilon$ es un factor que representa la reducción en la emisividad asociada con la absorción mutua de la radiación entre las dos especies.

Por otro lado, la absorptividad del gas se puede calcular como:

$$\alpha_g = \alpha_w + \alpha_c - \Delta\alpha$$

Donde las absorptividades del agua y del dióxido de carbono se pueden evaluar a partir de la emisividad [143].

$$\alpha_w = C_w \left(\frac{T_g}{T_s} \right)^{0.45} \cdot \varepsilon_w(T_s, p_w L_e \frac{T_s}{T_g})$$

$$\alpha_c = C_c \left(\frac{T_g}{T_s} \right)^{0.65} \cdot \varepsilon_c(T_s, p_c L_e \frac{T_s}{T_g})$$

De acuerdo con Hottel [143] debe evaluarse el efecto de las moléculas polares como el vapor de agua contenido en el aire o los hidrocarburos. Por tanto, dado que el contenido absoluto en vapor en el aire, en general, es bajo, este se considera no participativo en la metodología. El oxígeno, el nitrógeno y los gases inertes como el argón (gas inerte utilizado en reactores cerrados) son no participativos por ser gases no polares.

En función de la clasificación anterior, tanto el modelo DO como el modelo MC permiten resolver con precisión la radiación en el interior de un reactor solar cuando la fuente de radiación se considera isotrópica (sin dirección) para medios no participativos. Por ello, cuando se conoce la intensidad de radiación incidente en cada pared del reactor (no se necesita indicar la dirección del perfil de radiación incidente) ambos modelos son válidos, presentando DO menor consumo computacional. Sin embargo, cuando el perfil de radiación se tiene en la apertura del reactor (más fácil de medir y de determinar con programas como TracePro® [144]) es necesario el modelo de Monte Carlo puesto que es el único que permite incluir la dirección de los rayos.

En la metodología se considera que el medio no es participativo en los casos de reactores solares abiertos ni en el caso de reactores solares cerrados donde se trabaja con atmósferas inertes. La herramienta ANSYS-CFX ofrece el modelo S2S para resolver la transferencia de radiación entre superficies cuando el medio no es participativo.

3.2.3 Selección de modelos para medio poroso

Previamente, se definen las características principales de un medio poroso y para ello se presentan los siguientes conceptos:

Se define la porosidad (γ) como la fracción de volumen ocupada por los huecos o espacios vacíos. Para la metodología se asume que los huecos que forman el medio poroso están interconectados.

El tamaño de las partículas sólidas esféricas queda perfectamente determinado por el valor de su diámetro. Para partículas no esféricas, se definen varios conceptos, que se consideran a continuación:

- Diámetro esférico equivalente, d_{sph} , es el diámetro de aquella esfera que tiene el mismo volumen que la partícula.
- Esfericidad, Φ_s , es la relación entre la superficie externa de la esfera con el mismo volumen que la partícula y la superficie de la partícula. Estos valores están tabulados para distintas geometrías de partículas.
- Diámetro efectivo, d_{ef} , es el diámetro de aquella esfera que tiene la misma relación superficie/volumen que la partícula considerada. La relación superficie/volumen para una partícula esférica es $6/\text{diámetro efectivo}$. Por tanto, se deduce que $d_{ef} = \Phi_s d_{sph}$.

Normalmente, los conjuntos de partículas no se presentan con tamaños uniformes, sino con una distribución de tamaños. Por tanto, se debe considerar un diámetro medio de partículas.

De acuerdo con lo anterior, en la metodología se asume que todas las partículas son esféricas y presentan un mismo diámetro medio.

En la Figura 42 se presenta el comportamiento ideal de la relación existente entre la caída de presión y la velocidad en sistemas fijos y fluidizados para partículas sólidas uniformes en forma y tamaño.

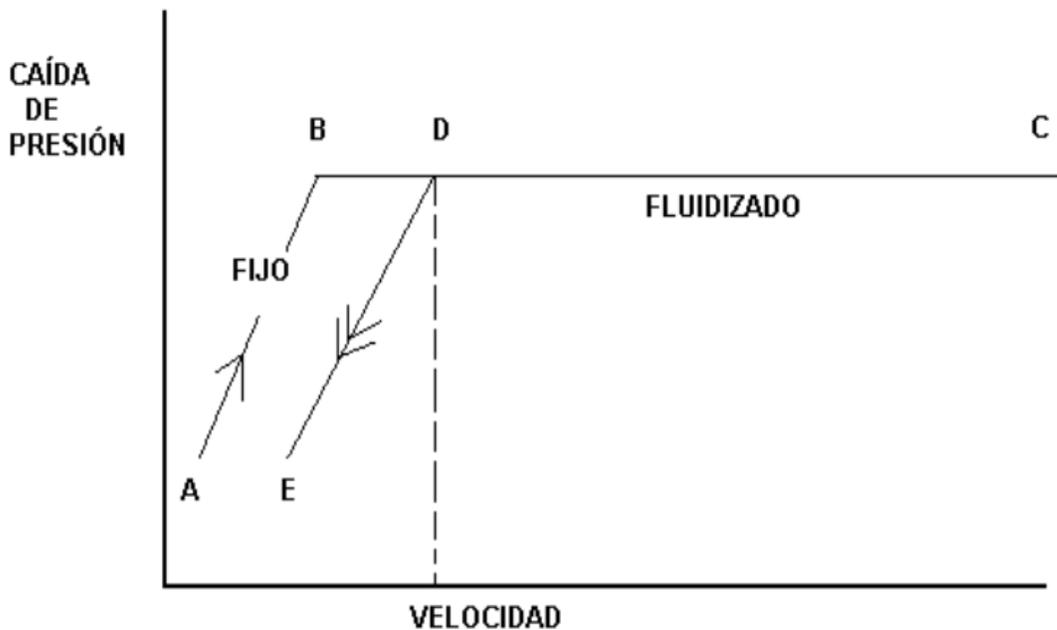


Figura 42. Relación caída de presión – velocidad.

La metodología de la presente Tesis Doctoral se define para lechos fijos, por tanto únicamente se tienen en cuenta las características del tramo AB donde las partículas sólidas descansan unas encima de otras al fondo de una columna.

Para un lecho fijo si se hace circular un fluido a través del mismo, con dirección descendente, no tiene lugar ningún movimiento relativo entre las partículas a menos que la orientación inicial de las mismas sea inestable. Si el flujo es laminar, la caída de presión a través del lecho será directamente proporcional a la velocidad de flujo, aumentando más rápidamente a grandes velocidades.

Considerando un fluido que circula por un lecho fijo de partículas, se define:

- Velocidad superficial, u^+ , como el caudal fluido dividido por la sección del cuerpo geométrico.
- Velocidad media con la que circula un fluido a través de los huecos, u , la cual es mayor que la velocidad superficial. Esta velocidad se puede calcular suponiendo que durante un período de tiempo Δt , ha circulado un volumen $Q \cdot \Delta t$. Este volumen ocupa una distancia ΔL en el lecho, por lo que:

$$u = \frac{\Delta L}{\Delta t} = \frac{S \Delta L}{S \Delta t} = \frac{\text{volumen total}}{S \Delta t} = \frac{\text{volumen del fluido} / \gamma}{S \Delta t} = \frac{(Q \Delta t) / \gamma}{S \Delta t} = \frac{u^+}{\gamma}$$

Donde: S se corresponde con la sección de paso fluida, Q es el caudal volumétrico y Δt se corresponde con un intervalo de tiempo.

El concepto de velocidad de un fluido a través de los huecos es referido a valores medios, debido al gradiente de cantidad de movimiento, velocidad máxima en el centro de los huecos y velocidad nula en las capas adheridas a los sólidos.

3.2.3.1 Modelo de pérdida de carga en lechos fijos: Ley de Darcy

Cuando circula un fluido a baja velocidad u , en régimen laminar, a través de un conjunto de partículas sólidas macizas, las cuales se encuentran en contacto continuo entre sí y en reposo, se establece la Ley de Darcy que relaciona la velocidad media superficial y la presión:

$$u^+ = (u - u_s)(1 - \gamma_s) = -\frac{k}{\mu} \left[\frac{\partial p^+}{\partial x} \right]$$

Donde u^+ es la velocidad superficial media relativa (m/s), k es la permeabilidad del fluido a través de los sólidos (m^2), μ es la viscosidad del fluido ($\text{Pa} \cdot \text{s}$) y p^+ es la presión con contribución gravitatoria del fluido (Pa).

Además, los lechos granulares (diámetro de partícula $> 40 \mu\text{m}$) se consideran lechos incompresibles, es decir, la porosidad no cambia con la presión. Por tanto, para lechos incompresibles, se considera que la fracción de sólidos es constante en todo su seno.

En la circulación de fluidos por el exterior de sólidos se utiliza el módulo de Reynolds de partícula. El cual se define en términos del diámetro de la partícula y la velocidad que existiría en el canal sin el compactado [145]:

$$Re_p = \frac{\rho_f u^+ d_p}{\mu_f}$$

De acuerdo con el Reynolds de partícula, se considera:

- Flujo en régimen laminar cuando $Re_p < 10$
- Flujo en régimen de transición $1000 > Re_p > 10$
- Flujo en régimen turbulento cuando $Re_p > 1000$

En la herramienta CFD, ANSYS – CFX 14.0, se puede seleccionar un modelo de pérdida de carga isotrópica o direccional. En el caso de lechos de partículas tanto para reactores tubulares como volumétrico, el ordenamiento de las partículas hace que la pérdida de carga sea isotrópica. Una vez seleccionado el modelo, la herramienta permite introducir las resistencias a partir de:

- La permeabilidad y el coeficiente de pérdida de resistencia
- Coeficientes lineal y cuadrático de resistencia

Para esta metodología se selecciona incluir el modelo de pérdida de carga isotrópico en función de los coeficientes lineal y cuadrático. A continuación, se presentan las correlaciones para determinar la pérdida de carga en función del régimen de flujo en el interior de un medio poroso, es decir, se presentan las correlaciones entre la pérdida de carga y la velocidad del fluido para régimen laminar, turbulento o de transición.

1. Régimen laminar a través de lechos fijos: Ecuación de Blake – Kozeny

Para lechos fijos incompresibles y considerando como aproximación que los poros que atraviesan el lecho son prácticamente rectos teniendo una sección no necesariamente circular, la pérdida de presión que sufre el fluido al atravesar dicho poro viene dada por la ecuación de Bernoulli:

$$-\frac{\Delta p^+}{\rho} = 2f u^2 \frac{L_{poro}}{D_{eq.poro}}$$

Donde f es el factor de fricción de Fanning, L la longitud del poro y D_{eq} el diámetro equivalente del poro. En las condiciones en las que la ley de Darcy puede aplicarse (régimen laminar, transporte molecular de cantidad de movimiento), Kozeny indica que la variación del factor de fricción viene dado por la ecuación de Hagen – Poiseuille ($f=16/Re$), por tanto:

$$-\frac{\Delta p^+}{L_{poro}} = \frac{32\mu u}{D_{eq.poro}^2}$$

Sustituyendo las siguientes expresiones:

$$D_{eq} = 4 \frac{\text{secc. transv. poros}}{\text{perím. mojado poros}} = 4 \frac{S_{transv\ poros} \frac{h_{lecho}}{V_{lecho}}}{P_{mojado\ poros} \frac{h_{lecho}}{V_{lecho}}} = \frac{4\gamma}{A_{ef}} \left. \vphantom{D_{eq}} \right\} D_{eq} = \frac{4\gamma}{A_v(1-\gamma)}$$

$$A_{ef} = A_v \gamma_s = A_v(1-\gamma)$$

Donde A_v es la superficie específica del material sólido, que representa los m^2 de superficie interna de los poros entre el volumen sólido, A_{ef} es la superficie específica del lecho, γ es la porosidad, h_{lecho} es la altura del lecho y V_{lecho} es el volumen del lecho.

$$u = \frac{u^+}{\gamma}$$

Se obtiene:

$$-\frac{\Delta p^+}{L} = \frac{32\mu u^+}{\gamma \left(\frac{4\gamma}{A_{ef}}\right)^2} = \frac{2A_{ef}^2 \mu u^+}{\gamma^3}$$

Dado que la ecuación de Fanning es únicamente válida en tramos rectos de circulación de fluidos, esta expresión es válida únicamente cuando los poros que atraviesan el lecho son rectos, suposición inicial. Dado que los poros no tienen por qué ser rectos o cruzar el lecho perpendicularmente, Kozeny sustituyó el factor 2 por una constante k obtenida empíricamente, cuyo valor es $25/6$.

Por ello, para lechos fijos incompresibles formados por partículas redondeadas, d_p , el valor de A_{ef} será:

$$A_{ef} = \frac{6}{\Phi_s d_p} (1-\gamma)$$

Y considerando la constante de Kozeny, se obtiene la ecuación conocida como Blake-Kozeny:

$$-\frac{\Delta p^+}{L} = \frac{150(1-\gamma)^2 \mu u^+}{\gamma^3 (\Phi_s d_p)^2}$$

Comparando esta ecuación con la Ley de Darcy, se obtienen las siguientes expresiones para la permeabilidad:

$$k = \frac{\gamma^3(\Phi_s d_p)^2}{150(1-\gamma)^2} \therefore k = \frac{6\gamma^3}{25A_{ef}^2}$$

2. Régimen turbulento a través de lechos fijos: Ecuación de Burke–Plummer

Las ecuaciones anteriores están definidas para un flujo laminar que atraviesa un lecho fijo incompresible, dado que se ha utilizado la ecuación de Hagen – Poiseuille. Este planteamiento es correcto cuando se tienen partículas finas, de forma que los poros formados también son finos y la circulación del fluido en los poros en régimen turbulento produciría unas pérdidas de carga imposibles de superar. Sin embargo, cuando una corriente gaseosa atraviesa un lecho de partículas granulares (partículas de mayor tamaño) puede circular en régimen turbulento al ser los poros también de mayor tamaño y por tanto el valor de la pérdida de carga no puede obtenerse a partir de la ecuación de Blake – Kozeny.

Cuando un fluido circula en régimen turbulento, el factor de fricción es prácticamente constante, tanto más cuanto mayor es la rugosidad. A partir de la ecuación:

$$-\frac{\Delta p^+}{\rho} = 2fu^2 \frac{L_{poro}}{D_{eq.poro}}$$

Realizando una deducción similar a la anterior pero en función de f para régimen turbulento ($Re_p > 1000$) se obtiene:

$$-\frac{\Delta p^+}{L} = 3f \frac{\rho(1-\gamma)u^{+2}}{\Phi_s d_p \gamma^3} \cong 1.75 \frac{\rho(1-\gamma)u^{+2}}{\Phi_s d_p \gamma^3}$$

En la cual se ha sustituido el valor de dicho factor encontrado experimentalmente, obteniéndose la ecuación de Burke – Plummer.

3. Régimen de transición a través de lechos fijos: Ecuación de Ergun

En estas condiciones, lechos incompresibles, se han obtenido expresiones para la obtención de la pérdida de carga que sufre un fluido al atravesar un lecho de partículas cuando este circula en régimen laminar ($Re_p < 10$ Ecuación Blake – Kozeny) y turbulento ($Re_p > 1000$ Ecuación Burke – Plummer). Ergun realizó una deducción para la obtener una expresión que fuese válida para el régimen de transición ($10 < Re_p < 1000$) suponiendo que el factor de fricción es una combinación lineal de:

$$f = \frac{16}{Re} \frac{25}{6} \frac{1}{2} + \frac{1.75}{3}$$

La ecuación que se obtiene para este factor de fricción es:

$$-\frac{\Delta p^+}{L} = 150 \frac{(1-\gamma)^2}{\gamma^3(\Phi_s d_p)^2} \mu u^+ + 1.75 \frac{(1-\gamma)}{\gamma^3 \Phi_s d_p} \rho u^{+2}$$

Conocida como la ecuación de Ergun y válida para cualquier Re_p dado que:

- A caudales de circulación bajos, el segundo término de la ecuación de Ergun es despreciable y la pérdida de presión es directamente proporcional a la velocidad superficial, indicando que el régimen de circulación es laminar.
- Para caudales de circulación elevados, el segundo término es mayor, indicando que el régimen de circulación es turbulento.

Por tanto, la ecuación de Ergun puede utilizarse para el cálculo de la pérdida de carga que experimenta un fluido al atravesar un lecho poroso incompresible independientemente del régimen de circulación.

Para incluir la pérdida de carga del medio poroso en el modelo en función de los coeficientes lineal y cuadrático se tiene:

$$-\frac{\Delta p^+}{L} = C_1 u^+ + C_2 u^{+2}$$

Donde:

$$C_1 = \frac{\mu}{K_{perm}} = 150 \frac{\mu(1-\gamma)^2}{\gamma^3(\Phi_s d_p)^2} \quad \text{y} \quad C_2 = K_{loss} \frac{\rho}{2} = 3.5 \frac{(1-\gamma)}{\gamma^3 \Phi_s d_p} \frac{\rho}{2}$$

De forma que, una vez calculado el Reynolds se selecciona la correlación correspondiente al régimen de circulación del fluido a través del medio poroso correspondiente. Los coeficientes correspondientes a las distintas correlaciones en función del régimen del flujo se resumen en la Tabla 18:

Régimen	Coefficiente resistencia lineal	Coefficiente resistencia cuadrático
Laminar	$C_1 = \frac{\mu}{K_{perm}} = 150 \frac{\mu(1-\gamma)^2}{\gamma^3(\Phi_s d_p)^2}$	$C_2 = K_{loss} \frac{\rho}{2} \approx \text{despreciable}$
Turbulento	$C_1 = \frac{\mu}{K_{perm}} \approx \text{despreciable}$	$C_2 = K_{loss} \frac{\rho}{2} = 3.5 \frac{(1-\gamma)}{\gamma^3 \Phi_s d_p} \frac{\rho}{2}$
Transición	$C_1 = \frac{\mu}{K_{perm}} = 150 \frac{\mu(1-\gamma)^2}{\gamma^3(\Phi_s d_p)^2}$	$C_2 = K_{loss} \frac{\rho}{2} = 3.5 \frac{(1-\gamma)}{\gamma^3 \Phi_s d_p} \frac{\rho}{2}$

Tabla 18. Coeficientes modelado de pérdida de carga medio poroso.

En el caso de que el reactor trabaje para diferentes flujos, la pérdida de carga puede modelarse de acuerdo a la correlación de flujo de transición, dado que a caudales de circulación bajos, el segundo término de la ecuación de Ergun es despreciable, y la pérdida de presión es directamente proporcional a la velocidad

superficial, indicando que el régimen de circulación es laminar (rozamientos viscosos). Por el contrario, para caudales altos, el segundo término es mayor, indicando que el régimen de circulación es turbulento y la pérdida de carga es proporcional a la velocidad al cuadrado.

3.2.3.2 Modelado de transferencia de calor en medios porosos

Para resolver el balance energético entre la parte fluida y la sólida del medio poroso se resuelve la ecuación:

$$Q_{fs} = A_{fs}h(T_s - T_f) (W/m^3)$$

Donde:

- A_{fs} es la densidad de área intersticial (área efectiva) (m^{-1})
- h es el coeficiente de transferencia de calor entre el fluido y las partículas ($W/m^2 \cdot K$). Para dicha transferencia (fluido y lecho de partículas esféricas) se analizan las correlaciones presentadas en el estudio realizado por Wen y Ding [131] para el modelado 2D de transferencia de calor en lechos empacados y la correlación de Wakao [146]. se realiza una revisión bibliográfica de las correlaciones de Nusselt (Tabla 19).

	Correlación	Nu*	h*	Rango validez
Wakao	$Nu = 2 + 1.1Pr^{1/3}Re_p^{0.6}$	18.4	398.3	$15 < Re_p < 8500$
Calderbank	$Nu = 4.21Re_p^{0.365}$	23.3	503.5	$14 < D_t/d_p < 28$
Yagi	$Nu = 15 + 0.029Re_p$	18.2	392	$3.9 < D_t/d_p < 51$
De Wasch	$Nu = 12.5 + 0.048Re_p$	17.7	382.7	$D_t/d_p \sim 17$
Li	$Nu = 0.17Re_p^{0.79}$	6.9	149.2	$3 < D_t/d_p < 5$
Derimel	$Nu = 0.430Re_p^{0.633}$	8.3	180.7	$5.6 < D_t/d_p < 6.6$

Tabla 19. Comparación de correlaciones de Nusselt para medios porosos.

* Los cálculos se realizan para $Re_p=108.8$, donde el la corriente fluida es nitrógeno (0.001737 kg/s y temperatura media de 1500 K) y $D_t/d_p=13.3$ ($d_t \equiv$ diámetro del tubo; $d_p \equiv$ diámetro de la partícula).

Se observa, que en los casos de las correlaciones de Li y Derimel los valores de los coeficientes de película se desvían de las otras correlaciones, esto se debe principalmente a que el caso presentado ($d_t/d_p=13.3$) no se encuentra dentro del rango de validez de dichas correlaciones. También ocurre en menor medida para la correlación de Calderbank dado que tampoco se encuentra en el rango de validez.

En el modelado de la transferencia de calor entre el fluido y el sólido del medio poroso empacado, debe seleccionarse la correlación de la Tabla 19, de la literatura u obtenida experimentalmente que mejor se ajuste a las características del diseño del reactor.

3.3 DESARROLLO DE LA METODOLOGÍA

El objetivo de la presente Tesis Doctoral es el desarrollo de una metodología para el diseño y/u optimización térmica de reactores solares tubulares y volumétricos con técnicas CFD. Como se indica en el apartado anterior el software comercial en el que se implementa la metodología es ANSYS-CFX 14.0. Además, para ilustrar los resultados de las distintas etapas de la metodología se presenta un caso base académico de reactor solar tubular para ciclo termoquímico de ferrita.

La metodología de la Tesis Doctoral para el diseño/optimización térmica de un reactor solar (tubular o volumétrico) con herramientas CFD se presenta en la Figura 43 y se divide en dos grandes bloques:

- El primero de ellos se denomina diseño inicial, de forma que una vez que se selecciona el proceso termoquímico solar (temperatura mínima requerida) y la potencia necesaria (perfil de radiación incidente), se realiza una revisión bibliográfica para seleccionar una geometría inicial. Este bloque finaliza con una geometría inicial a introducir en el modelo CFD que se desarrolla en el siguiente bloque. La selección de la geometría inicial no es objetivo de la Tesis Doctoral.
- El segundo bloque se denomina desarrollo de la herramienta CFD. Este bloque contiene el objetivo principal de la Tesis Doctoral, el cual consiste en desarrollar una metodología detallada para el diseño térmico de un reactor solar con técnicas CFD. Este bloque se divide en tres apartados: diseño de la cavidad, diseño del reactor y análisis paramétrico, los cuales se tratan de forma independiente. Con el objetivo de reducir el número de iteraciones y el coste computacional de las mismas, estas tres secciones se optimizan por separado.

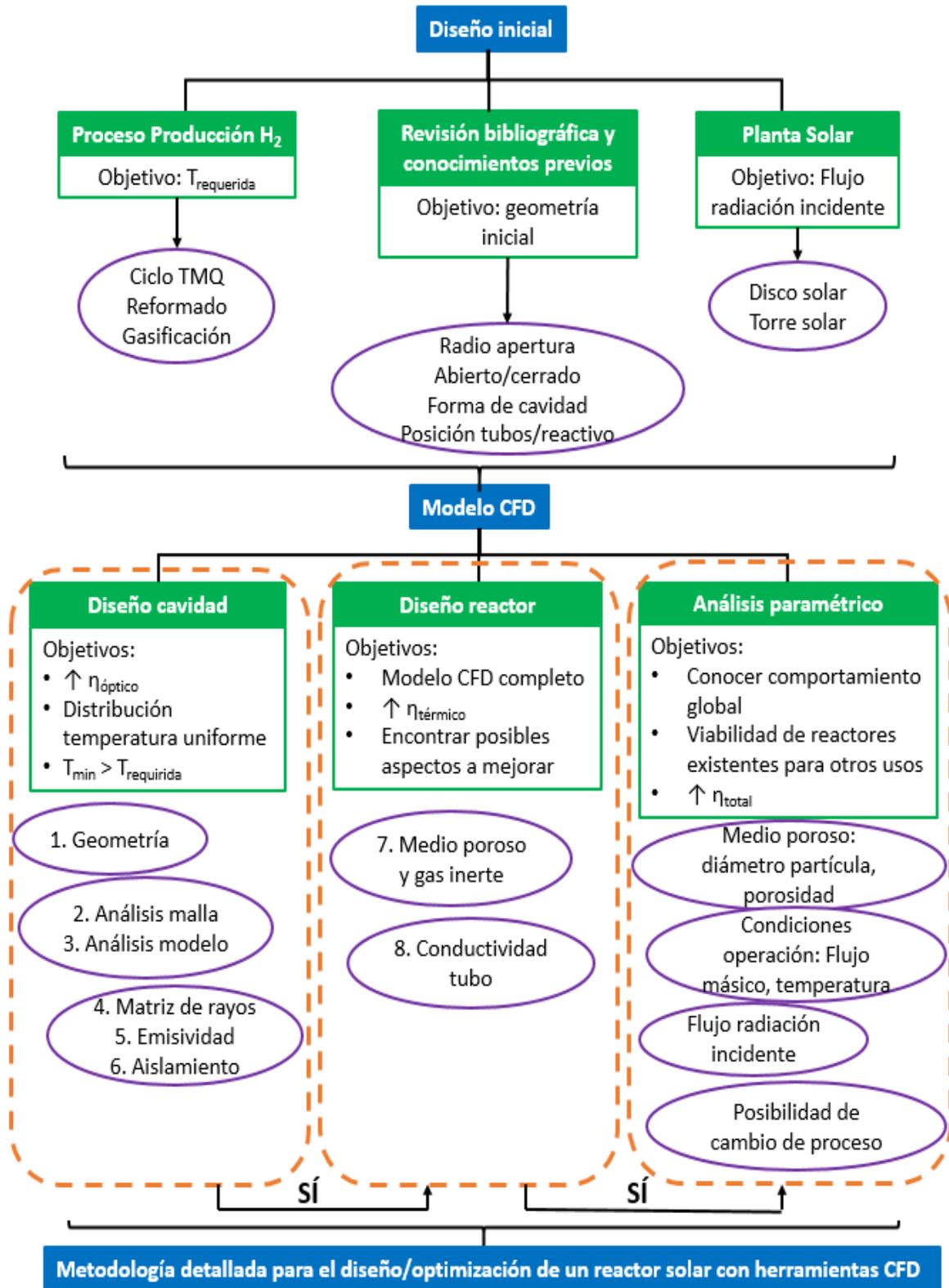


Figura 43. Esquema de la metodología para el diseño CFD de un reactor solar.

En el bloque de diseño inicial, la planta solar y el proceso termoquímico deben ser definidos para determinar los parámetros iniciales del diseño. Es necesario conocer el tipo de instalación solar para determinar la potencia disponible y el perfil de distribución de radiación en el foco de la misma (apertura del reactor solar). Por otro lado, seleccionar el proceso termoquímico permite conocer las temperaturas necesarias en el reactor. Ambos parámetros permiten determinar la cantidad de metal de óxido no volátil necesario para el ciclo termoquímico o catalizador requerido para el reformado (en función de la potencia disponible o de la cantidad de hidrógeno/gas de síntesis a producir) y con ello, un tamaño inicial del reactor. Con estos datos de entrada se determinan los parámetros iniciales de la geometría inicial, tales como el radio de apertura de la cavidad, forma de la cavidad, la posición de los tubos (en caso de reactor tubular), la necesidad de incluir ventana de cuarzo o no, etc. Este estudio se presenta en el apartado 3.3.1.

El bloque de modelado CFD de la metodología permite evaluar de forma local la distribución de los flujos de calor radiante y los perfiles de temperatura y obtener a su vez una herramienta de diseño incluyendo los distintos fenómenos involucrados. Este bloque (diseño CFD) comienza con la definición de la geometría y concluye con el análisis térmico completo del reactor solar. Para ello, se divide en tres secciones: diseño de la cavidad, diseño del reactor y análisis paramétrico, las cuales son secuenciales de forma que el diseño del reactor se comienza una vez se tiene un diseño final de la cavidad, al igual que en modelo matemático de Palumbo [147] para el diseño de un reactor químico solar de ciclo termoquímico de óxido de zinc.

El diseño de la cavidad está enfocado a optimizar la eficiencia óptica, alcanzando una temperatura mínima mayor que la requerida por el proceso termoquímico seleccionado de acuerdo con el cálculo que se presenta al inicio del apartado 3.3.2.1. Esta sección incluye las fases desde la generación de la geometría inicial hasta incluir las condiciones de contorno del modelo de la cavidad. En esta etapa se realizan la mayor parte de las iteraciones de la metodología para conseguir la temperatura requerida en la superficie de los tubos de la forma más uniforme posible. Una descripción detallada de los distintos pasos a seguir se presenta en el apartado 3.3.2.1

El diseño del reactor solar comienza una vez finalizado el diseño de la cavidad (se alcanzan las temperaturas requeridas con una distribución uniforme y un rendimiento óptico adecuado). Los principales objetivos de esta sección son completar el balance térmico global, encontrar los puntos fríos/calientes y alcanzar el volumen de reacción necesario desde el punto de vista térmico. Para ello, se incluye en el modelo el espesor de los tubos (en caso de reactor tubular) y

un medio poroso como lecho catalítico o material del ciclo termoquímico. Además, se incluyen las condiciones de operación del gas de arrastre: caudal y temperatura. Esta sección se detalla en el apartado 3.3.2.2.

La última sección de la metodología consiste en un análisis paramétrico de las principales variables con el objetivo de optimizar el diseño del reactor solar y obtener un mapa de operación del reactor final. En este apartado, se analizan variables tales como: el diámetro de las partículas del medio poroso, las condiciones de operación del gas de arrastre, la potencia de radiación incidente, etc. Esta sección se detalla en el apartado 3.3.2.3.

3.3.1 Definición del diseño inicial

De acuerdo con las consideraciones previas y la potencia solar disponible o la cantidad de combustible solar que se quiere producir, se realiza la primera fase de la metodología la cual consiste en la selección una geometría inicial. Esta fase no es objeto de la Tesis Doctoral, pero deben presentarse algunos aspectos para determinar una geometría inicial cuyos principales parámetros no difieran en gran medida de los finales que se obtendrán tras la optimización, para reducir así el número de iteraciones necesarias en el diseño.

En función de la instalación seleccionada, torre o disco, ha de analizarse:

- Disco: la potencia solar concentrada disponible en el foco del disco en el cual se situará la apertura del reactor.
- Torre: en caso de tener una torre de mayor potencia a la requerida para el proceso requerido, se analiza la combinación de heliostatos disponibles que generan el perfil de radiación con la intensidad requerida de la forma más uniforme posible.

Es importante definir una geometría inicial cuyo volumen, radio de apertura, y posición del receptor sean similares a los de la geometría final para reducir el número de iteraciones en el diseño. El objetivo de un diseño inicial simplificado consiste en garantizar las condiciones de temperatura requerida por el ciclo termoquímico que se llevará a cabo en su interior en la parte indicada como receptor. Para ello, se tienen en cuenta las siguientes consideraciones:

- La eficiencia térmica del reactor solar aumenta cuanto menores son las temperaturas ya que se reducen las pérdidas por radiación y convección.
- La conversión química aumenta cuanto mayor son las temperaturas.

Debido a lo anterior es fundamental desarrollar un diseño optimizado para alcanzar las condiciones requeridas por el proceso termoquímico reduciendo las

pérdidas térmicas del equipo. Dicho diseño se consigue a través de la metodología CFD que se desarrolla en la Tesis Doctoral.

Los aspectos y variables fundamentales de diseño se describen a continuación:

3.3.1.1 Radio de apertura

En 1993 Steinfeld y Schubnell [148] realizan un análisis matemático el cual validan experimentalmente, cuyo resultado es poder determinar el radio óptimo de la apertura para reducir las pérdidas y alcanzar la temperatura máxima en el interior de la cavidad asumiendo una distribución Gaussiana del perfil de radiación para reactores solares de alta temperatura (> 1000 K).

$$r_{opt} = \left[-2\mu^2 \ln \left(\frac{\sigma T^4}{F_{peak}} \right) \right]^{0.5}$$

Donde:

- $0 < \sigma T^4 < F_{peak}$
- Potencia total procedente del concentrador $\equiv P_{in} = 2\pi\mu^2 F_{peak}$ (W)
- $F_{peak} \equiv$ Intensidad de radiación concentrada
- $\mu \equiv$ Desviación estándar, este factor considera las pérdidas por desbordamiento (%)
- $T \equiv$ Temperatura en la superficie del receptor (K)
- $\sigma \equiv$ Constante de Stefan – Boltzman (W/K^4m^2)

Como resultado de este estudio se obtiene un radio de apertura óptimo en función de la radiación incidente, para reducir las pérdidas radiantes y convectivas que presentan un fuerte efecto en el rendimiento global del diseño de un reactor solar.

Por otro lado, Reddy [149] propone una relación óptima de área de la apertura y área de receptor de 8 para una cavidad semicilíndrica para la cual se minimizan las pérdidas por convección libre para un rango de temperaturas de operación entre 400 K y 700 K.

En la metodología de diseño de la cavidad de un reactor solar se propone tomar el radio calculado por Steinfeld como dato de partida del radio de apertura para la geometría inicial para todos los tipos de reactores solares.

3.3.1.2 Incluir o no ventana de cuarzo

En la literatura existen distintas opiniones en cuanto a incluir una ventana de cuarzo o no para cerrar la cavidad en reactores tubulares. Los reactores volumétricos y de partículas operan en atmósferas inertes y a presión por lo forzosamente deben incluir una ventana de cuarzo en la apertura para cerrar la

cavidad. En los reactores tubulares, la radiación incidente está desacoplada de la reacción química por lo que no es necesario trabajar en las condiciones anteriormente mencionadas y por tanto, se pueden encontrar reactores con y sin ventana de cuarzo.

En este contexto, Uhlig [150] propone como estrategia para reducir las pérdidas por convección incluir una ventana transparente en la apertura para todos los reactores. Sin embargo, Steinfeld [151] indica que los reactores tubulares deberían ser abiertos dado que la ganancia en términos de eficiencia térmica o ratio de conversión es pequeña al trabajar con una atmósfera inerte. Por otro lado, debe tenerse en cuenta que pequeñas deposiciones sobre la ventana reducen la eficiencia del sistema por suciedad, debido a este inconveniente, en algunos diseños se incluye la entrada de gas inerte de forma que barra la ventana cuarzo evitando el ensuciamiento de la misma [110], [111], [124], [125].

A la hora de incluir la ventana de cuarzo en los modelos de simulación CFD, en la Figura 44 se observa que la transmisividad del cuarzo para longitud de onda corta (radiación solar) es prácticamente transparente con un valor superior a 0.9 mientras que para onda larga es prácticamente nula.

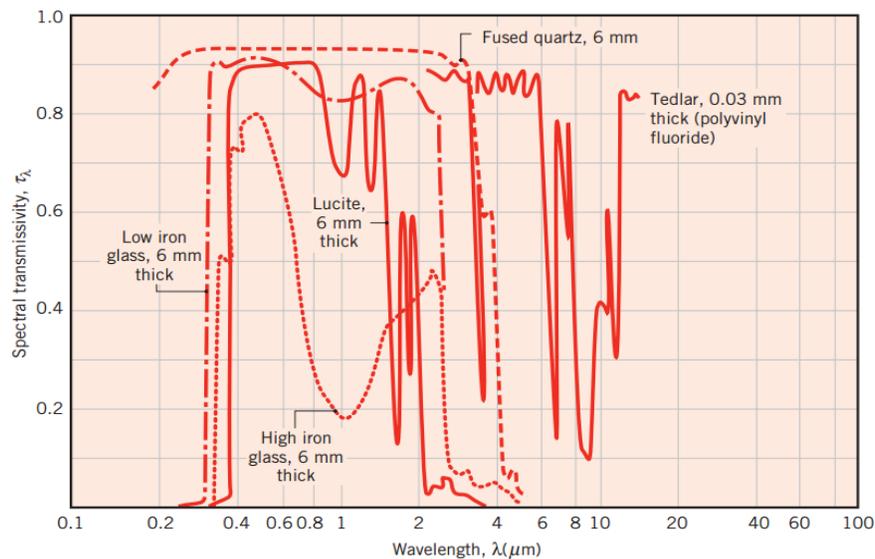


Figura 44. Transmisividad del cuarzo [138].

Tras analizar el efecto de ventana de cuarzo en el reactor, se concluye que para el diseño inicial de reactores volumétricos esta siempre se incluye, mientras que para el caso de reactores tubulares esta se incluirá en función de las pérdidas por convección del sistema las cuales dependen del ángulo de inclinación de la cavidad solar, del radio de apertura, etc. Por tanto para el caso de reactores tubulares, se incluirá o no la ventana en función de los resultados obtenidos de pérdidas convectivas en el desarrollo de la metodología.

3.3.1.3 Forma de la cavidad

Existen diversos artículos en la literatura donde se analiza el efecto de la geometría de la cavidad en la distribución de temperaturas.

Reddy [149] realiza un estudio de las pérdidas por convección de la cavidad para tres geometrías de receptor situados en una instalación de disco (Ver Figura 45).

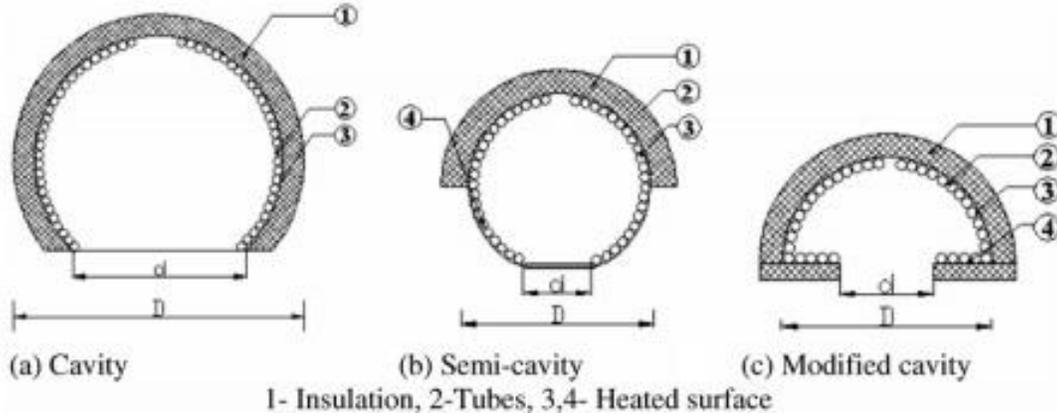


Figura 45. Geometrías analizadas por Reddy en el estudio de pérdidas por convección [149].

Además, Reddy analiza la influencia de la relación del área de la apertura y el área del receptor. Para el caso de la tercera geometría estudiada (c) se obtienen las menores pérdidas por convección cuando dicha relación es igual a 8.

El estudio realizado por He-Ping Tan [152] presenta una metodología y un modelo para determinar la geometría óptima de una cavidad en cuanto a la forma de la misma y el radio de apertura con el objetivo de obtener un perfil de radiación incidente uniforme. Para ello, utiliza el método de Monte Carlo y compara los resultados 2D obtenidos con cálculos analíticos. A continuación se presentan los resultados del estudio obtenidos:

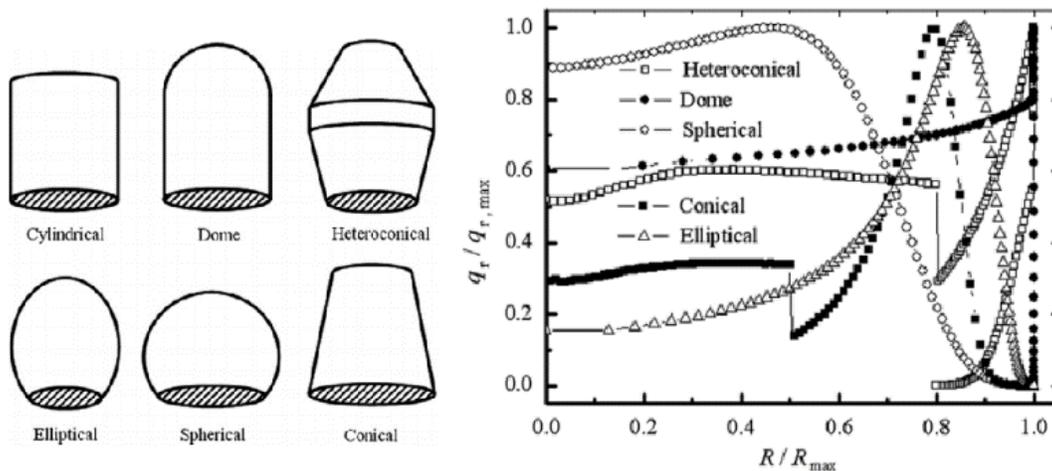


Figura 46. Resultados para el diseño de una cavidad de reactor solar de disco [152].

He-Ping Tan analiza cinco geometrías de cavidad simple de acuerdo con la uniformidad de flujo de radiación de la pared (Ver Figura 46). Los resultados obtenidos indican que la geometría de la cavidad tiene un efecto significativo en la distribución global del flujo de calor. Basándose en el concepto de flujo de calor equivalente, el receptor esférico con relativamente buen rendimiento de radiación proporciona un punto de partida para la optimización de la forma. Durante el proceso de optimización según la metodología descrita se obtiene que la forma de la cavidad óptima para un reactor solar de disco es una geometría con forma de pera invertida donde se alcanza una distribución casi uniforme.

Por otro lado, Ozalp [119] analiza la uniformidad de temperatura de una cavidad esférica y una cavidad cilíndrica. Analizando dichas geometrías de reactor solar de cracking de metano, se obtiene una eficiencia superior en el caso esférico que el cilíndrico dado que la continua curvatura de la cavidad esférica reduce las pérdidas por reflexiones.

Por tanto, se propone como geometría inicial, una geometría sencilla que de acuerdo con los estudios anteriores reduzca las pérdidas por reflexiones y se obtenga un perfil de distribución de la radiación uniforme. Esta geometría es cilíndrica para el caso de reactores de disco dado que la radiación incide desde una de las bases del mismo y semicilíndrica para un reactor de torre donde la radiación incide a través de un lateral.

3.3.1.4 Tamaño cavidad (transitorios)

Reducir el tamaño de la cavidad permite reducir los transitorios térmicos. Es por ello, que se debe seleccionar la cavidad de menor tamaño posible con el objetivo de reducir el tiempo de calentamiento del equipo. La influencia de este parámetro no se analiza en esta metodología dado que el diseño del reactor se realiza para el estado estable.

3.3.1.5 Inclinación de la cavidad

Otro factor que debe tenerse en cuenta a la hora de definir la geometría inicial para cuantificar las pérdidas por convección y actuar en caso de diseño de reactores solares para instalaciones de torre nuevas (se construyen a la vez que el reactor) es el ángulo de inclinación del reactor solar. El ángulo de inclinación se corresponde con el ángulo formado por la normal a la apertura de la cavidad con la horizontal, el cual se representa en la Figura 47.



Figura 47. Definición de ángulo de inclinación del reactor solar. Izq: viento de frente ($\alpha=0^\circ$); Drch: viento de lado ($\alpha=90^\circ$).

El ángulo de inclinación de un reactor solar de disco viene definido por la propia instalación de disco parabólico, por lo que no puede contemplarse como un factor de diseño del reactor solar. En el caso de una instalación de torre solar existente, este parámetro puede ser modificado de acuerdo a que en general la potencia instalada es muy superior a la utilizada en aplicaciones de producción de hidrógeno de forma que se suele incluir en la torre una cavidad nueva a una altura inferior. Sin embargo, en el caso de una nueva construcción de torre, el ángulo de inclinación de la cavidad puede ajustarse, en la medida de lo posible, para reducir las pérdidas por convección.

Reddy analiza el efecto de la inclinación de la cavidad en su estudio [149] sin considerar el efecto del viento (convección natural). El estudio concluye que las pérdidas por convección son elevadas para un ángulo de inclinación de 0° y que estas disminuyen a medida que aumenta el ángulo hasta alcanzar los 90° debido a que el estancamiento del aire en el interior de la cavidad aumenta. En la Figura 48 se representan las pérdidas por convección para distintos ángulos de inclinación y temperaturas de ensayo.

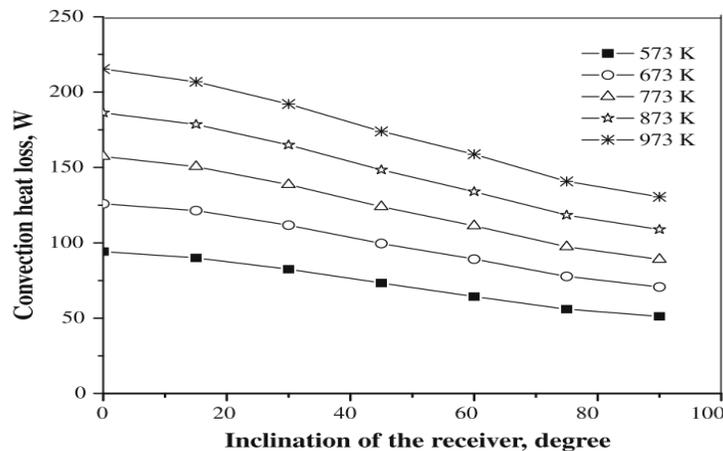


Figura 48. Resultados de pérdidas convectivas en función del ángulo de inclinación del reactor para distintas temperaturas [149].

Por otro lado, el viento afecta directamente a las pérdidas convectivas de los reactores solares aunque en la presente metodología no se incluya. El efecto del viento depende principalmente de la inclinación de la cavidad y de la forma de la misma. Las principales conclusiones de los estudios del viento de la literatura [153], [154] son:

- Las pérdidas convectivas disminuyen a medida que aumenta el ángulo de inclinación.
- A medida que aumenta la velocidad del viento (Re^2/Gr aumenta), las pérdidas convectivas dependerán en menor medida del ángulo de inclinación. En la Figura 49, se observa que para Re^2/Gr igual a 1.5 el ángulo de inclinación comienza a ser despreciable (cuando es mayor que 0°).
- En función de la velocidad y dirección del viento puede encontrarse un mínimo de pérdidas convectivas para ángulos de inclinación pequeños ($< 45^\circ$), esto se debe a que cuando las velocidades no son muy elevadas el viento actúa como barrera reduciendo la convección interior de la cavidad. Sin embargo, cuando el ángulo de inclinación es alto incluso para velocidades bajas, la zona estancada disminuirá mientras que la zona de convección se hace más grande obteniendo como resultado un aumento de la pérdida de calor por convección (ver Figura 49).

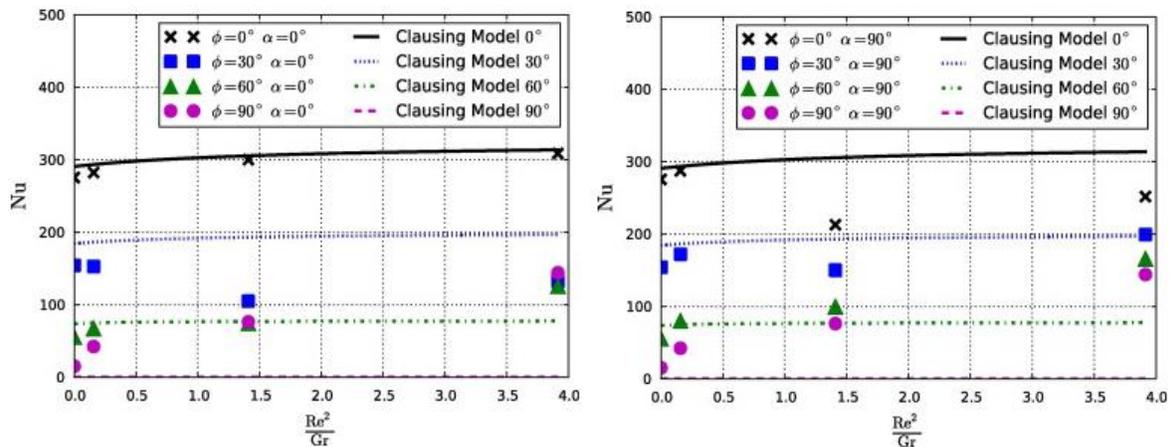


Figura 49. Efecto de la dirección y velocidad del viento y el ángulo de inclinación de la cavidad sobre las pérdidas convectivas [153].

Para la geometría inicial de un reactor de torre de nueva construcción, se recomienda un ángulo de inclinación superior a 0° con el objetivo de reducir las pérdidas convectivas. Para esta metodología, se recomienda un ángulo de inclinación de 30° , debido a que la zona de aire estancado es estable a partir de este ángulo de inclinación (de acuerdo con las conclusiones de [149]). Además, a velocidades bajas, para 30° se reducen en gran medida las pérdidas convectivas con respecto a un ángulo de 0° para ambas direcciones del viento estudiadas. Sin

embargo, a velocidades elevadas las pérdidas dependen débilmente del ángulo de inclinación (salvo en el caso de 0°) [153].

En caso de que se disponga de una base de datos del viento, el efecto del mismo puede incluirse en la metodología en la fase de diseño de la cavidad. Para este análisis se propone seguir el estudio realizado por Flesch [153], donde se incluye la cavidad en un ambiente exterior con las siguientes dimensiones:

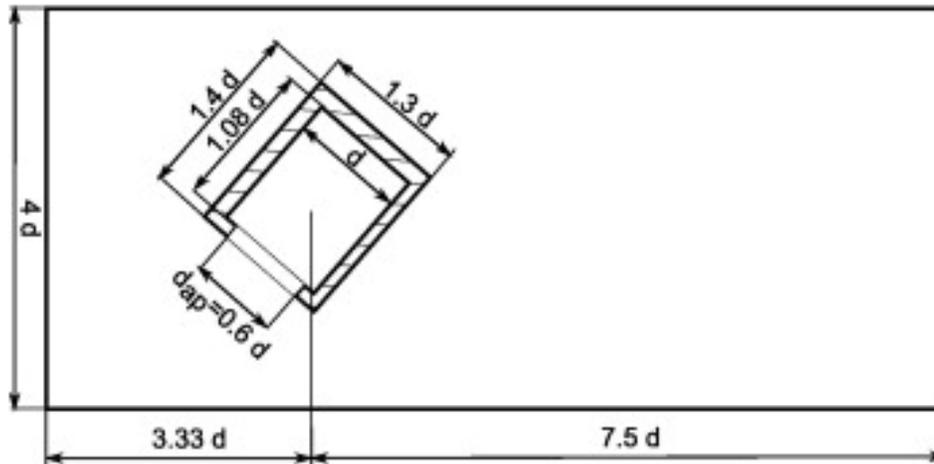


Figura 50. Dimensiones del ambiente exterior con respecto a la cavidad del reactor para análisis del viento [153].

3.3.1.6 Posición del receptor

En la metodología que se describe, se define como receptor la superficie sobre la cual incide la radiación que va a ser utilizada en la reacción química. En el caso de los reactores volumétricos esta superficie se corresponde con aquella que está formada por el lecho catalítico o de ciclo termoquímico, mientras que en los reactores tubulares, se considera receptor la superficie de los tubos. El receptor debe situarse en la zona de la cavidad donde las temperaturas son superiores a las requeridas por el ciclo termoquímico. En el caso de un reactor volumétrico, el reactivo se situará en la pared sobre la que incide la radiación concentrada. En el caso de un reactor tubular, la ubicación de los tubos es más compleja debido a que deben ocupar la zona donde se alcanzan mayores temperaturas evitando que unos tubos penalicen a otros.

En el estudio realizado por J. Martinek [155] se presenta un análisis para la configuración de un reactor volumétrico en el cual el reactivo se dispone en tubos situados en la cavidad realizado con Fluent 6.3.26. Se comparan los resultados obtenidos para las distintas configuraciones donde se incluyen los fenómenos de intercambio de calor, masa, reacción química y turbulencia en modelos 3D analizando la eficiencia total en cada caso. La eficiencia se define como:

$$\eta = \eta_1 \cdot \eta_2 = \frac{Q_{reacción}}{Q_{tubos}} \frac{Q_{tubos}}{Q_{solar}}$$

En la Figura 51 se muestran las distintas configuraciones de tubos analizadas, además se estudia el radio de la cavidad, la altura de la misma y las siguientes condiciones de operación: potencia solar, relación de S/C, cantidad de Carbono total y caudal de gas inerte.

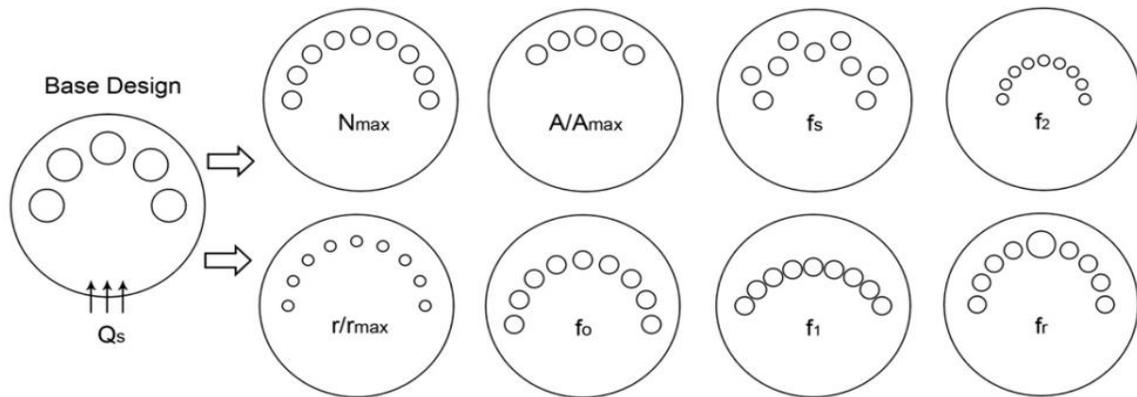


Figura 51. Configuración de tubos para reactor multitubular [155].

En este estudio, Martinek concluye que los factores con mayor influencia sobre el rendimiento total del reactor son: por un lado, la potencia solar en cuanto a las condiciones de operación debido que al aumentar la potencia incidente aumenta el rendimiento; y por otro lado, el radio de la cavidad en cuanto a la geometría global del reactor, disminuyendo la eficiencia a medida que este aumenta. En cuanto a la distribución de los tubos en el interior de la cavidad los factores con mayor efecto son el número de tubos y f_2 , el cual es definido como la relación entre el radio de disposición de los tubos y el radio máximo. El diseño del reactor presenta mejores rendimientos cuanto menor es el número de tubos y cuanto menor es f_2 , es decir, cuanto más se desplazan los tubos hacia el centro de la cavidad. Los factores que menos impacto presentan para un mismo radio de apertura son la altura de la cavidad y f_0 , relación del desplazamiento de los tubos y el radio original.

Para el diseño inicial de la geometría de un reactor solar tubular, se proponen las distintas geometrías atendiendo al tipo de instalación solar.

Los reactores solares de instalaciones de torre presentan mayores dimensiones por lo que en general permiten el uso de tubos comerciales (altura y diámetro). De acuerdo con Martinek, la altura de los tubos es un factor de impacto menor por lo que puede fijarse en función de los catálogos disponibles. El efecto del diámetro, la posición y el número de tubos presentan un efecto mayor por lo que deben tener en cuenta en el diseño de la cavidad tubular. Como punto de partida

para esta metodología, se propone la disposición de los tubos como el primer parámetro para el diseño de la cavidad tubular. Para ello, se selecciona un diámetro comercial para los tubos compatible con el reactivo o el ciclo termoquímico seleccionado que junto con la altura permiten obtener un número de tubos fijo para el diseño inicial (fijado en función de la cantidad de hidrógeno a producir). De esta forma, la disposición de los tubos en la cavidad es el parámetro que se deja libre para el diseño. Para la geometría inicial de la posición de los tubos en la cavidad que se desarrolla en la metodología, se propone incluir los tubos en hileras en configuración cruzada. En caso, de que el número de hileras obtenido sea superior a 3, se propone aumentar el diámetro de los tubos para reducir el número y evitar que se penalicen unos a otros.

La mayoría de los reactores solares instalados en instalaciones de disco son reactores volumétricos (ver apartado 2.3), sin embargo, aunque en menor medida, existen reactores tubulares para instalación de disco [95]. Los reactores solares para instalaciones de disco suelen ser de menor tamaño que los reactores solares para torre y consecuentemente se obtiene una producción de hidrógeno menor. En la Figura 52, se muestran los esquemas del diseño de reactores tubulares solares de disco, los tubos suelen presentarse de forma embobinada, tanto alrededor de la cavidad como en forma de toroide.

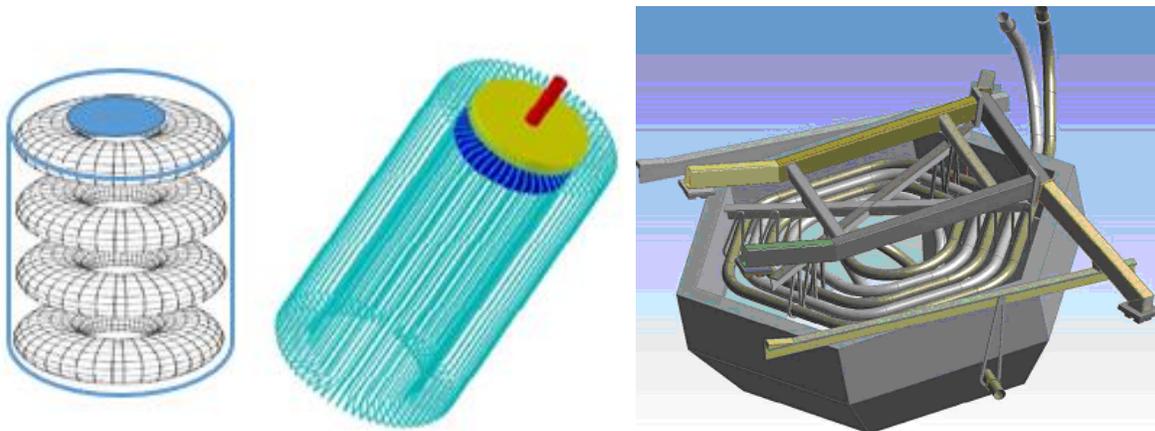


Figura 52. Esquemas de reactores tubulares para instalaciones de disco parabólico (figura derecha [88]).

3.3.1.7 Conclusiones del diseño inicial

A la vista de los apartados anteriores, se observa la complejidad de la selección del diseño inicial de la cavidad del reactor, la cual difiere en función de la instalación (torre o disco), del tipo de reactor solar, etc.

Las pérdidas por radiación se corresponden con las más elevadas en el cómputo total de pérdidas térmicas de un reactor solar debido a las altas temperaturas de operación de los procesos termoquímicos. Desde este punto de vista, los

parámetros que más afectan al diseño son: el radio de apertura y la forma de la cavidad. Por tanto debe considerarse:

- Un radio de apertura pequeño para reducir las reflexiones que escapan de la cavidad por la apertura. Existe un óptimo dado que éste debe ser suficientemente grande para dejar pasar la radiación incidente.
- Evitar las esquinas para reducir las pérdidas por reflexión. En la literatura se identifican como mejores geometrías para reducir las pérdidas radiantes las cavidades semicilíndricas para los reactores tubulares de torre y las cavidades cilíndricas para los reactores tubulares de disco o volumétricos. La geometría inicial debe presentar la mayor relación de área de receptor por volumen de receptor para aumentar el área de intercambio sin penalizar a la incidencia de radiación solar.

Desde el punto de vista de las pérdidas por convección, los parámetros que afectan al diseño de la cavidad son: el diámetro de apertura, la forma de la cavidad, el tamaño de la cavidad, el ángulo de inclinación y el viento (particularmente para reactores solares de torre). Teniendo en cuenta que las pérdidas por convección suponen un incremento de las pérdidas térmicas totales entre un 5 y un 15 % de las pérdidas radiantes [154], se propone:

- Reducir el radio de apertura de la cavidad en el caso de reactores abiertos, para evitar la recirculación del aire en la misma.
- Reducir el tamaño de la cavidad, de forma que la distribución de temperaturas en la misma sea más homogénea.
- En el caso de reactores tubulares de torre (cuando sea posible en la instalación), aumentar la inclinación del reactor, de forma que se reduce el efecto del viento además de la convección natural en los casos en los casos que el viento no se considere. En estos casos se propone un ángulo de inclinación de 30 °.

Para los reactores tubulares se propone la siguiente disposición de los tubos:

- En el caso de reactores tubulares de torre donde el tamaño de la cavidad es mayor, se propone incluir los tubos en hileras a tresbolillo, de forma que el número de hileras no exceda de 3 para evitar que unos tubos penalicen a otros. En estos casos, se propone aumentar el diámetro de los tubos reduciendo así el número total.
- En el diseño de reactores tubulares solares de disco, se propone incluir los tubos de forma embobinada, tanto alrededor del interior de la cavidad como en forma de toroide [94], [95], [99].

Estas geometrías se corresponden con el punto de partida de las aplicaciones de la Tesis Doctoral que se describen en el apartado 4.2.

3.3.2 Desarrollo del modelo CFD

En este apartado se describe el segundo bloque de la metodología cuyo objetivo principal consiste en modelar los principales fenómenos térmicos (conducción, convección y radiación) a tener en cuenta para el diseño de un reactor solar.

El diseño de un reactor solar es un proceso iterativo con respecto a cada uno de los bloques que se definen con un alto coste computacional. Por ello, el desarrollo de esta fase de la metodología se define de forma que el coste computacional y el número de iteraciones necesarias para el diseño sean mínimos.

Para incluir el modelo completo del reactor solar reduciendo las iteraciones y el coste computacional, el bloque de desarrollo del modelo CFD de la metodología se divide en tres fases que se detallan en los siguientes apartados y se presentaron en la Figura 43.

3.3.2.1 Diseño de la cavidad

Las simulaciones que se llevan a cabo en esta etapa de la metodología tienen como objetivo obtener la distribución de temperatura más uniforme posible en la superficie receptora reduciendo las pérdidas por radiación y convección en el interior de la cavidad (eficiencia óptica) para una temperatura superficial mínima requerida.

Para reducir el coste computación de esta parte del diseño, se propone que las simulaciones se centren exclusivamente en la cavidad, es decir, no se incluirá en el caso de reactor tubular el interior de los tubos y en el caso de reactor volumétrico el lecho poroso. Para considerar en esta etapa de la metodología el intercambio térmico que se lleva a cabo en el interior del reactor, se tiene en cuenta que la temperatura del proceso termoquímico que se lleve a cabo en él, (temperatura de la fase de oxidación para ciclos termoquímicos o temperatura de reacción para procesos de reformado), se corresponde con la temperatura final requerida en el lecho reactivo (T_{req}). Para poder desacoplar en la metodología el diseño de la cavidad del diseño del reactor, se calcula la temperatura mínima requerida en la superficie de los tubos (T_s) para el diseño de la cavidad de acuerdo con el balance de energía en el interior del tubo:

$$Q_{CD} = Q_{gas\ de\ arrastre} + Q_{reacción}$$

Donde: Q_{CD} se corresponde con el calor de conducción en el espesor del tubo, $Q_{gas\ de\ arrastre}$ con el calor necesario para calentar el gas de arrastre desde la temperatura de entrada hasta la temperatura requerida y $Q_{reacción}$ con el calor necesario para llevar a cabo la reacción.

En la Figura 53 se presenta el balance completo el cual puede ser utilizado para estimar la temperatura superficial exterior del tubo (T_s). Sin embargo, el balance se simplifica si se considera que:

- En el caso de que el lecho reactivo este formado por partículas esféricas, las resistencias de contacto son muy altas debido a que el contacto entre las partículas y la superficie interior de tubo ($R_{C;t-p}$) o entre partículas ($R_{C;p-p}$) es puntual.
- En los casos en los que el fluido circule en régimen de transición o turbulento, la resistencia por convección entre las partículas y el gas ($R_{CV;p-g}$) es pequeña debido a que al estar en paralelo su suma hace que sea menor que la resistencia por convección entre el tubo y el fluido. De esta forma la temperatura de las partículas y del gas serán prácticamente la misma.

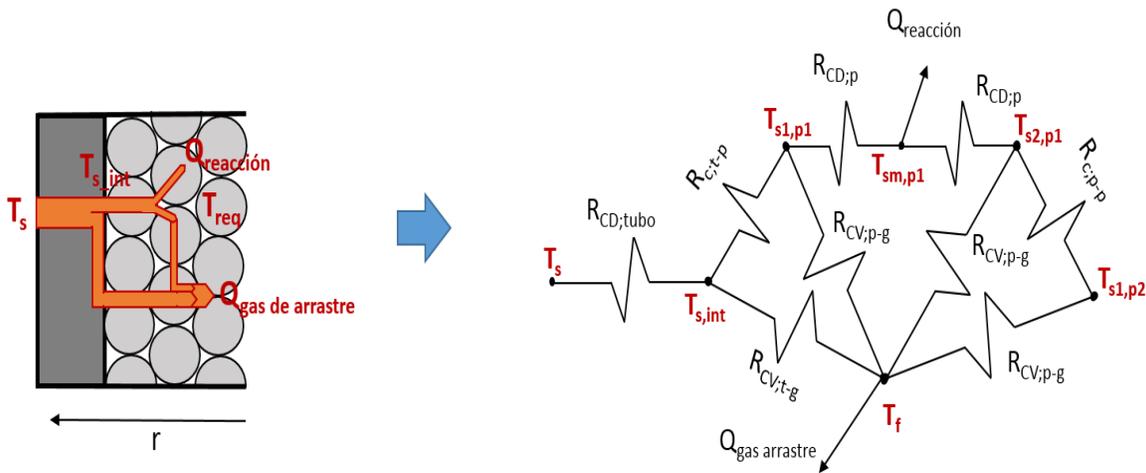


Figura 53. Balance de energía interior del tubo.

Donde: T_s es la temperatura de la superficie exterior del tubo, $T_{s,int}$ es la temperatura de la superficie interior del tubo, T_f es la temperatura del fluido, $T_{s1,p}$ es la temperatura de la superficie 1 de la partícula, $T_{sm,p}$ es la temperatura media de la partícula, $T_{s2,p}$ es la temperatura de la superficie 2 de la partícula y T_{req} es la temperatura requerida por el proceso. Por otro lado, $Q_{reacción}$ se corresponde con el calor necesario para la reacción, $Q_{gas-arrastre}$ con el calor aportado al gas de arrastre, $R_{CD;p}$ es la resistencia por conducción en la partícula y $R_{CD;tubo}$ es la resistencia por conducción en el tubo.

De acuerdo con las simplificaciones, el balance energético simplificado es:

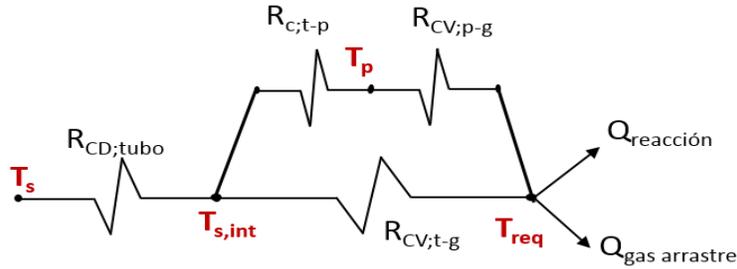


Figura 54. Esquema simplificado del cálculo de la temperatura requerida en diseño de cavidad.

Por tanto, la temperatura superficial mínima en el exterior del tubo se puede estimar a partir de la siguiente ecuación:

$$\frac{T_s - T_{req}}{R_{CD;tubo} + \left[\frac{1}{R_{CV;t-g}} + \frac{1}{R_{cont;tp} + R_{CV;p-g}} \right]^{-1}} = Q_{gas\ de\ arrastre} + Q_{reacción}$$

$$T_s = (Q_{gas\ de\ arrastre} + Q_{reacción}) \cdot \left(R_{CD;tubo} + \left[\frac{1}{R_{CV;t-g}} + \frac{1}{R_{cont;tp} + R_{CV;p-g}} \right]^{-1} \right) + T_{req}$$

Donde:

- T_s es la temperatura superficial mínima para la fase de diseño de la cavidad del reactor solar.
- $Q_{gas\ de\ arrastre} = m_{ga} c_{p,ga} (T_{out} - T_{in})$ se corresponde con el calor necesario para calentar el gas de arrastre (m_{ga}) desde la temperatura de entrada T_{in} hasta la de salida T_{out} .
- $Q_{reacción} = \left(\frac{M_{proceso\ TMQ}}{\tau_{reacción}} \right) \Delta H_{reacción}$ es el calor que se debe aportar al sistema para que se lleve a cabo la reacción endotérmica, el cual se calcula en función de la masa del material utilizado en el proceso termoquímico, $M_{proceso\ TMQ}$, el tiempo de reacción ($\tau_{reacción}$) y la entalpía de reacción ($\Delta H_{reacción}$).
- $R_{tubo} = \frac{\ln\left(\frac{r_{ext}}{r_{int}}\right)}{2\pi L k_t}$ es la resistencia del tubo, depende de los radios interior (r_{int}) y exterior (r_{ext}) del tubo, de la altura (L) del mismo y de la conductividad del tubo (k_t).
- $R_{CV;t-g} = \frac{1}{h_{tg} A_{t,CV}}$ es la resistencia convectiva entre el gas de arrastre y el tubo, la cual se calcula en función del coeficiente de película (h_{tg}). h_{tg} se asume como el valor medio entre el coeficiente convectivo de película de medio poroso (apartado 3.2.3.2) y el coeficiente convectivo de película interior a un conducto de sección circular. Por último, el área del tubo que

afecta al intercambio convectivo ($A_{t;CV} = 2\pi r_{int}L\gamma_s$) donde γ_s es la porosidad en la superficie del tubo.

- $R_{cont;tp} = R_{contacto}/A_{t;CD}$ es la resistencia de contacto entre el tubo y las partículas. En este caso el área afectada por el intercambio por conducción es ($A_{t;CD} = 2\pi r_{int}L(1 - \gamma_s)$).

Se observa que la temperatura superficial de los tubos depende del gas de arrastre, del proceso termoquímico, del material del tubo y de la resistencia de contacto.

Para el caso base que ilustra la metodología, se necesita una temperatura mínima superficial de 1502 K siendo la temperatura requerida por el ciclo termoquímico de 1450 K.

La etapa de diseño de la cavidad basada en CFD es iterativa y finaliza cuando se obtiene una distribución de temperatura uniforme en el receptor cuya temperatura superficial mínima es superior a la requerida por el proceso termoquímico seleccionado más el calor necesario para calentar el fluido y llevar a cabo la reacción química endotérmica. Una vez finalizada esta etapa se obtiene como resultado un diseño cerrado de la geometría de la cavidad.

Para ello, la metodología del diseño de la cavidad se divide en 6 pasos que a su vez se pueden clasificar en 3 apartados (ver Figura 55).

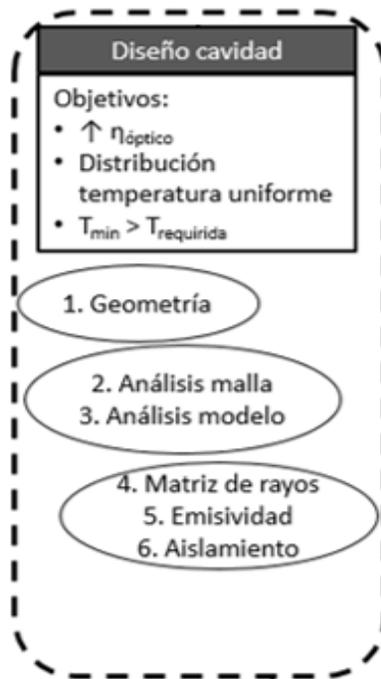


Figura 55. Etapas de la metodología del bloque de diseño de la cavidad en CFD.

En esta etapa, además de introducir los modelos y parámetros necesarios para simular la transferencia de calor, se busca una distribución de temperatura uniforme y alcanzar una temperatura mínima. El primer apartado consiste en la definición de la geometría para su simulación (paso 1), el segundo apartado, consiste en el análisis de malla el cual está ligado a los modelos de transferencia de masa y energía que se implementan (paso 2 y 3) y por último, se incluyen condiciones de contorno específicas que permiten evaluar con precisión la distribución de temperaturas (paso 4, 5 y 6).

1. Definición de la geometría utilizada para la metodología

El primer apartado de la metodología consiste en la generación de la geometría en función de la simulación que se desea realizar. La herramienta de simulación ANSYS-CFX permite importar geometrías/mallas desde distintos programas de diseño gráfico. Para el caso base de esta metodología y las aplicaciones que se presentan en el apartado 4.2, se utiliza el mallador propio de ANSYS (ICEM-CFD) y la geometría se realiza en el mismo programa. Sin embargo, pueden importarse formatos tales como *step*, *iges*, *stl* o *catia*.

En función de la simulación que se quiera llevar a cabo deben tenerse en cuenta los siguientes aspectos en la geometría:

- Para el análisis del diseño de la cavidad, se incluye como volumen de control la propia cavidad sin incluir los volúmenes sólidos (espesor de los tubos, medio poroso).
- Para el análisis del diseño de reactor (segunda etapa de la metodología), se incluye la geometría final de la etapa de diseño de la cavidad junto con los volúmenes sólidos.
- Para el análisis del viento, en caso de tener una base de datos del mismo, se necesita incluir el ambiente exterior a la cavidad. En este caso se proponen las relaciones presentadas por Flesch [153] y descritas en el apartado 3.3.1.5 para definir las dimensiones del ambiente exterior a la cavidad.

La geometría del caso base, que se presenta para ilustrar el desarrollo de la metodología, es una geometría sencilla que permite su reproducibilidad con un coste computación de simulación inferior a una geometría de reactor real. En la Figura 56 se muestra la geometría del caso base, la cual se realiza en ICEM-CFD 14.0. Esta geometría consiste en una cavidad cúbica de 1mx1mx1m, con una apertura de radio 7.5 cm. A 5 cm de la pared opuesta a la apertura se sitúa un tubo de diámetro exterior 5 cm y espesor 0.5 cm.

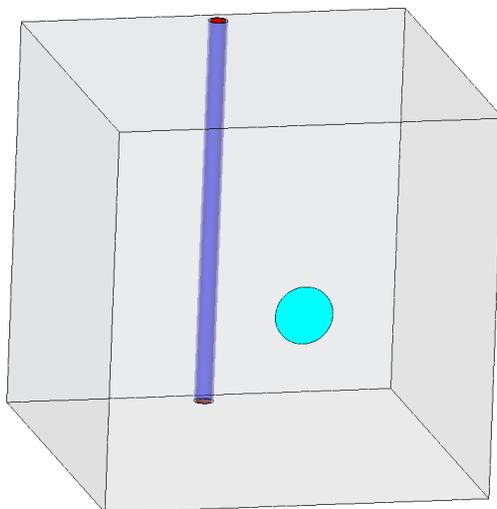


Figura 56. Geometría definida para metodología.

2. Mallado computacional y análisis de malla

La discretización del volumen de control se realiza mediante la generación del mallado computacional. Los elementos que forman la malla pueden ser de tipo hexaedros, tetraedros, etc. o combinaciones de ellos. Los elementos hexaédricos presentan generalmente mejores prestaciones en la precisión de resultados [156], por lo que, si la geometría lo permite, se prefiere este tipo de elementos.

A la hora de realizar el mallado de un reactor solar se debe seguir la guía de buenas prácticas [156], [157] y se deben tener en cuenta los modelos de transferencia de calor seleccionados:

Para resolver el intercambio radiante, en el apartado 3.2.1 se propone utilizar el modelo de MC. Además, se considera medio no participativo por lo que el intercambio es entre superficies (S2S). Por ello, desde el punto de vista de transferencia de calor por radiación, la malla en el volumen de la cavidad puede ser de mayor tamaño mientras que en las paredes se requiere una mayor precisión de malla debido principalmente a dos aspectos: en primer lugar, a que el intercambio radiante se produce entre superficies; y en segundo lugar, a la relación de aspecto entre la malla de la cavidad y de los tubos (en reactores tubulares) o medio poroso (en reactores volumétricos). El mallado de la cavidad se puede realizar con elementos hexaédricos o tetraédricos en aquellos casos donde la complejidad de las geometrías de los reactores dificulte el mallado hexaédrico.

El efecto de la convección presenta mayor importancia en reactores solares abiertos debido a la convección natural que se produce por el movimiento del aire en el interior de la cavidad o convección forzada cuando se introduce el viento y que está asociado con las pérdidas convectivas. Para considerar los efectos de la

convección natural, se tienen en cuenta los siguientes aspectos: se necesita una malla fina en la apertura en el caso de que no exista ventana de cuarzo, por otro lado, el volumen debe tener un tamaño de malla tal, que permita evaluar la convección natural que se produce en el interior de la cavidad. Para tener en cuenta este fenómeno y obtener resultados satisfactorios debe prestarse atención a la capa límite. Para ello, se debe incluir una malla prismática en las paredes (ver detalle en la Figura 57 para el caso base).

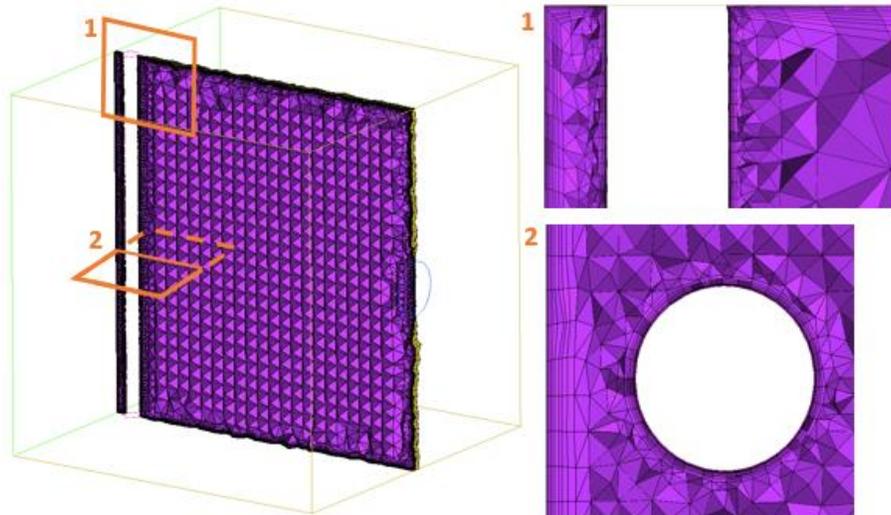


Figura 57. Detalle de la malla en las paredes para resolver la capa límite.

En el caso base, se consideran 10 capas de prismas en todas las paredes, con un espesor total que varía en función de la geometría del diseño, de acuerdo con la guía de buenas prácticas [156], [157].

Atendiendo a los fenómenos radiantes y convectivos debe alcanzarse una solución de compromiso para el tamaño de malla en el volumen de la cavidad.

Durante el mallado de la cavidad debe tenerse en cuenta que cuando se modele el reactor (apartado 3.3.2.2) se generará una interfaz entre la cavidad y el espesor del tubo para reactores tubulares y el lecho reactivo para reactores volumétricos a través de la cual se producirá el intercambio térmico.

De acuerdo al intercambio radiante, debe considerarse una relación de aspecto entre la malla del tubo/lecho reactivo y la malla de la cavidad (ratio entre los tamaños de ambas mallas en la interfaz) debido a que una elevada relación de aspecto puede provocar dificultades de convergencia o imprecisión en los resultados [156]. En casos extremos donde la relación de aspecto es alta, se deben resolver con doble precisión para reducir los errores de cálculo cometidos aunque esto supone un aumento del coste computacional. En esta metodología se recomienda una relación de aspecto 1:1 para resolver de forma precisa (Ver Figura 58).

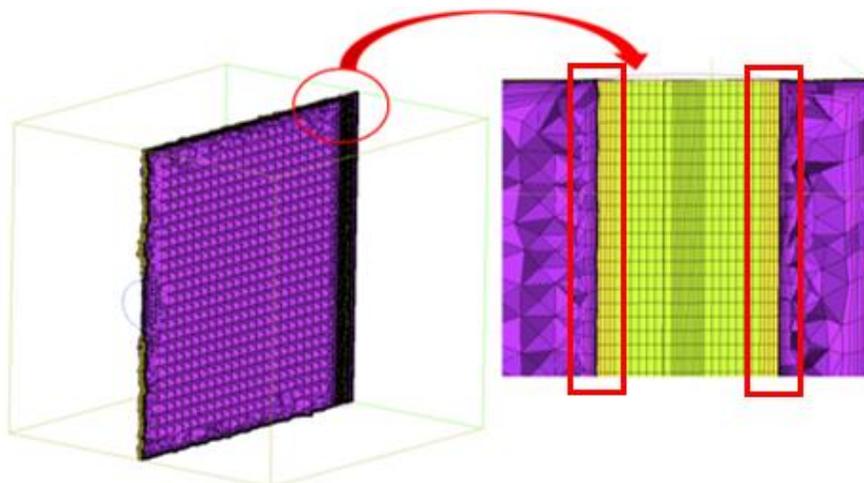


Figura 58. Relación de aspecto entre malla de la cavidad y tubo.

Por otro lado, toda simulación resuelta con herramientas de fluidodinámica computacional conlleva asociada un análisis de sensibilidad de la malla [156]. El objetivo de este análisis es obtener resultados de los fenómenos involucrados independientemente del mallado. La malla del volumen de control debe optimizarse para obtener el menor número de elementos/nodos (menor coste computacional) y el mayor número de elementos/nodos (mayor precisión de resultados). Este hecho plantea obtener como solución de compromiso del análisis de sensibilidad una malla con el menor número de elementos/nodos para la cual los resultados sean precisos, es decir, independientes de la misma.

Esta fase supone un esfuerzo inicial elevado, dada la necesidad de realizar distintas pruebas de malla para obtener un resultado fiable. Sin embargo, a largo plazo, supone reducir el coste computacional, y por tanto temporal, de las simulaciones. Por ello, se considera una fase imprescindible para la resolución de problemas de cualquier índole con simulaciones fluidodinámicas y aún en mayor medida cuando se realizan numerosas simulaciones, como es el caso del diseño de un equipo o la optimización de sus condiciones de operación.

Teniendo en cuenta las consideraciones anteriores, se realiza el análisis de malla para la geometría del caso base. Se comparan 3 mallas las cuales presentan un ratio mínimo de 1.3 por cada dimensión en el número de nodos. El número de nodos y elementos para cada malla se indican en la Tabla 20:

	Apertura Nº Nodos	Tubo Nº Nodos	Total Nº Nodos	Total Nº Elementos
Malla 1	392	3954	96758	429861
Malla 2	1245	11317	197572	752366
Malla 3	2032	24786	379138	1345349

Tabla 20. Características de mallas (nº de nodos y nº de elementos).

A continuación, en la Figura 59 se muestran los resultados de temperatura considerando el mismo perfil de radiación incidente en los cuatro casos. Para ello, se ha impuesto un flujo normal a la apertura de 675 kW/m^2 constante.

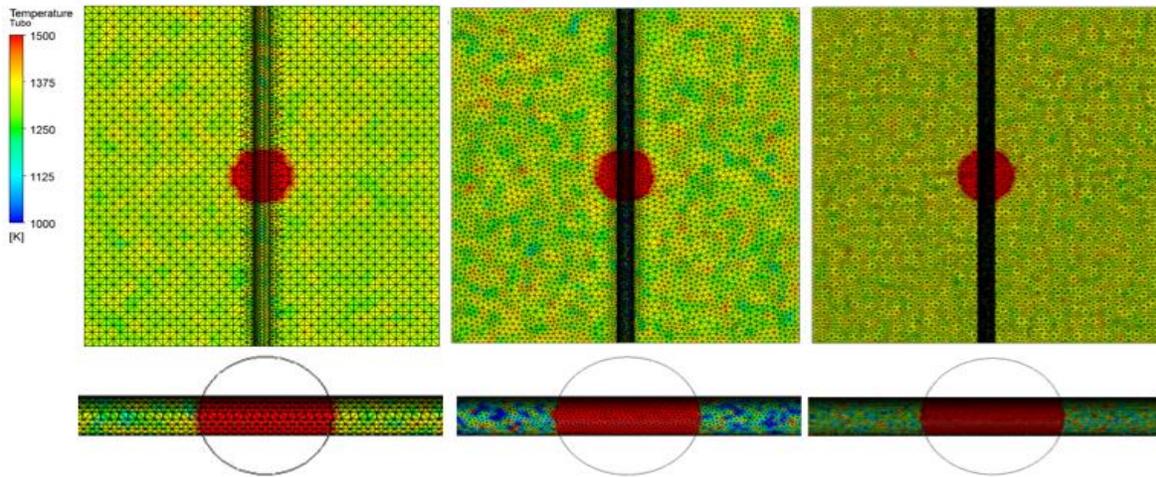


Figura 59. Distribución de temperatura y mallado del tubo-receptor. De izq a derch: Malla 1; Malla 2; Malla 3.

En la Figura 59 se observa que el número de histories es insuficiente debido a que hay gradientes de temperaturas elevados de un nodo a otro próximos entre sí. Este efecto es menos acentuado en la malla 1 debido a que al presentar un menor número de nodos, su tamaño es mayor y los valores medios suavizan la distribución. Sin embargo, esto supone una dependencia con la malla.

En la Figura 60 y Figura 61 se comparan los resultados de distribución de temperatura en la línea media vertical del tubo (línea roja) y en la línea media horizontal del receptor (línea azul):

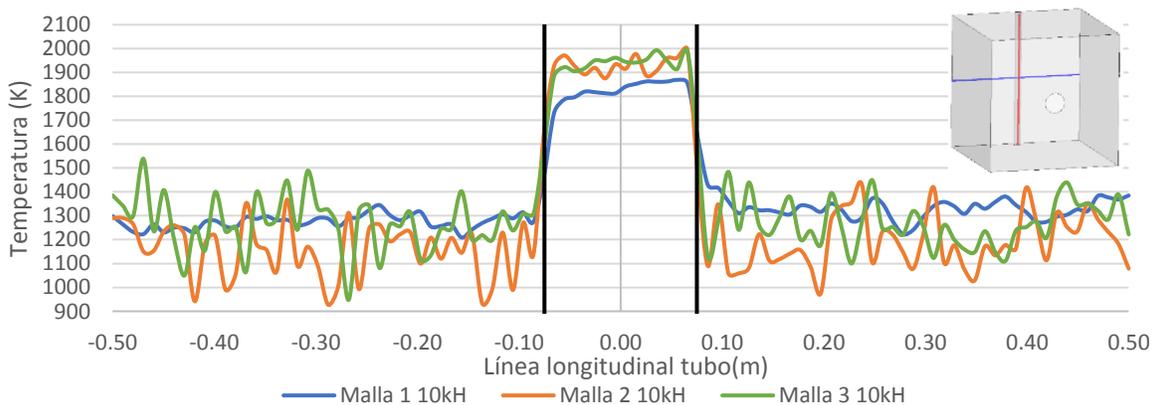


Figura 60. Resultados de temperatura del análisis de malla: línea longitudinal (roja).

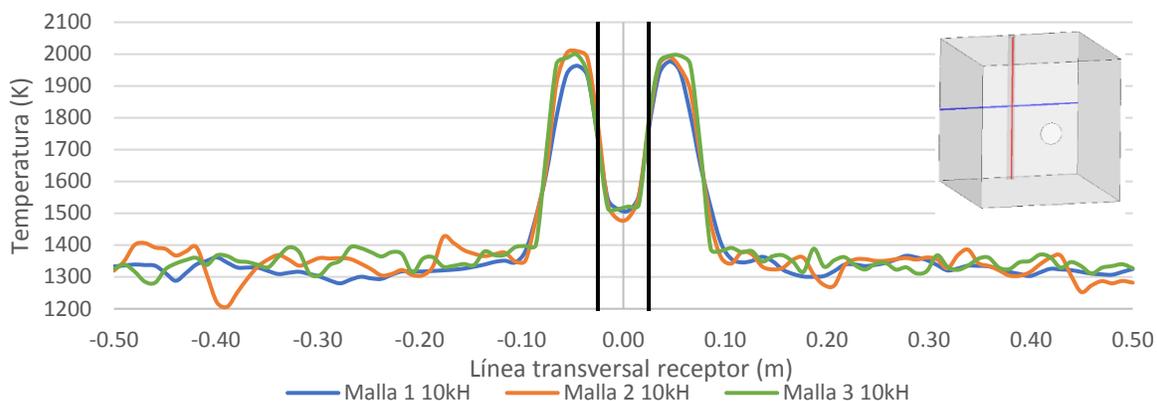


Figura 61. Resultados de temperatura del análisis de malla: línea transversal (azul).

Las líneas verticales representan el diámetro de apertura en la figura superior (línea longitudinal sobre el tubo) y diámetro del tubo en la figura inferior (línea transversal sobre el receptor). Además, en la Figura 61, también se observan dichos gradientes de temperatura en las oscilaciones de la temperatura.

Las simulaciones presentadas en este análisis de malla se realizan con el número de histories del modelo por defecto (10000). Se observan mayores oscilaciones en los casos en los que las mallas son más finas (mayor número de nodos) debido a que la relación entre número de histories y número de nodos es menor.

Todo ello, conlleva a realizar el análisis de malla una vez ajustado el parámetro del modelo de radiación MC denominado número de histories. Cabe destacar que para los casos donde el perfil de radiación se considera isotrópico, el modelo Discrete Ordinate presenta un menor coste computacional y en este caso el parámetro de ajuste se denomina número de rayos cuyo valor por defecto es 8.

El análisis de malla del tubo o lecho reactivo para reactores tubulares o volumétricos respectivamente, se realiza en la etapa de diseño del reactor.

3. Análisis número de histories

El número de histories se define como el número de rayos total utilizados por el método de MC para resolver el intercambio radiante del sistema. Este es el principal parámetro que la herramienta CFD permite ajustar en cuanto al modelo de radiación cuando se resuelve por MC, por tanto es importante obtener un valor del mismo de acuerdo con las recomendaciones. En otros modelos de radiación, otro parámetro a tener en cuenta es la energía umbral de los rayos (parámetro que permite controlar las reflexiones que se producen en el interior de la cavidad en función de la energía del rayo). Para el método de MC, este parámetro no se puede variar y tiene un valor de 5000 W.

El objetivo de este apartado consiste en identificar el valor mínimo de número de histories (modelo MC) para obtener resultados independientes del mismo con el menor coste computacional independientemente de la malla seleccionadas. El valor por defecto es 10000 histories, muy inferior a los obtenidos cuando se garantizan las recomendaciones [158], donde las soluciones únicamente son válidas en caso de que los siguientes parámetros cumplan los criterios definidos:

- % SD Sur: este parámetro representa la desviación estándar normalizada del flujo radiante sobre las superficies, de manera que cuanto menor es este valor más representativo es el valor medio del conjunto. Para estos análisis se considera una solución aceptable y precisa cuando el parámetro de control % SD se encuentra por debajo de 30 % de acuerdo con la guía teórica de modelado de ANSYS-CFX [135]. En aquellos casos donde el nivel de ruido es alto, puede reducirse este parámetro aún más aumentando el número de histories y consecuentemente, el coste computacional.
- % Loss: representa el porcentaje de histories perdidos debido a errores de cálculo iterativo o a errores de superposición de interfaces. Valores de este parámetro superiores al 5 % son indicación de un error de modelado.
- % Imbal: este parámetro representa el porcentaje de error en el balance de energía radiante. Este parámetro debe ser menor a un 1 %, de lo contrario los resultados no son fiables.

Toda solución que no cumpla con las afirmaciones anteriormente indicadas no se debe considerar como un resultado fiable.

En la metodología que se describe en la presente Tesis Doctoral, la condición de contorno para incluir la radiación incidente se encuentra en la apertura, a diferencia de otros estudios donde se incluye directamente en las paredes de interés ([110], [111], [115], [117]).

El número de histories necesario (% SD=30) para cada malla se presenta en la Tabla 21.

Número de histories (x10⁶)	
Malla 1	20
Malla 2	65
Malla 3	170

Tabla 21. Número de histories mínimo para cada malla.

* El número de histories correspondiente a la malla 3 es el máximo permitido computacionalmente, para 8 procesadores en paralelo. El % SD alcanzado es de 40 %.

Se observa que a medida que aumenta el tamaño de la malla (mayor número de nodos), aumenta el número de histories necesarios para obtener una solución

precisa frente a la radiación. Este factor, hace necesario analizar el tamaño de malla junto con el número de histories para obtener una solución óptima en cuanto al coste computacional que sea precisa.

En la Figura 62 se presenta la distribución de temperatura para cada malla una vez alcanzado un % SD igual a 30 %.

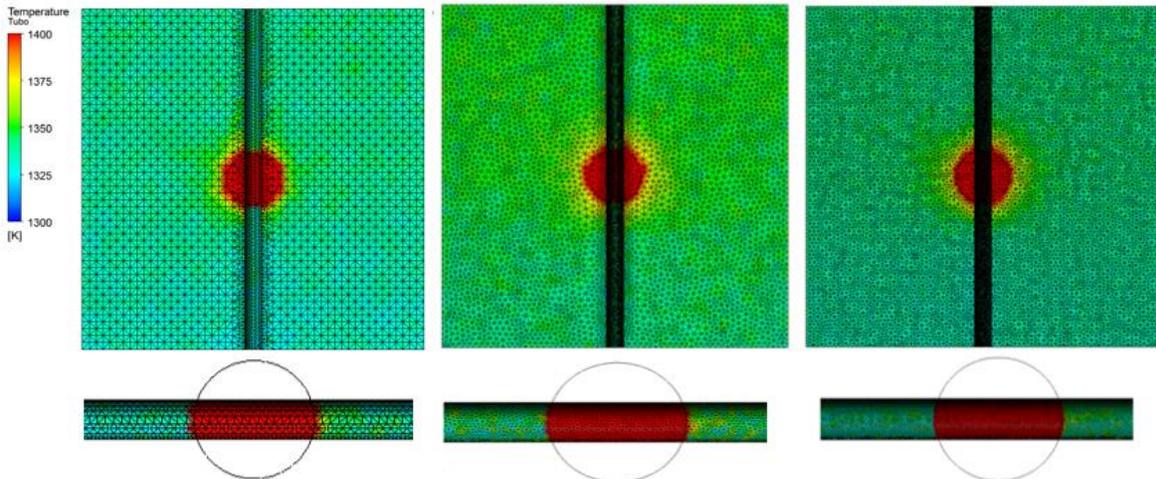


Figura 62. Distribución de temperatura y mallado del tubo-receptor. De izq a derch: Malla 1; Malla 2; Malla 3*

* El número de histories correspondiente a la malla 3 es el máximo permitido computacionalmente, para 8 procesadores en paralelo. El % SD alcanzado es de 40 %.

En los resultados de distribución de temperatura, se observa que el aumento del número de histories hasta alcanzar el valor mínimo que hace que % SD sea igual a 30 para cada malla, conlleva una distribución de temperaturas más precisa.

En la Figura 63 y la Figura 64 se grafica la temperatura en la línea longitudinal sobre el tubo y en la línea transversal sobre el receptor para las distintas mallas con el número de histories correspondiente.

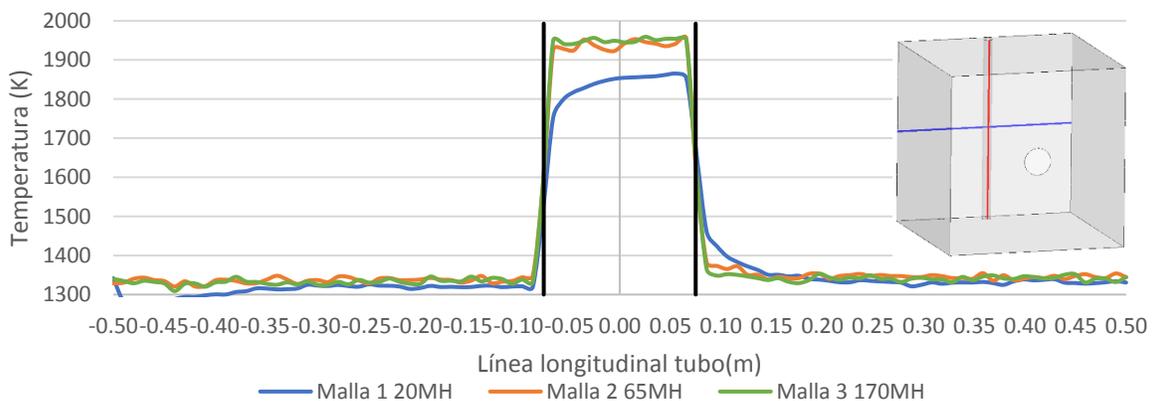


Figura 63. Resultados de temperatura del análisis de malla con número de histories ajustado: línea longitudinal (roja).

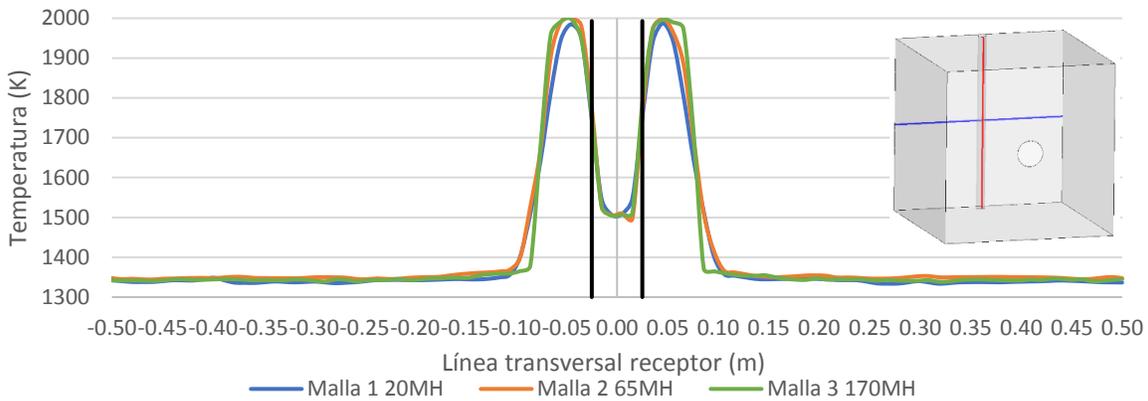


Figura 64. Resultados de temperatura del análisis de malla con número de histories ajustado: línea transversal (azul).

A la vista del conjunto de resultados, se obtiene que la malla 2 presenta la relación óptima requerida, dado que los resultados son independientes de la misma con el menor número de histories y nodos asociados. La malla 1 se descarta debido a las desviaciones en la superficie del tubo donde incide la radiación con respecto a las otras mallas. Los resultados de la malla 3 son válidos al igual que la malla 2 pero el coste computacional es superior (ver Tabla 22).

	Número de histories (x10 ⁶)	Tiempo/iteración (s/it)
Malla 1	20	390
Malla 2	65	700
Malla 3	170*	1980

Tabla 22. Coste computacional y número de histories para las distintas mallas.

* El número de histories correspondiente a la malla 3 es el máximo permitido computacionalmente, para 8 procesadores en paralelo. El % SD alcanzado es de 40 %.

Si se comparan los resultados con los obtenidos en el paso anterior, en la Figura 65 y la Figura 66 se observa que las oscilaciones en la temperatura se reducen en gran medida, debido al ajuste del número de histories al tamaño de malla.

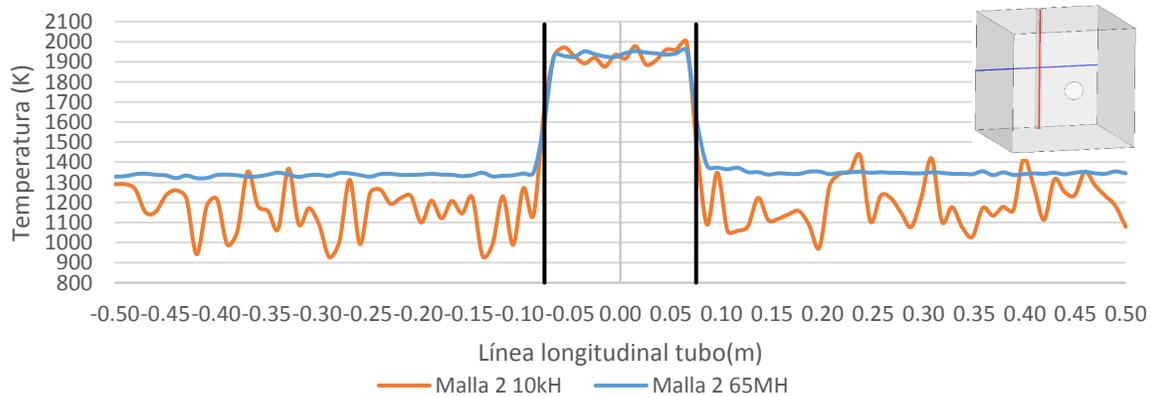


Figura 65. Distribución de temperatura para la malla 2 en función del número de histories en la línea longitudinal sobre el tubo (roja).

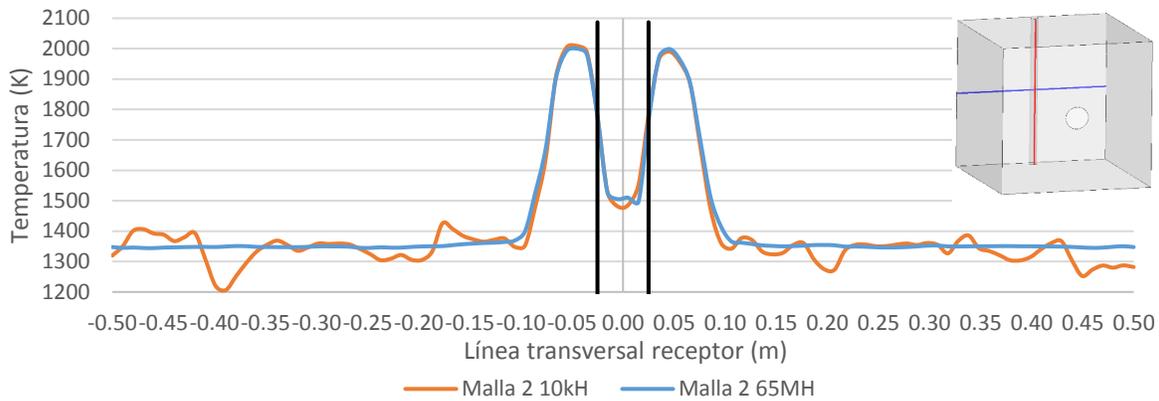


Figura 66. Distribución de temperatura para la malla 2 en función del número de histories en la línea transversal sobre el receptor (azul).

En la Figura 67, una vez seleccionada la malla 2, se presenta para esta la evolución del % SD y el tiempo por iteración con el aumento de número de histories. Se observa que a medida que aumenta el número de histories, el tiempo por iteración aumenta, por tanto se recomienda ajustar el número de histories para que el % SD sea 30 %, dado que la solución es suficientemente precisa.

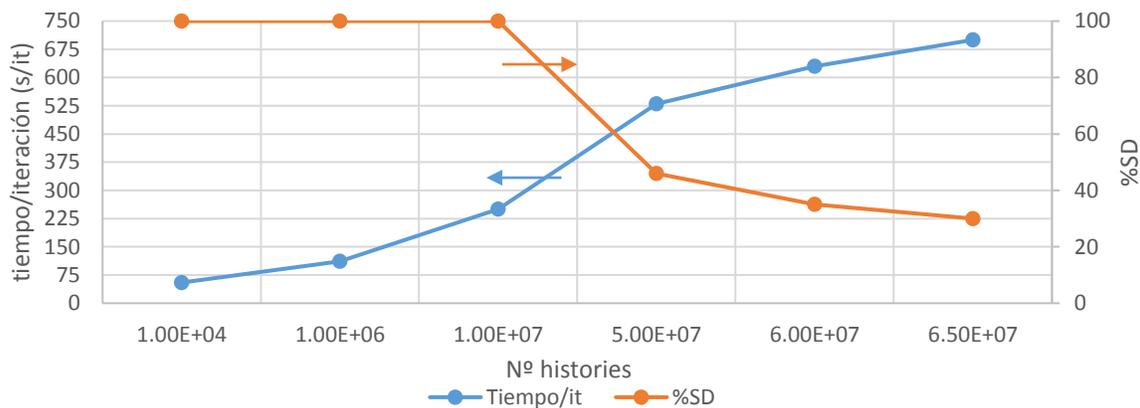


Figura 67. Evolución del coste computación (azul) y % SD (naranja) con número de histories.

Por tanto se concluye que es necesario realizar un análisis de número de histories a la vez que se analiza la malla para obtener soluciones precisas con el menor coste computacional. Esto supone una conclusión novedosa con respecto a los estudios encontrados en la literatura, en los que estos análisis se realizan independientemente. Debido a que el número de histories por defecto es muy bajo, los resultados de un análisis de malla independiente pueden llevar a la selección de una malla menor de la requerida para obtener resultados precisos.

A partir de los resultados del análisis de malla-número de histories, se recomienda iniciar las simulaciones con un mínimo de 10^6 histories (se demuestra que el valor por defecto es muy bajo) hasta que se establezcan los

parámetros de seguimientos establecidos, y entonces aumentar el número de histories hasta alcanzar un % SD de 30 %.

4. Matriz de rayos

En este paso de la metodología se incluye la fuente de radiación real concentrada sobre la cavidad. Esta fuente de energía solar se incluye como una condición de contorno en la apertura/ventana de la cavidad del reactor, principal diferencia con revisión bibliográfica de análisis de reactores con CFD. Este perfil de radiación puede ser un perfil medido experimentalmente o calculado, en función de los datos disponibles.

En ambos casos, esta condición consta de dos entradas para el modelo. Por un lado, se encuentra la intensidad de radiación que en función de los datos disponibles (medidas experimentales o cálculos) se puede incluir constante, con una ecuación o como una matriz donde se incluye la intensidad para cada posición de la apertura. Por otro lado, la dirección de los rayos incidentes se incluyen en todos los casos como una matriz, definiendo la dirección de los rayos en los ejes x, y, z para cada posición de la apertura. Por ejemplo, en el caso de definir una dirección única, se introduciría un vector en las coordenados x, y, z. Es por ello, que en el desarrollo de la metodología, el eje de coordenados se define en el centro de la apertura.

En otros estudios encontrados en la literatura [42], [97], [125] se determina la intensidad incidente que proviene del concentrador solar sobre las paredes del reactor con TracePro®, de tal forma que para el diseño del reactor solar es necesario el cálculo del perfil de radiación para cada iteración cuando se modifica la geometría de la cavidad.

Incluir en la metodología la intensidad y dirección correspondiente a cada rayo del perfil de radiación permite:

- Identificar con precisión los puntos calientes/fríos en el reactor, de forma que se pueda optimizar el diseño y reducir los elevados gradientes de temperatura en el reactor que conllevan asociados problemas de materiales.
- Evaluar y mejorar la uniformidad de la radiación incidente sobre las paredes del reactor, principalmente sobre el receptor.
- Determinar con mayor precisión si la temperatura mínima alcanzada es superior a la requerida por el proceso termoquímico que se lleva a cabo.

Para ilustrar el caso base de la metodología, se introduce un perfil de radiación calculado por IMDEA Energía con el software comercial TracePro® en la apertura. TracePro® simula la distribución de la intensidad luminosa, la irradiancia y el flujo a través de un medio o en superficies seleccionadas por

rastreo de rayos utilizando el método de Monte Carlo [144]. El resultado obtenido consiste en una matriz donde se incluye para cada posición la dirección de la radiación y la intensidad de la misma. Este programa ha sido ampliamente utilizado para determinar los perfiles de radiación en aplicaciones de concentración solar, por lo que la validez está garantizada para receptores de cavidad [159].

A continuación se presentan los resultados para el caso base. En primer lugar, en la Figura 68 se muestra la direccionalidad de la matriz de radiación. Esta condición de contorno del perfil de radiación se incluye en la apertura una vez seleccionado el modelo de radiación. Se define como una fuente de radiación para la cual es necesario incluir la intensidad y la dirección. En este caso, la intensidad de radiación se mantiene constante e igual a 850 kW/m^2 (15 kW), mientras que la dirección se incluye como una matriz donde se define la dirección en los ejes x , y , z para cada posición de la apertura. En este caso, la apertura se considera cerrada para eliminar las pérdidas por convección, sin embargo, si se permiten las pérdidas por radiación dado que se considera transparente. De esta forma se puede comparar el resultado de temperatura con el límite teórico presentado por Steinfeld [148].

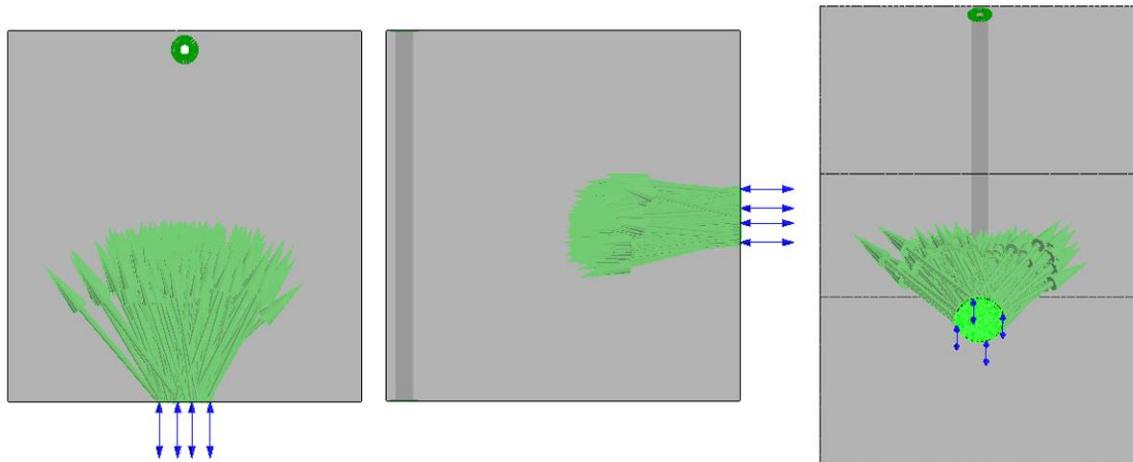


Figura 68. Condición de contorno de direccionalidad de los rayos en la apertura.

En la Figura 69 se muestra la distribución de temperaturas en el tubo y en la pared posterior. Se observa el perfil de radiación real sobre el receptor de la cavidad, de forma que se identifican los puntos donde inciden mayor número de rayos alcanzando las temperaturas más elevadas y allí donde la concentración de rayos es menor se encuentran los puntos más fríos de la cavidad.

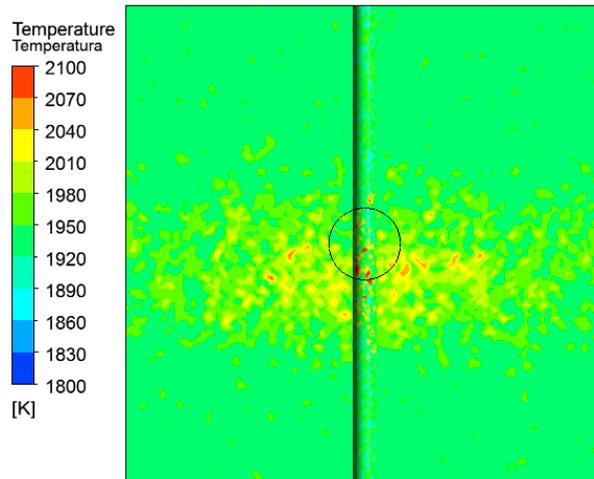


Figura 69. Distribución de temperaturas caso base con matriz de dirección de rayos.

Para comprobar la precisión del modelo, se calcula la temperatura máxima teórica y se compara con los resultados de la simulación. El valor teórico se obtiene a partir de la ecuación de Steinfeld [148] denominada temperatura de estancamiento:

$$T_{estancamiento} = \left(\frac{I \cdot C \cdot \alpha}{\sigma \cdot \varepsilon} \right)^{0.25} [K]$$

Para la intensidad de radiación (I) concentrada ($C \equiv$ factor de concentración) y considerando ideal el caso ($\varepsilon = \alpha = 1$) se obtiene que la temperatura estanca es igual a 1968 K, mientras que para la simulación se obtiene un valor de 1946.9 K. El error cometido es del 1 %.

5. Propiedades radiantes

En este apartado, se analizan las propiedades radiantes de la cavidad descritas en el apartado 3.2.2.3 de forma que se asume la ley de Kirchhoff.

En general, en el diseño de reactores tubulares, se utilizan distintos materiales para la cavidad y para los tubos con el objetivo de aumentar la energía absorbida en los tubos y reducir la absorbida en las paredes. Por otro lado, permite mejorar la uniformidad de temperaturas en los tubos, debido a que los gradientes térmicos son menores entre las partes frontal y posterior de los mismos. Mientras que el caso de los reactores volumétricos la diferencia se encuentra entre la emisividad de las paredes (igual que reactor tubular) y la emisividad de la matriz soporte/reactivo dado que en este caso el intercambio es directo.

En la mayoría de los reactores presentados en el apartado 2.3, la cavidad está formada por materiales con emisividades comprendidas entre 0.4 y 0.6, mientras que los tubos son de materiales de alta emisividad, en torno a 0.9.

A partir de este apartado de la metodología se considera la cavidad abierta dejando el paso de radiación (igual que antes) y contabilizando las pérdidas por convección.

A continuación, en la Figura 70, se presentan los resultados obtenidos para el caso base, cuando se incluye una emisividad de 0.9 en el tubo (emisividad del carburo de silicio) y una emisividad de 0.4 en el resto de las paredes (alúmina).

Se observa, que para el cuerpo negro (izquierda) las temperaturas de la pared posterior son superiores que para el caso con distintas emisividades.

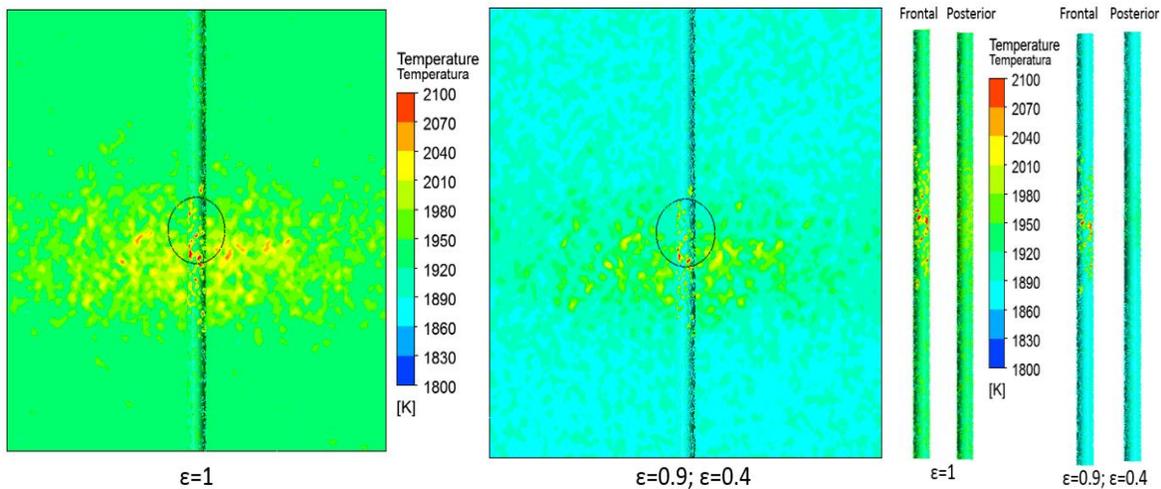


Figura 70. Distribución de temperaturas para caso base, condiciones de cuerpo negro y materiales reales $\epsilon=0.9$ tubo y $\epsilon=0.4$ resto de paredes.

Cuando se reduce la emisividad de dicha pared y se mantiene valores altos (0.9) en el tubo, se consigue uniformizar las temperaturas de la parte posterior y frontal del tubo de forma que el gradiente térmico en el mismo es menor. Por otro lado, la temperatura media alcanzada en el tubo para el caso de emisividades reales de los materiales es de 1898.2 K, ligeramente inferior aunque más uniforme que para el caso de condiciones ideales (1942.6 K). Sin embargo, la amplitud de temperaturas en el tubo se reduce de 325 K a 300 K, reduciéndose el gradiente térmico.

Por otro lado, se observa que la temperatura del caso ideal es ligeramente inferior que la temperatura estanca calculada en el apartado anterior. Esta diferencia se debe a las pérdidas por convección.

6. Aislamiento

Otro aspecto a tener en cuenta en el diseño térmico, también relacionado con los materiales de la instalación, son las pérdidas por conducción y convección a través de las paredes de la cavidad. Debido a las altas temperaturas a las que se

encuentra el reactor, estas pérdidas pueden ser importantes en función de los materiales de la cavidad, el aislante utilizado y el espesor de los mismos.

El material más utilizado en las paredes de la cavidad en reactores solares es la alúmina debido a que presenta una conductividad baja de 30 y 5 W/m·K para temperatura ambiente y 2000 K respectivamente. El espesor varía entre 5 y 20 cm en la literatura [89], [97], [101], [125].

Tras la alúmina, se incluye otra capa de material aislante cuya temperatura máxima es menor a las alcanzadas en la cavidad. Un aislamiento comúnmente utilizado en la industria es el óxido de silicio, el cual permite temperaturas de 1200 K con una conductividad de entre 0.1 y 0.25 W/m·K [143]. Otro aislante utilizado es Microtherm® cuya conductividad es de 0.05 W/m·K [160].

Por último, se incluye el término convectivo – radiante entre la superficie exterior de la pared y el ambiente exterior. En estos casos, el coeficiente convectivo – radiante exterior varía entre 5 y 20 W/m²·K, dado que se considera convección natural.

El aislamiento se puede modelar de dos formas, incluyendo un coeficiente global de transferencia que implemente los fenómenos de conducción y convección o incluyendo en el modelo CFD los sólidos correspondientes a las paredes de la cavidad y a los aislamientos incluidos y un coeficiente convectivo exterior. Para el diseño de la cavidad de esta metodología, ambas opciones son válidas. Por lo que se recomienda que para casos de pre-diseño o casos donde estas pérdidas sean despreciables utilizar el método del coeficiente global de transferencia, U . Mientras que para casos donde las pérdidas por conducción y convección – radiación exterior sean significativas o se trate del diseño final del equipo, se recomienda incluir los distintos sólidos del reactor y el término convectivo – radiante exterior.

Para el caso base, el aislamiento y la convección exterior se incluyen a partir del coeficiente global de transferencia, definido como:

$$U = \frac{1}{\frac{1}{h_{ext;CV-RD}} + \frac{e_{cav}}{k_{cav}} + \frac{e_{aisl}}{k_{aisl}}}$$

A continuación, en la Figura 71 se presentan los resultados para un coeficiente global de transferencia de 0.243 W/m²·K. El cual se calcula en función de un coeficiente convectivo – radiante exterior de 10 W/m²·K, un espesor de cavidad de 10 cm de alúmina y un espesor de aislante de Microtherm® de 20 cm para una temperatura exterior de 298 K.

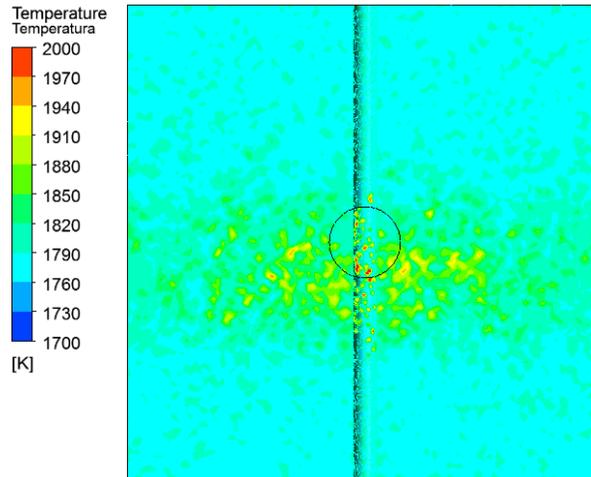


Figura 71. Distribución de temperaturas en tubo y receptor cuando se incluyen las pérdidas por conducción y convección al exterior.

Se observa que se reduce notablemente la temperatura del receptor, pasando de 1897.2 K a 1796.6 K, También disminuye la temperatura del tubo debido a que al disminuir la temperatura de las paredes se reduce la radiación por temperatura en el conjunto. Se observa que las pérdidas a través del aislamiento son elevadas, 3.46 kW de los 15 kW introducidos, éstas se deben entre otras cosas al tamaño de la cavidad con respecto a la superficie ocupada por el tubo.

7. Conclusiones de diseño de la cavidad

Para concluir se definen los siguientes índices que permiten identificar el grado de uniformidad de temperatura alcanzado y de aprovechamiento de la energía incidente en la cavidad, principales objetivos de esta fase de diseño.

Los índices de seguimiento para evaluar la uniformidad de la distribución de temperatura sobre la superficie de interés (tubo/lecho reactivo) y la posición del mismo son:

- Temperatura mínima en la superficie de intercambio, ya sea sobre el propio reactivo en el caso de los reactores volumétricos o sobre los tubos en reactores tubulares.
- Desviación superior e inferior de la temperatura sobre la superficie de interés con respecto a la media, los tubos en reactores tubulares y el lecho reactivo en reactores volumétricos. Estas desviaciones se calculan a partir de la siguiente ecuación:

$$\%Desv_{max/min} = \frac{abs(T_{max/min} - T_{media})}{T_{media}}$$

- Porcentaje de la superficie de los tubos o reactivos para reactores tubulares y volumétricos respectivamente que se encuentra 50 K y 100 K por encima de la temperatura requerida.

- Índice de radiación incidente sobre el tubo/lecho reactivo (IRIT): este índice se define como:

$$IRIT = \frac{Potencia\ incidente_{tubo}}{Potencia\ incidente_{apertura}}$$

Este índice puede ser mayor que la unidad debido a las reflexiones de la radiación. No es un valor real del aprovechamiento de la energía radiante pero permite evaluar el porcentaje de radiación que incide sobre el tubo de la radiación incidente a la cavidad. Este factor permite evaluar la posición de los tubos en cuanto a la radiación incidente sobre los mismos. Cuanto mayor sea este factor mayor será la energía que incide sobre la superficie de interés.

Los índices definidos para evaluar la distribución de la energía en la cavidad son:

- Rendimiento óptico radiante definido como cociente entre la potencia radiante neta en la cavidad (W) y la potencia incidente (W):

$$\eta_{\text{óptico}} = \frac{Potencia_{incidente} - Pérdidas_{apertura}^{radiación}}{Potencia_{incidente}}$$

- Rendimiento convectivo apertura: este índice permite evaluar las pérdidas convectivas por la apertura. Debe ser lo más próximo a la unidad de forma que las pérdidas por convección en la apertura sean mínimas. En el caso de reactores cerrados, este rendimiento es igual a la unidad. Se define a partir de la siguiente ecuación:

$$\eta_{cv;apertura} = 1 - \frac{Pérdidas_{convectivas;apertura}}{Potencia\ incidente_{apertura}}$$

- Rendimiento conductivo-convectivo de las paredes: este rendimiento permite, al igual que en caso anterior, evaluar las pérdidas, ahora, por conducción y convección por las paredes. Debe ser lo más próximo a la unidad de forma que las pérdidas por las paredes sean bajas. Se define a partir de la siguiente ecuación:

$$\eta_{CD-CV;paredes} = 1 - \frac{Pérdidas_{CD-CV;paredes}}{Potencia\ incidente_{apertura}}$$

- Rendimiento del proceso: este índice se define como el cociente entre la potencia neta sobre el tubo y la potencia incidente por la apertura.

$$\eta_{proceso} = \frac{Potencia\ neta_{tubo}}{Potencia\ incidente_{apertura}}$$

En esta etapa del diseño su valor es siempre nulo dado que el tubo se considera adiabático. De acuerdo con su definición, la temperatura que se alcanza en el diseño se corresponde con un límite superior de la temperatura máxima para la cavidad diseñada dado que cuando se

incluya el tubo/proceso, y se produzca un aprovechamiento de la energía, la temperatura superficial del tubo disminuirá.

Estos parámetros permiten comparar el efecto de las modificaciones sobre la cavidad en las sucesivas iteraciones que surgen durante la fase de diseño, lo cual se puede comprobar en el apartado 4.2.

Estos parámetros correspondientes al caso base se presentan en la Tabla 23.

Parámetros diseño de cavidad para caso base (en tubo)	
Temperatura mínima (K)	1758.7
Temperatura media (K)	1799.6
Desviación máxima (%)	17.2
Desviación mínima (%)	2.3
% Sup. $T > T_{requerida}^*$ (%)	100
% Sup. $T > T_{requerida}^* + 50 \text{ K}$ (%)	100
% Sup. $T > T_{requerida}^* + 100 \text{ K}$ (%)	100
Índice de radiación incidente sobre el tubo (%)	24.7
Potencia incidente (W)	15000
Pérdidas radiantes (W)	7660
Pérdidas convectivas (W)	3865
Pérdidas por conducción (W)	3475
Rendimiento óptico radiante (%)	51
Rendimiento convectivo apertura (%)	74.2
Rendimiento cond-conv paredes (%)	76.8
Rendimiento del proceso (%)	0

Tabla 23. Parámetros de seguimiento para el diseño de la cavidad (caso base).

*La temperatura requerida es 1502 K de acuerdo con el balance de energía en el tubo para el caso base.

El primer índice se corresponde con la temperatura mínima del tubo y se observa que esta es superior a la temperatura requerida del proceso. A continuación, se presenta la temperatura media y las desviaciones, de forma que la desviación es mayor con respecto a la temperatura máxima que a la mínima debido a que la radiación incide directamente sobre el tubo.

En este caso se observa que la temperatura media es superior a la temperatura requerida de forma que los porcentajes de superficie que se encuentran por encima de 50 y 100 K son del 100 %.

A continuación se presentan los rendimientos de la cavidad en función de las pérdidas. Se observa que las mayores pérdidas son por radiación como cabría esperar debido principalmente a las altas temperaturas. Las pérdidas convectivas del caso base suponen un 50 % de las pérdidas radiantes, de forma que en este aspecto se podría mejorar el diseño de la cavidad introduciendo una ventana de cuarzo y reduciendo el tamaño de la apertura. En el caso de reducir el radio de apertura hay que tener en cuenta que también se reduce la potencia incidente, en este caso, puede llevarse a cabo dado que la temperatura mínima en el tubo es muy superior a la requerida.

Por otro lado, las pérdidas por conducción son elevadas debido a la superficie de intercambio de la cavidad con respecto a la del tubo.

El rendimiento del proceso es nulo porque, en esta etapa del diseño, el tubo es adiabático de forma que el balance energético sobre el mismo es nulo, en esta fase se presenta la temperatura máxima que se puede alcanzar en el mismo para las características de la cavidad definida.

La etapa de diseño de la cavidad finaliza cuando se alcanzan los parámetros requeridos del proceso termoquímico.

3.3.2.2 Diseño del reactor solar

A la vista de los resultados obtenidos en el desarrollo de las etapas de la metodología descritas hasta el momento, se obtiene un diseño cerrado de la cavidad del reactor. El diseño final alcanzado tras las iteraciones necesarias está optimizado de acuerdo con las pérdidas ópticas (pérdidas por radiación) y cumple con los requisitos de temperatura mínima en el receptor con una distribución de temperaturas uniforme.

En este segundo bloque de la metodología se incluye la matriz porosa en la cual se produce la reacción como un medio poroso, es decir, los pellets correspondientes al ciclo termoquímico o el lecho catalítico seleccionado. El efecto sobre la temperatura debido a la reacción endotérmica se puede considerar a partir del balance de energía e imponiendo una temperatura requerida de diseño superior a la requerida por el ciclo de acuerdo a la reacción, o bien incluyendo un sumidero de calor acorde a la reacción.

En el caso ilustrativo de la metodología no se incluye la reacción química, únicamente se incluye el reactivo empaquetado o el lecho fijo como un medio poroso y las partes sólidas de la cavidad tales como el espesor de los tubos en el

caso de un reactor tubular o el volumen sólido de la cavidad y el aislamiento en aquellos que se quiere simular de la segunda forma explicada en el paso 6 del apartado 3.3.2.1.

El principal objetivo de esta etapa es obtener una herramienta CFD completa para el diseño térmico de reactores solares en la cual se pueden variar distintos parámetros que permiten optimizar el reactor y obtener un mapa de operación. Es decir, este objetivo presenta dos aspectos importantes de diseño, en primer lugar se obtiene un modelo CFD en el que se tienen en cuenta los principales fenómenos térmicos y que puede utilizarse como punto de partida para la optimización y en segundo lugar puede utilizarse para predecir y optimizar las condiciones de operación de un reactor existente previamente a la realización de los ensayos experimentales. En caso de utilizar esta herramienta CFD para optimizar el diseño del reactor o de las condiciones de operación se obtiene como resultado secundario el efecto que supone el cambio de alguno de los parámetros de diseño u operación.

Para modelar el efecto térmico de la reacción química se puede actuar de dos formas:

Por un lado, sin incluir el sumidero de calor en la simulación, pero teniendo en cuenta que la temperatura requerida en el lecho reactivo y a la salida del gas de arrastre mínima debe ser la requerida por el proceso termoquímico más la requerida por la reacción endotérmica. De esta forma, los resultados de la simulación se deben comparar con la temperatura estimada a partir de:

$$\bar{T}_{ga} = \frac{\dot{m}_{ga}c_{p;ga}(T_{req} - T_{gae}) + Q_{reacción}}{\dot{m}_{ga}c_{p;ga}} + T_{gae}$$

Donde: \bar{T}_{ga} es la temperatura media del gas de arrastre, T_{req} es la temperatura mínima requerida por el proceso termoquímico y T_{gae} la temperatura del gas de arrastre o reactivos a la entrada.

Para el caso base que ilustra la metodología, se necesita una temperatura mínima en el lecho reactivo/ gas de arrastre de 1490 K.

Por otro lado, comúnmente este efecto se aborda incluyendo un sumidero de calor en el medio poroso, teniendo en cuenta que el sumidero debe estar activo únicamente en la zona donde la temperatura es mayor que la temperatura requerida, en este caso 1450 K. Este sumidero de calor se calcula a partir de las siguientes ecuaciones [161]:

$$Q_{reac} = H \cdot R_{reg} \cdot A_{ef} \quad (W/m^3)$$

Donde: H la entalpía de la fase de reducción del oxígeno (kJ/mol), A_{ef} es el área efectiva del lecho reactivo (1/m) y R_{reg} es el ratio de la reacción química (mol/s · m²) y se determina a partir de:

$$R_{reg} = \varphi k_{reg} y$$

Donde: φ es la capacidad de almacenamiento de material redox por carga en la pared (mol/m²), y es la fracción de área que contiene oxígeno (%) y k_{reg} es la velocidad de la reacción de oxidación (1/s), la cual se puede calcular a partir de:

$$k_{reg} = k_{0,reg} e^{E_a/R \cdot T}$$

Donde: $k_{0,reg}$ se corresponde con la constante de reacción (1/s), E_a es la energía de activación (J/mol), R la constante ideal (J/mol · K) y T la temperatura a la que se lleva a cabo la reacción (K).

De acuerdo a los datos presentados por Agrafiotis [161] para una ferrita de tipo $Mn_{0.5}Zn_{0.5}Fe_2O_4$, para el caso base se obtiene un sumidero de calor de 0.085 W/m³.

1. Definición de malla del reactor

Antes de comenzar con el modelado del reactor se realiza el mallado del mismo, lecho reactivo y espesor del tubo, este último en el caso de reactores tubulares. En general, los tubos o el lecho reactivo presentan geometrías más sencillas que las presentadas en el diseño de la cavidad por lo que se recomienda un mallado basado en elementos hexaédricos.

En este apartado es importante recordar que se necesita un tamaño de malla acorde a la malla de la cavidad para que la relación de aspecto sea 1:1 (ver paso 2 del apartado 3.3.2.1). Por otro lado, para obtener una buena precisión en la transferencia por conducción en el espesor de los tubos, debe considerarse al menos 4 elementos en el mismo de acuerdo a la guía de buenas prácticas [156].

El mallado del reactivo viene definido en función del tipo de lecho: monolito, espuma o partículas. En los casos donde el reactivo es de tipo espuma o monolito, es decir, la porosidad es constante tanto en el volumen del lecho como en la superficie, se realiza un análisis de malla igual al de la cavidad. Se comparan al menos 3 mallas con una relación de 1.3 por dimensión en el número de nodos.

En los casos donde el reactor contiene un lecho de partículas, en la zona del medio poroso adyacente a la pared del tubo la porosidad es distinta a la del lecho debido al ordenamiento de las partículas. En la presente metodología, se define de acuerdo a la correlación de Mueller [162] (ver Figura 72). Este aspecto no se considera en los trabajos encontrados en la literatura de diseño de reactores, sin

embargo, es importante tenerlo en cuenta en el diseño de reactores de partículas para evaluar el aporte de calor hacia la parte sólida y fluida. En la zona del lecho reactivo adyacente al tubo, la porosidad es igual a la unidad y en el centro del lecho reactivo es del orden de 0.4 (dependiendo del diámetro de partícula).

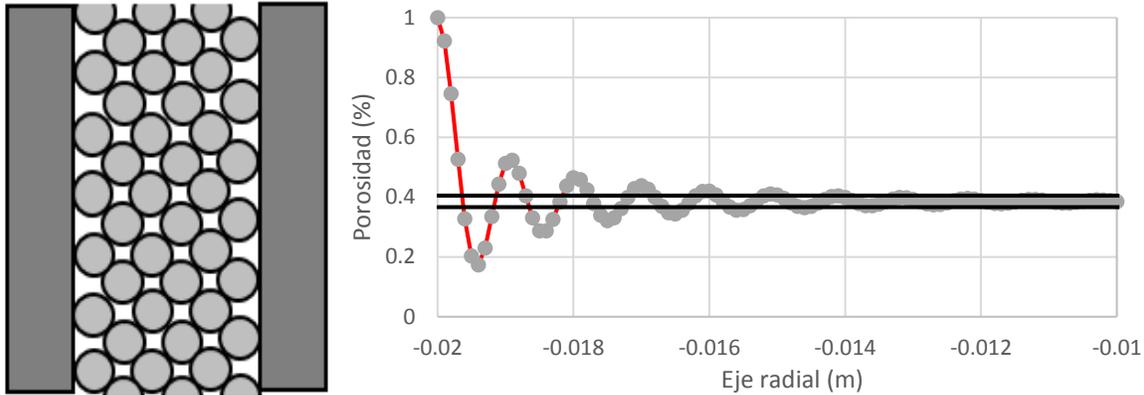


Figura 72. Porosidad para lechos reactivos de partículas.

Dado que la función de la porosidad es de la forma presentada en la Figura 72, se observa que en las proximidades a la pared del tubo, la pendiente de curva es elevada, de forma que el mallado de esta zona debe ser mayor para captar la variación. Por ello, desde $D_t/2$ (superficie del tubo) hasta $D_t/2 - d_p/10$, se propone incluir un mínimo de 3 nodos con distribución uniforme. Se propone un mallado fino, aunque en menor medida que en la sección anterior, en la corona del tubo donde las oscilaciones de la porosidad son mayores al $\pm 5\%$ (líneas negras de la Figura 72). Esta zona se define en función de la relación de D_t/d_p :

- Desde $D_t/2 - d_p/10$ hasta $0.75 \cdot D_t/2$ para $D_t/d_p > 13$, se propone un mallado exponencial de 4 nodos por oscilación superior a $\pm 5\%$ donde el tamaño del primer nodo sea igual al de la zona anterior y un factor multiplicador de 2. En el caso de la Figura 72, se incluye un total de 40 nodos dado que hay 10 oscilaciones por encima/debajo del $\pm 5\%$.
- Desde $D_t/2 - d_p/10$ hasta $0.8 \cdot D_t/2 - d_p/2$ cuando $2.6 < D_t/d_p < 13$ se propone un mallado exponencial de al menos 4 nodos por oscilación superior a $\pm 5\%$ donde el tamaño del primer nodo sea igual al de la zona anterior y un factor multiplicador de 2.

De acuerdo a la Figura 73, se observa que a medida que aumenta el diámetro de partícula para un diámetro del tubo constante, la oscilación es mayor y aumenta el número de oscilaciones hasta que se estabiliza la porosidad. Además, cuanto mayor es el diámetro de partícula, mayor es la porosidad en el centro del lecho. Es por ello, que se distingue en función de la relación D_t/d_p .

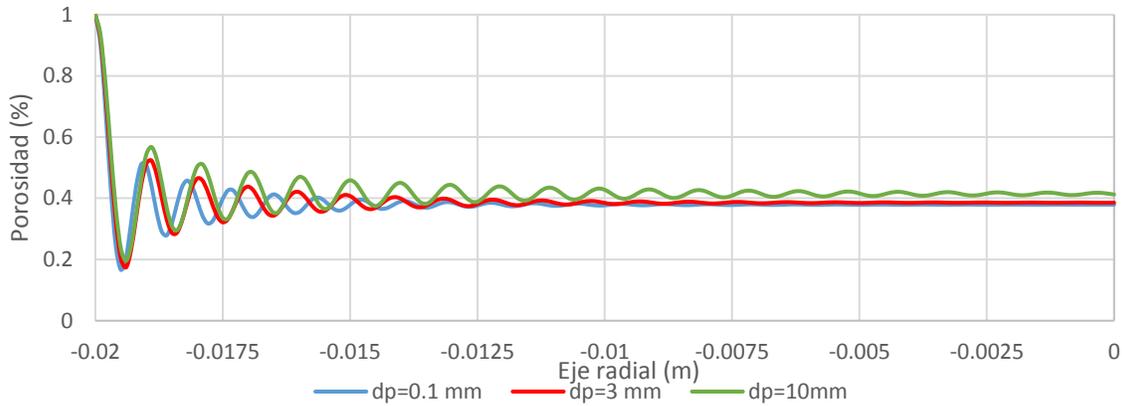


Figura 73. Porosidad para un lecho de partículas de diámetro 0.1, 3 y 10 mm.

Por último para la zona central del tubo, se propone un mallado menos fino, aunque con continuidad con la zona anterior.

En la Figura 74 se presentan los detalles la malla del caso base:

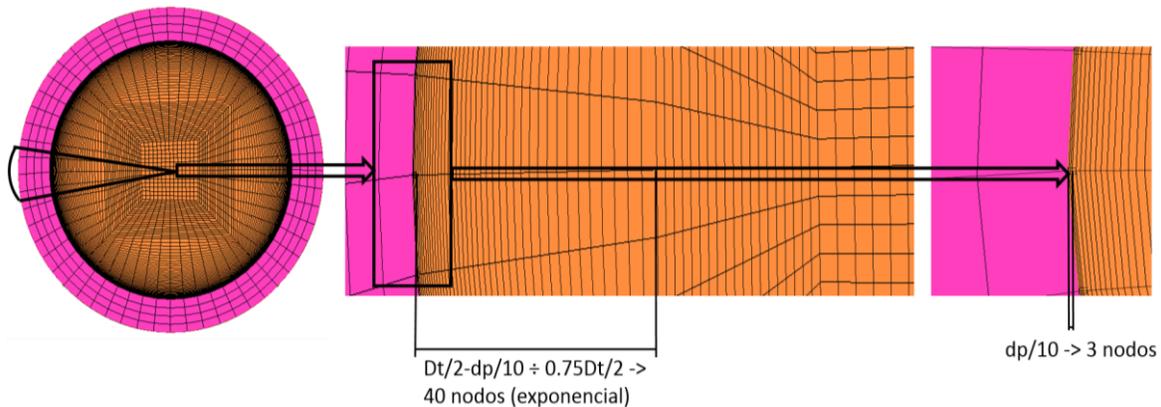


Figura 74. Detalles del mallado del tubo para un lecho de partículas.

2. Definición del lecho reactivo (medio poroso)

En esta etapa de la metodología, se incluyen en el modelo cerrado de la cavidad los cuerpos sólidos correspondientes al lecho de reacción, al espesor de los tubos (en reactores tubulares) y al espesor de la cavidad y aislante (en aquellos casos donde se incluyen como sólidos) una vez finalizado el análisis de malla correspondiente.

El medio poroso simula el material metálico de óxido no volátil correspondiente al ciclo termoquímico o el catalizador para otros procesos termoquímicos tales como el reformado. Por otro lado, se incluye también el gas de arrastre o reactivos en función de proceso definiendo el caudal y la temperatura de entrada.

Durante este paso de la metodología, las propiedades térmicas de los materiales pueden incluirse en función de la temperatura o constantes de acuerdo con los datos disponibles. En el caso de considerar propiedades constantes, estas deben ser para una temperatura similar a la del sistema. Por otro lado, si se introducen en función de la temperatura se favorece a la uniformidad de las temperaturas en el reactor, dado que en las zonas donde las temperaturas son menores, las conductividades son mayores y viceversa. El hecho de incluir las propiedades de los sólidos en función de la temperatura también afecta a las pérdidas por las paredes ya que dicho coeficiente depende de las conductividades. Los materiales que presentan una conductividad térmica elevada y un coeficiente de expansión térmico bajo permiten una buena resistencia al impacto térmico, estos materiales pueden ser: carburo de silicio, alúmina, etc. y por ello se utilizan en el diseño de reactores solares.

El objetivo de esta etapa es cerrar el diseño del equipo, incluyendo el fenómeno de conducción/convección en el medio poroso y el espesor de los tubos en el caso de reactores tubulares, de forma que se puede determinar la temperatura localmente en el interior de la zona reactiva y evaluar cómo se reparte la energía al lecho.

En primer lugar, se debe prestar atención a cómo incluir la porosidad del medio poroso en función del tipo de reactivo:

- Para lechos reactivos tipo espumas o monolitos, la porosidad es constante en todo el dominio, ya sea para reactores tubulares o volumétricos. (Ver Figura 75 (a)).
- Para lechos de partículas en reactores tubulares, el ordenamiento de las partículas provoca que en el contacto de las mismas con las paredes del tubo la porosidad no sea igual a la del volumen, siendo prácticamente la unidad en la zona de contacto entre el tubo y las partículas. (Ver Figura 75 (b)).

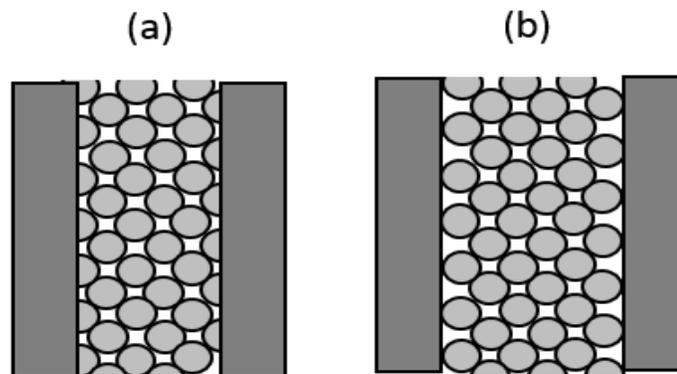


Figura 75. Definición de medio poroso.

Es importante definir bien la porosidad del medio para evaluar de forma adecuada la transferencia de calor entre la superficie del tubo y las partes sólida y fluida del lecho reactivo y la pérdida de carga. En el caso de lechos reactivos como el de la Figura 75 (a), la porosidad se puede incluir constante en el modelo. Para el caso de lecho de partículas (Figura 75 (b)), la porosidad se incluye en función de la dirección radial desde el centro del tubo como una expresión que depende del cociente entre el diámetro del tubo y el diámetro de la partícula definida por Mueller [162]. De esta forma, se modela el contacto puntual de las partículas con las paredes del tubo, lo que permite modelar de forma real la transferencia de calor en la zona de contacto de las partes sólidas y los caminos preferenciales del gas de arrastre o reactivo. La expresión de la porosidad de Mueller [162] se define como:

$$\gamma = \gamma_b + (1 - \gamma_b)J_0(ar^*)e^{-br^*}$$

Esta expresión es válida cuando $D_{tubo}/d_p \geq 2.61$, donde:

$$\begin{cases} a = 8.243 - \frac{12.98}{(D_{tubo}/d_p + 3.156)} & \text{para } 2.61 \leq D_{tubo}/d_p \leq 13.0 \\ a = 7.383 - \frac{2.932}{(D_{tubo}/d_p - 9.864)} & \text{para } D_{tubo}/d_p > 13.0 \end{cases}$$

$$b = 0.304 - \frac{0.724}{D_{tubo}/d_p}$$

$$r^* = r/d_p \text{ para } r/d_p \geq 0$$

$$\gamma_b = 0.379 + \frac{0.078}{(D_{tubo}/d_p - 1.80)}$$

J_0 función de Bessel de orden 0

Para el modelado de la pérdida de carga, se incluye el modelo isotrópico a partir de los coeficientes lineal y cuadrático correspondientes a la ecuación de Ergun, válida para cualquier régimen de circulación del fluido. Para casos laminares o turbulentos completamente desarrollados pueden incluirse los coeficientes correspondientes (ver Tabla 18).

La transferencia de calor por convección en el medio poroso se define a partir del coeficiente de película entre las partículas y el fluido (gas de arrastre o reactivos) (ver Tabla 19 en caso de no disponer de datos experimentales) y el área efectiva del mismo. Estos parámetros se presentan en el apartado 3.2.3.2. El intercambio radiante entre partículas puede despreciarse debido a la diferencia de

temperatura entre las partículas es relativamente baja [163], [164], al igual que para lechos de monolitos o espumas [161].

Otro aspecto a considerar en los reactores tubulares es la resistencia de contacto entre el espesor del tubo y el medio poroso. Definiendo el número de Biot en la pared como:

$$Bi_{pared} = \frac{Q_f}{Q_s} = \frac{h_{f-t} A_t \gamma_{pared} (T_{pared} - T_f)}{\frac{k_p}{e} A_t (1 - \gamma_{pared}) (T_{pared} - T_p)} \approx |Si T_f \approx T_p| \approx \frac{h_{fluido-tubo} A_t \gamma_{pared}}{\frac{k_p}{e} A_t (1 - \gamma_{pared})}$$

Donde:

- Q_f es el calor transferido al fluido y por tanto el área de transferencia se corresponde con el área del tubo (A_t) multiplicada por la porosidad en la pared (γ_{pared}). h_{f-t} es el coeficiente de película entre la superficie del tubo y el fluido, T_{pared} es la temperatura en la pared interior del tubo y T_f la temperatura del fluido.
- Q_s es el calor transferido al sólido y por tanto el área de transferencia es $A_t(1 - \gamma_{pared})$. k_p es la conductividad de la parte sólida del lecho reactivo, T_{pared} es la temperatura en la pared interior del tubo y T_p la temperatura de las partículas. e se corresponde con el espesor de la transferencia.

A partir del número de Biot en la pared, se obtiene que para los reactores de partículas la resistencia de contacto se puede considerar despreciable dado que el denominador incluye el término $(1 - \gamma_{pared})$ el cual tiende a cero, lo que supone un número de Biot alto ($Bi > 100$) [165] y por tanto que la transferencia de calor se producirá principalmente a través del fluido. Para lechos tipo espuma o monolitos, este término no tiende a cero y por tanto debe calcularse el número de Biot, si es menor que 100, la resistencia de contacto no es despreciable.

La herramienta ANSYS – CFX no permite incluir la resistencia de contacto entre el tubo y la parte sólida del medio poroso directamente, por lo que para considerarla se modifica la conductividad del sólido del lecho poroso incluyendo una conductividad equivalente a la resistencia de contacto en el espesor (e):

$$Q = \frac{1}{R_{cont}} A_t (T_{pared} - T_p) = \frac{k_{eq}}{e} A_t (T_{pared} - T_p) \therefore k_{eq} = \frac{e}{R_{cont}}$$

En el caso de la producción de hidrógeno mediante ciclos termoquímicos, el gas inerte de arrastre se introduce porque de acuerdo a la literatura [37], [151], [166], este disminuye la temperatura requerida para la etapa de oxidación. Además, favorece el arrastre del oxígeno producido. Los gases de arrastre más utilizados en la literatura para ciclos termoquímicos de óxidos metálicos son el nitrógeno y el argón.

Para el caso base de la metodología, se supone un lecho de partículas de diámetro 3 mm con una porosidad definida a partir de la correlación de Mueller [162] (Figura 77). Las partículas de ferrita (parte sólida del lecho poroso) tienen una conductividad térmica igual a $100 \text{ W/m}\cdot\text{K}$ [161]. En este caso se consideran los mismos materiales utilizados en el análisis de emisividad (apartado 3.3.2.1 paso 5), alúmina para las paredes y carburo de silicio para el tubo. De acuerdo con la literatura, la dependencia de la conductividad con la temperatura para estos materiales es:

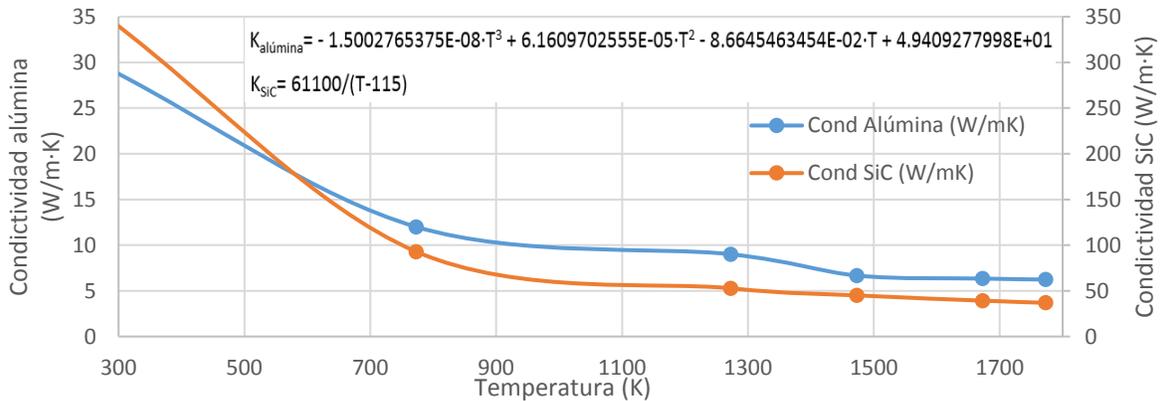


Figura 76. Conductividad de alúmina [125] y carburo de silicio [167] en función de la temperatura.

La parte fluida del lecho poroso se corresponde con el gas de arrastre, nitrógeno. Dicho gas se introduce desde la parte superior del tubo (se evita desplazamiento de partículas) de forma que la pérdida de carga sea de 500 mbar (6.25 kg/h) a una temperatura de 500 K. De acuerdo con la transferencia de calor en el medio se incluye el coeficiente de película a partir de la correlación de Wakao [146] y el área efectiva del medio, al igual que en el trabajo presentado por [163]. Por último, se considera que el número de Biot en la pared es superior a 100 (lecho de partículas) y por tanto no se incluye la resistencia de contacto en el modelo.

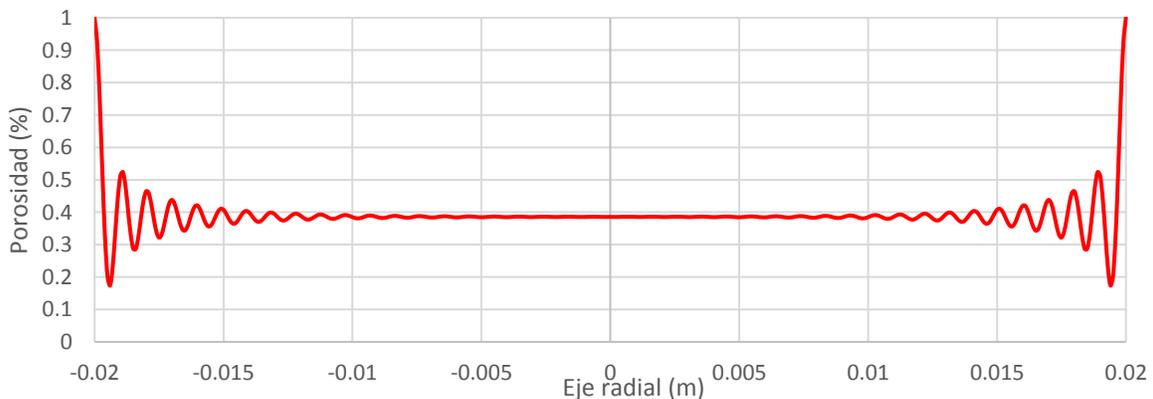


Figura 77. Distribución de la porosidad en el eje radial del tubo.

A continuación, se presentan los resultados obtenidos para el caso base. En primer lugar, se muestra la distribución de temperatura en la superficie del tubo – receptor (Figura 78 izquierda) y en el medio poroso (Figura 78 derecha).

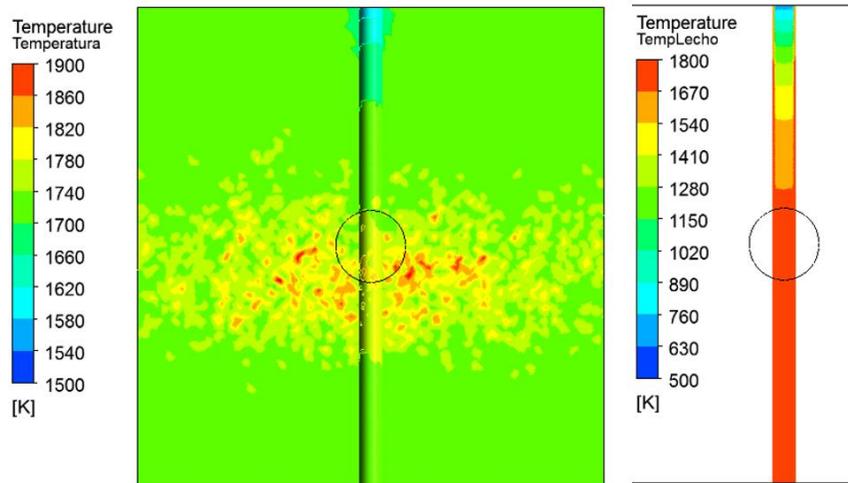


Figura 78. Distribución de temperatura tubo-receptor y medio poroso.

Se observa que tanto en el lecho de partículas como en la superficie del tubo exterior, la temperatura más baja se encuentra en la parte superior del tubo debido a que el gas de arrastre se introduce en esta zona a 500 K. La temperatura media de la parte fluida del medio poroso es 1600.4 K, mientras que la parte sólida se encuentra a una temperatura media de 1596.8 K. Por otro lado, la temperatura de salida del gas de arrastre es de 1732.5 K. La temperatura media de la parte fluida del medio poroso es 1600.4 K, mientras que la parte sólida se encuentra a una temperatura media de 1596.8 K.

A continuación, se presenta la distribución de velocidades al atravesar el lecho poroso. En la Figura 79 se observa que la velocidad sobre la superficie del tubo es nula, alcanzando valores máximos inmediatamente después debido a que la porosidad superficial (igual a la unidad) es superior a la del medio formándose caminos preferenciales. Por otro lado, se observa que la velocidad mínima se alcanza a una distancia de $d_p/2$ de la pared del tubo. Además, se observa que a medida que se atraviesa el lecho aumenta la velocidad, esto se debe al aumento de temperatura del fluido.

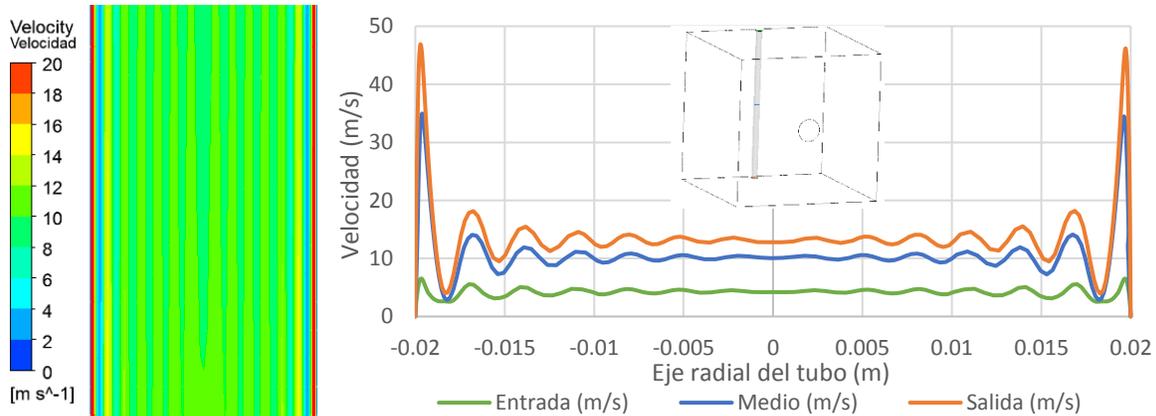


Figura 79. Distribución de velocidad en el eje radial del tubo a la entrada, salida y en el medio.

En la Figura 80 se observa que la temperatura requerida (1490 K) se alcanza tras atravesar 21 cm del lecho de partículas, de forma que un 19.5 % del volumen del medio poroso se encuentra por debajo de los 1490 K requeridos.

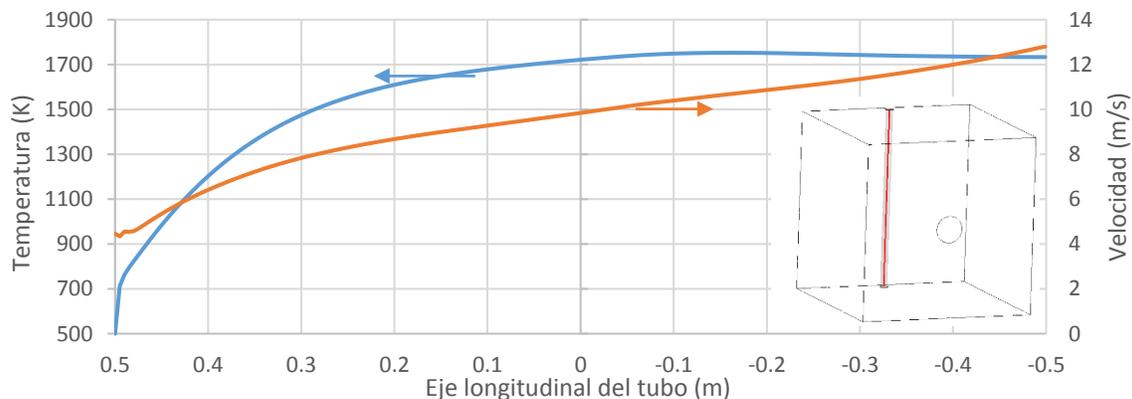


Figura 80. Distribución de temperatura y velocidad en el eje longitudinal del tubo.

Los resultados del caso base cuando se incluye el sumidero de calor, activo únicamente en el volumen del reactor donde la temperatura del lecho es superior a la temperatura requerida por el proceso, presentan una temperatura media del lecho 5 K inferior, dado que el calor requerido por la reacción es bajo en este caso particular. La temperatura de salida del gas de arrastre se reduce de 1732.5 K a 1728.5 K al incluir el sumidero de calor.

3. Conclusiones de diseño del reactor solar

Para concluir la etapa de diseño del reactor solar con la herramienta CFD de la presente metodología, se presentan los siguientes factores que permiten identificar el grado de uniformidad de temperatura alcanzado en el interior del reactor (lecho reactivo) y la eficiencia térmica del reactor, principales objetivos de esta fase de diseño. Los factores de seguimiento son:

- Temperatura media y mínima sobre la superficie exterior del tubo.
- Desviación superior e inferior de la temperatura superficial exterior del tubo con respecto a la media.
- Porcentaje del volumen reactivo en el reactor solar que se encuentra por debajo de la temperatura mínima requerida.
- Longitud del tubo para el caso de los reactores solares tubulares hasta que se alcanza la temperatura requerida.
- Temperatura media de la parte fluida y de la parte sólida del lecho.
- Potencia al proceso por convección y por conducción.
- Rendimiento óptico radiante definido como cociente entre la potencia radiante neta en la cavidad (W) y la potencia incidente (W):

$$\eta_{\text{optico}} = \frac{\text{Potencia}_{\text{incidente}} - \text{Pérdidas}_{\text{apertura}}^{\text{radiación}}}{\text{Potencia}_{\text{incidente}}}$$

- Rendimiento convectivo apertura: este índice permite evaluar las pérdidas convectivas por la apertura. Debe ser lo más próximo a la unidad de forma que las pérdidas por convección en la apertura sean mínimas. En el caso de reactores cerrados, este rendimiento es igual a la unidad. Se define a partir de la siguiente ecuación:

$$\eta_{\text{cv;apertura}} = 1 - \frac{\text{Pérdidas}_{\text{convectivas;apertura}}}{\text{Potencia}_{\text{incidente}_{\text{apertura}}}}$$

- Rendimiento conductivo-convectivo de las paredes: este rendimiento permite, al igual que en caso anterior, evaluar las pérdidas, ahora, por conducción y convección por las paredes. Debe ser lo más próximo a la unidad de forma que las pérdidas por las paredes sean bajas. Se define a partir de la siguiente ecuación:

$$\eta_{\text{CD-CV;paredes}} = 1 - \frac{\text{Pérdidas}_{\text{CD-CV;paredes}}}{\text{Potencia}_{\text{incidente}_{\text{apertura}}}}$$

Los rendimientos anteriormente mencionados son índices para evaluar el diseño de la cavidad, sin embargo, se presentan de nuevo para conocer los valores finales de los mismos para el diseño cerrado del reactor solar.

- Rendimiento térmico definido como el cociente entre la potencia al proceso y la potencia incidente.

$$\eta_{\text{proceso}} = \frac{\text{Potencia}_{\text{netatubo}}}{\text{Potencia}_{\text{incidente}_{\text{apertura}}}}$$

A continuación se presentan los parámetros definidos en la Tabla 24, para el caso base definido a lo largo de la metodología, es decir, considerando el medio poroso como un lecho de partículas y se compara con los resultados para el mismo caso pero con un lecho tipo espuma (porosidad constante igual a 0.4).

Parámetros diseño de reactor para caso base	Lecho de partículas	Porosidad constante (espuma)
Temperatura superficial media (K)	1720.4	1718.4
Temperatura superficial mínima (K)	1556.4	1264.3
Desviación máxima (%)	7.1	26.4
Desviación mínima (%)	9.5	6.3
% Volumen $T < T_{requerida}$ (%)	19.5	4.2
$L_{tubo} T < T_{requerida}$ (m)	0.21	0.05
Temperatura media del fluido (K)	1600.4	1712.1
Temperatura media del lecho(K)	1596.8	1714.6
Pérdida de carga (mbar)	489	638
Potencia incidente (W)	15000	15000
Pérdidas radiantes (W)	6561	6623
Pérdidas convectivas (W)	3738	3738
Pérdidas por conducción (W)	2150	2122
Potencia al proceso (W)	2551	2517
Potencia al proceso por convección (W)	2363	45
Potencia al proceso por conducción (W)	188	2472
Rendimiento óptico radiante (%)	56.3	55.8
Rendimiento convectivo apertura (%)	75.1	75.1
Rendimiento cond-conv paredes (%)	85.7	85.9
Rendimiento del proceso (%)	17.0	16.8

Tabla 24. Parámetros de seguimiento para el diseño del reactor.

*La temperatura media del fluido requerida es 1490 K de acuerdo con la reacción química para el caso base.

Para las mismas condiciones se observa que para un reactor de lecho de partículas, el calor se transfiere principalmente por convección (2363 W de los 2551 W) mientras que para el lecho tipo espuma, mayor contacto entre el lecho y la pared del tubo, la transferencia se produce principalmente a través de la conducción (alta conductividad de la ferrita). Debido a esto, el lecho reactivo de partículas tarda más en calentarse 21 cm frente a los 5 del lecho tipo espuma lo que a su vez implica que la temperatura superficial de este último sea inferior a la del lecho de partículas (1556.8 K frente 1264.3 K). Esto se traduce un volumen

bajo las condiciones requeridas por el proceso mayor en el caso de reactivo tipo espuma, siendo la temperatura media del mismo del orden de 100 K superior. Sin embargo, la pérdida de carga en el lecho tipo espuma es superior (150 mbar) a la del lecho de partículas. Todo ello, para los mismos rendimientos de la cavidad.

Una vez concluida esta etapa de la metodología del diseño del reactor, se obtiene un modelo detallado del diseño térmico del reactor solar, en el cual se pueden variar las condiciones de operación para obtener un mapa completo de operación previo a la experimentación del mismo. De esta forma, se pueden determinar las condiciones extremas, en cuanto a caudal máximo para que la temperatura sea superior a la requerida, o caudal mínimo para que no se supere una temperatura que provoque la sinterización del lecho reactivo, etc.

3.3.2.3 Análisis paramétrico

En este apartado, se presentan los principales parámetros que afectan al diseño térmico del reactor solar. Estos factores se pueden dividir en dos grupos: parámetros que afectan al diseño de la cavidad y parámetros que afectan al diseño/operación del reactor.

Los parámetros que afectan al diseño de la cavidad se analizan en su mayoría en el apartado de aplicaciones 4.2, donde se presentan dos casos reales de aplicación de reactor solar tubular, uno para instalación de disco y otro para torre. Estos factores son:

- Radio de apertura.
- Forma de la cavidad.
- Ventana de cuarzo.
- Distribución de los tubos.

Otros factores de diseño de la cavidad como el material de la cavidad y el aislamiento se analizan a continuación.

Los parámetros que afectan al diseño del reactor/condiciones de operación se listan a continuación:

- Diámetro de las partículas.
- Caudal del gas de arrastre.
- Temperatura de entrada del gas de arrastre.
- Perfil de radiación incidente.

En este apartado se presentan los principales resultados del análisis paramétrico de los factores del reactor/condiciones de operación y los materiales de la cavidad y aislamiento en cuanto a la cavidad. Se compara el caso base con variaciones de un único parámetro.

Las condiciones de operación del caso base de este apartado son:

- Intensidad direccional de radiación en la apertura de 850 kW/m².
- Emisividad/absortividad de 0.4 en las paredes y 0.9 en el tubo.
- Coeficiente global de transferencia en las paredes depende de la temperatura: $U = \frac{1}{\frac{1}{h_{ext}} + \frac{e_{cav}}{k_{cav}} + \frac{e_{aisl}}{k_{aisl}}}$ donde $h_{ext} = 10 \frac{W}{m^2 \cdot K}$; $e_{cav} = 0.1 m$; $e_{aisl} = 0.2 m$. El valor del coeficiente global de transferencia medio es de 0.243 W/m²·K.
- Diámetro de partícula de 3mm.
- Caudal de gas de arrastre de 6.25 kg/h (pérdida de carga ≈ 500 mbar).
- Temperatura de entrada del gas de arrastre de 500 K.

Este caso se corresponde con las condiciones de la última etapa de la metodología donde se incluyen todos los fenómenos.

1. Cavidad: materiales de la cavidad

El cambio de materiales de la cavidad afecta principalmente a las propiedades radiantes de forma que varía la emisividad de los mismos, y a las pérdidas al exterior. En este apartado se analiza el efecto sobre las temperaturas del tubo y de las paredes cuando la emisividad de las paredes de la cavidad varía entre 0.4 y 0.6 mientras que la del tubo se mantiene constante (0.9).

Este estudio se realiza únicamente sobre la cavidad, de forma que se analiza el efecto térmico. Se obtiene que al variar la emisividad en las paredes de 0.4 a 0.6, la temperatura del receptor aumenta ligeramente de 1796.4 K a 1800.2 K. Desde el punto de vista del reparto de pérdidas, en la Tabla 25 y en la Figura 81 se observa que las pérdidas radiantes disminuyen en la medida que aumentan las pérdidas convectivas – conductivas, dado que al aumentar la absortividad ligeramente las paredes aumentan su temperatura.

Emisividad	Potencia Incidente (W)	Pérdidas radiantes apertura (W)	Pérdidas convectivas apertura (W)	Pérdidas cond-conv paredes (W)
0.4	15000	7660	3865	3475
0.6	15000	7556	3878	3566

Tabla 25. Balance de energía en la cavidad para distinta emisividad en las paredes.

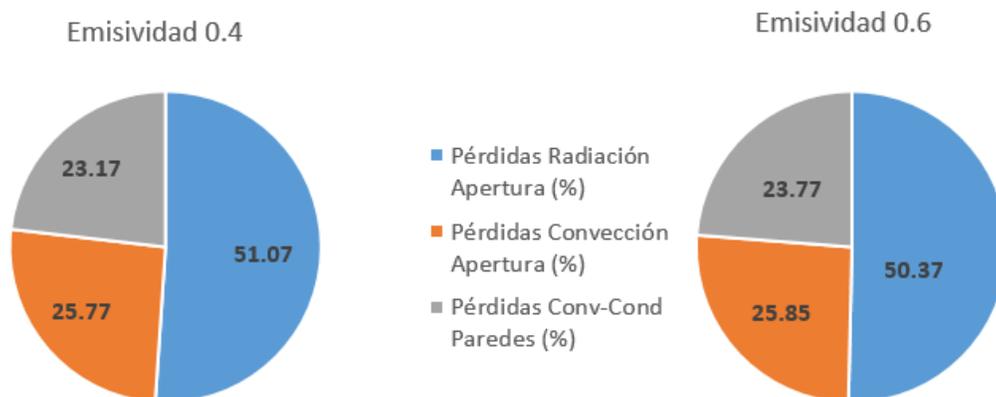


Figura 81. Reparto de pérdidas de la cavidad para distinta emisividad en las paredes.

2. Cavidad: aislamiento

En este apartado se comparan dos materiales distintos de aislamiento, óxido de silicio y Microtherm®. El aislamiento se encuentra en una segunda capa de forma que no cambian las propiedades radiantes de los materiales de la cavidad. Sin embargo, afecta en gran medida a las pérdidas por conducción y convección al exterior y por tanto a la temperatura alcanzada en la cavidad. Este análisis permite optimizar los costes de aislamiento si se realiza un análisis de materiales y espesores con respecto a las pérdidas producidas.

En este caso, se modifica el coeficiente global medio de transferencia por las paredes, el cual es de 1.092 W/m²·K. Para este coeficiente, se considera el mismo coeficiente convectivo – radiante al exterior y los mismos espesores, sin embargo, cambia la conductividad del material, la cual presenta un valor comprendido entre 0.1 y 0.25 W/m·K para este material (0.05 W/m·K en el caso base). Para el cálculo del coeficiente global de transferencia se toma una conductividad de 0.25 W/m·K.

En la Tabla 26 se presenta el balance de energía en la cavidad para ambos aislamientos. Mientras que en la Figura 82 se presentan los porcentajes que suponen dichas pérdidas.

U (W/m ² ·K)	Potencia Incidente (W)	Pérdidas radiantes apertura (W)	Pérdidas convectivas apertura (W)	Pérdidas cond-conv paredes (W)
0.234 (base)	15000	7660	3865	3475
1.092	15000	4194	2986	7820

Tabla 26. Balance de energía en la cavidad para distintos aislamientos.



Figura 82. Reparto de pérdidas de la cavidad para distintos aislamiento.

Se observa que al aumentar las pérdidas por conducción-convección al exterior cambia el reparto total de pérdidas, debido a que la temperatura en las paredes de la cavidad y del tubo disminuye considerablemente, lo que supone que disminuyan las pérdidas por radiación (proporcionales a la temperatura a la cuarta) y las pérdidas por convección (proporcionales a la temperatura). La temperatura media superficial del tubo es 1799.5 K y 1490.6 K para el coeficiente global de transferencia de 0.243 y 1.092 W/m²·K respectivamente.

3. Lecho reactivo: diámetro de partícula

La variación del diámetro de partícula afecta a la transferencia de energía, a la pérdida de carga que introduce el lecho reactivo y, aunque no se haya analizado en el modelo, a las reacciones químicas.

Desde el punto de vista de la transferencia de energía, disminuir el diámetro de partículas supone un aumento en el coeficiente de película convectivo y del área efectiva de forma que aumenta la transferencia de energía.

Desde el punto de vista de la pérdida de carga, disminuir el diámetro de partícula supone un aumento de la pérdida de carga. Esto afecta al resto de la instalación dado que se necesitará un mayor aporte de energía para mover los mismos caudales del proceso.

Por último desde el punto de vista de la reacción química, la oxidación del lecho en el caso de los ciclos termoquímicos o el catalizador para el reformado, no conllevan una reducción del diámetro de partícula. Por tanto, para reducir el gradiente térmico de la misma y reducir los tiempos de reacción interesa un diámetro de partícula pequeño [168].

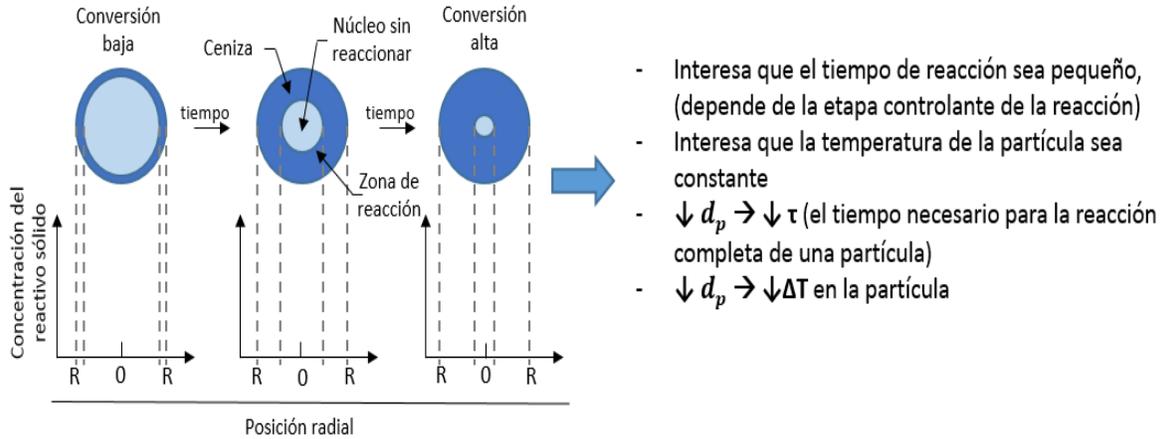


Figura 83. Efecto del diámetro de partícula sobre la reacción química (basado en [168]).

A la vista de lo anterior, se analiza el efecto del diámetro de partícula para la optimización del diseño/proceso del reactor solar. Por ello, se comparan los resultados obtenidos para los siguientes diámetros de partícula: 2, 3, 4, 5 mm, siendo 3 mm el valor utilizado en el caso base con el modelo desarrollado en la metodología. Nótese que para los casos donde el diámetro de partícula es igual a 4 y 5 mm, la expresión para el cálculo del coeficiente a de la correlación de Mueller [162] cambia debido a que la relación D_{tubo}/d_p es inferior a 13, (10 y 8 respectivamente).

En la Figura 84 se observa que a medida que disminuye el diámetro de partícula antes se alcanza la temperatura requerida (línea roja). Se observa que la temperatura de salida es la misma para todos los diámetros de partículas para este caso particular.

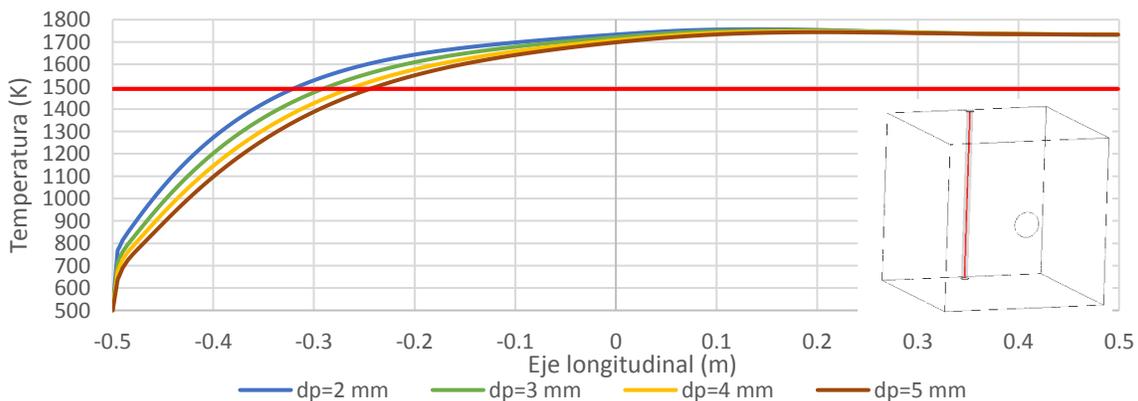


Figura 84. Evolución de la temperatura a lo largo del eje longitudinal para valores de diámetro de partícula de 2, 3 (base), 4, 5 mm.

Por otro lado, en la Figura 85, se compara la pérdida de carga y el porcentaje de volumen del lecho reactivo que se encuentra por encima de la temperatura requerida para los distintos diámetros de partícula.

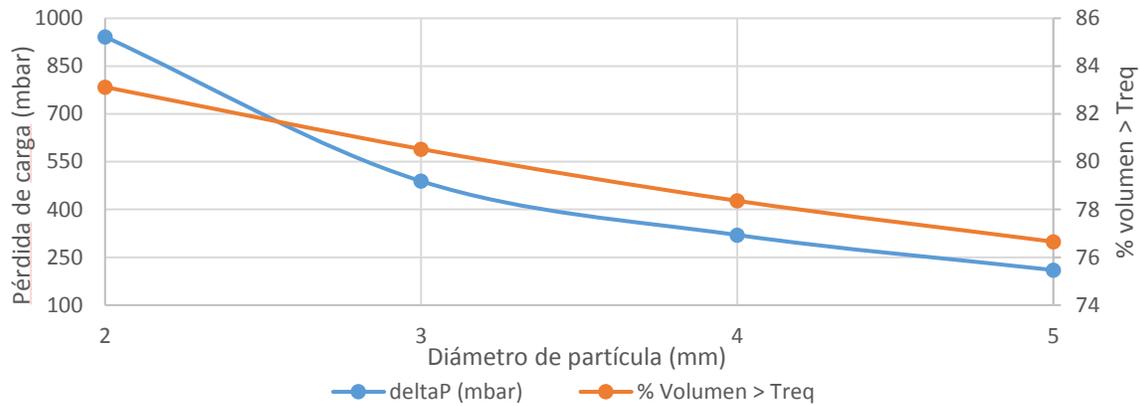


Figura 85. Comparación de pérdida de carga y porcentaje de volumen por encima de la temperatura requerida para valores de diámetro de partícula de 2, 3 (base), 4, 5 mm.

En este caso, se observa que a medida que disminuye el diámetro de partícula aumenta la pérdida de carga como cabría esperar. Se observa que a medida que aumenta el diámetro de partícula la pendiente de la pérdida de carga disminuye, esto se debe a la ecuación de Ergun. Para todos los diámetros de partícula presentados el régimen está en transición, aumentando la turbulencia con el diámetro de partícula. El cambio de pendiente se debe a que el término viscoso es proporcional a $(1/d_p^2)$, mientras que el término inercial es proporcional a $(1/d_p)$. Sin embargo, desde el punto de vista térmico, el hecho de disminuir el diámetro de partícula favorece el proceso, dado que el volumen a la temperatura requerida es mayor.

Por último en la Tabla 27, se presentan las variaciones sobre el balance de energía entre el tubo y el lecho reactivo debidas al diámetro de partícula.

d_p (mm)	\bar{T}_{fluido} (K)	$\bar{T}_{sólido}$ (K)	Q_{conv} (W)	Q_{cond} (W)	% conv	% cond
2	1620.6	1618.7	2402	149	94.16	5.84
3	1600.4	1596.8	2363	188	92.63	7.37
4	1582.6	1577.7	2345	206	91.92	8.08
5	1568.7	1562	2322	229	91.02	8.98

Tabla 27. Balance de energía en el interior del tubo para valores de diámetro de partícula de 2, 3 (base), 4, 5 mm.

Se observa que al aumentar el diámetro de partícula disminuye la transferencia por convección y aumenta la transferencia por conducción, de forma que aumenta la temperatura media alcanzada en el lecho para un mismo calor total.

Teniendo en cuenta que las reacciones químicas son más rápidas cuanto menor es el diámetro de partícula y los efectos sobre la pérdida de carga y temperatura del lecho reactivo, se obtiene una mejor eficiencia del proceso cuanto menor sea el diámetro de partícula siempre que la pérdida de carga resultante sea admisible.

4. Gas de arrastre: caudal de arrastre

La variación del caudal de arrastre afecta a la transferencia de energía, a la pérdida de carga y aunque no se haya analizado en el modelo a las reacciones químicas.

Desde el punto de vista de la transferencia de energía, aumentar el caudal de gas de arrastre, el cual se introduce a una temperatura inferior a la temperatura requerida por el proceso termoquímico, reduce la eficiencia térmica del proceso ya que una mayor parte de la energía debe emplearse para calentar el fluido.

Desde el punto de vista de la pérdida de carga, al aumentar el caudal de gas de arrastre aumenta la pérdida de carga, dado que esta aumenta de forma cuadrática con la velocidad cuando se opera en régimen turbulento y de forma proporcional para régimen laminar.

Desde el punto de vista de la reacción química, variaciones en el caudal de arrastre desplazan el equilibrio de la reacción, de forma que un aumento del mismo supone una disminución de la temperatura requerida por la reacción debido a que mejora el arrastre del oxígeno producido.

En este apartado se comparan los resultados para el caudal base (6.25 kg/h) y los casos para un 5 % y un 25 % más de caudal.

En la Figura 86 se muestra el efecto del caudal del gas de arrastre en la temperatura.

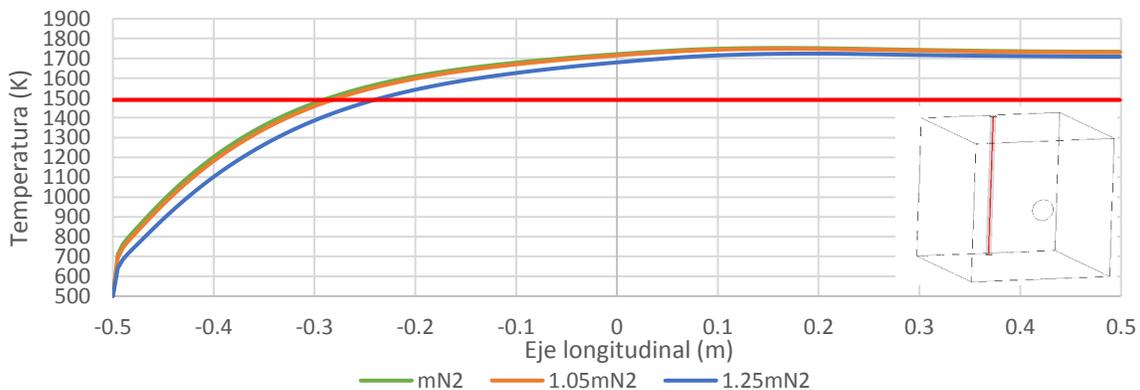


Figura 86. Evolución de la temperatura a lo largo del eje longitudinal para valores de caudal de nitrógeno de m_{N_2} (base), $1.05 \cdot m_{N_2}$ y $1.25 \cdot m_{N_2}$.

Se observa que al aumentar el caudal disminuye la temperatura del sistema dado que el caudal entra a una temperatura inferior a la del proceso. Sin embargo, este parámetro debe compararse con datos de reacción, si se tienen, dado que al aumentar el caudal, la temperatura requerida por la reacción disminuye. En el estudio de Bhosale [166] se analiza el efecto del caudal de gas de arrastre para un ciclo termoquímico de FeSO_4 . Se concluye que la temperatura requerida en la etapa de oxidación disminuye a medida que aumenta el caudal hasta que llegado un punto el aumento de caudal no presenta un gran efecto en la disminución de la temperatura requerida (ver línea verde de la Figura 87).

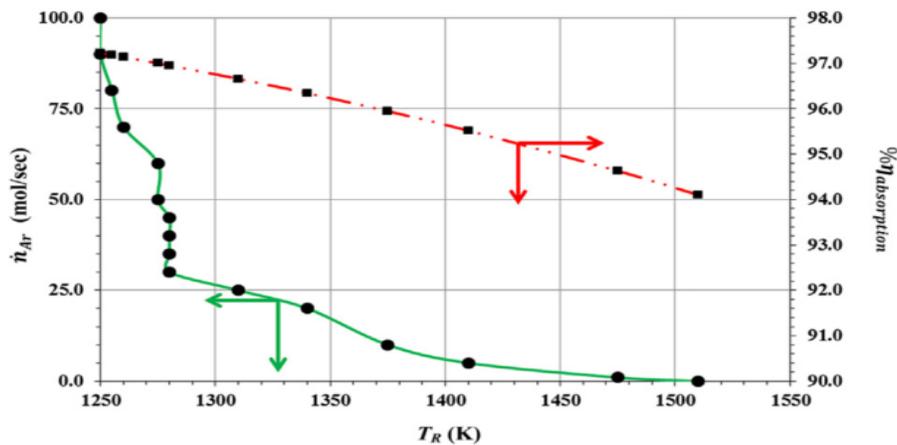


Figura 87. Variación de la temperatura requerida en la fase de oxidación del ciclo termoquímico de FeSO_4 en función del caudal de arrastre [166].

A continuación, en la Figura 88 se compara la pérdida de carga y el volumen de lecho de partículas que se encuentra por encima de la temperatura requerida por el ciclo (considerando siempre la misma temperatura e igual a 1490 K) cuando se varía el caudal de gas de arrastre.

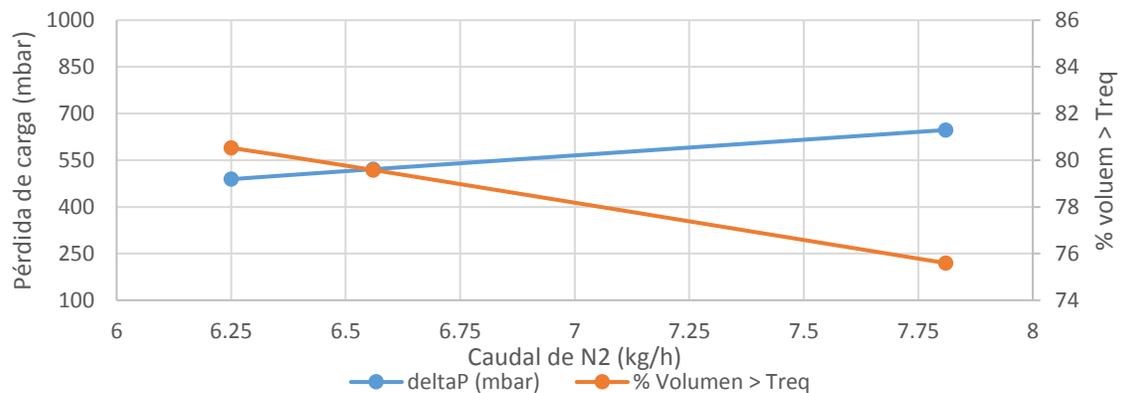


Figura 88. Comparación de pérdida de carga y porcentaje de volumen por encima de la temperatura requerida para valores de caudal de nitrógeno de \dot{m}_{N_2} (base), $1.05 \cdot \dot{m}_{N_2}$ y $1.25 \cdot \dot{m}_{N_2}$.

Se observa que un aumento en el caudal de arrastre, supone un aumento de la pérdida de carga, aunque en menor medida que las variaciones sobre el diámetro de partículas. Sin embargo, desde el punto de vista térmico, el aumento de caudal reduce considerablemente el volumen a la temperatura requerida por el ciclo debido a que la temperatura de entrada es inferior a la requerida.

Por último en la Tabla 28, se presentan las variaciones sobre el balance de energía entre el tubo y el lecho reactivo debidas al caudal de gas de arrastre.

\dot{m}_{N_2} (kg/h)	\bar{T}_{fluido} (K)	$\bar{T}_{sólido}$ (K)	Q_{conv} (W)	Q_{cond} (W)	Q_{total} (W)
6.25	1600.4	1596.8	2363	188	2551
6.56 (x1.05)	1591.6	1588	2469	184	2653
7.81(x1.25)	1550.3	1546.3	2870	206	3076

Tabla 28. Balance de energía en el interior del tubo para valores de caudal de nitrógeno de \dot{m}_{N_2} (base), $1.05 \cdot \dot{m}_{N_2}$ y $1.25 \cdot \dot{m}_{N_2}$.

Se observa que al aumentar el caudal de gas de arrastre aumenta el calor total transferido, principalmente por convección debido a que la mayor transferencia se produce a través del fluido. Por otro lado, debido al aumento de caudal, la temperatura media de la parte fluida y sólida del lecho de partículas disminuye.

Para determinar el caudal óptimo de gas de arrastre del proceso se debe analizar el efecto sobre la reacción, ya sea incluyendo la reacción química en el modelo si se tienen los datos de la misma o de forma experimental. Desde el punto de vista térmico y de pérdida de carga interesa un caudal de gas de arrastre pequeño, aunque siempre se incluye para arrastrar el oxígeno producido en la etapa de oxidación del ciclo termoquímico y porque la reacción química se desplaza de forma que se reduce la temperatura requerida manteniendo la eficiencia.

5. Gas de arrastre: temperatura de entrada

La temperatura de entrada del gas de arrastre afecta principalmente a la eficiencia térmica del reactor debido a que cuanto mayor sea la temperatura de entrada menos energía radiante tendrá que ser empleada en calentar el fluido.

Desde el punto de vista de la pérdida de carga, el efecto de aumentar la temperatura supone un aumento en la velocidad del gas de arrastre y por tanto en la presión, aunque este efecto puede considerarse prácticamente despreciable.

Desde el punto de vista de la reacción química, un aumento de temperatura supone mejorar la reacción química siempre que no se alcancen temperaturas que lleven a la sinterización [166], [168].

En este análisis se presentan los resultados para las temperaturas de entrada de 300 K, 500 K (temperatura del caso base) y 800 K. Si se tiene en cuenta la

eficiencia global de la instalación, se observa que el caudal del gas de arrastre con oxígeno a la salida del reactor supone una corriente con gran energía debido a las altas temperaturas de la etapa, por tanto se puede incluir un precalentador para la corriente de entrada con la corriente de salida. Un estudio del precalentador se presenta en el apartado 4.2.1.

En la Figura 89 se presenta la evolución de la temperatura a lo largo del eje longitudinal del tubo para distintas temperaturas de entrada del gas de arrastre.

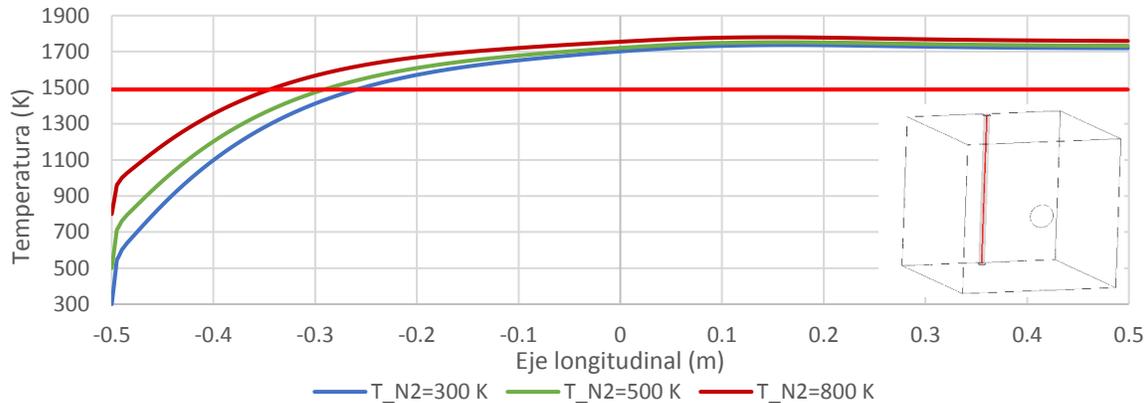


Figura 89. Evolución de la temperatura a lo largo del eje longitudinal para valores de temperatura de nitrógeno de 300 K, 500 K (base) y 800 K.

Se observa que un incremento de la temperatura de entrada del gas supone un incremento en la temperatura de salida (en menor medida) y dado que la zona más fría del reactor es la entrada, disminuye el gradiente térmico a través del tubo y la longitud del tubo con temperatura inferior a la requerida.

A continuación, en la Figura 90 se compara la pérdida de carga y el volumen de lecho de partículas que se encuentra por encima de la temperatura requerida por el ciclo cuando se varía la temperatura de entrada del gas de arrastre.

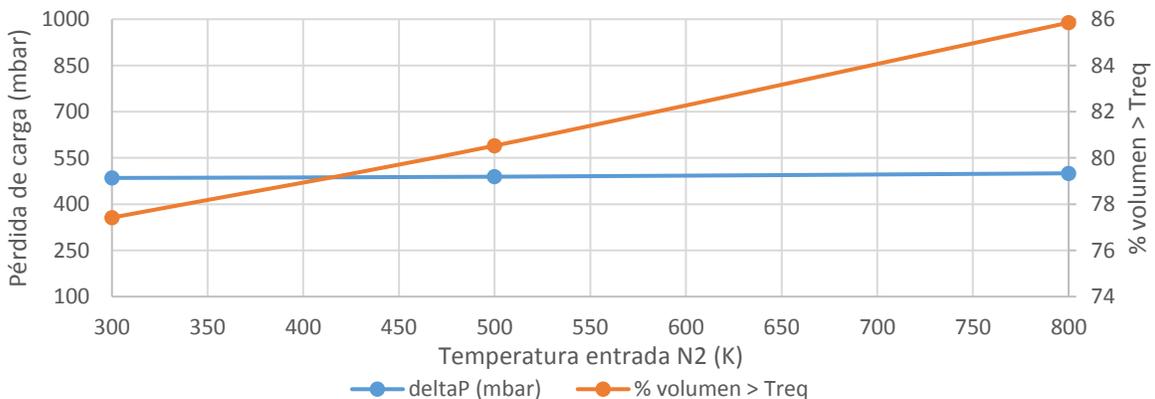


Figura 90. Comparación de pérdida de carga y porcentaje de volumen por encima de la temperatura requerida para valores de temperatura de nitrógeno de 300 K, 500 K (base) y 800 K.

Se observa que variaciones en la temperatura de entrada del gas de arrastre supone variaciones en la pérdida de carga despreciables, aumentando considerablemente el porcentaje de volumen del lecho reactivo que se encuentra por encima de la temperatura requerida.

Por último en la Tabla 29, se presentan las variaciones sobre el balance de energía entre el tubo y el lecho reactivo debidas al caudal de gas de arrastre.

$T_{N_2}(\text{K})$	$\bar{T}_{fluido}(\text{K})$	$\bar{T}_{sólido}(\text{K})$	$Q_{conv}(\text{W})$	$Q_{cond}(\text{W})$	$Q_{total}(\text{W})$
300	1562.1	1557.9	2651	209	2860
500	1600.4	1596.8	2363	188	2551
800	1660.7	1658.1	1860	132	1992

Tabla 29. Balance de energía en el interior del tubo para valores de temperatura de nitrógeno de 300 K, 500 K (base) y 800 K.

Se observa que al aumentar la temperatura del gas de arrastre disminuye el calor total transferido. Por otro lado, al aumentar la temperatura, aumentan las temperaturas medias de la parte fluida y sólida del lecho de partículas y dado que la temperatura de salida es similar en todos los casos, se homogeniza la temperatura del lecho mejorando así las prestaciones del reactor desde el punto de vista de la reacción.

La eficiencia térmica del sistema mejora cuando aumenta la temperatura de entrada del gas de arrastre siempre que no se alcancen temperaturas de sinterización del lecho reactivo. Por tanto, este aumento de temperatura debe hacer aprovechando la energía de la corriente del gas de arrastre a la salida del reactor dado que no supone un consumo extra de energía.

6. Potencia incidente: Perfil de radiación

El perfil de radiación incidente variará a lo largo del día y a lo largo de los días en función de la posición del sol. Esta variación de la potencia incidente afecta principalmente a las temperaturas alcanzadas en el reactor de forma que al aumentar aumenta la temperatura. Este hecho a su vez afecta al comportamiento del lecho reactivo (la pérdida de carga y las reacciones químicas del sistema) de forma que al aumentar la temperatura aumenta la pérdida de carga porque aumenta la velocidad del gas de arrastre y mejora la conversión química.

Para tener un mapa de operación de la variación de la radiación solar incidente en este apartado se analiza el caso base de la metodología para tres intensidades en la apertura: 650 kW/m², 850 kW/m² (caso base) y 1100 kW/m².

En la Figura 91 se presenta la evolución de la temperatura a lo largo del eje longitudinal del tubo para distintas intensidades de radiación en la apertura.

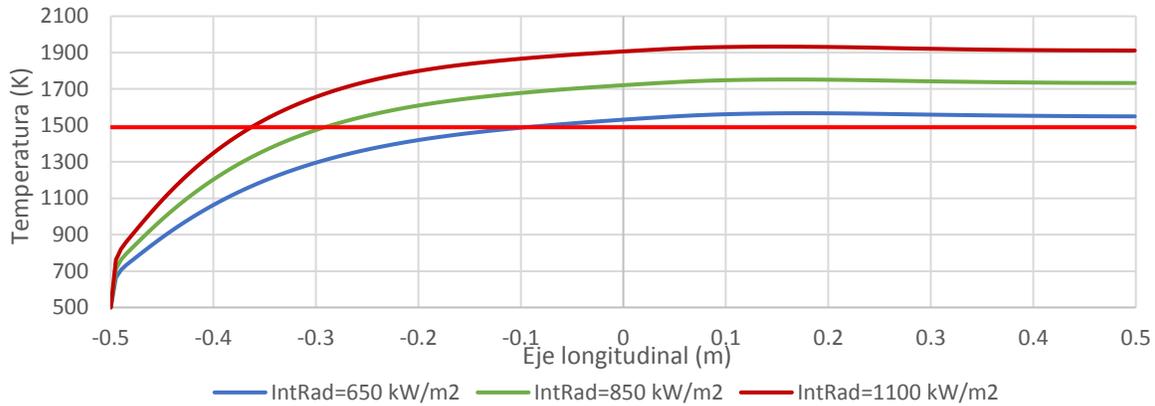


Figura 91. Evolución de la temperatura a lo largo del eje longitudinal para valores de intensidad de radiación 650 kW/m² (11.5 kW), 850 kW/m² (15kW) (base) y 1100 kW/m² (19.4 kW).

Se observa que un incremento de la potencia de entrada en la apertura supone un incremento en la temperatura de salida. Cuando se reduce la potencia incidente un 23.3 % aumenta unos 20 cm más la distancia a recorrer para alcanzar la temperatura requerida mientras que cuando se aumenta 29.3 % sólo se reduce en 7 cm la distancia con respecto al caso base. Esto se debe a que las temperaturas mínimas se encuentran en la parte superior (entrada) y en esta zona la radiación no incide directamente.

A continuación, en la Figura 92 se compara la pérdida de carga y el volumen de lecho de partículas que se encuentra por encima de la temperatura requerida por el ciclo cuando se varía la potencia de entrada a la cavidad.

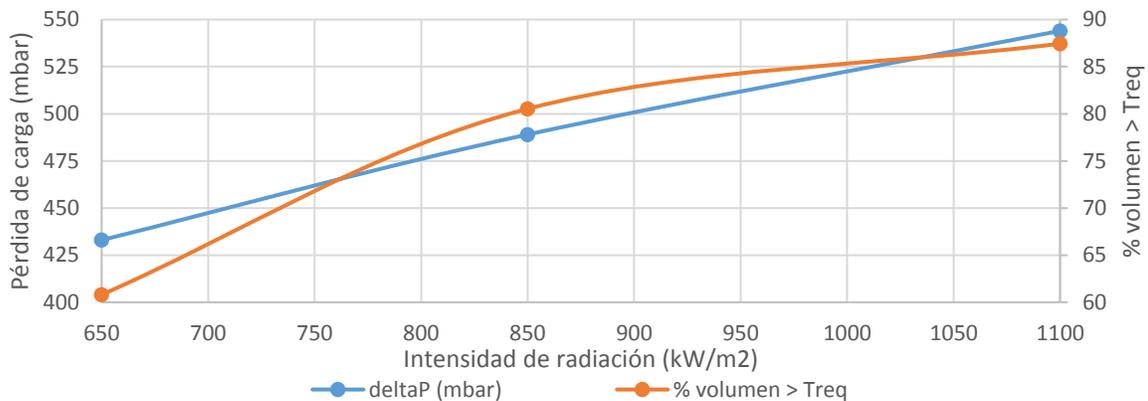


Figura 92. Comparación de pérdida de carga y porcentaje de volumen por encima de la temperatura requerida para valores de intensidad de radiación 650 kW/m², 850 kW/m² (base) y 1100 kW/m².

Se observa que al aumentar la potencia incidente, el porcentaje del lecho que se encuentra a mayor temperatura de la requerida aumenta en menor medida desde los 15 kW hasta los 19.4 kW que frente al aumento desde los 11.5 kW hasta

los 15 kW. Esto se debe principalmente al aumento de transferencia de calor por convección de forma que se alcanza la temperatura requerida en un recorrido del tubo menor. En cuanto a la pérdida de carga, se observa que aumenta con la potencia de forma lineal debido al aumento que se produce en la velocidad al aumentar la temperatura.

Por último en la Tabla 30, se presentan las variaciones sobre el balance de energía entre el tubo y el lecho reactivo debidas a la potencia incidente.

Intensidad (kW/m²)	$\bar{T}_{fluido}(K)$	$\bar{T}_{sólido}(K)$	$Q_{conv}(W)$	$Q_{cond}(W)$	$Q_{total}(W)$
650	1424.6	1421.5	1958	162	2120
850	1600.4	1596.8	2363	188	2551
1100	1774.4	1770.5	2759	189	2948

Tabla 30. Balance de energía en el interior del tubo para valores de intensidad de radiación 650 kW/m², 850 kW/m² (base) y 1100 kW/m².

Se observa que la potencia al tubo no varía en la misma medida que la potencia incidente, esto se debe principalmente a las pérdidas por radiación, 4249 W, 6561 W y 9929 W para 650 kW/m², 850 kW/m² y 1100 kW/m² de intensidad de radiación respectivamente, mientras que las pérdidas por convección y conductivas – radiantes varían en menor medida.

7. Conclusiones del análisis paramétrico

A continuación, se recopilan las conclusiones obtenidas para el análisis paramétrico realizado para el caso base:

- Al aumentar la emisividad en las paredes, la temperatura de las mismas aumenta ligeramente. Este factor puede favorecer el aumento de las temperaturas mínimas también los tubos de la hilera más cercana a las paredes cuando se disponen en varias hileras.
- Se obtiene una mejor eficiencia del proceso cuanto menor sea el diámetro de partícula siempre que la pérdida de carga resultante sea admisible. Para menores diámetros de partículas, mayor parte del lecho reactivo alcanza temperaturas superiores a la requerida debido al aumento de velocidad en el interior del lecho reactivo.
- El caudal de gas de arrastre depende de la reacción química del proceso dado que desplaza el equilibrio de la misma (a mayor caudal, menor temperatura requerida manteniendo la eficiencia hasta cierto caudal). Desde el punto de vista térmico y de pérdida de carga interesa un caudal de gas de arrastre pequeño, dado que se reduce la entrada de una corriente fría al sistema y la velocidad (pérdida de carga).

- Un incremento de la temperatura de entrada del gas supone un incremento en la temperatura de salida (en menor medida) y dado que la zona más fría del reactor es la entrada, disminuye el gradiente térmico a través del tubo y la longitud del tubo con temperatura inferior a la requerida, mejorando la eficiencia del sistema.
- La potencia a la superficie de interés (tubo/reactivo) no varía en la misma medida que la potencia incidente en la apertura, debido principalmente a las pérdidas por radiación. Por ello, la cavidad debe diseñarse para la potencia media, de forma que se reduzcan en mayor medida las pérdidas por radiación en la situación más representativa de la operación del sistema.

3.3.3 Pautas de la metodología

Se indican a continuación, a modo de conclusiones del capítulo, las principales pautas a seguir en la metodología.

Las principales pautas para la selección del diseño inicial se pueden resumir en:

- Se propone tomar el radio calculado por Steinfeld (ver apartado 3.3.1.1) como dato de partida del radio de apertura para todos los tipos de reactores solares.
- En cuanto a la geometría de la cavidad debe seleccionarse una geometría que reduzca las pérdidas por reflexiones y se obtenga una distribución de la radiación uniforme. Se recomienda una geometría cilíndrica para reactores de disco y semicilíndrica para un reactor de torre donde la radiación incide por un lateral (ver apartado 3.3.1.3). El tamaño de la cavidad debe ser el menor posible para reducir los transitorios térmicos.
- En el caso de reactores volumétricos debe incluirse una ventana para cerrar la cavidad donde se lleva a cabo la reacción química, mientras que para reactores tubulares esta se incluirá en función de las pérdidas por convección del sistema, las cuales dependen del ángulo de inclinación de reactor solar, del radio de apertura, etc. (ver apartado 3.3.1.2).
- En cuanto a la inclinación de la cavidad analizada en el apartado 3.3.1.5, se recomienda un ángulo de inclinación superior a 0° con el objetivo de reducir las pérdidas convectivas para una instalación de torre. En la metodología se propone un ángulo de inclinación de 30° , debido a que la zona de aire estancado es estable a partir de este ángulo de inclinación.
- Para los reactores tubulares de torre, la disposición de los tubos propuesta en la metodología es tubos en hileras en configuración cruzada. En caso, de que el número de hileras obtenido sea superior a 3, se propone aumentar el diámetro de los tubos para reducir el número y evitar que se

penalicen unos a otros. En el diseño de reactores tubulares solares de disco, los tubos suelen presentarse de forma embobinada, tanto alrededor de la cavidad como en forma de toroide. (Ver apartado 3.3.1.6).

Para el desarrollo de la metodología de la presente Tesis Doctoral se utiliza la herramienta de simulación ANSYS-CFX tanto para el diseño de la cavidad como para el diseño del reactor y el análisis paramétrico de las distintas variables. La metodología establece dos etapas: el diseño de la cavidad y el diseño del reactor.

Los pasos necesarios para el diseño de la cavidad se resumen a continuación:

- En función del estudio que se quiera llevar a cabo se debe seleccionar un volumen de control. Para el diseño de la cavidad, el volumen de control es la propia cavidad con o sin incluir el espesor de la misma y del aislante sin incluir el espesor de los tubos y el lecho reactivo. Para el diseño del reactor, se incluye la geometría final de la etapa de diseño de la cavidad junto con los volúmenes sólidos. Por otro lado, si se realiza un análisis del viento o las pérdidas por convección son elevadas, se necesita incluir el ambiente exterior a la cavidad (ver apartado 3.3.1.5). La herramienta ANSYS-CFX permite importar geometrías y mallas desde distintos programas de diseño gráfico tales como step, iges, stl o catia o el utilizado en la presente metodología ICEM-CFD.
- En la metodología se propone resolver la turbulencia con el modelo de turbulencia SST (ver apartado 3.2.1) dado que mejora la precisión de resultados en la capa límite y por tanto la resolución de la convección. Para que los resultados de transferencia de calor por convección sean independientes de la malla debe comprobarse que el y^+ es menor que 1. Para el software comercial ANSYS – CFX cuando se utiliza la condición de *automatic wall function*, se garantiza directamente un y^+ menor o igual que 1.
- Para resolver la transferencia de calor por radiación, en la presente metodología se selecciona el modelo de Monte Carlo para la dependencia direccional porque permite incluir la direccionalidad de la radiación incidente en la cavidad de forma directa en la apertura (apartado 3.2.2.1). Al incluir el perfil de radiación incidente sobre la apertura con la direccionalidad de los rayos, se puede utilizar el mismo perfil de radiación para todas las iteraciones de la fase de diseño de cavidad. En aquellos casos particulares, donde la direccionalidad puede despreciarse, el modelo DO presenta un menor coste computacional con resultados precisos. Por otro lado, se considera intercambio entre superficies dado que tanto para una atmósfera abierta (aire) como para una atmósfera cerrada con gas inerte el medio no es participativo (apartado 3.2.2.4). Por último, en función de las propiedades de los materiales y el rango de temperaturas

para las que se diseña, se selecciona un modelo gris o multibanda para la dependencia espectral (apartado 3.2.2.2).

- A continuación, una vez seleccionados los modelos de turbulencia y radiación, debe realizarse el análisis de malla frente al número de histories. Este estudio debe ser simultáneo para obtener una buena precisión de los resultados con el menor coste computación, a diferencia de los estudios encontrados en la literatura. Se recomienda comparar un mínimo de 3 mallas con una relación de al menos 1.3 en el número de nodos por cada dimensión e iniciar las simulaciones con un mínimo de 10^6 histories (se demuestra que el valor por defecto es muy bajo) hasta que se estabilicen los parámetros de seguimientos establecidos, y entonces aumentar el número de histories hasta alcanzar un % SD máximo de 30 %. Si los recursos computacionales lo permiten, reducir el % SD reduce la desviación (ruido) en los resultados.
- Esta metodología propone incluir el perfil de radiación en la apertura, a diferencia de muchos de los modelos encontrados en la literatura [119], [121], [125], debido a que está enfocada al diseño térmico del reactor solar. Incluir el perfil de radiación en esta posición permite utilizar un único perfil de radiación para todas las iteraciones de la etapa de diseño de la cavidad, esto no puede hacerse si el perfil se incluye directamente en las paredes. Para poder evaluar la proyección del perfil de radiación en las paredes de la cavidad, este debe incluirse con direccionalidad y ser modelado a partir de un modelo que tenga en cuenta dichas direcciones, en este caso el método de MC. El perfil de radiación incluido puede ser medido experimentalmente o calculado, en función de los datos disponibles.

Los pasos necesarios para el diseño del reactor se resumen en:

- Inicialmente, al igual que en el diseño de la cavidad, debe realizarse un análisis de malla el cual se especifica en el apartado 3.3.2.2 paso 1 de acuerdo con el tipo de reactivo. Además, se recomienda una relación de aspecto de 1:1 entre la malla de la cavidad y del sólido (ver paso 2 del apartado 3.3.2.1). Por otro lado, para evaluar el gradiente térmico por conducción en el espesor de los sólidos (tubos), debe considerarse al menos 4 elementos en el mismo.
- La pérdida de carga en el lecho reactivo se modela de acuerdo con la ecuación de Ergun (ver apartado 3.2.3.1) dado que puede utilizarse para determinar la caída de presión que experimenta un fluido al atravesar un lecho poroso incompresible independientemente del régimen de circulación. Por ello, se selecciona un modelo de pérdida de carga

isotrópico donde los coeficientes lineal y cuadrático se corresponden con los de la ecuación de Ergun.

- La transferencia de calor entre las partículas y el gas inerte se modela a partir del coeficiente de película entre el fluido y las partículas y el área efectiva de intercambio. Para el coeficiente de transferencia se presentan distintas correlaciones en el apartado 3.2.3.2 de la metodología, de forma que debe seleccionarse la que mejor se ajuste a las características del sistema en el caso de que no se tengan datos experimentales. El área efectiva se calcula a partir del diámetro medio de partícula y la porosidad del lecho.
- Además, en esta metodología, se define el medio poroso (porosidad) en función del tipo de reactivo. Se estudia simultáneamente el efecto de las partículas en la porosidad y el diseño térmico para lechos reactivos de partículas, en la literatura sólo se encuentran estudios térmicos de reactores con medio poroso cuando el lecho es de tipo espuma o monolito (porosidad constante). Es importante incluir la variación radial de la porosidad en los reactores de partículas dado que afecta considerablemente al calentamiento del sistema obteniéndose resultados más optimistas cuando no se incluye dicho efecto, es decir porosidad constante en el lecho.
- En este bloque de la metodología, se incluye el gas de arrastre o reactivos en función de proceso, definiendo el caudal y la temperatura de entrada.

Se concluye que a lo largo de este capítulo se ha desarrollado una metodología detallada para el diseño térmico de un reactor solar. En esta metodología se han considerado los fenómenos de radiación, convección y conducción que se producen en función de la configuración del reactor y del tipo de reactivo utilizado para el proceso seleccionado.

“La mejor forma de predecir el futuro es implementarlo”

David Heinemeier Hansson – creador de Ruby on Rails

4 VALIDACIÓN Y APLICACIONES

Este capítulo se divide en dos secciones: validación de la metodología y aplicaciones de la misma. En la primera sección, se valida principalmente el modelo de radiación empleado en la metodología. Para ello, en primer lugar, se comparan los resultados obtenidos para una geometría dada del modelo de MC en ANSYS – CFX con los resultados de TracePro®. En segundo lugar, se comparan los resultados obtenidos a partir de la metodología con resultados experimentales de un reactor solar propuesto por IMDEA Energía. En la segunda sección, se presentan dos aplicaciones de la metodología de la presente

Tesis Doctoral para el diseño de reactores solares, uno para instalación de torre de 250 kW y otro para una instalación de disco de 25 kW. Ambos reactores solares son tubulares y se diseñan para la producción de hidrógeno a partir del ciclo termoquímico de ferrita.

4.1 VALIDACIÓN

La validación de los modelos empleados en la metodología de diseño de reactores solares se ha realizado en dos fases. Ambas están enfocadas a validar el modelo de radiación implementado por ser el de mayor relevancia en el diseño.

La mayoría de los estudios encontrados en la literatura utilizan el modelo de radiación DO incluyendo el perfil incidente directamente sobre las paredes [119], [121], [125], por ello, se propone en un primer lugar, validar la precisión de la proyección del perfil de radiación en las paredes con el modelo MC cuando se incluye en la apertura. La validación se ha realizado comparando los resultados de la simulación con los resultados obtenidos independientemente por IMDEA Energía, en el marco de un proyecto de investigación conjunto, mediante el software comercial TracePro® 7.0 [144].

En segundo lugar, se ha validado el modelo con resultados experimentales para un reactor solar volumétrico existente en las instalaciones de IMDEA Energía. En este caso, se ha realizado una comparación entre los resultados de la simulación CFD (desarrollada acorde a la metodología) con los valores experimentales de 3 termopares situados en el interior de la cavidad. La geometría y los resultados experimentales son proporcionados por IMDEA Energía.

4.1.1 Validación de la proyección del perfil de radiación sobre las paredes

Para validar la proyección del perfil de radiación como condición de contorno en la apertura para la metodología, se plantea una cavidad rectangular. La validación consiste en comparar la distribución de la radiación incidente en la pared obtenida con el modelo MC en ANSYS-CFX con los resultados obtenidos con TracePro® 7.0.

4.1.1.1 Descripción de la geometría

La geometría utilizada consiste en una cavidad de sección cuadrada de lado 4 m y una profundidad de 2 m, con una apertura de 48 cm de diámetro (ver Figura 93).

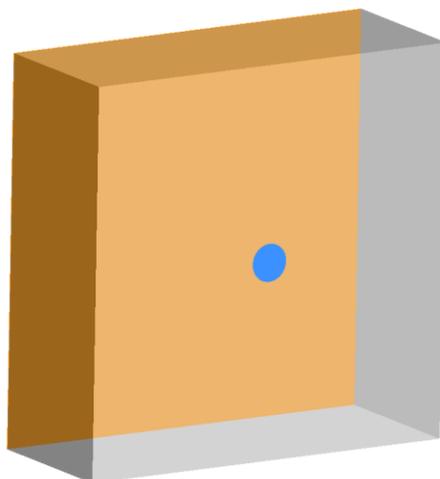


Figura 93. Geometría para validación modelo MC vs TracePro.

4.1.1.2 Descripción del modelo

De acuerdo con la metodología, el modelo de radiación utilizado es Monte Carlo y superficie-superficie (medio no participativo). La emisividad en las paredes de la cavidad es igual a la unidad. En la Figura 94 se presenta el perfil de radiación en la apertura, las fluctuaciones están asociadas a la reflexión y apunte del campo de helióstatos. Este se incluye junto con la dirección de los rayos como condición de contorno en la apertura. El punto de diseño para obtener el perfil de radiación seleccionado se corresponde con el día 81 del año a las 12:00 horas solar, con una latitud de 37.4° N, para una altura sobre el nivel del mar de 148 m y una irradiancia normal directa de 850 W/m^2 y ha sido proporcionado por IMDEA Energía.

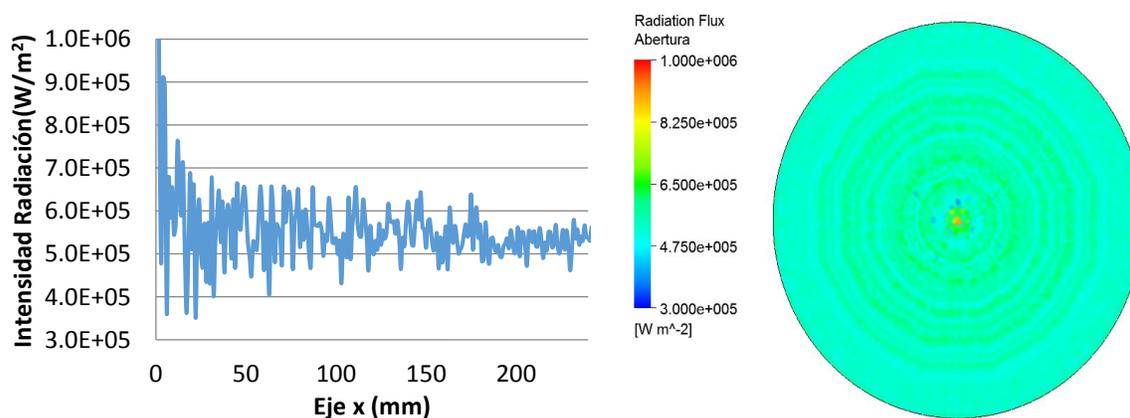


Figura 94. Intensidad de radiación en la apertura.

Para poder comparar los resultados de proyección sobre las paredes con los resultados de TracePro® 7.0, se incluye en la simulación CFD un coeficiente global de transferencia elevado en las paredes de forma que se evalúe

únicamente el efecto de la proyección de la radiación en la pared del fondo (receptor), sin que se vea afectado por el intercambio de calor por diferencia de temperatura entre las paredes.

4.1.1.3 Análisis de resultados

En la Figura 95 se comparan los resultados de radiación incidente sobre la pared del receptor de ANSYS – CFX (derecha) con los resultados de TracePro® 7.0 (izquierda) obtenidos por IMDEA Energía. Los valores indicados numéricamente representan la potencia incidente en la subdivisión central del receptor.

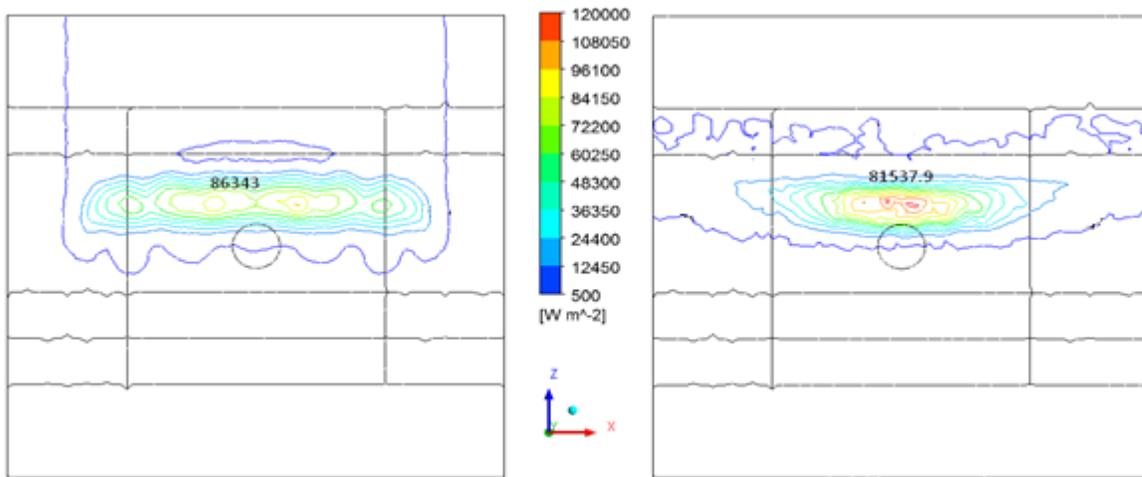


Figura 95. Isolíneas de intensidad de radiación en la pared del fondo de la cavidad. TracePro® 7.0 (Izquierda). ANSYS-CFX 14.0 (Derecha).

En la Figura 95 se aprecia que la distribución de radiación obtenida con ANSYS – CFX 14.0 es más uniforme que la de TracePro® 7.0 dado que las líneas de nivel de intensidad de radiación en los resultados de TracePro® 7.0 están más próximas entre ellas. Sin embargo, el gradiente obtenido es mayor dado que la intensidad de radiación máxima alcanzada en ANSYS – CFX 14.0 es mayor, mientras que el área que abarca la proyección de dicha intensidad es menor. Por tanto, cuando se integra la radiación incidente en la sección central se obtiene un error entre ambos modelos del 5.5 %.

Comparando la intensidad de la radiación incidente, el valor pico obtenido con la herramienta ANSYS – CFX 14.0 es un 20 % superior al de TracePro® 7.0 mientras que la altura de ambas proyecciones es la misma, 0.65 m en el centro.

Se obtiene que la diferencia entre ambos modelos es del orden del 5.5 % en la zona central y dado que la intensidad pico es un valor puntual, se concluye que la proyección de la intensidad de radiación sobre las paredes con el modelo MC utilizado en ANSYS – CFX 14.0 es válida para el diseño de reactores solares.

4.1.2 Validación del modelo con resultados experimentales en un reactor solar

La validación del modelo de radiación se ha realizado comparando los resultados obtenidos a partir de la metodología del capítulo anterior con los resultados y experimentación realizada por IMDEA Energía para un reactor volumétrico.

4.1.2.1 Descripción de la geometría

El reactor utilizado para validar los modelos incluidos en la metodología, consiste en un reactor volumétrico para la producción de hidrógeno mediante ciclos termoquímicos. Consta de una cavidad de alúmina cerrada con una ventana de cuarzo en cuyo interior se sitúa una muestra de grafito. El gas de arrastre utilizado es argón y se introduce por cuatro entradas situadas a 90 ° entre sí en las cercanías de la ventana (ver Figura 96).

Para realizar la validación del modelo con los datos experimentales, se dispone de 3 termopares situados en las posiciones TC_i para $i= 1, 2, 3$ de la Figura 96.

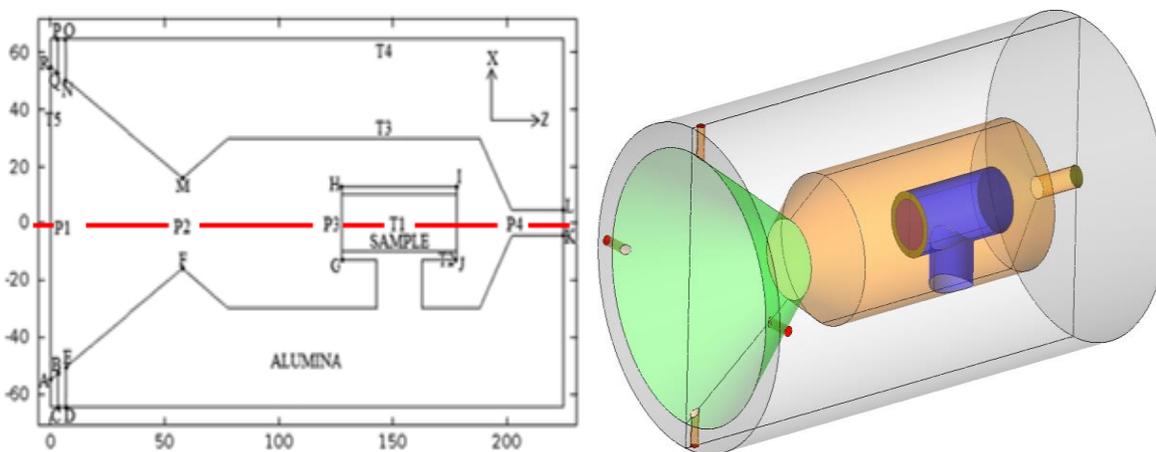


Figura 96. Geometría del reactor, cotas en mm.

Por otro lado, se comparan los resultados de simulación realizados con COMSOL Multiphysics por IMDEA Energía con CFX – ANSYS de la presente Tesis Doctoral, en este caso, se comparan los resultados de temperatura obtenidos en la línea central del reactor formada (línea roja de P1 a P4 en Figura 96) para distintos caudales de gas de arrastre y posiciones de la muestra.

4.1.2.2 Descripción de la experimentación realizada por IMDEA Energía

El simulador solar utilizado para la generación de radiación solar concentrada consiste en una lámpara arco xenón de 7 kW_e y de un espejo elíptico. La potencia máxima capaz de alcanzarse es de 2.1 kW, siendo el flujo máximo de radiación de 2.7 kW/m². Para medir la distribución de radiación concentrada en la

superficie específica, se aplican las técnicas comúnmente utilizadas de métodos directos e indirectos. El método directo se basa en la medición del flujo en un único punto usando un radiómetro, en este estudio se hace con un calorímetro tipo Gardon (Vatell TG1000). El método indirecto se basa en la medición de la distribución de flujo bajo el blanco lambertiano con una cámara CCD. En esta investigación, las mediciones del calorímetro de tipo Gardon se utilizan para convertir las imágenes en escala de grises de la cámara CCD para obtener la distribución de flujo. Por lo tanto, la distribución del flujo de radiación sobre la superficie se obtiene mediante la combinación de ambas técnicas. El reactor solar se coloca en línea con el eje óptico del simulador y la distribución del flujo de radiación en la superficie del blanco se mide para diferentes distancias de la muestra, el máximo flujo se obtiene a una distancia de la muestra de 70 mm ya que esta es la más próxima a la longitud focal del simulador. La experimentación ha sido desarrollada por IMDEA Energía.

4.1.2.3 Descripción del modelo

Para la validación con datos experimentales se introducen los datos del reactor volumétrico de acuerdo con la metodología descrita para los datos disponibles.

En primer lugar, se realiza un análisis de malla y de número de histories. En este caso, el perfil de radiación se introduce sobre las paredes debido a que es el dato experimental disponible, siendo desconocido el perfil de radiación en la apertura. Esta condición de contorno se incluye como una fuente de radiación isotrópica en función del radio en el frustum (superficie cónica) y en el receptor cuando la muestra se encuentra a 70 mm de acuerdo con la Figura 97.

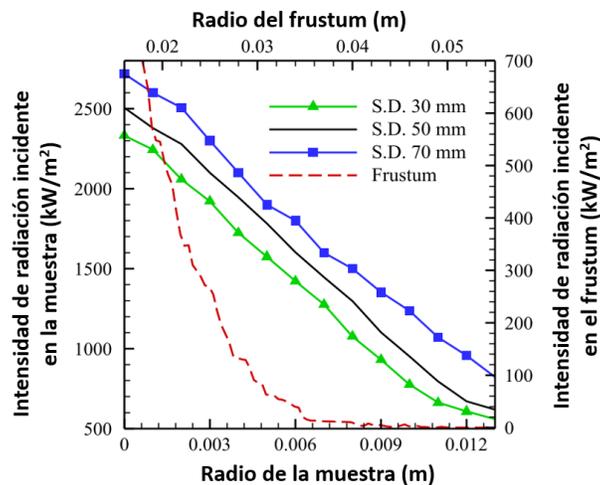


Figura 97. Radiación incidente en el frustum y el frontal de la muestra [125].

Tras el análisis de independencia de malla y número de histories se obtiene una malla de 151.986 nodos y 574.610 elementos y número de histories de $25 \cdot 10^6$. En este caso, el modelo de turbulencia de la cavidad es laminar dado que $Re < 150$.

El material de la cavidad es alúmina mientras que la muestra es de grafito. Para estos materiales se incluye la conductividad en función de la temperatura mientras que el calor específico es de $1025 \text{ J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$ para la alúmina y de $712 \text{ J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$ para el grafito y las densidades son 3900 y $1850 \text{ kg}/\text{m}^3$ respectivamente. En cuanto a las propiedades radiantes superficiales, la emisividad de la alúmina es de 0.07 y la del grafito de 0.88 .

El gas de arrastre, argón, se define como gas ideal dado que es un gas noble. La densidad, la viscosidad dinámica y la conductividad térmica se definen en función de la temperatura, mientras que el calor específico es igual a $520 \text{ J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$. El caudal de argón introducido por las 4 entradas es de 9 LPM a 300 K .

Por último, se considera un coeficiente convectivo de $5 \text{ W}/\text{m}^2 \cdot \text{K}$ con una temperatura exterior de 300 K para las pérdidas por las paredes al exteriores.

4.1.2.4 Análisis de resultados

En la Tabla 31, se comparan los resultados obtenidos experimentalmente por los termopares y por la simulación en la posición de los mismos.

	TC ₁ (K)	TC ₂ (K)	TC ₃ (K)
Experimentación	1691	1529	1149
Simulación	1671	1472	1308
Error (%)	1.2	3.7	13.8

Tabla 31. Comparación resultados experimentales y simulación.

Se observa que el error cometido por la simulación en la posición de los termopares TC₁ y TC₂ (sobre la muestra) es inferior al 5 %. El error cometido en simulación en la posición del termopar TC₃ (situado en la pared de la cavidad interior del reactor), presenta un error del 15 % el cual puede deberse a la incertidumbre de la posición real del termopar (medida de temperatura superficial o del fluido). Esto afecta de forma que variaciones de 1 mm hacia el interior de la cavidad suponen variaciones de hasta 50 K en función de la posición exacta del termopar el valor experimental puede variar.

El error cometido con los modelos descritos en la metodología para los resultados de temperatura de la simulación comparados con la experimentación es del mismo orden que los encontrados en la literatura [66], [97], [118], [119], [125].

Por ello, se concluye que la metodología es válida para el diseño térmico de un reactor solar.

4.1.3 Conclusiones

Se han realizado dos validaciones. En primer lugar, se valida el modelo de radiación comparando los resultados obtenidos del modelo de MC en ANSYS – CFX 14.0 con los obtenidos en TracePro 7.0 por IMDEA Energía. En segundo lugar, se valida la metodología incluyendo el perfil de radiación incidente sobre las paredes de un reactor solar volumétrico (dato experimental disponible) comparando los resultados con datos experimentales. A partir de dichas validaciones realizadas, se concluye:

En cuanto a la validación de la proyección del perfil de radiación desde la apertura hasta las paredes a partir del método de MC de ANSYS – CFX comparado con TracePro®, se obtiene que el error cometido para la potencia incidente en la zona de interés es inferior al 6 %. Por otro lado, el error cometido en la radiación incidente media es del 5.5 % mientras que para el valor pico es del 20 %. Dado que la radiación incidente pico es puntual, se concluye que el modelo de MC utilizado por la herramienta ANSYS – CFX para proyectar el perfil de radiación desde la apertura hasta las paredes es válido al igual que la herramienta TracePro®.

La metodología propuesta en la presente Tesis Doctoral, presenta un error de temperatura inferior al 5 % con respecto a los resultados experimentales proporcionados por IMDEA Energía para los termopares situados en la muestra. El error cometido por la simulación para el termopar situado en la superficie de la cavidad interior es mayor que los anteriores, del orden del 15%. Sin embargo, en conjunto se obtiene que el error cometido en temperatura en las simulaciones es del mismo orden que el de la mayoría de estudios del apartado 2.4, el cual se encuentra en torno al 10 %. Por ello, se concluye que de acuerdo a la experimentación la metodología se adapta a la experimentación para el diseño térmico de un reactor solar.

Destacar, que debido a la incertidumbre de la posición del termopar, el error en temperatura de las simulaciones para el termopar TC₃ es relativo, dado que variaciones de 1 mm hacia el interior de la cavidad suponen variaciones de hasta 50 K en función de la posición exacta del termopar.

4.2 APLICACIONES

A continuación se presentan dos aplicaciones reales, en las cuales se ha utilizado la metodología descrita en el presente Tesis Doctoral:

- En primer lugar se presenta el diseño de un reactor tubular para una instalación de torre para la producción de hidrógeno a partir del ciclo termoquímico de ferrita. (CONFIDENCIAL)
- La segunda aplicación consiste en un reactor tubular de disco para producir hidrógeno a partir de ciclo termoquímico de ferrita.

4.2.1 Reactor solar tubular de torre para ciclo termoquímico de ferrita tipo espuma (CONFIDENCIAL)

4.2.2 Reactor solar tubular de disco para ciclo termoquímico de ferrita tipo espuma

A continuación se describe la segunda aplicación de la metodología descrita en la presente Tesis Doctoral. Esta aplicación está asociada al Proyecto de Excelencia de la Junta de Andalucía de Producción de Hidrógeno Mediante Ciclos Termoquímicos Acoplados a Energía Solar Térmica de Alta Temperatura (P10-RNM-6127) desarrollado entre 2011 – 2014.

Consiste en un reactor solar tubular instalado en un disco parabólico. El uso final del reactor es para la producción de hidrógeno a partir de ciclo termoquímico de ferrita.

Para ello, se presentan los objetivos y las condiciones requeridas por el proceso. Tras este apartado, se presentan las iteraciones realizadas desde el diseño inicial hasta alcanzar el diseño final del reactor de acuerdo a los requisitos del proceso.

4.2.2.1 *Objetivos y condiciones de diseño*

El objetivo de esta aplicación es el diseño térmico de un reactor solar tubular para la producción de hidrógeno mediante un ciclo termoquímico de ferrita para una instalación de disco.

Para el proceso termoquímico de ciclo termoquímico de ferrita seleccionado se requiere una temperatura de 900 °C. De acuerdo al balance de energía, la temperatura requerida por el proceso es de 950 °C en el lecho reactivo.

En la Figura 98 se presenta el perfil de radiación del disco parabólico seleccionado, para el cual, la potencia total incidente es de 20 kW. Para esta aplicación, la intensidad de radiación se considera constante.

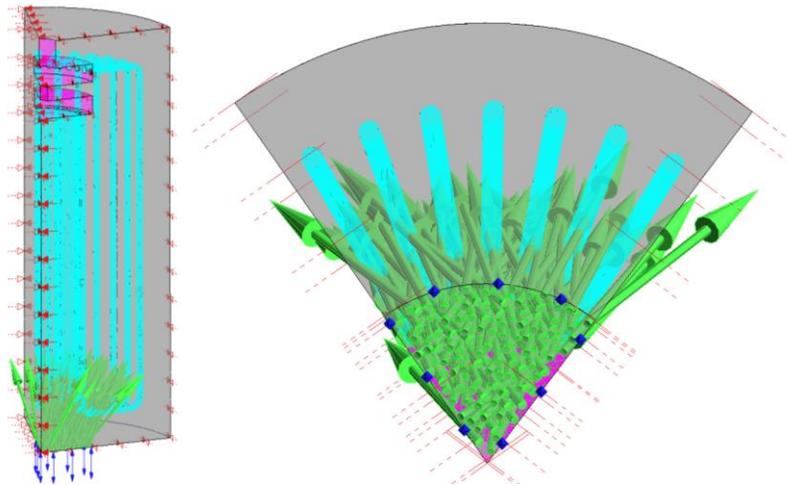


Figura 98. Dirección de la radiación en la apertura para instalación de disco.

4.2.2.2 *Diseño inicial*

A partir del objetivo y las condiciones de diseño definidas en el apartado anterior, se selecciona como diseño inicial una geometría cilíndrica para el reactor con un radio de cavidad de 0.25 m y una altura de 0.74 m (ver Figura 99). Esta forma de la cavidad coincide con la definida en la metodología como diseño inicial. Se considera una cavidad abierta con radio de apertura de 10 cm. Se dispone de 35 tubos embobinados en forma de toroide, el diámetro de los tubos es igual a 2 pulgadas y la longitud total de los mismos de 1.3 m.

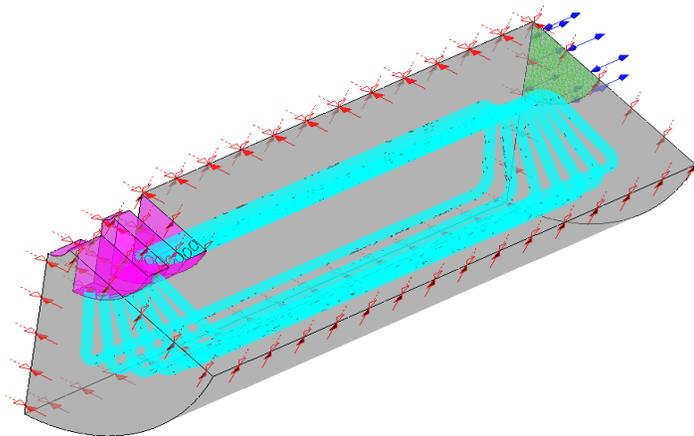


Figura 99. Geometría inicial para la cavidad de disco.

Dado que la geometría presenta simetría de revolución, se selecciona una quinta parte de la misma para realizar las simulaciones en CFD, dado que se puede mejorar el mallado reduciendo el coste computacional.

4.2.2.3 Iteraciones del diseño del reactor

Para esta aplicación se presentan directamente las iteraciones realizadas para mejorar la distribución de temperaturas hasta alcanzar la temperatura requerida de acuerdo al apartado 3.3.2.3.

La malla utilizada para estas simulaciones tiene 30.972.228 elementos y 6.332.602 nodos y el número de histories de acuerdo a la metodología es $85 \cdot 10^6$.

Para mejorar el diseño se realizan las siguientes propuestas:

- Iteración 1: mejoras sobre la cavidad: por un lado, se propone cambiar la cavidad exterior que envuelve a los tubos con el objetivo de reducir las pérdidas por radiación (reflexiones). Para ello, se propone eliminar las esquinas de la cavidad de acuerdo al apartado 3.3.1.3 de diseño inicial. Por otro lado, se propone incluir como radio de apertura el óptimo de acuerdo al estudio realizado por Steinfeld [148] (apartado 3.3.1.1) con el objetivo de reducir las pérdidas por radiación y convección.
- Iteración 2: aumentar la potencia incidente al reactor solar desde los 20 kW iniciales hasta 25 kW.
- Iteración 3: dado que en el apartado 3.3.1.2, no se obtienen conclusiones concluyentes sobre incluir o no la ventada de cuarzo. Se propone analizar su efecto con el objetivo de eliminar las pérdidas por convección.
- Iteración 4: al igual que en la aplicación de torre, se propone incluir un precalentador para aprovechar la energía del gas de arrastre a la salida. El objetivo es homogenizar la distribución de temperatura en los tubos.

Para todas las simulaciones se consideran las siguientes condiciones:

- Los tubos son de carburo de silicio debido a las buenas propiedades termofísicas que presentan. Por ello, se considera una emisividad de 0.9 y una conductividad térmica de $37.6 \text{ W/m} \cdot \text{K}$.
- Para los colectores, al igual que los tubos, el material seleccionado es carburo de silicio.
- La cavidad envolvente de los tubos se considera perfectamente aislada (paredes adiabáticas) y con una emisividad de 0.6.
- El medio poroso (ciclo termoquímico) tiene una porosidad constante igual a 0.4. El coeficiente de película convectivo entre la parte sólida y fluida del lecho es igual a $350 \text{ W/m}^2 \cdot \text{K}$. La conductividad térmica es de $100 \text{ W/m} \cdot \text{K}$.
- El gas de arrastre es nitrógeno, se introduce un caudal de 7.5 kg/h a $25 \text{ }^\circ\text{C}$.

Para comparar los resultados de las iteraciones, se define el siguiente parámetro:

$$\% \text{ mejora} = f_1 - f_2 = \frac{T_{\text{mejora}}}{T_{\text{requerida}}} 100 - \frac{T_{\text{diseño inicial}}}{T_{\text{requerida}}} 100 = \frac{T_{\text{mejora}} - T_{\text{diseño inicial}}}{T_{\text{requerida}}} 100$$

Donde:

- f_1 indica cómo de lejos se encuentra el diseño para alcanzar la temperatura requerida.
- f_2 indica cómo de lejos se encuentra la solución inicial para alcanzar la temperatura requerida.
- El porcentaje de mejora indica cuánto se ha mejorado en el diseño térmico (temperatura media del receptor) con respecto al diseño inicial.

A continuación, se presentan los resultados de las propuestas de mejora.

Iteración 1: Mejora sobre la cavidad

A continuación se presentan los resultados de distribución de temperatura tras incluir la primera mejora, la cual consiste en reducir el diámetro de apertura de la cavidad desde 20 cm a 10 cm de acuerdo al estudio de Steinfeld [148] y redondear las esquinas superiores de la cavidad para reducir las pérdidas por reflexión de acuerdo al estudio de He – Ping [152]. Ambas medidas se realizan con el objetivo de reducir las pérdidas por radiación y convección.

En la Figura 100 se muestran los resultados de temperatura sobre la superficie de los tubos con dichas mejoras incluidas.

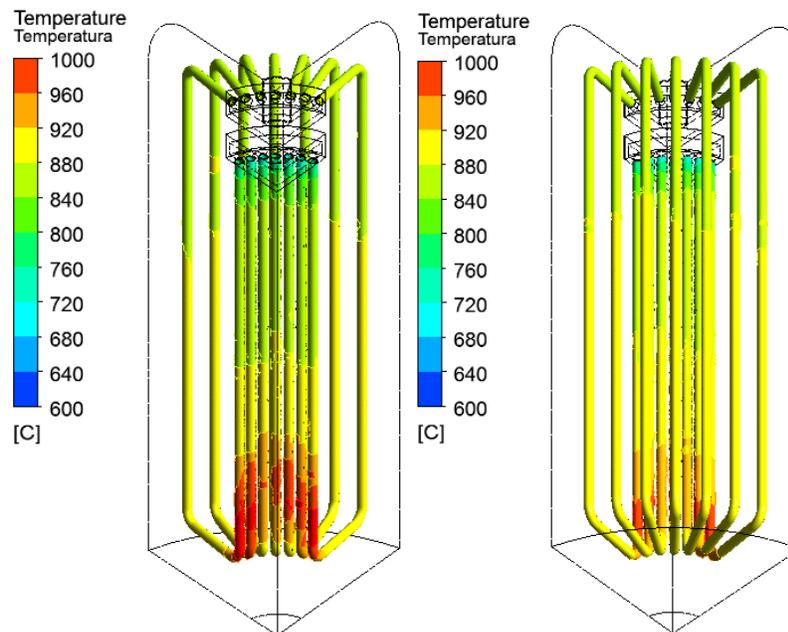


Figura 100. Distribución de temperaturas en los tubos tras modificar la cavidad. Izq: Vista frontal; Drch: Vista posterior.

En este caso, la temperatura media de los tubos es de 890 °C. Siendo la temperatura de salida del gas de arrastre de 870 °C. En este caso, se mejora la uniformidad de la temperatura en la superficie de los tubos dado que la amplitud

se reduce del orden de 1000 °C con respecto al diseño inicial. Esto se debe a que al reducir el radio de apertura, por un lado, la radiación no incide directamente sobre los codos de los tubos disminuyendo considerablemente la temperatura máxima, y por otro lado, al mantener la potencia incidente constante aumenta la intensidad de radiación, aumentando la temperatura mínima.

Al incluir estas modificaciones sobre la cavidad, se obtiene un porcentaje de mejora del 20%. Aunque esta es notable, la distribución de temperaturas del sistema se encuentra todavía por debajo de los requisitos del proceso termoquímico dado que sólo el 4.9 % del lecho reactivo se encuentra a la temperatura requerida.

A pesar de la mejora lograda, la temperatura alcanzada en los tubos sigue siendo insuficiente. Por tanto, se propone aumentar la potencia a 25 kW.

Iteración 2: Aumento de la potencia de disco

En este apartado se presentan los resultados para la geometría propuesta en la iteración anterior cuando se aumenta la potencia incidente del disco a 25 kW. Esta variación es viable dado que la potencia incidente proveniente del disco parabólico depende del tamaño del disco, existiendo discos de diámetro igual a 8.5 metros con una potencia térmica de 50 kW [170].

En la Figura 101 se presentan los resultados de temperatura superficial de los tubos obtenidos tras aumentar la potencia a 25 kW.

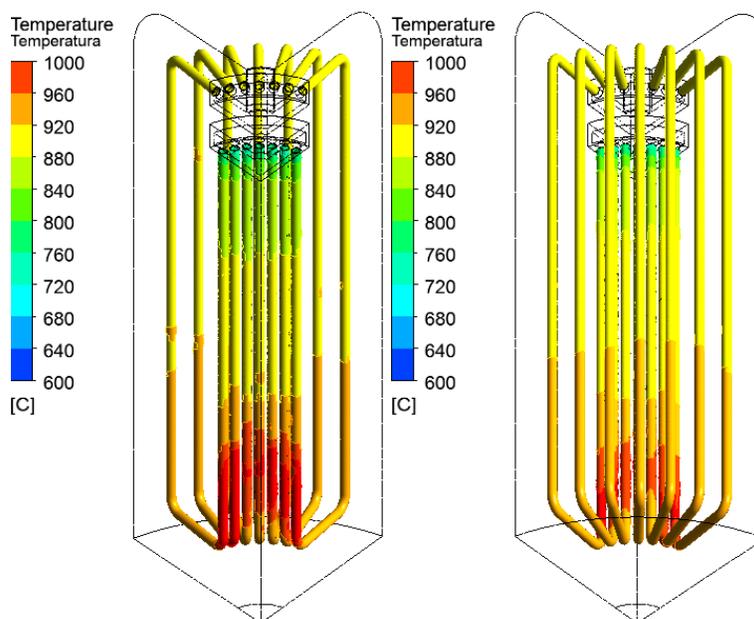


Figura 101. Distribución de temperaturas tras modificar potencia incidente. Izq: Vista frontal; Drch: Vista posterior.

Se obtiene que la temperatura media de los tubos es de 910 °C y la temperatura del gas inerte a la salida es de 880 °C. Además, la temperatura máxima y mínima son 1165 °C y 745 °C respectivamente. En este caso, aumenta la amplitud de temperatura sobre los tubos de 350 °C a 420 °C con respecto al diseño anterior debido al aumento de la temperatura máxima principalmente.

El porcentaje de mejora de esta modificación es despreciable frente al de las modificaciones en la cavidad dado que se pasa de 20 % a un 22.1 % con respecto al diseño inicial.

Iteración 3: Ventana de cuarzo

En este apartado se incluye una ventana de cuarzo en la apertura con el objetivo de eliminar las pérdidas por convección [150]. Dado que el proceso termoquímico se lleva a cabo en el interior de los tubos, no hay riesgo de ensuciamiento de la ventada por deposición de partículas por lo que la propuesta es viable tecnológicamente. Esta ventana de cuarzo permite pasar toda la radiación incidente y evita las pérdidas térmicas por convección que se producen debido al movimiento del fluido (aire) en la cavidad.

En la Figura 102 se presenta la distribución de temperatura sobre los tubos cuando se incluye una ventana de cuarzo en la apertura en el diseño del reactor.

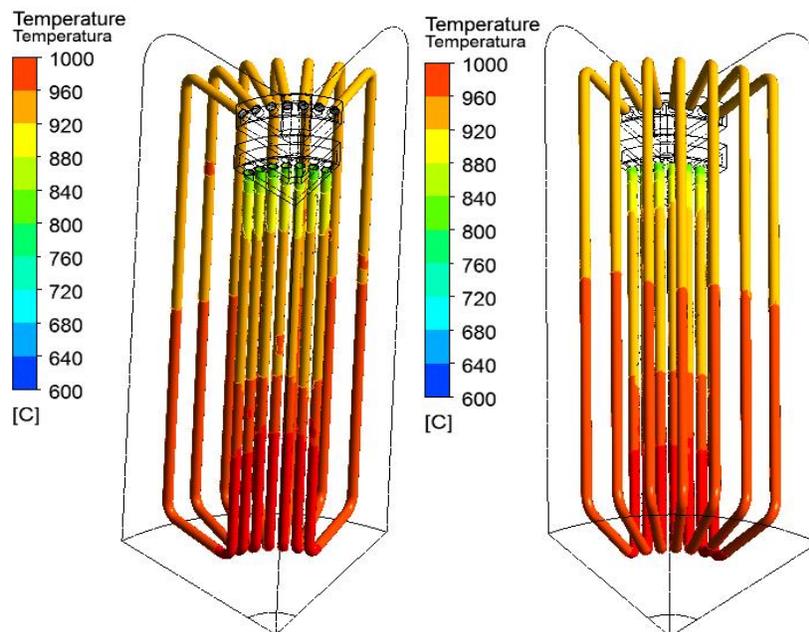


Figura 102. Distribución de temperaturas tras incluir ventana de cuarzo. Izq: Vista frontal; Drch: Vista posterior.

Tras eliminar por completo las pérdidas por convección en el interior de la cavidad se obtiene una temperatura media de los tubos de 965 °C. Mientras que la temperatura máxima y mínimas son 1210 °C y 797 °C respectivamente. Además, al mejorar la distribución de temperaturas en la superficie de los tubos también aumenta la temperatura de salida del gas de arrastre hasta 934 °C.

Iteración 4: Precalentar gas de arrastre

Al igual que se muestra en el análisis paramétrico (apartado 3.3.2.3) y en la aplicación de torre (4.2.1), aprovechar la energía del gas de arrastre de salida permite uniformar la temperatura en el interior del reactor dado que la zona más fría es la entrada del fluido.

En este caso, se propone una temperatura de entrada al sistema de 500 °C. En la Figura 103 se presenta la distribución de temperaturas obtenida al incluir esta mejora a las anteriores. En este caso la escala de la Figura 103 de 800 °C a 1100 °C dado que la distribución se encuentra en este rango de temperaturas, superior al de las primeras simulaciones (caso inicial y primeras mejoras).

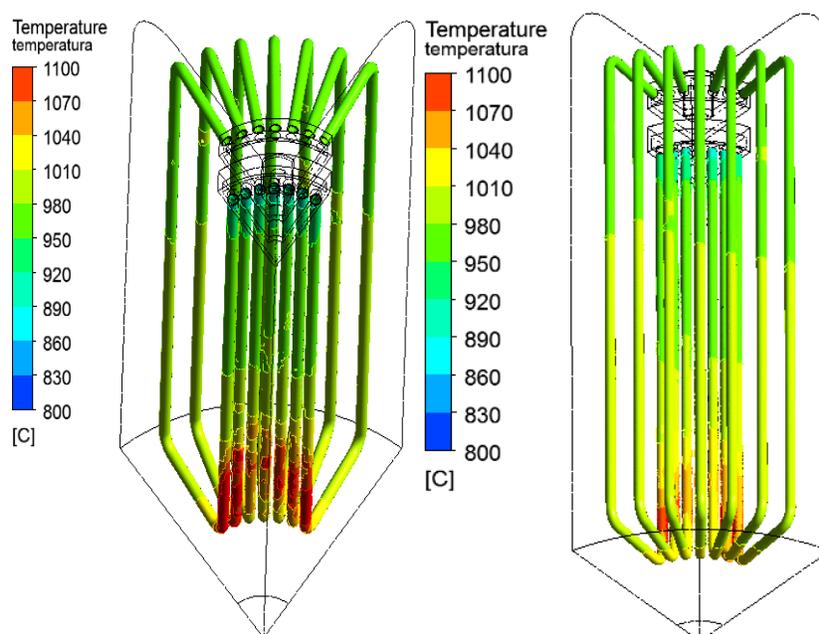


Figura 103. Distribución de temperaturas tras incluir precalentador. Izq: Vista frontal; Drch: Vista posterior.

Tras aumentar la temperatura del gas de arrastre, se observa que la temperatura superficial media de los tubos es de 1025 °C, este aumento se debe principalmente al aumento de temperatura en la zona de entrada. Además, se alcanza la temperatura requerida por el ciclo termoquímico en un 95.5 % del lecho por lo que se han alcanzado los objetivos del diseño de reactor solar.

4.2.2.4 Conclusiones diseño de reactor solar tubular en disco

A continuación, en la Tabla 32, se presentan los principales resultados obtenidos para el diseño inicial y las mejoras implementadas.

	T_{sup} (°C)	T_{max} (°C)	T_{min} (°C)	T_{salida} N_2 (°C)	%lecho >900°C	%lecho >950°C	%lecho >1000°C	% mejora
Geo inicial	700	1577	510	636	5.46	4.13	2.74	-
1ªIteración	890	1080	730	870	34.38	4.89	2.74	20.0
2ªIteración	910	1165	745	880	55.81	10.13	2.74	22.11
3ªIteración	965	1210	797	950	96.16	58.30	11.45	27.89
4ªIteración	1025	1215	890	975	98.89	95.50	32.94	34.21

Tabla 32. Resumen de resultados de las mejoras implementadas en disco.

Se observa que la distribución de temperaturas ha mejorado con todas las modificaciones incluidas en el diseño tanto geométricas como de condiciones de operación. El mayor porcentaje de mejora se obtiene al modificar la cavidad, principalmente debido al cambio de diámetro de apertura. Para el diseño final del reactor solar tubular se obtiene que el 95.5 % del lecho reactivo se encuentra a la temperatura requerida (950 °C) y a la vista de los resultados se consigue un perfil de temperaturas uniforme en el mismo (amplitud de 325 °C). Por último se concluye que incluyendo las modificaciones propuestas en la metodología, se consigue una mejora del 34 % sobre el diseño inicial.

4.2.3 Conclusiones de las aplicaciones

A lo largo del apartado 4.2, se presentan los pasos de la metodología y las mejoras realizadas para alcanzar una distribución de temperaturas uniforme y superior a la temperatura requerida por el proceso termoquímico que se lleva a cabo en el equipo diseñado. Por ello, de acuerdo con las aplicaciones desarrolladas, queda demostrado la aplicabilidad de la metodología para la resolución de casos reales en diseño térmico de reactores solares.

Ciencia es todo aquello sobre lo cual siempre cabe discusión

Ortega y Gasset

5 CONCLUSIONES

La metodología desarrollada en la presente Tesis Doctoral define los pasos a seguir para el diseño térmico de un reactor solar de alta temperatura utilizando herramientas de Fluidodinámica Computacional (CFD). Estos pasos se han ilustrado a lo largo de su descripción a partir de una geometría sencilla (caso base), y posteriormente se han presentado dos aplicaciones reales, una para instalación de torre y otra para disco, ambos reactores solares tubulares para la producción de hidrógeno a partir de ciclos termoquímicos de ferrita.

La metodología se basa en técnicas CFD, donde se ha seleccionado el software comercial ANSYS – CFX para su desarrollo debido a las ventajas que presenta para la implementación de las condiciones de operación frente a otros códigos.

Adicionalmente, se ha analizado la influencia de los parámetros de diseño y operación en las prestaciones finales del reactor utilizado como caso base, de forma que se puede evaluar la influencia de cada modificación realizada en el diseño.

La metodología desarrollada ha sido validada en base a dos casos de estudio disponibles: en primer lugar, la distribución de radiación incidente sobre el receptor se ha validado comparando el modelo MC en ANSYS – CFX utilizado en la metodología con TracePro®. En segundo lugar, se valida la metodología definida comparando los resultados de temperatura con las temperaturas más relevantes en un reactor solar experimental. En ambos casos se demuestra que la metodología desarrollada permite predecir con precisión adecuada los perfiles de radiación incidente y de temperatura en reactores solares.

La metodología desarrollada para el modelado de reactores solares se ha aplicado exitosamente al diseño de dos reactores solares. El primero de ellos para una instalación de torre de 250 kW y producción de hidrógeno mediante ciclo termoquímico de ferrita a 1400 °C, y el segundo para una instalación de disco parabólico de 25 kW para la producción de hidrógeno a 900 °C mediante ciclo termoquímico de ferrita.

5.1 PRINCIPALES CONCLUSIONES

En la presente Tesis Doctoral se ha presentado el desarrollo de una metodología para el diseño y optimización de un reactor solar de alta temperatura con herramientas CFD, la cual ha sido validada y utilizada en diversas aplicaciones.

Las conclusiones más importantes de la metodología CFD y del trabajo desarrollado en la Tesis Doctoral son las siguientes:

- En el análisis del estado del arte se identifica una serie de carencias importantes:
 1. Existe una limitación en el modelado de la radiación con respecto al concepto de diseño. En general, se separa el análisis de la radiación incidente a la cavidad desde la apertura del análisis de la radiación interno en la cavidad, lo que supone la necesidad de modificar el perfil de radiación utilizado como dato de entrada.
 2. Por otro lado, se detecta una limitación en el análisis del reparto de energía en estudios donde se acopla el diseño térmico de reactores solares con lecho reactivo formado por partículas o pellets. Esta limitación viene dada por la falta de un tratamiento detallado de la

porosidad en el lecho, que conlleva un error en la transferencia de calor desde la pared del tubo a la fase sólida y gas.

3. En cuanto al proceso de modelado con herramientas CFD, los estudios del estado del arte se realizan de forma convencional: análisis de malla, introducción de modelos y condiciones de contorno y post-procesado de los resultados. Sin embargo, en el desarrollo de la investigación realizada en la presente Tesis Doctoral, se identifica la necesidad de acoplar el ajuste del parámetro de control del modelo de radiación al análisis de malla.

Las carencias encontradas en el estado del arte suponen un objetivo de la Tesis Doctoral y por tanto, se analizan detalladamente en la metodología desarrollada.

- La metodología definida en la presente Tesis Doctoral se ha dividido en tres bloques principales:
 1. El primer bloque consiste en el diseño de la cavidad. Esta sección incluye las fases desde la generación de la geometría inicial hasta incluir las condiciones de contorno del modelo de la cavidad. En esta etapa se realizan la mayor parte de las iteraciones de la metodología para conseguir la temperatura requerida en la superficie de los tubos de la forma más uniforme posible.
 2. El segundo bloque, diseño del reactor solar, comienza una vez finalizado el diseño de la cavidad. Los principales objetivos de esta sección son completar el balance térmico global, encontrar los puntos fríos/calientes y alcanzar el volumen de reacción necesario desde el punto de vista térmico.
 3. El último bloque consiste en un análisis paramétrico de las principales variables con el objetivo de optimizar el diseño del reactor solar y obtener un mapa de operación del reactor final. En este apartado, se analizan variables tales como: el diámetro de las partículas del medio poroso, las condiciones de operación del gas de arrastre, la potencia de radiación incidente, etc.
- Del estudio realizado en la fase del diseño de la cavidad de la metodología, se obtienen las siguientes conclusiones de interés:
 1. La generación del mallado final se ha realizado bajo criterios de buenas prácticas, ampliamente utilizados. Sin embargo, en base a la investigación realizada, se determina la necesidad de realizar este paso simultáneamente con la selección del parámetro del modelo de

radiación (número de histories) para que el análisis de malla sea válido.

2. Por otro lado, la metodología desarrollada permite el diseño térmico de un reactor solar a partir de un perfil de radiación en la apertura, pudiéndose incluir la direccionalidad del mismo (modelo MC). Esta diferencia con respecto a lo identificado en la literatura permite:
 - Evaluar distintos diseños de cavidad de reactores a partir de un único dato de perfil de radiación en la entrada, que no debe ser recalculado para cada iteración de diseño como ocurre cuando se incluye como condición sobre las paredes.
 - Evaluar con precisión los puntos fríos y calientes del sistema, siempre que la direccionalidad del perfil de radiación se incluya en la apertura.
- Del estudio realizado en la fase del diseño del reactor de la metodología, se obtienen las siguientes conclusiones de interés:
1. El hecho de incluir la porosidad en función del radio supone una mejora significativa en la precisión de los resultados, para diseños con lechos de partículas. Constituye adicionalmente una novedad frente a los estudios encontrados en la literatura. Este hecho permite evaluar el reparto de energía en reactores tubulares a diferencia de los estudios encontrados en la literatura. Incluir una porosidad constante para reactores tubulares de partículas supone un resultado de temperatura del lecho reactivo superior a la real dado que la conductividad de los sólidos es mayor que la de los gases.
- Las principales conclusiones del análisis paramétrico realizado para el caso base son:
1. Disminuir el diámetro de partícula en reactores tubulares de partículas mejora la eficiencia del proceso aunque este hecho implica un aumento en la pérdida de carga del sistema, por lo que hay que alcanzar una solución de compromiso.
 2. Desde el punto de vista térmico y de pérdida de carga interesa un caudal de gas de arrastre pequeño, dado que se reduce la entrada de una corriente fría al sistema y la velocidad (pérdida de carga). Sin embargo, para los ciclos termoquímicos es necesario incluir un caudal, el cual depende de la reacción química del proceso. Aumentar el caudal desplaza el equilibrio de la reacción de forma que disminuye la temperatura requerida manteniendo la eficiencia hasta cierto caudal.

3. Incluir un precalentador del gas de arrastre disminuye el gradiente térmico a través del tubo y la longitud del mismo con temperatura inferior a la requerida, mejorando la eficiencia del sistema.
- La validación experimental del modelo muestra resultados del mismo orden que los encontrados en la literatura, errores en temperatura inferiores al 10 %. Por otro lado, el modelo de radiación MC de ANSYS – CFX ha sido comparado con TracePro, obteniéndose un error del 5.5 % en el cálculo de la potencia incidente en el receptor entre ambos códigos.
 - Por último, la metodología presenta diferentes potenciales aplicaciones, como por ejemplo:
 - Diseño de reactores solares de alta temperatura destinados principalmente a la producción de hidrógeno termoquímico por las altas temperaturas requeridas en los procesos.
 - Evaluar los límites del equipo y optimizar las condiciones de operación. En el modelo final obtenido tras aplicar la metodología se pueden variar las condiciones de operación, lo que permite establecer límites y condiciones óptimas en la operación del sistema.

Queda resaltada la necesidad de un trabajo multidisciplinar donde se combine la aplicación de diversos campos de conocimiento: mecánica de fluidos, termodinámica y aspectos de modelado CFD tales como, técnicas de mallado y parámetros de solver.

5.2 APORTACIÓN DE LA TESIS DOCTORAL AL ESTADO DEL CONOCIMIENTO

En este apartado se citan las aportaciones más relevantes del trabajo desarrollado en la presente Tesis Doctoral al estado del conocimiento en el modelado de reactores solares de alta temperatura:

- Mediante el análisis del estado del arte se han identificado carencias y limitaciones claras en los trabajos encontrados en la literatura. En la Tesis Doctoral se han puesto de manifiesto estas limitaciones, y se ha procedido a desarrollar la presente metodología detallada y justificada, donde quedan resueltas las limitaciones identificadas.
- En la presente Tesis Doctoral se presenta el estudio detallado del reparto de energía desde la cavidad hacia la parte sólida/fluida del lecho reactivo

para los reactores tubulares con lechos de partículas. El efecto de analizar la transferencia de calor en función de la variación radial de la porosidad mejora significativamente la precisión de los resultados (y por tanto la validez del diseño final) con respecto a los estudios analizados en el estado del arte.

- A diferencia de los estudios de la literatura, se determina la necesidad de evaluar simultáneamente el mallado de acuerdo a las buenas prácticas junto con el parámetro de radiación que determina la precisión (número de histories). El hecho de que el número de histories por defecto sea claramente insuficiente, puede dar lugar a la selección de una malla inferior a la requerida cuando el análisis se realiza por separado en caso de que no se proceda de acuerdo a la metodología definida en la presente Tesis Doctoral.

5.3 RESUMEN DE PUBLICACIONES Y PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

Esta metodología ha surgido y se ha implementado a raíz de los siguientes proyectos de investigación:

Proyecto Singular Estratégico de Hidrógeno Renovable (PSEH2RENOV)

- Tipo de proyecto: Proyecto de Excelencia de la Junta de Andalucía (Modalidad de proyectos motrices y de innovación).
- Referencia: PS-120000-2009-3.
- Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación, Junta de Comunidades de Castilla-La Mancha.
- Participantes: CNH2 (coordinador), HYNERGREEN, IDESA, CEGASA, INASMET, INTA, CSIC – ICP, AICIA, URJC, CIDAUT, CIDETEC, ITC, Acciona Energía, Ingeteam Energy, ASNT, LBEIN, CIEMAT, UPMETSII, UPV – EHU, Instituto IMDEA Energía, AIJU, ITE.
- Periodo de realización: 2009 – 2010.

Producción de Hidrógeno Mediante Ciclos Termoquímicos Acoplados a Energía Solar Térmica de Alta Temperatura.

- Tipo de proyecto: Proyecto de Excelencia de la Junta de Andalucía (Modalidad de proyectos motrices y de innovación).
- Referencia: P10-RNM-6127.
- Entidad financiadora: Junta de Andalucía (Consejería de Innovación, Ciencia y Empresas)
- Participantes: Universidad de Sevilla (Coordinador); Abengoa Hidrógeno.

- Periodo de realización: 2011 – 2014.

SolH2: Producción de hidrógeno empleando energía solar térmica de alta temperatura

- Tipo de Proyecto: OPN - INNPACTO, convocatoria del año 2011.
- Referencia: IPT-2011-1323-920000.
- Participantes: Abengoa Hidrógeno (Coordinador); Instituto IMDEA Energía; Universidad de Sevilla; CIEMAT.
- Entidad financiadora/Programa: Ministerio de Economía y Competitividad/Subprograma INNPACTO 2011.
- Periodo de realización: 2011 – 2014.

Se han realizado las siguientes publicaciones en congresos de ámbito nacional e internacional:

- Thermal and Optical Analysis of a 100 kW_{th} Multi-Tubular Reactor for Hydrogen Production Based on a Two-Step Thermochemical Cycle Integrated in a Solar Tower. M. Martín, V. Gallardo, A. González Pardo, J. Gonzalez-Aguilar, M. Romero, A. Iranzo, A. Salva, E. Tapia. Proceedings of the International Conference on Hydrogen Production (ICH2P-2011) Tesalónica, Grecia. 2011.
- Estudio de las Tecnologías para la Producción de Hidrógeno Mediante Ciclos Termoquímicos Acoplados a Energía Solar de Alta Temperatura. E. Tapia Martín, J. A. Salva Aguirre, A. Iranzo Paricio, V. Gallardo, A. Casado. CONAPPICE2012. Madrid, España (2012).
- SolH2: project Solar-driven hydrogen production by bioethanol reforming and mixed-ferrite thermochemical cycle. R. Diaz Franco; A. Vidal Delgado, Alfonso; V. Gallardo García-Orta; M. Martín Betancourt; M. Romero Álvarez; J. Gonzalez-Aguilar; M. A. Ridao Carlini; E. Tapia Martin; F. J. Gutiérrez Ortiz; J. Vazquez. 18th SolarPACES Conference (2012), 11 - 14 September 2012, Marrakech, Morocco.
- Solar reactors for hydrogen production based on thermochemical cycles. Tapia, E.; Salva, J.A.; Iranzo, A.; Pino, F. J.; Martín-Betancourt, M.; Domínguez, R.; Maynar, M.; Rosa, F. WHEC 2014, Gwangju City, Korea (2014).
- Optimization of numerical methods for the CFD analysis of solar reactors. Ghotkar, R.; Tapia, E.; Iranzo, A.; Salva, J.A.; Pattnaik, P.; Guerra, J. CONAPPICE2014. Barcelona, España (2014).
- Methodology for thermal optimization of solar reactor design using CFD techniques. Tapia, E.; Iranzo, A.; Pino, F.J; Rosa, R.; Salva, J.A.; Valverde, L. HYCELTEC2015. Tenerife, España (2015).

- CFD thermal model validation of a lab-scale solar reactor, Tapia E.; Bellan S.; Iranzo A.; Gonzalez-Aguilar J.; Pino F.J.; Rosa F.; Salva J.A. WHEC 2016, Zaragoza, España (2016).

Se ha publicado la metodología desarrollada en la presente Tesis Doctoral en la revista *International Journal Hydrogen Energy* (factor de impacto 3.205 en 2015).

- Methodology for thermal design of solar tubular reactors using CFD techniques. *Int. J. Hydrogen Energy*, 2016. E. Tapia, A. Iranzo, F. J. Pino, F. Rosa, and J. A. Salva. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2016.07.186.

5.4 LÍNEAS FUTURAS DE TRABAJO

La metodología CFD desarrollada durante la Tesis Doctoral permite el diseño térmico de reactores solares, y ha sido validado experimentalmente desde este punto de vista. Además, se han presentado dos aplicaciones de proyectos de investigación para los cuales ha sido utilizada exitosamente.

Sin embargo, existen aspectos adicionales que pueden implementarse con el objetivo de completar los fenómenos que se producen en el reactor solar. A continuación, se exponen las siguientes mejoras que pueden realizarse a futuro sobre la metodología CFD desarrollada.

1. Incluir una siguiente fase en la etapa de diseño del reactor para incorporar las reacciones químicas que se producen en función de la temperatura. De esta forma, quedarían incluidos todos los fenómenos que se producen en un reactor solar en una misma simulación. En este caso, se podría evaluar la eficiencia química del proceso y los problemas en el diseño de puntos calientes (sinterización) y puntos fríos (reacciones incompletas).
2. Implementación del medio participativo y de partículas (a partir de la teoría de Mie), de forma que la metodología sea válida también para reactores solares de partículas. En este caso, la metodología sería válida para todos los tipos de reactores solares.
3. En caso de cavidades abiertas del reactor, analizar con mayor precisión los resultados de pérdidas convectivas incluyendo un volumen de control mayor para analizar el movimiento del fluido en la apertura.
4. Incluir el tiempo como variable del modelo (transitorios), de forma que se puedan evaluar los tiempos de calentamiento, lo cual permite optimizar el tamaño de la cavidad. Además, permitiría reproducir un ciclo completo del proceso de producción si se incluyen las reacciones químicas.

REFERENCIAS

- [1] I. E. A. Publications, *Energy Technology Perspectives 2010. Scenarios & Strategies to 2050*. 9, rue de la Fédération, 75739 PARIS CEDEX 15 (France), 2010.
- [2] V. Ruiz Hernández, “Energías renovables y nuevas tecnologías energéticas,” 2002, vol. Valencia (, no. V Conferencias sobre el Medio Ambiente. Medio Ambiente y Empresa, pp. 107–119.
- [3] M. Momirlan and T. N. Veziroglu, “Current status of hydrogen energy,” *Renew. Sustain. Energy Rev.*, vol. 6, no. 1–2, pp. 141–179, 2002.
- [4] M. Ball and M. Wietschel, “The future of hydrogen – opportunities and challenges,” *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 34, no. 2, pp. 615–627, 2009.
- [5] C.-J. Winter, “Hydrogen energy — Abundant, efficient, clean: A debate over the energy-system-of-change,” *Hydrog. Energy - Abund. Effic. Clean A Debate over Energy-System-of-Change Hydrog. Energy - Abund. Effic. Clean A Debate over Energy-System-of-Change*, vol. 34, no. 14, Supplement 1, pp. S1–S52, 2009.
- [6] L. Correas Usón, “Aspectos sociales del hidrógeno,” vol. Fundación . Madrid, 2011.
- [7] European Commission, “Hydrogen Energy and Fuel Cells, A vision of our future,” Luxemburgo, 2003.

- [8] K. Bennaceur, B. Clark, F. M. Orr Jr., T. S. Ramakrishnan, C. Roulet, and E. Stout, “El hidrógeno ¿Un futuro portador energético?” *Oilfield Review*, 2005.
- [9] IDAE and Ministerio de Industria Turismo y Comercio Gobierno de España, “Plan de acción nacional de energías renovables de España (paner) 2011 - 2020 30,” 2010.
- [10] M. Voldsund, K. Jordal, and R. Anantharaman, “Hydrogen production with CO₂ capture,” *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 41, no. 9, pp. 4969–4992, 2016.
- [11] IEA, “Technology Roadmap: Hydrogen and Fuel Cells,” p. 81, 2015.
- [12] B. Suresh, R. Gubler, X. He, and Y. Yamaguchi, “Hydrogen :: Chemical Economics Handbook :: IHS Chemical.” [Online]. Available: <http://chemical.ihs.com/CEH/Public/Reports/743.5000>. [Accessed: 19-Oct-2015].
- [13] International Partnership for Hydrogen and Fuel Cells in the Economy, “2010 Hydrogen and Fuel Cell Global Commercialization & Development Update,” no. November, pp. 1–10, 2010.
- [14] S. Z. Baykara, “Hydrogen as fuel: a critical technology?,” *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 30, no. 5, pp. 545–553, 2005.
- [15] J. O. Bockris, “The origin of ideas on a Hydrogen Economy and its solution to the decay of the environment,” *Proc. Sel. Pap. Third Int. Conference Hydrog. Treat. Mater. HTM-2001*, vol. 27, no. 7–8, pp. 731–740, 2002.
- [16] A. Meier and C. Sattler, “Solar Fuels from Concentrated Sunlight,” *SolarPACES*, 2009.
- [17] T. Ohta and T. N. Veziroglu, “Hydrogen production using solar radiation,” *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 1, no. 3, pp. 255–263, 1976.
- [18] A. Ruíz Navarro, “HIDRÓGENO Y ENERGÍAS RENOVABLES,” *ARIEMA*.
- [19] J. I. Linares Hurtado, “El hidrógeno y la Energía,” 2007.
- [20] DOE, “FUEL CELL TECHNOLOGIES OFFICE MULTI-YEAR RESEARCH, DEVELOPMENT, AND DEMONSTRATION PLAN - Hydrogen Production,” 2015.
- [21] T. Pregger, D. Graf, W. Krewitt, C. Sattler, M. Roeb, and S. Möller, “Prospects of solar thermal hydrogen production processes,” *2nd World Hydrog. Technol. Conv. 2nd World Hydrog. Technol. Conv.*, vol. 34, no. 10, pp. 4256–4267, 2009.
- [22] N. Nakicenovic, “Global prospects and Opportunities for Methane in 21st Century,” *Int. Gas Union Publ.*, pp. 118–125, 2003.
- [23] M. Momirlan and T. N. Veziroglu, “The properties of hydrogen as fuel

- tomorrow in sustainable energy system for a cleaner planet,” *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 30, no. 7, pp. 795–802, 2005.
- [24] K. W. A. Guy, “The Hydrogen Economy,” *Sustain. Dev.*, vol. 78, no. 4, pp. 324–327, 2000.
- [25] “World Hydrogen Market,” *Freedonia*. [Online]. Available: <http://www.reportlinker.com/p0944103-summary/World-Hydrogen-Industry.html>.
- [26] S. S. Penner, “Steps toward the hydrogen economy,” *Second Bienn. Int. Work. "Advances Energy Stud.*, vol. 31, no. 1, pp. 33–43, 2006.
- [27] DOE, “<http://hydrogen.pnl.gov/hydrogen-data/hydrogen-production-europe-2009-2013>.” .
- [28] “Green Car Congress: DOE to award up to \$1M to evaluate technology pathways for cost-competitive hydrogen fuel.” [Online]. Available: <http://www.greencarcongress.com/2012/10/fct-20121006.html>. [Accessed: 14-May-2015].
- [29] A. Steinfeld, “Solar thermochemical production of hydrogen—a review,” *Sol. Hydrog.*, vol. 78, no. 5, pp. 603–615, 2005.
- [30] C. Sattler and M. Roeb, “FUELS - HYDROGEN PRODUCTION | Thermochemical Cycles,” in *Encyclopedia of Electrochemical Power Sources*, J. Garche, Ed. Amsterdam: Elsevier, 2009, pp. 384–393.
- [31] F. Fresno, R. Fernández-Saavedra, M. Belén Gómez-Mancebo, A. Vidal, M. Sánchez, M. Isabel Rucandio, A. J. Quejido, and M. Romero, “Solar hydrogen production by two-step thermochemical cycles: Evaluation of the activity of commercial ferrites,” *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 34, no. 7, pp. 2918–2924, 2009.
- [32] L. C. Brown, “High Efficiency Generation of Hydrogen Fuels Using Nuclear Power,” General Atomics.
- [33] C. H. Aporta, P. E. Martinez, and D. M. Pasquevich, “Estudio de los ciclos termoquímicos para la producción de hidrógeno nuclear,” *Inst. Energía y Desarro. Sostenible. Com. Nac. Energía Atómica*, pp. 5–13, 2011.
- [34] R. Perret, “Solar Thermochemical Hydrogen Production Research,” SANDIA National Laboratories, 2011.
- [35] D. Graf, N. Monnerie, M. Roeb, M. Schmitz, and C. Sattler, “Economic comparison of solar hydrogen generation by means of thermochemical cycles and electrolysis,” *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 33, no. 17, pp. 4511–4519, 2008.
- [36] A. Le Duigou, J.-M. Borgard, B. Larousse, D. Doizi, R. Allen, B. C. Ewan, G. H. Priestman, R. Elder, R. Devonshire, V. Ramos, G. Cerri, C. Salvini, A. Giovannelli, G. De Maria, C. Corgnale, S. Brutti, M. Roeb, A. Noglik, P.-

- M. Rietbrock, S. Mohr, L. de Oliveira, N. Monnerie, M. Schmitz, C. Sattler, A. O. Martinez, D. de Lorenzo Manzano, J. Cedillo Rojas, S. Dechelotte, and O. Baudouin, "HYTHEC: An EC funded search for a long term massive hydrogen production route using solar and nuclear technologies," *EHEC2005*, vol. 32, no. 10–11, pp. 1516–1529, 2007.
- [37] A. Steinfeld, "Solar hydrogen production via a two-step water-splitting thermochemical cycle based on Zn/ZnO redox reactions," *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 27, no. 6, pp. 611–619, 2002.
- [38] K. Wegner, H. C. Ly, R. J. Weiss, S. E. Pratsinis, and A. Steinfeld, "In situ formation and hydrolysis of Zn nanoparticles for production by the 2-step ZnO/Zn water-splitting thermochemical cycle," *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 31, no. 1, pp. 55–61, 2006.
- [39] L. O. Schunk, W. Lipiński, and A. Steinfeld, "Heat transfer model of a solar receiver-reactor for the thermal dissociation of ZnO—Experimental validation at 10 kW and scale-up to 1 MW," *Chem. Eng. J.*, vol. 150, no. 2–3, pp. 502–508, Jan. 2009.
- [40] S. Abanades and G. Flamant, "Thermochemical hydrogen production from a two-step solar-driven water-splitting cycle based on cerium oxides," *Sol. Energy*, vol. 80, no. 12, pp. 1611–1623, 2006.
- [41] S. Ghandehariun, G. F. Naterer, I. Dincer, and M. A. Rosen, "Solar thermochemical plant analysis for hydrogen production with the copper–chlorine cycle," *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 35, no. 16, pp. 8511–8520, 2010.
- [42] H. I. Villafán-Vidales, S. Abanades, C. Caliot, and H. Romero-Paredes, "Heat transfer simulation in a thermochemical solar reactor based on a volumetric porous receiver," *Appl. Therm. Eng.*, vol. 31, no. 16, pp. 3377–3386, 2011.
- [43] T. Nakamura, "Hydrogen production from water utilizing solar heat at high temperatures," *Sol. Energy*, vol. 19, no. 5, pp. 467–475, 1977.
- [44] F. Sibieude, M. Ducarroir, A. Tofighi, and J. Ambriz, "High temperature experiments with a solar furnace: The decomposition of Fe₃O₄, Mn₃O₄, CdO," *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 7, no. 1, pp. 79–88, 1982.
- [45] P. Charvin, S. Abanades, G. Flamant, and F. Lemort, "Two-step water splitting thermochemical cycle based on iron oxide redox pair for solar hydrogen production," *Energy*, vol. 32, no. 7, pp. 1124–1133, 2007.
- [46] R. B. Diver, J. E. Miller, M. D. Allendorf, N. P. Siegel, and R. E. Hogan, "Solar Thermochemical Water-Splitting Ferrite-Cycle Heat Engines," *J. Sol. Energy Eng.*, vol. 130, no. November, pp. 1–8, 2008.
- [47] L. Xiao, S.-Y. Wu, and Y.-R. Li, "Advances in solar hydrogen production via two-step water-splitting thermochemical cycles based on metal redox

- reactions,” *Renew. Energy*, vol. 41, no. 0, pp. 1–12, 2012.
- [48] Y. Tamaura, A. Steinfeld, P. Kuhn, and K. Ehrensberger, “Production of solar hydrogen by a novel, 2-step, water-splitting thermochemical cycle,” *Energy*, vol. 20, no. 4, pp. 325–330, 1995.
- [49] Y. Tamaura, M. Kojima, T. Sano, Y. Ueda, N. Hasegawa, and M. Tsuji, “Thermodynamic evaluation of water splitting by a cation-excessive (Ni, Mn) ferrite,” *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 23, no. 12, pp. 1185–1191, 1998.
- [50] Y. Tamaura and H. Kaneko, “Oxygen-releasing step of ZnFe₂O₄/(ZnO + Fe₃O₄)-system in air using concentrated solar energy for solar hydrogen production,” *Sol. Hydrog.*, vol. 78, no. 5, pp. 616–622, 2005.
- [51] H. Kaneko, N. Gokon, N. Hasegawa, and Y. Tamaura, “Solar thermochemical process for hydrogen production using ferrites,” *Int. Symp. CO₂ Fixat. Effic. Util. Energy (CandE 2002) Int. World Energy Syst. Conf.*, vol. 30, no. 11–12, pp. 2171–2178, 2005.
- [52] Y. Tamaura, N. Kojima, N. Hasegawa, M. Inoue, R. Uehara, N. Gokon, and H. Kaneko, “Stoichiometric studies of H₂ generation reaction for H₂O/Zn/Fe₃O₄ system,” *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 26, no. 9, pp. 917–922, 2001.
- [53] H. Kaneko, T. Kodama, N. Gokon, Y. Tamaura, K. Lovegrove, and A. Luzzi, “Decomposition of Zn-ferrite for O₂ generation by concentrated solar radiation,” *Sol. World Congr. 2001*, vol. 76, no. 1–3, pp. 317–322, 2004.
- [54] M. Inoue, N. Hasegawa, R. Uehara, N. Gokon, H. Kaneko, and Y. Tamaura, “Solar hydrogen generation with H₂O/ZnO/MnFe₂O₄ system,” *Sol. World Congr. 2001*, vol. 76, no. 1–3, pp. 309–315, 2004.
- [55] H. Kaneko, T. Yokoyama, A. Fuse, H. Ishihara, N. Hasegawa, and Y. Tamaura, “Synthesis of new ferrite, Al–Cu ferrite, and its oxygen deficiency for solar H₂ generation from H₂O,” *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 31, no. 15, pp. 2256–2265, 2006.
- [56] S. B. Han, T. B. Kang, O. S. Joo, and K. D. Jung, “Water splitting for hydrogen production with ferrites,” *Sol. Energy*, vol. 81, no. 5, pp. 623–628, 2007.
- [57] T. Kodama, N. Gokon, and R. Yamamoto, “Thermochemical two-step water splitting by ZrO₂-supported Ni_xFe_{3-x}O₄ for solar hydrogen production,” *Sol. Energy*, vol. 82, no. 1, pp. 73–79, 2008.
- [58] Y. Tamaura, Y. Ueda, J. Matsunami, N. Hasegawa, M. Nezuca, T. Sano, and M. Tsuji, “SOLAR HYDROGEN PRODUCTION BY USING FERRITES,” *Sol. Energy*, vol. 65, no. 1, pp. 55–57, Jan. 1999.
- [59] Y. Tamaura, N. Hasegawa, M. Kojima, Y. Ueda, H. Amano, and M. Tsuji, “Water splitting with the Mn(II)-ferrite–CaO–H₂O system at 1273K,”

- Energy*, vol. 23, no. 10, pp. 879–886, 1998.
- [60] L. Seralessandri, M. Bellusci, F. Padella, A. Santini, and F. Varsano, “The oxygen-releasing step in the water splitting cycle by $\text{MnFe}_2\text{O}_4\text{--Na}_2\text{CO}_3$ system,” *2nd World Hydrog. Technol. Conv. 2nd World Hydrog. Technol. Conv.*, vol. 34, no. 10, pp. 4546–4550, 2009.
- [61] H. Kaneko, Y. Ochiai, K. Shimizu, Y. Hosokawa, N. Gokon, and Y. Tamaura, “Thermodynamic study based on the phase diagram of the $\text{Na}_2\text{O--MnO--Fe}_2\text{O}_3$ system for H_2 production in three-step water splitting with $\text{Na}_2\text{CO}_3/\text{MnFe}_2\text{O}_4/\text{Fe}_2\text{O}_3$,” *Sol. Energy*, vol. 72, no. 4, pp. 377–383, 2002.
- [62] C. Alvani, A. La Barbera, G. Ennas, F. Padella, and F. Varsano, “Hydrogen production by using manganese ferrite: Evidences and benefits of a multi-step reaction mechanism,” *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 31, no. 15, pp. 2217–2222, 2006.
- [63] T. Kodama, Y. Kondoh, R. Yamamoto, H. Andou, and N. Satou, “Thermochemical hydrogen production by a redox system of ZrO_2 -supported Co(II) -ferrite,” *Sol. Hydrog.*, vol. 78, no. 5, pp. 623–631, 2005.
- [64] T. Kodama and N. Gokon, “Thermochemical cycles for high-temperature solar hydrogen production.,” *Chem. Rev.*, vol. 107, no. 10, pp. 4048–4077, 2007.
- [65] N. Gokon, H. Murayama, J. Umeda, T. Hatamachi, and T. Kodama, “Monoclinic zirconia-supported Fe_3O_4 for the two-step water-splitting thermochemical cycle at high thermal reduction temperatures of 1400–1600 °C,” *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 34, no. 3, pp. 1208–1217, 2009.
- [66] N. Gokon, H. Murayama, A. Nagasaki, and T. Kodama, “Thermochemical two-step water splitting cycles by monoclinic ZrO_2 -supported NiFe_2O_4 and Fe_3O_4 powders and ceramic foam devices,” *Sol. Energy*, vol. 83, no. 4, pp. 527–537, 2009.
- [67] N. Gokon, T. Hasegawa, S. Takahashi, and T. Kodama, “Thermochemical two-step water-splitting for hydrogen production using Fe-YSZ particles and a ceramic foam device,” *Energy*, vol. 33, no. 9, pp. 1407–1416, 2008.
- [68] N. Gokon, S. Takahashi, H. Yamamoto, and T. Kodama, “Thermochemical two-step water-splitting reactor with internally circulating fluidized bed for thermal reduction of ferrite particles,” *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 33, no. 9, pp. 2189–2199, 2008.
- [69] H. Ishihara, H. Kaneko, N. Hasegawa, and Y. Tamaura, “Two-step water-splitting at 1273–1623 K using yttria-stabilized zirconia-iron oxide solid solution via co-precipitation and solid-state reaction,” *Energy*, vol. 33, no. 12, pp. 1788–1793, 2008.
- [70] P. Haueter, S. Moeller, R. Palumbo, and A. Steinfeld, “The production of

- zinc by thermal dissociation of zinc oxide—solar chemical reactor design,” *Sol. Energy*, vol. 67, no. 1–3, pp. 161–167, 1999.
- [71] S. Abanades, P. Charvin, G. Flamant, and P. Neveu, “Screening of water-splitting thermochemical cycles potentially attractive for hydrogen production by concentrated solar energy,” *Energy*, vol. 31, no. 14, pp. 2805–2822, 2006.
- [72] M. Romero, J. Palma, and D. P. Serrano, “Nuevas tecnologías para la descarbonización del transporte,” *Química e Ind.*, vol. 600, p. 36, 2012.
- [73] S. Palero, “Estudio Teórico-Experimental de la Transferencia de Calor en Absorbedores Solares Volumétricos: Estados Críticos,” Universidad de Educación a Distancia (España), 2008.
- [74] A. Wörner and R. Tamme, “CO₂ reforming of methane in a solar driven volumetric receiver–reactor,” *Catal. Today*, vol. 46, no. 2–3, pp. 165–174, 1998.
- [75] C. Agrafiotis, M. Roeb, A. G. Konstandopoulos, and L. Nalbandian, “Solar water splitting for hydrogen production with monolithic reactors,” *Sol. Energy*, vol. 79, pp. 409–421, 2005.
- [76] M. Roeb, M. Neises, J.-P. Säck, P. Rietbrock, N. Monnerie, J. Dersch, M. Schmitz, and C. Sattler, “Operational strategy of a two-step thermochemical process for solar hydrogen production,” *2nd World Hydrog. Technol. Conv. 2nd World Hydrog. Technol. Conv.*, vol. 34, no. 10, pp. 4537–4545, 2009.
- [77] M. Roeb, J.-P. Säck, P. Rietbrock, C. Prah, H. Schreiber, M. Neises, L. de Oliveira, D. Graf, M. Ebert, W. Reinalter, M. Meyer-Grünefeldt, C. Sattler, A. Lopez, A. Vidal, A. Elsberg, P. Stobbe, D. Jones, A. Steele, S. Lorentzou, C. Pagkoura, A. Zygogianni, C. Agrafiotis, and A. G. Konstandopoulos, “Test operation of a 100 kW pilot plant for solar hydrogen production from water on a solar tower,” *SolarPACES 2009*, vol. 85, no. 4, pp. 634–644, 2011.
- [78] R. Tamme, R. Buck, and M. Epstien, “Solar Upgrading of Fuels for Generation of Electricity,” *J. Sol. Energy Eng.*, vol. 163, pp. 160–163, 2001.
- [79] S. MÖLLER, “Final Report Summary - SOLREF (Solar Steam Reforming of Methane Rich Gas for Synthesis Gas Production),” Germany, 2014.
- [80] T. Tan and Y. Chen, “Review of study on solid particle solar receivers,” *Renew. Sustain. Energy Rev.*, vol. 14, no. 1, pp. 265–276, 2010.
- [81] J. M. Hruby, “A technical feasibility study of a solid particle solar central receiver for high temperature applications,” EEUU, 1986.
- [82] A. Kogan, M. Kogan, and S. Barak, “Production of hydrogen and carbon by solar thermal methane splitting. III. Fluidization, entrainment and

- seeding powder particles into a volumetric solar receiver,” *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 30, no. 1, pp. 35–43, 2005.
- [83] A. Steinfeld, M. Brack, A. Meier, A. Weidenkaff, and D. Wuillemin, “A solar chemical reactor for co-production of zinc and synthesis gas,” *Energy*, vol. 23, no. 10, pp. 803–814, 1998.
- [84] “Solar Hydrogen-Future Energy Carrier. Solar Fuels from Concentrated Sunlight,” *SolarPACES*, pp. 16–23, 2009.
- [85] R. Bertocchi, J. Karni, and A. Kribus, “Experimental evaluation of a non-isothermal high temperature solar particle receiver,” *SolarPACES 2002*, vol. 29, no. 5–6, pp. 687–700, 2004.
- [86] N. Siegel and G. J. Kolb, “Desing and on-sun testing of a solid particle receiver prototype.,” *Proc. ASME 2nd Int. Conf. Energy Sustain.*, 2008.
- [87] N. Gokon, S. Inuta, S. Yamashita, T. Hatamachi, and T. Kodama, “Double-walled reformer tubes using high-temperature thermal storage of molten-salt/MgO composite for solar cavity-type reformer,” *IWBT 2008 IWBT 2008*, vol. 34, no. 17, pp. 7143–7154, 2009.
- [88] H. Kaneko, “Solar Hydrogen production with rotary-type solar reactor in international collaborative development between Tokio Tech and CSIRO,” *SolarPACES*, 2009.
- [89] E. Koepf, W. Villasmil, and A. Meier, “Pilot-scale solar reactor operation and characterization for fuel production via the Zn/ZnO thermochemical cycle,” *Appl. Energy*, vol. 165, pp. 1004–1023, Mar. 2016.
- [90] J. E. Funk and C. England, “Solar thermochemical hydrogen: The heat source-process interface,” *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 10, no. 6, pp. 359–364, 1985.
- [91] H. Kameyama, “Thermal performance and control of a solar driven catalytic reactor,” *Kagaku kogaku Ronbunshu J.*, vol. 19, no. 5, 1993.
- [92] R. Levitan, H. Rosin, and M. Levy, “Chemical reactions in a solar furnace—Direct heating of the reactor in a tubular receiver,” *Sol. Energy*, vol. 42, no. 3, pp. 267–272, 1989.
- [93] M. Epstein and I. Spiewak, “Solar Experiments with a tubular reformer,” *Proc. 8th Int. Symp. Sol. Therm. Conc. Technol.*, pp. 1209–1229, 1996.
- [94] R. Benito, G. J. Duffy, K. T. Do, R. McNaughton, J. H. Edwards, N. Dave, M. Chensee, and C. Walters, “— CSIRO’s Advanced Power Generation Technology Using Solar Thermal — Fossil Energy Hybrid Systems,” in *Greenhouse Gas Control Technologies - 6th International Conference*, 2003, pp. 1813–1816.
- [95] R. Dunn, K. Lovegrove, and G. Burgess, “AMMONIA RECEIVER DESIGN FOR A 500 m2 DISH.” Australian National University (ANU), 2010.

- [96] J. K. Dahl, K. J. Buechler, A. W. Weimer, A. Lewandowski, and C. Bingham, "Solar-thermal dissociation of methane in a fluid-wall aerosol flow reactor," *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 29, no. 7, pp. 725–736, 2004.
- [97] T. Melchior, C. Perkins, A. W. Weimer, and A. Steinfeld, "A cavity-receiver containing a tubular absorber for high-temperature thermochemical processing using concentrated solar energy," *Int. J. Therm. Sci.*, vol. 47, no. 11, pp. 1496–1503, 2008.
- [98] N. Gokon, D. Nakano, S. Inuta, and T. Kodama, "High-temperature carbonate/MgO composite materials as thermal storage media for double-walled solar reformer tubes," *Sol. Energy*, vol. 82, no. 12, pp. 1145–1153, 2008.
- [99] R. McNaughton and W. Stein, "Improving efficiency of power generation from solar thermal natural gas reforming," *SolarPACES*, 2009.
- [100] S. Rodat, S. Abanades, J.-L. Sans, and G. Flamant, "Hydrogen production from solar thermal dissociation of natural gas: development of a 10 kW solar chemical reactor prototype," *Sol. Energy*, vol. 83, no. 9, pp. 1599–1610, 2009.
- [101] M. Kruesi, Z. R. Jovanovic, and A. Steinfeld, "A two-zone solar-driven gasifier concept : Reactor design and experimental evaluation with bagasse particles," *Fuel*, vol. 117, pp. 680–687, 2014.
- [102] T. Osinga, T. Frommherz, A. Steinfeld, and C. Wieckert, "Experimental Investigation of the Solar Carbothermic Reduction of ZnO using a two cavity Solar Reactor," *J. Sol. Energy Eng.*, vol. 126, pp. 633–637, 2004.
- [103] C. Wieckert, R. Palumbo, and U. Frommherz, "A two-cavity reactor for solar chemical processes: heat transfer model and application to carbothermic reduction of ZnO," *SolarPACES 2002*, vol. 29, no. 5–6, pp. 771–787, 2004.
- [104] U. Frommherz, S. Kräupl, and C. Wieckert, "A Pilot Scale Solar Reactor for Carbothermic Reduction of ZnO," *Publ. Sol. Technol. Lab. PSI*, vol. 43, 2004.
- [105] N. Piatkowski, C. Wieckert, and A. Steinfeld, "Experimental investigation of a packed-bed solar reactor for the steam-gasification of carbonaceous feedstocks," *Fuel Process. Technol.*, vol. 90, no. 3, pp. 360–366, 2009.
- [106] E. Tapia, A. Salva, A. Iranzo, V. Gallardo, and A. Casado, "Estudio de las tecnologías para la producción de hidrógeno mediante ciclos termoquímicos acoplados a energía solar de alta temperatura," in *CONAPPICE*, 2012.
- [107] S. V. Patankar, "Numerical heat transfer and fluid flow / Suhas V. Patankar." Hemisphere, Washington [etc.] :, 1980.

- [108] D. Yadav and R. Banerjee, "A review of solar thermochemical processes," *Renew. Sustain. Energy Rev.*, vol. 54, pp. 497–532, Feb. 2016.
- [109] A. Meier, J. Ganz, and A. Steinfeld, "Modeling of a novel high-temperature solar chemical reactor," *Chem. Eng. Sci.*, vol. 51, no. 11, pp. 3181–3186, 1996.
- [110] D. Hirsch and A. Steinfeld, "Solar hydrogen production by thermal decomposition of natural gas using a vortex-flow reactor," *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 29, no. 1, pp. 47–55, 2004.
- [111] D. Hirsch and A. Steinfeld, "Radiative transfer in a solar chemical reactor for the co-production of hydrogen and carbon by thermal decomposition of methane," *Chem. Eng. Sci.*, vol. 59, no. 24, pp. 5771–5778, 2004.
- [112] J. Dersch, A. Mathijssen, M. Roeb, and C. Sattler, "Modelling of a Solar Thermal Reactor for Hydrogen Generation," *Model. Assoc.*, 2006.
- [113] S. Abanades and G. Flamant, "Experimental study and modeling of a high-temperature solar chemical reactor for hydrogen production from methane cracking," *EHEC2005*, vol. 32, no. 10–11, pp. 1508–1515, 2007.
- [114] H. Chen, Y. Chen, H.-T. Hsieh, and N. Siegel, "Computational Fluid Dynamics Modeling of Gas - Particle Flow Within a Solid - Particle Solar Receiver," *ASME*, vol. 129, pp. 160–170, 2007.
- [115] H. H. Klein, J. Karni, R. Ben-Zvi, and R. Bertocchi, "Heat transfer in a directly irradiated solar receiver/reactor for solid-gas reactions," *Sol. Energy*, vol. 81, no. 10, pp. 1227–1239, 2007.
- [116] A. Z'Graggen and A. Steinfeld, "Hydrogen production by steam-gasification of carbonaceous materials using concentrated solar energy – V. Reactor modeling, optimization, and scale-up," *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 33, no. 20, pp. 5484–5492, 2008.
- [117] H. I. Villafán-Vidales, C. A. Arancibia-Bulnes, U. Dehesa-Carrasco, and H. Romero-Paredes, "Monte Carlo radiative transfer simulation of a cavity solar reactor for the reduction of cerium oxide," *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 34, no. 1, pp. 115–124, 2009.
- [118] N. Ozalp and D. JayaKrishna, "CFD analysis on the influence of helical carving in a vortex flow solar reactor," *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 35, no. 12, pp. 6248–6260, 2010.
- [119] J. Costandy, N. El Ghazal, M. T. Mohamed, A. Menon, V. Shilapuram, and N. Ozalp, "Effect of reactor geometry on the temperature distribution of hydrogen producing solar reactors," *Adv. Hydrog. Prod. (Selected Pap. from ICH2P-2011)*, vol. 37, no. 21, pp. 16581–16590, 2012.
- [120] M. I. Roldán, I. Cañadas, J. L. Casas, and E. Zarza, "Thermal analysis and design of a solar prototype for high-temperature processes," *Int. J. Heat*

- Mass Transf.*, vol. 56, no. 1–2, pp. 309–318, Jan. 2013.
- [121] J. Martinek, C. Bingham, and A. W. Weimer, “Computational modeling and on-sun model validation for a multiple tube solar reactor with specularly reflective cavity walls. Part 1: Heat transfer model,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 81, no. 0, pp. 298–310, Jan. 2012.
- [122] J. Martinek, C. Bingham, and A. W. Weimer, “Computational modeling of a multiple tube solar reactor with specularly reflective cavity walls. Part 2: Steam gasification of carbon,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 81, no. 0, pp. 285–297, 2012.
- [123] K. S. Reddy, D. Premkumar, and T. S. Vikram, “Heat Transfer Modeling and Analysis of Solar Thermo-chemical Reactor for Hydrogen Production from Water,” *2013 ISES Sol. World Congr.*, vol. 57, no. 0, pp. 570–579, 2014.
- [124] S. Bellan, E. Alonso, C. Perez-Rabago, J. Gonzalez-Aguilar, and M. Romero, “Numerical Modeling of Solar Thermochemical Reactor for Kinetic Analysis,” *Proc. SolarPACES 2013 Int. Conf.*, vol. 49, no. 0, pp. 735–742, 2014.
- [125] S. Bellan, E. Alonso, F. Gomez-Garcia, C. Perez-Rabago, J. Gonzalez-Aguilar, and M. Romero, “Thermal performance of lab-scale solar reactor designed for kinetics analysis at high radiation fluxes,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 101, no. 0, pp. 81–89, 2013.
- [126] S. Tescari, M. Neises, L. de Oliveira, M. Roeb, C. Sattler, and P. Neveu, “Thermal model for the optimization of a solar rotary kiln to be used as high temperature thermochemical reactor,” *Sol. Energy*, vol. 95, no. 0, pp. 279–289, 2013.
- [127] N. Ozalp and V. Shilapuram, “Step-by-step methodology of developing a solar reactor for emission-free generation of hydrogen,” *Nov. Hydrog. Prod. Technol. Appl. Nov. Hydrog. Prod. Technol. Appl.*, vol. 35, no. 10, pp. 4484–4495, 2010.
- [128] F. Menter, M. Kuntz, and R. Langtry, “Ten years of industrial experience with the SST turbulence model,” 2003.
- [129] F. R. Menter, “Review of the shear-stress transport turbulence model experience from an industrial perspective,” *Int. J. Comput. Fluid Dyn.*, vol. 23, no. 908134069, pp. 305–316, 2009.
- [130] W. Wang, B. Wang, L. Li, B. Laumert, and T. Strand, “The effect of the cooling nozzle arrangement to the thermal performance of a solar impinging receiver,” *Sol. Energy*, vol. 131, pp. 222–234, Jun. 2016.
- [131] D. Wen and Y. Ding, “Heat transfer of gas flow through a packed bed,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 61, no. 11, pp. 3532–3542, Jun. 2006.

- [132] S. Abanades, H. Kimura, and H. Otsuka, "Hydrogen production from thermo-catalytic decomposition of methane using carbon black catalysts in an indirectly-irradiated tubular packed-bed solar reactor," *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 39, pp. 18770–18783, 2014.
- [133] T. D. Canonsburg, "ANSYS FLUENT User's Guide," no. November, 2011.
- [134] "ANSYS-CFX 14.0 Ansys Inc." 2001.
- [135] Ansys Inc., "ANSYS CFX-Solver Theory Guide v14.0," ANSYS., USA, 2011, p. 402.
- [136] W. Vieser, T. Esch, F. Menter, and P. Smirnov, "Heat transfer predictions using advanced two-equation turbulence models," in *CFX Validation Report*, ANSYS.
- [137] "cfx-sst (1).pdf," *Innovative Turbulence Modeling: SST Model in ANSYS CFX*, 2006.
- [138] F. P. (Frank P. Incropera, T. L. Bergman, A. S. Lavine, and D. P. Dewitt, *Fundamentals of heat and mass transfer*, 7th Editio. United States of America: John Wiley & Sons, 2011.
- [139] M. F. Modest, *Radiative Heat Transfer*. Elsevier, 2003.
- [140] R. J. Howell, "The Monte Carlo Method in Radiative Heat Transfer," *J. Heat Transf. 1997 Max Jakob Meml. Award Lect.*, vol. 120, pp. 547–560, 1998.
- [141] J. M. María and C. Monné, *Transferencia de Calor*. Universidad de Zaragoza.
- [142] "Pyromark®, pintura para altas temperaturas | Tempil." [Online]. Available: <http://es.tempil.com/specialty-coatings/pyromark-pintura-para-altas-temperaturas/>. [Accessed: 01-Feb-2016].
- [143] T. L. Bergman, A. S. Lavine, F. P. Incropera, and D. P. Dewitt, *Fundamentals of Heat and Mass Transfer. 7th Edition*. 2011.
- [144] "Optical Design Software | Illumination Software | Optics Software - TracePro." [Online]. Available: <http://www.lambdares.com/features>. [Accessed: 16-Feb-2016].
- [145] J. A. Sánchez Gonzàlez, "Circulación de fluidos a través de lechos porosos," 2012.
- [146] N. Wakao, S. Kaguei, and T. Funazkri, "Effect of fluid dispersion coefficients on particle-to-fluid heat transfer coefficients in packed beds. Correlation of nusselt numbers," *Chem. Eng. Sci.*, vol. 34, no. 3, pp. 325–336, 1979.
- [147] R. Palumbo, M. Keunecke, S. Möller, and A. Steinfeld, "Reflections on the design of solar thermal chemical reactors: thoughts in transformation,"

- SolarPACES 2002*, vol. 29, no. 5–6, pp. 727–744, 2004.
- [148] A. Steinfeld and M. Schubnell, “Optimum aperture size and operating temperature of a solar cavity-receiver,” *Sol. Energy*, vol. 50, no. 1, pp. 19–25, 1993.
- [149] N. Sendhil Kumar and K. S. Reddy, “Comparison of receivers for solar dish collector system,” *Energy Convers. Manag.*, vol. 49, no. 4, pp. 812–819, Apr. 2008.
- [150] R. Uhlig, R. Flesch, B. Gobereit, S. Giuliano, and P. Liedke, “Strategies Enhancing Efficiency of Cavity Receivers,” *Energy Procedia*, vol. 49, pp. 538–550, 2014.
- [151] A. Steinfeld, S. Sanders, and R. Palumbo, “Design aspects of solar thermochemical engineering - A case study: Two-step water splitting cycle using the Fe₃O₄/FeO redox system,” *Sol. Energy*, vol. 65, no. 1, pp. 43–53, Jan. 1999.
- [152] Y. Shuai, X.-L. L. Xia, and H.-P. Tan, “Radiation performance of dish solar concentrator/cavity receiver systems,” *Sol. Energy*, vol. 82, no. 1, pp. 13–21, Jan. 2008.
- [153] R. Flesch, H. Stadler, R. Uhlig, and R. Pitz-Paal, “Numerical analysis of the influence of inclination angle and wind on the heat losses of cavity receivers for solar thermal power towers,” *Sol. Energy*, vol. 110, pp. 427–437, Dec. 2014.
- [154] S.-Y. Wu, L. Xiao, Y. Cao, and Y.-R. Li, “Convection heat loss from cavity receiver in parabolic dish solar thermal power system: A review,” *Sol. Energy*, vol. 84, no. 8, pp. 1342–1355, Aug. 2010.
- [155] J. Martinek and A. W. Weimer, “Design considerations for a multiple tube solar reactor,” *Sol. Energy*, vol. 90, pp. 68–83, Apr. 2013.
- [156] Ansys Inc., “General Best Practice Guidelines,” in *ANSYS CFX Reference Guide*, 14.0 ed., 2011, pp. 94–104.
- [157] N. E. A. C. O. T. S. O. N. I. NEA/CSNI, *Best Practice Guidelines for the use of CFD in Nuclear Reactor Safety Applications*. 2007.
- [158] ANSYS Inc., “ANSYS CFX-Solver Modeling Guide v14.0,” ANSYS., USA, 2011, p. 594.
- [159] S. R. Pavlovic, V. P. Stefanović, P. Rajković, E. P. Petrovic, and S. Ayed, “Ray Tracing Study to Determine the Characteristics of the Solar Image in the Receiver for a Thermal Solar Concentration System.”
- [160] “Microtherm nv - High temperature insulation.” [Online]. Available: <http://www.microthermgroup.com/low/EXEN/site/hightemperature-insulation.aspx>. [Accessed: 18-May-2016].

- [161] C. C. Agrafiotis, C. Pagkoura, S. Lorentzou, M. Kostoglou, and A. G. Konstandopoulos, "Hydrogen production in solar reactors," *Catal. Today*, vol. 127, no. 1–4, pp. 265–277, Sep. 2007.
- [162] G. E. Mueller, "Prediction of radial porosity distributions in randomly packed fixed beds of uniformly sized spheres in cylindrical containers," *Chem. Eng. Sci. Eng. Sci.*, vol. 46, no. 2, pp. 706–708, 1978.
- [163] M. Cascetta, G. Cau, P. Puddu, and F. Serra, "A comparison between CFD simulation and experimental investigation of a packed-bed thermal energy storage system," *Appl. Therm. Eng.*, vol. 98, pp. 1263–1272, 2016.
- [164] D. Kunii and J. M. Smith, "Heat transfer characteristics of porous rocks," *AIChE J.*, vol. 6, no. 1, pp. 71–78, 1960.
- [165] Y. Asakuma, M. Asada, Y. Kanazawa, and T. Yamamoto, "Thermal analysis with contact resistance of packed bed by a homogenization method," *Powder Technol.*, vol. 291, pp. 46–51, 2016.
- [166] R. R. Bhosale, A. Kumar, L. J. P. van den Broeke, S. Gharbia, D. Dardor, M. Jilani, J. Folady, M. S. Al-Fakih, and M. A. Tarsad, "Solar hydrogen production via thermochemical iron oxide–iron sulfate water splitting cycle," *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 40, no. 4, pp. 1639–1650, Jan. 2015.
- [167] O. Nilsson, H. Mehling, R. Horn, J. Fricke, R. Hofmann, S. G. Müller, R. Eckstein, and D. Hofmann, "Determination of the thermal diffusivity and conductivity of monocrystalline silicon carbide (300–2300 K)," *High Temp. - High Press.*, vol. 29, no. 1, pp. 73–79, 1997.
- [168] O. Levenspiel, *Ingeniería de las reacciones químicas / Octave Levenspiel*. México: Limusa, 2012.
- [169] R. Diaz Franco and A. Vidal Delgado, Alfonso; Gallardo García-Orta, Victoria; Martín Betancourt, Victoria; Romero Álvarez, Manuel; Gonzalez-Aguilar, Jose; Ridao Carlini, Miguel Ángel; Tapia Martin, Elvira; Gutiérrez Ortiz, Francisco Javier; Vazquez, Jesús ;, "SolH2 project Solar-driven hydrogen production by bioethanol reforming and mixed-ferrite thermochemical cycle," in *SolarPACES2012*, 2012.
- [170] "Plataforma Solar de Almería - Discos Parabólicos." [Online]. Available: <http://www.psa.es/es/instalaciones/discos/distal2.php>.