



Modelación de la combustión de bagazo de caña en un módulo de producción de azúcar no centrifugado

Fabián Andrés Velásquez Ayala

Universidad Nacional de Colombia
Facultad de Ingeniería
Departamento de Ingeniería Química y Ambiental
Bogotá, Colombia
2024

Modelación de la combustión de bagazo de caña en un módulo de producción de azúcar no centrifugado

Fabián Andrés Velásquez Ayala

Tesis presentada como requisito parcial para optar por el título de:
Magíster en ingeniería - Ingeniería química

Director:

Ph.D Jader Rodríguez Cortina

Codirectora:

Dr. Ing Sonia Lucia Rincón Prat

Línea de investigación:

Conversión termoquímica de biomasa

Grupo de investigación:

Grupo de Investigación en Biomasa y Optimización Térmica de Procesos, (BIOT)

Universidad Nacional de Colombia

Facultad de Ingeniería

Departamento de Ingeniería Química y Ambiental

2024

Declaración

Me permito afirmar que he realizado ésta tesis de manera autónoma y con la única ayuda de los medios permitidos y no diferentes a los mencionados el presente texto. Todos los pasajes que se han tomado de manera textual o figurativa de textos publicados y no publicados, los he reconocido en el presente trabajo. Ninguna parte del presente trabajo se ha empleado en ningún otro tipo de tesis.

Bogotá., 30/01/2024

Fabián Velásquez
Fabián Andrés Velásquez Ayala

Agradecimientos

Quisiera expresar mi gratitud a Dios, fuente de sabiduría y fortaleza, por guiarme a lo largo de este camino académico. A mi familia, por su apoyo y comprensión durante el desarrollo de este trabajo.

Agradezco de manera especial a mis directores de tesis, Sonia Lucía Rincón Prat y Jader Rodríguez Cortina, por su dedicación, orientación y sabios consejos que fueron fundamentales para el desarrollo y culminación de este proyecto. Su experiencia y compromiso han sido inspiradores, y estoy agradecido por la oportunidad de aprender de ellos.

A la Corporación Colombiana de Investigación Agropecuaria (Agrosavia), mi sincero agradecimiento por proporcionar el entorno propicio para la realización de esta investigación. La colaboración y el apoyo de todo el equipo fueron cruciales para el éxito de este trabajo.

Finalmente, a todos aquellos que, de una manera u otra, contribuyeron a la realización de esta tesis, les extiendo mi más sincero agradecimiento.

Resumen

Modelación de la combustión de bagazo de caña en un módulo de producción de azúcar no centrifugada

El azúcar no centrifugado de caña (ANC) es un edulcorante sólido no refinado con un gran potencial de comercialización debido a sus atributos nutraceuticos. Sin embargo, los módulos de producción de ANC presentan problemas de baja eficiencia térmica debido al diseño empírico de sus componentes como la cámara de combustión causando que la energía suministrada por el combustible (bagazo de caña) no sea suficiente para cubrir la demanda energética del proceso. Como resultado, se obtienen bajas temperaturas de combustión y altas tasas de emisión de gases contaminantes. Consecuentemente, para establecer modificaciones y criterios de diseño en estos equipos, es necesario comprender los fenómenos de conversión termoquímica que experimenta el combustible. Por lo tanto, se planteó el desarrollo de un modelo de combustión de bagazo de caña a partir de técnicas de dinámica computacional de fluidos (CFD) en una cámara de combustión plana de lecho fijo. El modelo fue planteado a partir de los balances de energía y masa en estado transitorio para un sistema heterogéneo compuesto por dos fases: gas y sólido. Se tiene en cuenta los procesos de transferencia de calor, masa y las reacciones químicas derivadas de los procesos de degradación térmica del combustible. El modelo fue validado a partir de datos experimentales tomados en una cámara de combustión de lecho fijo para bagazo de caña, donde se midieron los perfiles de distribución de temperatura y la composición de especies (CO_2 , CO y O_2). El modelo permite determinar la distribución de los perfiles de temperatura y la concentración de especies generadas o destruidas durante el proceso. La validación del modelo muestra la capacidad de predecir un comportamiento promedio de la temperatura y composición de especies que se generan en la combustión de bagazo de caña.

Palabras clave: Dinámica computacional de fluidos, modelación matemática, combustión en lecho fijo, biomasa, bagazo de caña

Abstract

Modelling of sugarcane bagasse combustion in a non-centrifugal sugar production module

Non-centrifugal cane sugar (NCS) is an unrefined solid sweetener with great commercialization potential due to its nutraceutical attributes. However, NCS production modules present problems of low thermal efficiency due to the empirical design of its components such as the combustion chamber causing the energy supplied by the fuel (cane bagasse) is not sufficient to cover the energy demand of the process. As a result, low combustion temperatures and high pollutant gas emission rates are obtained. Consequently, to establish modifications and design criteria for these equipment, it is necessary to understand the thermochemical conversion phenomena experienced by the fuel. Therefore, the development of a cane bagasse combustion model was proposed using computational fluid dynamics (CFD) techniques in a flat fixed-bed combustion chamber. The model was based on the energy and mass balances in transient state for a heterogeneous system composed of two phases: gas and solid. It takes into account the heat and mass transfer processes and the chemical reactions derived from the thermal degradation processes of the fuel. The model was validated from experimental data taken in a fixed bed combustion chamber for sugarcane bagasse, where temperature distribution profiles and species composition (CO_2 , CO y O_2) were measured. The model allows determining the distribution of temperature profiles and the concentration of species generated or destroyed during the process. The validation of the model shows the ability to predict an average behavior of the temperature and species composition generated in the combustion of sugarcane bagasse.

Keywords: Computational Fluid Dynamics, mathematical modelling, fixed bed combustion, biomass, sugar cane bagasse

Contenido

Agradecimientos	ii
Resumen	iii
Abstract	iv
Contenido	viii
Lista de figuras	x
Lista de tablas	xii
Listado de símbolos y abreviaturas	xiii
1. Introducción	1
2. Planteamiento del problema	3
2.1. Importancia socioeconómica de la producción de ANC	3
2.2. Proceso de producción de ANC	3
2.3. Tipos de sistemas de combustión en unidades de producción de azúcar no centrifugada	5
2.4. Descripción del problema	6
2.5. Sistemas de lecho fijo de combustión	7
2.6. Tipos de modelos para lecho fijo	9
2.7. Descripción matemática de la combustión en lecho fijo	11
2.8. Términos fuente	12
2.8.1. Secado	12
2.8.2. Pirólisis	14
2.8.3. Combustión	15
2.9. Objetivos	16
2.9.1. Objetivo general	16

Modelación de la combustión de bagazo de caña en un módulo de producción de azúcar no centrifugado

2.9.2. Objetivos específicos	17
3. Ecuaciones de conservación del modelo	18
3.1. Suposiciones del modelo matemático	19
3.2. Ecuaciones de gobierno	21
3.2.1. Ecuación de conservación de especies para la fase gas	21
3.2.2. Ecuación de conservación de energía para la fase gas	21
3.2.3. Ecuación de conservación de especies para la fase sólida	22
3.2.4. Ecuación de conservación de energía para la fase sólida	23
4. Propiedades físicas y químicas de fases gas y sólida	25
4.1. Propiedades para la fase gaseosa	25
4.1.1. Viscosidad dinámica por especie de gas	25
4.1.2. Viscosidad dinámica para mezcla de gas	26
4.1.3. Conductividad térmica por especie de gas	27
4.1.4. Conductividad térmica para mezcla de gas	28
4.1.5. Conductividad térmica efectiva por radiación entre partículas	29
4.1.6. Conductividad térmica efectiva del gas	30
4.1.7. Calor específico y entalpía molar por especie de gas	30
4.1.8. Calor específico molar para mezcla de gas	31
4.1.9. Coeficiente de difusión binario	32
4.1.10. Coeficiente de difusión para gases con componentes múltiples	32
4.1.11. Coeficiente de dispersión transversal asociado a la transferencia de masa	32
4.1.12. Coeficiente de dispersión transversal asociado a la transferencia de calor	33
4.1.13. Velocidad de fase gas	33
4.2. Propiedades para fase sólida	34
4.2.1. Densidad y porosidad de partícula	34
4.2.2. Masa y volumen de partícula	35
4.2.3. Diámetro equivalente de partícula y área superficial volumétrica de partícula	36
4.2.4. Calor específico efectivo de la fase sólida	36
4.2.5. Conductividad térmica efectiva de fase sólida	37
4.2.6. Velocidad de fase sólida	38
4.3. Coeficiente de transferencia de calor entre fase sólida y fase gas	38
5. Procesos de degradación térmica del combustible	40
5.1. Secado	40
5.2. Pirólisis	41

Modelación de la combustión de bagazo de caña en un módulo de producción de azúcar no centrifugado

5.3. Combustión	44
5.3.1. Combustión de volátiles	45
5.3.2. Combustión de carbonizado	46
5.4. Entalpías de reacción	47
5.5. Términos fuente	48
5.5.1. Términos fuente para la ecuación de conservación de especies para la fase gas	48
5.5.2. Términos fuente para la ecuación de conservación de energía para la fase gas	48
5.5.3. Términos fuente para la ecuación de conservación de especies para la fase sólida	49
5.5.4. Términos fuente para la ecuación de conservación de energía para la fase sólida	49
6. Técnicas de discretización y solución numérica	50
6.1. Discretización de ecuaciones	50
6.2. Métodos de solución numérica	52
6.3. Convergencia	53
6.3.1. Criterio de convergencia	53
6.3.2. Relajación de la solución iterativa	54
6.3.3. Linealización de términos fuente	56
6.4. Algoritmo de solución	57
7. Dispositivo experimental para la validación del modelo	59
7.1. Diseño del dispositivo experimental	59
7.1.1. Parámetros de diseño	59
7.1.2. Alternativas de diseño del dispositivo experimental	60
7.1.3. Dispositivo experimental	61
7.2. Pruebas experimentales	62
7.2.1. Materiales	62
7.2.2. Configuración del equipo y mediciones experimentales	63
7.2.3. Pruebas experimentales	64
7.3. Resultados experimentales	65
8. Resultados del modelo matemático y validación	69
8.1. Análisis de malla	69
8.2. Configuración de las simulaciones	70
8.2.1. Condiciones iniciales	71
8.2.2. Condiciones de frontera	73

Modelación de la combustión de bagazo de caña en un módulo de producción de azúcar no centrifugado

8.3. Resultados de simulaciones	74
8.3.1. Temperatura de fase gas y fase sólida	74
8.3.2. Composición de especies de la fase gas	77
8.3.3. Composición de especies para la fase sólida	82
8.3.4. Velocidad de fase gas y fase sólida	83
8.4. Validación del modelo	86
8.4.1. Perfil de temperatura	86
8.4.2. Concentración de especies para la fase gas	88
9. Conclusiones y perspectivas	91
A. Apéndice 1	93
A.1. Cálculo de viscosidad dinámica para gases	93
A.2. Conductividad térmica por especie de gas	95
A.3. Conductividad térmica para mezcla de gas	96
A.4. Calor específico y entalpía molar por especie de gas	96
A.5. Coeficiente de difusión binario	97
A.6. Discretización de ecuaciones	98
A.7. Pruebas de bondad de ajuste	101
B. Apéndice 2	103
B.1. Diseño de cámara de combustión	103
B.1.1. Parámetros de diseño	103
B.1.2. Resultados de las alternativas de diseño	104
Referencias Bibliográficas	105

Lista de figuras

2-1. Proceso de producción de ANC. Fuente: Velásquez et al. (2019).	4
2-2. Estructura de una hornilla para la producción de ANC. Fuente: Jader et al. (2018).	5
2-3. Tipos de cámara de combustión en módulos de producción de ANC: a) Ward y b) plana. Fuente: Jader et al. (2018).	6
2-4. Tipos de configuraciones de lecho fijo de combustión: a) co-corriente y b) contra-corriente. Fuente: Khodaei et al. (2015).	9
2-5. Regímenes de control de velocidad para la oxidación heterogénea de carbonizado. Fuente: Skinner and Smoot (1979).	16
3-1. a) Esquema general de la cámara de combustión y b) Sistema de coordenadas para el planteamiento de las ecuaciones de balance.	19
4-1. Viscosidad dinámica para diferentes especies: comparación valores de literatura y valores calculados.	26
4-2. Conductividad térmica para diferentes especies: comparación valores de literatura y valores calculados.	28
4-3. Calor específico molar para diferentes especies: comparación valores de literatura y valores calculados.	31
4-4. Ilustración para justificar la adopción del régimen de flujo pistón para la fase fluida. Fuente: de Souza-Santos (2010).	34
5-1. Velocidad de evaporación para diferentes temperaturas del sólido. Fuente: elaboración propia.	41
5-2. Pirólisis de bagazo de caña: a) velocidad de reacción y b) pérdida de masa.	42
5-3. Especies generadas durante el proceso de pirólisis.	44
6-1. a) Malla computacional implementada y b) volumen de control.	51
7-1. Diseño conceptual y alternativas de diseño para la cámara de combustión	61
7-2. Equipo de validación experimental	62
7-3. Partículas de combustible	63

**Modelación de la combustión de bagazo de caña en un módulo de producción de
azúcar no centrifugado**

7-4.	Diagrama esquemático de la cámara de combustión con puntos de medición de temperatura y concentración de gases	64
7-5.	Combustión de bagazo de caña con contenido de humedad de 35.40 %. Perfiles de temperatura de para: a) lado derecho del reactor, b) lado izquierdo del reactor, c) promedio y d) perfil de concentración de especies de gas.	66
7-6.	Combustión de bagazo de caña con contenido de humedad de 4.17 %. Perfiles de temperatura para: a) lado derecho del reactor, b) lado izquierdo del reactor, c) promedio y d) concentración de especies de gas.	68
8-1.	Perfiles de temperatura experimental y simulados con diferentes tipos de malla para a) 0.5 s y b) 0.25 s. c) Error absoluto medio para diferentes tipos de malla utilizando dos pasos de tiempo: 0.5 s y 0.25 s.	70
8-2.	Distribución de temperaturas en la cámara de combustión para: a) fase gas y b) fase sólida. Distancia desde la parte inferior del lecho P1 = 0.05 m, P2 = 0.15 m, P3 = 0.30 m, P4 = 0.40 m y Pout = 0.50 m	75
8-3.	Contornos de temperatura para fase gas y fase sólida	76
8-4.	Distribución de especies de la fase gas en el lecho para diferentes alturas. Distancia considerada desde la parte inferior del lecho: P1 = 0.05 m, P2 = 0.15 m, P3 = 0.30 m, P4 = 0.40 m y Pout = 0.50 m	78
8-5.	Contornos de concentración de especies para fase gas: CH_4 , H_2 , y Tar	80
8-6.	Contornos de concentración de especies para fase gas: CO , CO_2 , H_2O y O_2	81
8-7.	Distribución de especies de la fase sólida en el lecho	82
8-8.	a) Velocidad de fase gas, b) velocidad de fase sólida y c) Densidad aparente	83
8-9.	Contornos de fracción masa para carbonizado, velocidad de fase sólida y velocidad de fase gas	85
8-10.	Distribución promedio de temperaturas experimentales y modeladas para combustión con bagazo húmedo (caso 1) y seco (caso 2). Validación en cuatro alturas diferentes del lecho: P1 = 0.05 m, P2 = 0.15 m, P3 = 0.30 m y P4 = 0.40m	87
8-11.	Promedio de la temperatura cuando se ha alcanzado un estado estacionario entre los datos medidos experimentalmente y los datos modelados para: a) combustión con bagazo húmedo (caso 1) y b) combustión con bagazo seco (caso 2)	88
8-12.	Distribución promedio de concentración de especies. Valores experimentales y modelados para combustión con bagazo húmedo (a-c) y seco (d-e).	89
8-13.	Promedio de la concentración de especies se ha alcanzado un estado estacionario entre los datos medidos experimentalmente y los datos modelados para: a) combustión con bagazo húmedo (caso 1) y b) combustión con bagazo seco (caso 2)	90
B-1.	Contornos de velocidad de la sección lateral para las alternativas de diseño.	104
B-2.	Contornos de velocidad de la sección superior para las alternativas de diseño.	104

Lista de tablas

2-1. Significados físicos de los coeficientes de la ecuación de gobierno general con las unidades físicas correspondientes para las ecuaciones de transporte en modelos de lecho. Fuente: Jurena (2012).	12
4-1. Emisividad y densidad para componentes de bagazo de caña. Fuente: Lu et al. (2008).	29
4-2. Emisividad y densidad para componentes de bagazo de caña. Fuente: Rasul et al. (1999).	29
4-3. Valores de densidad y porosidad para bagazo de caña y carbonizado. Fuente: *Canedo et al. (2021); **Verissimo et al. (2020).	35
5-1. Parámetros cinéticos para pirólisis de bagazo de caña de azúcar. Fuente: Rincón and Gómez (2008).	42
5-2. Coeficientes estequiométricos de productos de pirólisis para cada reacción paralela independiente k	43
5-3. Velocidades de reacción para reacciones homogéneas. Fuente:Di Blasi (2004).	45
7-1. Parámetros de diseño y dimensiones de la cámara de combustión.	60
7-2. Tamaño promedio de partícula	63
7-3. Pruebas experimentales realizadas	65
8-1. Propiedades iniciales para fase gas.	71
8-2. Propiedades iniciales para fase sólida.	72
8-3. Esquemas de discretización, factores de relajación y criterio de convergencia asignados a las ecuaciones.	73
8-4. Coeficientes para polinomios de ignición y de pérdida de calor.	74
A-1. Propiedades de distintas especies gaseosas a 1 bar para determinar la viscosidad dinámica.	95
A-2. Coeficientes para determinar la conductividad térmica a presión constante (1 bar).	96

**Modelación de la combustión de bagazo de caña en un módulo de producción de
azúcar no centrifugado**

A-3. Coeficientes para determinar el calor específico molar a presión constante (1 bar) para $T < 1000$ K. Fuente: McBride et al. (1993).	97
A-4. Coeficientes para determinar el calor específico molar a presión constante (1 bar) para $1000 < T < 5000$ K. Fuente: McBride et al. (1993).	97
A-5. Parámetros de Lennard Jones para especies seleccionadas. Fuente: Turns (2000).	98
A-6. Función $A(P)$ para diferentes esquemas de discretización. Patankar (1980).	100
A-7. Error de porcentaje medio absoluto (EMA) para datos calculados de Viscosidad dinámica, Calor Específico y Conductividad térmica. Los datos calculados fueron comparados con los datos reportados por el NIST.	101
A-8. Error de porcentaje medio absoluto (EMA) entre los datos calculados y experimentales del proceso de pirólisis.	101
A-9. Temperatura mínima, máxima, promedio y desviación estándar para datos experimentales y modelados en cuatro posiciones diferentes en la cámara de combustión (P1 a P4).	102
A-10 Fracción molar mínima, máxima, promedio y desviación estándar para CO, CO ₂ y O ₂	102

Listado de símbolos y abreviaturas

Símbolos con caracteres latinos

Símbolo	Unidad	Término
A	1/s	Factor pre-eponencial
C	mol/m ³	Concentración molar
C_p	J/kgK	Capacidad calorífica
d	m	Diámetro
$D_{e,x,i,m}^g$	m ² /s	Coficiente de dispersión efectiva transversal asociado a la transferencia de masa
$D_{e,x,i,th}^g$	W/mK	Coficiente de dispersión efectiva transversal asociado a la transferencia de calor
$D_{i,m}$	m/s	Coficiente de difusión molecular
\mathcal{D}_{ab}	m ² /s	Coficiente de difusividad binaria
E_a	kJ/kmol	Energía de activación
F_c	---	Factor de corrección para gases diluidos
F_P^0	---	Factor de corrección que tiene en cuenta el efecto de polaridad
F_Q^0	---	Factor de corrección que tiene en cuenta el efecto cuántico
f_{ε_b}	---	Factor de corrección que tiene en cuenta la presencia de otras partículas en el lecho
H	kJ/kg	Entalpía
h_c	W/m ² K	Coficiente de transferencia de calor
h_{fg}	kJ/kg	Calor latente de vaporización
h_{gs}	W/m ² K	Coficiente de transferencia de calor entre fase gas y fase sólida
h_m	m/s	Coficiente de transferencia de masa
k	1/s, m/s	Constante de reacción
KK	---	Factor de corrección para el coeficiente de transferencia de calor
K	K/s	Tasa de calentamiento (Ec. 5.7)
k_c	m/s	Resistencia cinética
k_d	m/s	Resistencia difusiva
m	kg	Masa
M	g/mol	Masa molecular
n_p	1/m ³	Número de densidad de partícula
P_c	bar	Presión crítica
Q_{cr}	W	Calor transferido por convección y radiación

Modelación de la combustión de bagazo de caña en un módulo de producción de azúcar no centrifugado

R	J/mol K	Constante universal de los gases
\dot{r}	kg/m ³ s	Velocidad de reacción
\dot{S}	kg/m ³ s, W/m ³	Término fuente generalizado para transporte de masa y calor, respectivamente
S_p	m ² /m ³	Área superficial específica de partícula
T	K	Temperatura
T^*	---	Temperatura adimensional
T_c	K	Temperatura crítica
T_r	---	Temperatura reducida
t	s	Tiempo
\mathbf{u}	m/s	Vector de velocidad en dirección x
u_0	m/s	Velocidad de vacío
\mathbf{v}	m/s	Vector de velocidad en dirección y
V	m ³	Volumen
V_c	cm ³	Volumen crítico
w	---	Masa normalizada
X	mol/mol	Fracción mol
Y	g/g	Fracción masa

Símbolos con caracteres griegos

Símbolo	Unidad	Término
α	---	Grado de conversión
Γ	---	Término difusivo generalizado
$\Delta \bar{h}_R$	J/mol	Entalpía de reacción
Δt	s	Paso de tiempo
ε	m ³ /m ³	Porosidad
η	μP	Viscosidad
η_{CO}/η_{CO_2}	---	Relación de producción CO/CO ²
λ	W/mK	Conductividad térmica
ρ	kg/m ³	Densidad
ϕ	---	Cantidad transportada
ν	---	Coefficiente estequiométrico
Ω_v	---	Integral de colisión para viscosidad
Ω_D	---	Integral de colisión
μ_r	Debye	Momento dipolo reducido
ξ	μP	Viscosidad inversa
κ	---	Factor de corrección para sustancias altamente polares
$\phi_{i,j}, \phi_{ii}$	---	Parámetro de interacción
ϵ	---	Emisividad
σ_{ab}	Å	Diámetro de colisión promedio
τ	---	Tortuosidad

Subíndices

Modelación de la combustión de bagazo de caña en un módulo de producción de azúcar no centrifugado

Subíndice	Término
0	Referencia a un valor inicial o estándar
ash	Ceniza
b	Lecho
bm	Biomasa
b	Cinético
cf	Carbón fijo
char	Carbonizado
CO/CO ²	Relación de producción CO/CO ²
d	Difusivo
dry	Secado
e	Efectivo
env	Condición ambiente
eq	Equivalente
evp	Evaporación
gs	Gas-Sólido
i,j	Especies/componentes
m	Masa
p	Partícula
pyr	Pirólisis
rad	Radiación
th	Térmico
v1	Materia volátil primaria
v2	Materia volátil secundaria
w	Pared
wb	Base húmeda

Superíndices

Superíndice	Término
evp	Evaporación
g	Fase gas
s	Fase sólida

Números adimensionales

Número	Término
<i>Nu</i>	Número de Nusselt
<i>Gr</i>	Número de Grashof
<i>Pe</i>	Número de Peclet
<i>Re</i>	Número de Reynolds
<i>Sc</i>	Número de Schmidt
<i>Sh</i>	Número de Sherwood

Abreviaturas

Abreviatura	Término
ANC	Azúcar no centrifugada de caña
<i>db</i>	Base seca
<i>Ec</i>	Ecuación
<i>wb</i>	Base húmeda

1 Introducción

El azúcar no centrifugada de caña (ANC) es un edulcorante tradicional mínimamente procesado procedente de la evaporación del jugo caña de azúcar. ANC es el nombre técnico designado por la Organización de las Naciones Unidas para la Alimentación y la Agricultura (FAO). En Colombia es conocido como panela. Este producto es considerado como un producto potencialmente bioactivo por lo que existe un interés creciente en su comercialización (Jaffé, 2015). La producción mundial es liderada por India y Colombia con un aporte de 7.5 y 1.2 millones de toneladas por año, respectivamente (Agronegocios, 2021). En Colombia, la producción de ANC es realizada en módulos de producción localizados generalmente en áreas rurales. Se estima que aproximadamente existen 20000 unidades de producción (Invima, 2015) clasificadas de acuerdo con la escala de producción: pequeña (<100 kg/h), mediana (100 - 250 kg/h) y grande (>250 kg/h) (Espitia et al., 2020).

El principal conjunto estructural para la elaboración de ANC se denomina hornilla, la cual esta compuesta por una cámara de combustión, un ducto de gases, intercambiadores de calor abiertos comúnmente denominados “pailas” y una chimenea (Jader et al., 2018). En la cámara de combustión, la energía química contenida en el bagazo es transformada en energía térmica mediante el proceso de combustión. El calor liberado es utilizado es transportado por los gases de combustión a través del ducto de gases a los intercambiadores de calor para remover el agua contenida en el jugo y obtener de esta forma el producto final.

En los módulos de pequeña y mediana escala, los dispositivos para la generación y transferencia de calor como la cámara de combustión y los intercambiadores de calor abiertos o pailas han sido diseñados de manera empírica, sin considerar aspectos técnicos o teóricos (Espitia et al., 2020). En consecuencia, la eficiencia térmica global, entendida como la relación entre la energía transferida a los jugos y la energía suministrada por el combustible, es baja, variando entre 20 y 45 % según el tipo de tecnología implementada (Jader et al., 2018; Velásquez Arredondo et al., 2004). Para los componentes de transferencia de calor se han reportado varias investigaciones experimentales que abordan el diseño de nuevas tecnologías (Anwar, 2010; Jader et al., 2018) y estudios de transferencia de calor que incluyen la implementación de técnicas de dinámica computacional de fluidos (La Madrid et al., 2016, 2017; Espitia et al., 2020).

La cámara de combustión en los módulos productores de ANC se ubica dentro del ducto de

gases y la combustión se realiza en un sistema de lecho fijo. Se diferencian dos tipos de cámaras de combustión: planas y Ward (Velásquez et al., 2019). La cámara de combustión Ward representa una mejora con respecto a la plana, dónde se han documentado investigaciones experimentales al respecto (Gordillo and García, 1992; Forero et al., 2012), así como su análisis mediante herramientas de modelado y simulación numérica (Sánchez Castro and Mendieta Menjura, 2014). El uso de este tipo de cámaras está restringido a módulos de gran capacidad de producción.

Aunque la cámara de combustión plana es la más común en las unidades de producción de (ANC) de pequeña y mediana escala, se observa una falta de información en cuanto al estudio detallado de este diseño específico. La falta de un diseño adecuado ha llevado a que los procesos de degradación térmica de la biomasa (secado, pirolisis, gasificación, combustión) ocurran de manera irregular en el lecho de combustible (Sánchez Castro and Mendieta Menjura, 2014), dando lugar a un proceso de combustión inestable que se manifiesta en bajas temperaturas de combustión, elevadas tasas de emisión de monóxido de carbono y un incremento en el consumo específico de combustible (Gordillo and García, 1992; Jader et al., 2018).

La investigación en este tipo de cámaras se consolida como un desafío a nivel experimental por la falta de control de variables como el suministro de aire y combustible, además de enfrentar la dificultad inherente a trabajar en espacios confinados de acceso complicado. Asimismo, la formulación de modelos matemáticos relacionados con la combustión de biomasa representa un reto, dada la complejidad derivada de las características del combustible, la conversión del combustible sólido, el comportamiento del lecho de combustible y las diversas metodologías de modelado que pueden ser adoptadas (Khodaei et al., 2015).

De acuerdo con este contexto, se plantea el desarrollo de un modelo de combustión de bagazo de caña a partir de técnicas de dinámica computacional de fluidos (CFD) en una cámara de combustión plana de lecho fijo, que permita la comprensión de los fenómenos de conversión termoquímica para establecer a futuro modificaciones y criterios de diseño de equipos de combustión de bagazo de caña para unidades productoras de ANC. Con el propósito de superar las limitaciones experimentales y ejercer un control sobre las variables mencionadas, en este estudio se diseñó y construyó un dispositivo experimental para realizar la validación del modelo. Este dispositivo fue concebido para replicar las condiciones de una cámara de combustión plana, al mismo tiempo que posibilita un control adecuado sobre las variables de suministro de aire y bagazo de caña.

2 Planteamiento del problema

2.1 Importancia socioeconómica de la producción de ANC

El azúcar no centrifugado de caña (ANC) es un edulcorante sólido sin refinar obtenido a partir de la evaporación del jugo de caña de azúcar (Velásquez et al., 2019). La producción mundial de ANC es liderada por India seguido de Colombia con 7.5 y 1.2 millones de toneladas por año (Agronegocios, 2021). Por otra parte, Colombia es el mayor consumidor per cápita de ANC a nivel mundial con un promedio de 24 kg/año, aportando cerca de 236 kcal/persona/día, lo que representa cerca del 8% del consumo calórico de la población (Cadavid, 2007).

A nivel nacional, el sector de producción de ANC se considera como la segunda agroindustria en importancia social del país, después del café. Esta actividad es desarrollada por 350000 productores, genera 287000 empleos directos, ocupa el 12% de la población rural económicamente activa y aporta el 1.4% al producto interno bruto (PIB) agropecuario (Borray et al., 2020; MADR, 2018). La producción de ANC es realizada aproximadamente en 20000 unidades de producción (UP), las cuales son clasificadas conforme a la capacidad de producción: pequeña (50 - 100 kg/h), mediana (100 - 200 kg/h), y gran escala (> 200 kg/h) (Velásquez et al., 2019). Se estima que alrededor del 83% y el 15% de las UP, son de pequeña y mediana escala de producción, respectivamente (Invima, 2015).

2.2 Proceso de producción de ANC

La evaporación del jugo de caña y obtención de ANC se realiza por el método de ebullición en piscina (Kumar and Tiwari, 2006; Tiwari et al., 2004). Como se muestra en la figura **2-1**, la producción de ANC inicia con el proceso de molienda de la caña, la cuál pasa a través de un molino de rodillos y se obtiene como producto y coproducto el jugo y el bagazo de caña, respectivamente. Posteriormente el jugo es pre limpiado y transportado al sistema de evaporación, donde es sometido a tres etapas térmicas: clarificación, evaporación y concentración (Espitia et al., 2020). La energía suministrada a las etapas térmicas es obtenida a partir de la combustión del bagazo de caña, donde la energía térmica liberada es transferida a intercambiadores de calor abierto (pailas) por los gases de combustión (Velásquez et al.,

2019).

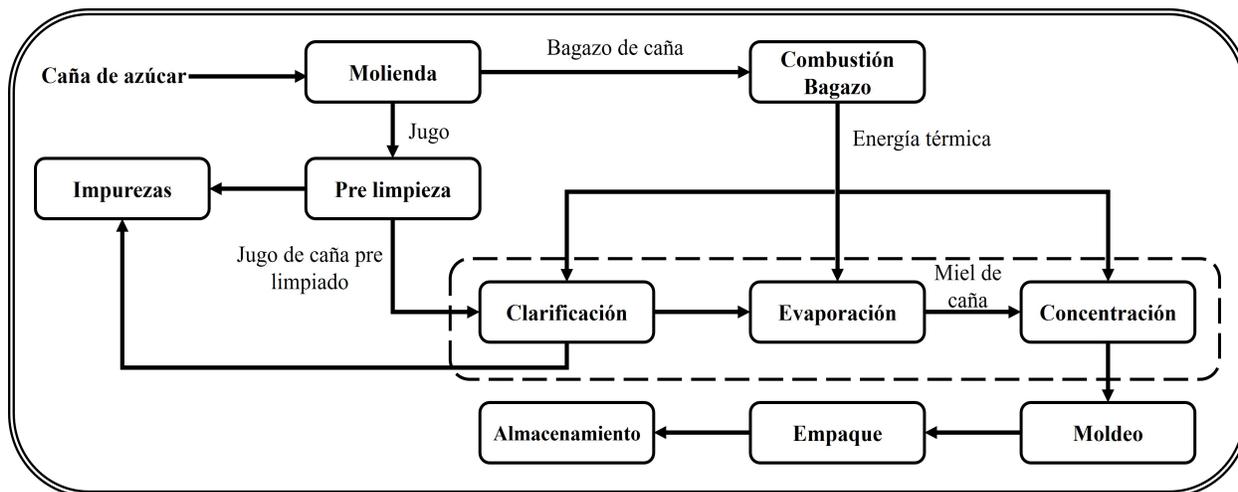


Figura 2-1: Proceso de producción de ANC. Fuente: Velásquez et al. (2019).

El principal conjunto estructural utilizado para la elaboración de ANC se denomina hornilla, la cual está compuesta generalmente por una cámara de combustión, un ducto de gases, intercambiadores de calor abiertos y una chimenea (Fig. 2-2). En la cámara de combustión se transforma la energía química contenida en el bagazo de caña en energía térmica por medio del proceso de combustión. Esta energía es transportada por los gases de combustión en el ducto de gases hacia los intercambiadores de calor para remover el agua contenida en el jugo de caña hasta obtener el producto final. Una vez se ha aprovechado la energía contenida en los gases de combustión, estos son expulsados al ambiente en la chimenea, la cual a su vez genera el diferencial de presión para el movimiento de los gases en el ducto.

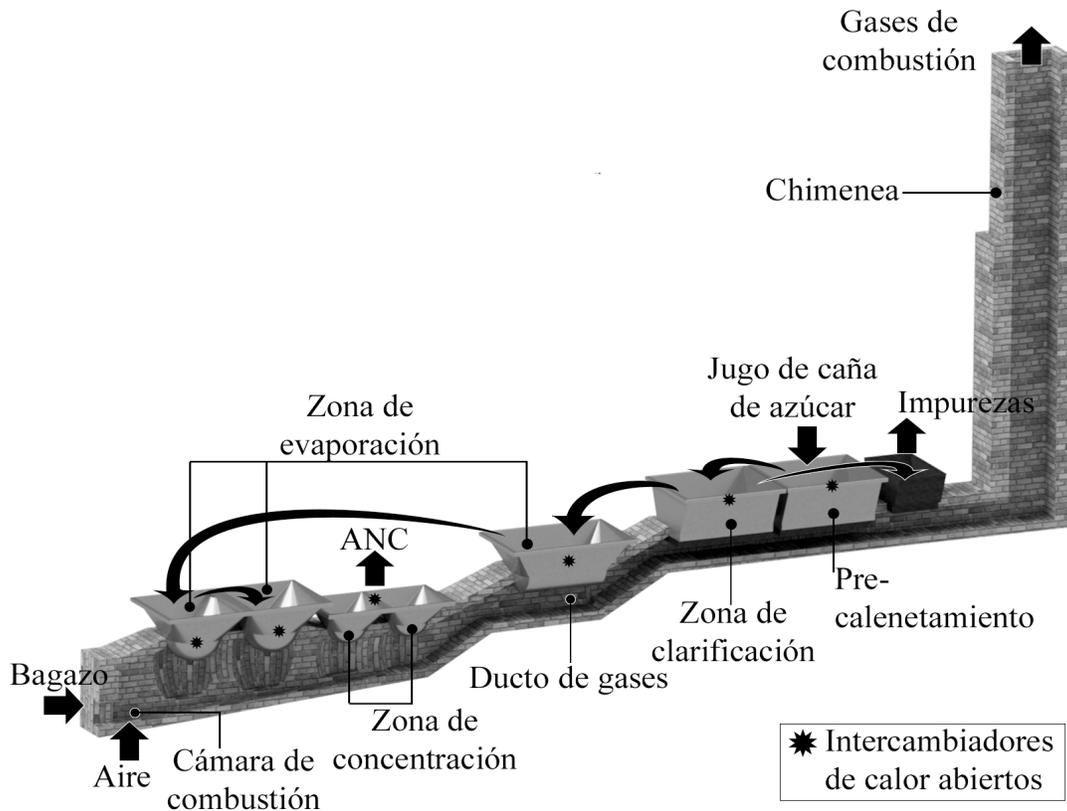


Figura 2-2: Estructura de una hornilla para la producción de ANC. Fuente: Jader et al. (2018).

2.3 Tipos de sistemas de combustión en unidades de producción de azúcar no centrifugada

La cámara de combustión en las unidades de producción de ANC son un espacio confinado localizado en la parte baja de la hornilla (ver Fig. 2-2). Allí se lleva a cabo el proceso de ignición entre el combustible y el oxígeno en un sistema de lecho fijo estacionario, el cual consta de una entrada para la alimentación del combustible, una parrilla que sirve como lecho y un cenicero. De acuerdo con Velásquez et al. (2019), los módulos de producción de ANC presentan dos tipos de cámaras de combustión en lecho fijo: Ward (Fig. 2-3a) y plana (Fig. 2-3b).

La cámara de combustión plana es la más frecuente en las unidades de producción de ANC. Se caracteriza por estar localizada en el interior del ducto de gases (ver Fig. 2-2), es una sección rectangular con un volumen de reacción limitado, consta de una entrada para la alimentación del bagazo y otra para la entrada de aire primario (Velásquez et al., 2019). El combustible utilizado es bagazo de caña al cual no se aplican pretratamientos de homogenización de tamaño, el secado se realiza de forma natural (radiación solar) y su suministro se realiza

manualmente con un contenido de humedad promedio del 30 %. Por otra parte, el suministro de aire a la cámara de combustión se realiza por medio de tiro natural, por lo tanto, estas condiciones generan inestabilidad en la combustión.

El funcionamiento de esta cámara ha sido estudiado por Jader et al. (2018) en términos del exceso de aire, temperatura de combustión y el índice de emisión de CO por MJ de energía suministrado al proceso de producción de ANC. Los resultados muestran que estas cámaras trabajan en un rango de contenido de humedad de combustible de 32 % y exceso de aire entre 1.3 y 1.5, generan temperaturas de combustión más bajas (800 – 850 °C) e índices de emisión más altos (0.0049 – 0.0114 kg CO/MJ).

El mejor desempeño de la cámara Ward obedece a que el diseño de este tipo de cámara está en función de los procesos de degradación térmica, por lo tanto, posee un volumen de reacción 4 veces mayor, considera una rampa de pre-secado, una zona primaria de combustión en lecho fijo y entradas secundarias de aire en la parte superior del lecho para la reacción de volátiles y material inquemado (Sánchez Castro and Mendieta Menjura, 2014). De acuerdo con Jader et al. (2018), en comparación con la cámara de combustión plana, la cámara Ward presenta mayores temperaturas (925 – 950 °C) y menor emisión de monóxido de carbono (0.0030 kg CO/MJ) operando con un mayor contenido de humedad en el combustible y exceso de aire (45 %, 1.8, respectivamente). Sin embargo, este tipo de cámara presenta un mayor costo de implementación y sólo se utiliza en UP de gran escala (> 150 kg ANC/h).

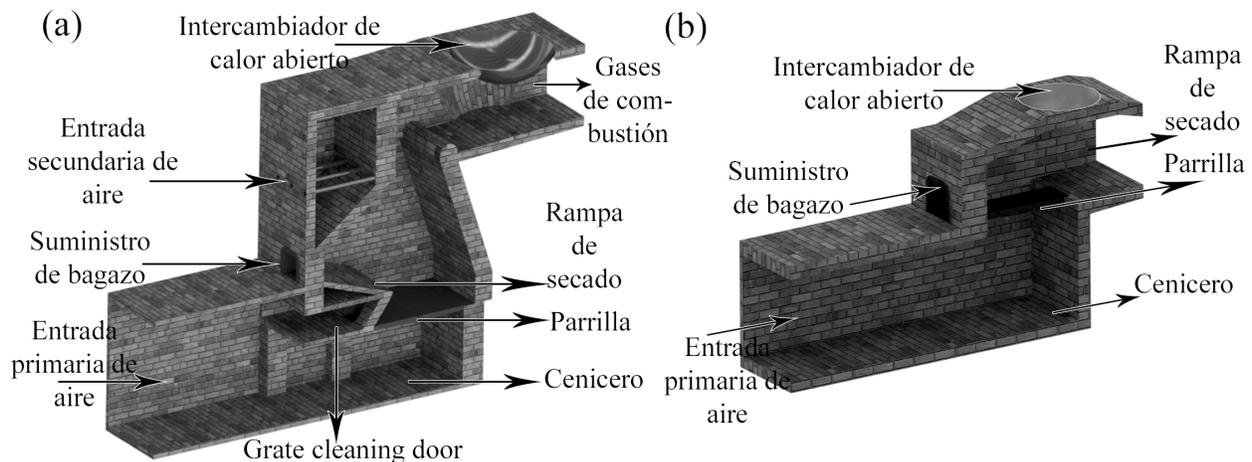


Figura 2-3: Tipos de cámara de combustión en módulos de producción de ANC: a) Ward y b) plana. Fuente: Jader et al. (2018).

2.4 Descripción del problema

El diseño de los dispositivos para la combustión de biomasa y la transferencia de calor en las unidades de producción de pequeña y mediana escala se ha realizado empíricamente sin tener en cuenta aspectos tecnológicos o modelos matemáticos (Espitia et al., 2020). En

2. Planteamiento del problema

consecuencia, la eficiencia térmica global comprendida como la relación entre la energía transferida a los jugos y la energía del combustible es baja, variando entre el 30 y el 45 % de acuerdo con el tipo de tecnología implementada (Jader et al., 2018; Velásquez Arredondo et al., 2004).

La mayoría de los estudios experimentales y modelos matemáticos relacionados con la combustión de bagazo de caña en módulos de producción de ANC han sido realizados en las cámaras de combustión tipo Ward (Forero et al., 2012; Guevara Enciso, 2014; Sánchez Castro and Mendieta Menjura, 2014). En el caso de las cámaras de combustión tipo plana existe una ausencia de información en el estudio y diseño de este tipo de dispositivos de combustión. Estas cámaras son las más implementadas en los módulos de producción de ANC y constituyen aproximadamente el 83 % del total de unidades de producción (Espitia et al., 2020).

La ausencia de un adecuado diseño ha conllevado a que los procesos de degradación térmica de la biomasa (secado, pirolisis, gasificación, combustión) ocurran irregularmente en el lecho de combustible (Sánchez Castro and Mendieta Menjura, 2014), generando un proceso de combustión inestable que se evidencia en bajas temperaturas de combustión, altas tasas de emisión de monóxido de carbono ($> 1\%$), tiempos de residencia del combustible inadecuados (cortos o prolongados) y un aumento en el consumo específico de combustible (Gordillo and García, 1992; Jader et al., 2018). Por lo tanto, para satisfacer la demanda energética del proceso se utilizan combustibles adicionales como madera, carbón o caucho de llanta, que a su vez generan impactos ambientales negativos que conllevan a la deforestación de bosques, mayor emisión de gases contaminantes como SO_x , NO_x , MP y aumento de los costos de producción.

El estudio experimental y la formulación de modelos matemáticos relacionados con la combustión de biomasa es un reto por las complicaciones provenientes de las características del combustible, la complejidad de la conversión del combustible sólido, el comportamiento del lecho del combustible, las geometrías y configuraciones variables de la cámara de combustión y las diferentes metodologías de modelado que pueden ser adoptadas (Khodaei et al., 2015). De acuerdo con este contexto, se plantea el desarrollo de un modelo de combustión de bagazo de caña a partir de técnicas de dinámica computacional de fluidos (CFD) en una cámara de combustión plana de lecho fijo, que permita la comprensión de los fenómenos de conversión termoquímica para establecer a futuro modificaciones y criterios de diseño de equipos de combustión de bagazo de caña para unidades productoras de ANC.

2.5 Sistemas de lecho fijo de combustión

Un lecho fijo es una pila de partículas situada sobre la parte superior de una parrilla, donde la combustión se puede llevar a cabo de dos maneras: estacionaria o móvil (Karim and Naser, 2017). La combustión estacionaria es la más usada comúnmente a pequeña escala, mientras que la combustión de lecho móvil es utilizada en escala industrial y puede integrarse en la generación de energía (Yin et al., 2008). En la combustión estacionaria se utilizan

combustores de rejilla fija donde se coloca y se quema el combustible. Estos equipos son más simples en comparación con los utilizados en la combustión de lecho móvil, en los cuales, la rejilla puede ser móvil, giratoria o vibratoria (Klason, 2006). Por ejemplo, la rejilla móvil permite el movimiento controlado del lecho de combustible a través de la cámara de combustión ayudando a distribuir uniformemente el combustible, lo cual, mejora la eficiencia de la combustión.

De acuerdo con Khodaei et al. (2015), en un lecho fijo de combustión, el combustible existe en uno de los cinco estados a medida que experimenta el proceso de degradación térmica: combustible verde o virgen, partículas secas, partículas devolatilizadas, carbonizado y ceniza. Estos estados dan como resultado un lecho estratificado con capas separadas entre sí por la diferencia de temperatura. Con base en la dirección relativa del movimiento de la fase sólida y la fase gaseosa se pueden definir dos tipos de configuraciones de lecho fijo (Fig. 2-4):

1. **Configuración co-corriente:** El frente de flama se propaga con la dirección de flujo del oxidante (Fig. 2-4a). La combustión inicia en la parte inferior del lecho, por lo tanto, el flujo de calor y masa está dominado por el flujo convectivo y en menor intensidad por la radiación y la difusión de flujo de calor (Thunman and Leckner, 2003). Los gases de combustión obtenidos a partir de esta configuración tienen un alto poder calorífico por su baja tasa de oxidación y altas velocidades de conversión. Sin embargo, se presentan altos niveles de alquitrán por las bajas temperaturas en la parte inferior del frente de ignición (Khodaei et al., 2015).
2. **Configuración contra-corriente:** El frente de ignición inicia en la parte superior del lecho, los flujos de calor radiativo y difusivo provocan que el frente de ignición avance en dirección opuesta al flujo de aire (Fig. 2-4b). Por otra parte, el flujo de calor convectivo frena la propagación del frente de conversión de manera distinta con respecto a la configuración co-corriente. Además, el oxígeno puede consumirse a través de la combustión de los volátiles antes de que inicie la combustión del carbón, ya que los volátiles se liberan antes de la zona de combustión del carbón, como se ilustra en la Figura 2-4b (Thunman and Leckner, 2003).

2. Planteamiento del problema

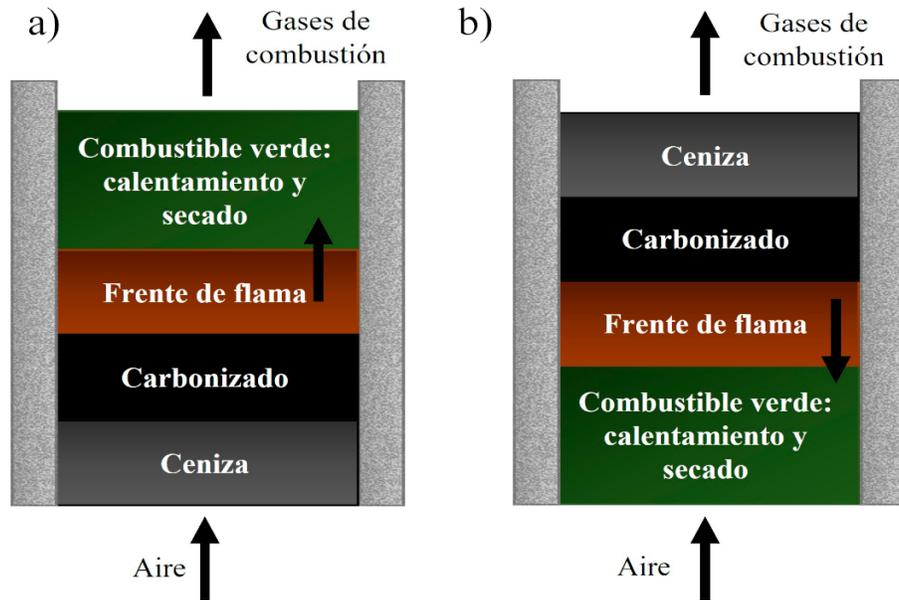


Figura 2-4: Tipos de configuraciones de lecho fijo de combustión: a) co-corriente y b) contra-corriente. Fuente: Khodaei et al. (2015).

2.6 Tipos de modelos para lecho fijo

Puesto que la conversión termoquímica en lechos fijos se basa en la compleja interacción de la energía, la transferencia de calor y la cinética química, se han desarrollado varios modelos a partir de diversos enfoques. Esto incluye modelos que se ordenan según el método de solución (analítico y numérico) o modelos cuya característica común es el grado de homogeneidad (Jurena, 2012; Khodaei et al., 2015). Los modelos según el método de solución dependen de la complejidad de las ecuaciones gobernantes o el propósito por el cual fueron desarrollados (Jurena, 2012). Los modelos que son basados en el grado de homogeneidad tienen en cuenta una variedad de mecanismos físicos que gobiernan la conversión del combustible y la escala espacial necesaria para el análisis (escala de lecho o de partículas)(Khodaei et al., 2015).

Para simulaciones de lecho fijo es necesario diferenciar los modelos según la escala de modelado en macroescala y microescala. La primera se refiere a la escala de todo el lecho mientras que la segunda se reserva solo para una única partícula de combustible. Dependiendo de la significancia de los efectos intrapartícula, se puede emplear un enfoque de modelado resuelto por partículas. Por el contrario, cuando estos efectos son despreciables se puede tratar el lecho como un medio poroso continuo (Jurena, 2012).

Las partículas de combustible son un parámetro importante en la naturaleza de la combustión, dependiendo de la consideración de su tamaño. De acuerdo con el estudio realizado por Ryu et al. (2006), cuando el frente de ignición pasa por un sensor de medición se genera un gradiente de temperatura ($\Delta T \Delta t$), los cuales, disminuyen con el aumento del tamaño de

partículas. Esta investigación muestra que las partículas de pino pequeñas tardan 1 minuto en alcanzar una temperatura de 800 °C desde 200 °C y aproximadamente 3 minutos para partículas de 35 mm de tamaño. Consecuentemente, si las partículas se consideran grandes, no se puede despreciar el gradiente de temperatura dentro de una partícula, es decir, cuando el número de Biot (Bi) es mayor a la unidad (Jurena, 2012).

Los modelos de lecho basados en el grado de homogeneidad pueden ser clasificados como se muestra a continuación (Khodaei et al., 2015):

- **Modelo homogéneo:** Considera una sola fase donde todas las propiedades térmicas de la fase fluida y sólida son incluidas en la ecuación de energía, por lo tanto, este método no considera gradientes de concentración o temperatura entre el fluido y la fase sólida.
- **Modelo heterogéneo con fase sólida continua:** En los modelos heterogéneos, la fase gaseosa y la fase sólida tienen las ecuaciones de balance de manera individual. Estos modelos se utilizan cuando la diferencia de temperatura y concentración de especies entre el gas y el sólido no es despreciable como en el caso de la combustión en lecho fijo (Karim and Naser, 2017). El modelo heterogéneo continuo trata ambas fases como si estuvieran distribuidas continuamente en todo el dominio espacial, es decir, que en cada punto del espacio existen ambas fases con distintas propiedades (Karim and Naser, 2017). Además, el modelo supone que existe una ausencia de gradientes intrapartícula de concentración de especies y temperatura y el transporte de calor entre las fases sólida y fluida se representa por medio de coeficientes de transferencia de calor (Khodaei et al., 2015).
- **Modelo heterogéneo con fase sólida dispersa :** Este modelo considera el lecho como un conjunto de partículas representativas, donde cada una de estas partículas se somete a procesos de conversión térmica (Karim and Naser, 2017). Debido a la importancia de los gradientes de temperatura y concentración en el interior de la partícula, este modelo describe los efectos intrapartícula al tener en cuenta el coeficiente de conducción de calor efectivo y la difusividad efectiva dentro de la partícula (Khodaei et al., 2015).

En el caso de la cámara de combustión en estudio, esta tiene la estructura de un reactor de lecho fijo, en el cual, las diferencias de temperatura entre la fase sólida y la fase gaseosa no son significativas, pero las diferencias de concentración si lo son. En cuanto a la forma y el tamaño de las partículas de bagazo, este se encuentra definido por el tipo de proceso utilizado en la extracción del jugo de caña de azúcar. Las partículas suelen ser no esféricas, de forma y tamaños irregulares conocidas como partículas polidispersas, compuestas principalmente por tres tipos de partículas mezcladas en diferente proporciones: médula, fibra y corteza (Pérez et al., 2019). El estudio de la distribución del tamaño de partículas gruesas de bagazo de caña realizado por Edwards (2018) muestran variaciones que van desde 0.46 mm hasta 3.26 mm. En este sentido, teniendo en cuenta el pequeño tamaño de las partículas de la fase sólida se puede considerar que hay una ausencia de gradientes de concentración y temperatura

2. Planteamiento del problema

al interior de las partículas. Además, si se determina el número de Biot a partir de las dimensiones de partícula mencionadas por Edwards (2018) y suponiendo una conductividad térmica de la partícula de bagazo de 0.10 W/mK (Verissimo et al., 2020) y un coeficiente máximo de transferencia de calor por convección de 30 W/m²K se obtiene un número de Biot menor a 1. En consecuencia, para la modelación matemática de la cámara de combustión se utilizó el modelo heterogéneo con fase sólida continua.

2.7 Descripción matemática de la combustión en lecho fijo

De acuerdo con la consideración del modelo heterogéneo con fase sólida continua, la combustión de biomasa en lecho fijo puede ser considerado como un sistema reactivo consistente de dos fases: sólida y gas. Dependiendo de las suposiciones que se realicen sobre el modelo, los modelos de lecho difieren en aspectos como la descripción de los coeficientes y de las ecuaciones de conservación que se resuelven (Jurena, 2012). Las ecuaciones del modelo surgen del planteamiento de las ecuaciones de conservación de la masa, movimiento y energía, las cuales son descritas matemáticamente por un sistema de ecuaciones diferenciales parciales transitorias. La ecuación general de transporte para cada una de estas ecuaciones es descrita de la siguiente forma (Jurena, 2012):

$$\underbrace{\frac{\partial(\varepsilon\rho\phi)}{\partial t}}_{\text{Término transitorio}} + \underbrace{\nabla \cdot (\varepsilon\rho\mathbf{v}\phi)}_{\text{Término convectivo}} = \underbrace{\nabla \cdot (\Gamma\nabla\phi)}_{\text{Término difusivo}} + \underbrace{S_\phi}_{\text{Término fuente}} \quad (2-1)$$

La ecuación 2-1 es denominada la ecuación general de transporte, donde ε es la porosidad, ρ es la densidad [kg/m^3], \mathbf{v} es el vector de velocidad [m/s], ϕ es la cantidad transportada, Γ es el coeficiente de difusión y S_ϕ incluye todos los términos fuente. Como se muestra en la **2-1**, con las unidades apropiadas, la ecuación 2-1 se convierte en la ecuación de gobierno para la transferencia de calor, masa o momento. Las ecuaciones de transporte para la fase sólida y gas, así como las suposiciones realizadas en el modelo, son abordados en el capítulo 2.

El transporte de calor y masa en medios porosos como en los lechos de partículas se distingue por la presencia de dos mecanismos fundamentales con fenomenologías diversas: la difusión molecular y la dispersión hidrodinámica (Telles and Trevisan, 1993). La fuerza impulsora de la difusión molecular está vinculada a los gradientes espaciales de propiedades termofísicas, tales como la conducción del calor y la difusión de masa, manifestándose tanto en medios estancados como en medios fluidos. La dispersión hidrodinámica, como segundo mecanismo, se evidencia en configuraciones donde los fluidos se desplazan a través de sistemas de medios porosos. El concepto de dispersión contribuye a explicar las diferencias frecuentemente observadas entre los parámetros de transporte medidos a lo largo y a lo ancho de la dirección principal del flujo de fluido (Telles and Trevisan, 1993).

Los términos de dispersión se incorporan en las ecuaciones de balance, según se detalla en las secciones 3 y 4. La dispersión de calor en medios porosos implica la conducción térmica

a través de los sólidos del medio y la transferencia de calor por convección y radiación en los espacios porosos llenos de fluido. La presencia de poros y la naturaleza del fluido contenido en los poros afectan significativamente la eficiencia de la dispersión térmica. En medios porosos, la difusión térmica y la advección térmica son fundamentales para entender cómo el calor se propaga y se distribuye en el material. Respecto a la dispersión de masa en medios porosos, esta describe la propagación y mezcla de sustancias a través de un medio que contiene espacios interconectados. La porosidad y la permeabilidad del medio poroso son factores clave que determinan la capacidad de dispersión de masa.

Tabla 2-1: Significados físicos de los coeficientes de la ecuación de gobierno general con las unidades físicas correspondientes para las ecuaciones de transporte en modelos de lecho. Fuente: Jurena (2012).

Ecuación	ϕ	Γ	S_ϕ
Continuidad	1 [-]	0 [kg/m s]	suma de velocidades de reacciones [kg/m ³ s]
Especies	Fracción masa de la especie i Y_i [kg/kg]	Producto de la densidad, porosidad y el coeficiente de dispersión [kg/m s]	Tasa de producción o consumo de la especie i [kg/m ³ s]
Energía	Entalpía específica [J/kg]	Conductividad térmica efectiva dividida por el calor específico [kg/ms]	Tasa de generación de calor [W/m ³]
Momento	velocidades [m/s]	Viscosidad dinámica [kg/ms]	Gradiente de presión, fuerza de gravedad. [N/m ³]

2.8 Términos fuente

Los términos fuente en la combustión de biomasa corresponden a aquellos de generación o de consumo de energía y especies durante los procesos de degradación térmica que experimenta el lecho de combustible. Estos procesos son secado, pirolisis y combustión y ocurren de manera secuencial a medida que incrementa la temperatura.

2.8.1 Secado

El secado es el primer paso en la conversión termoquímica de biomasa. La humedad en el sólido existe como vapor de agua, agua líquida capilar (libre) en los poros y agua líquida ligada en la matriz sólida (Di Blasi, 1997). El fenómeno está gobernado por el transporte de masa, calor y movimiento en el lecho de partículas y su descripción matemática se realiza

2. Planteamiento del problema

modelando la tasa de evaporación de la humedad (Dernbecher et al., 2019). En la literatura se reportan tres enfoques que son ampliamente utilizados:

- **Modelo cinético:** Este modelo supone que la conversión de agua de fase líquida a fase gas obedece a una tasa de reacción cinética de primer orden (Dernbecher et al., 2019). Por lo tanto, la evaporación no se encuentra limitada por la presión de saturación de vapor, solo está definida por temperatura y el contenido de humedad de la biomasa (Khodaei et al., 2015). La tasa de evaporación es descrita por una ecuación tipo Arrhenius:

$$\dot{r}_{dry} = A \exp\left(\frac{-E_a}{RT^s}\right) \rho^s y_{H_2O}^s \quad (2-2)$$

Dónde T^s es la temperatura de la fase sólida (K), E_a es la energía de activación, R es la constante universal de los gases, A es el factor pre exponencial, ρ^s es la densidad del sólido y $y_{H_2O}^s$ es la fracción masa actual de agua en el sólido.

- **Modelo de disipación de calor:** Este modelo considera que el proceso de secado es controlado por la transferencia de calor, y supone que el secado inicia cuando la temperatura en una zona húmeda alcanza la temperatura de evaporación. Toda la energía absorbida es usada para la evaporación y la temperatura permanece constante hasta que se completa el secado en esta región (Dernbecher et al., 2019). La tasa de evaporación puede ser definida de acuerdo con la correlación propuesta por Peters (2002):

$$\dot{r}_{dry} = 0 \quad \text{Para } T^s < T^{evp} \quad (2-3)$$

$$\dot{r}_{dry} = \frac{(T^g - T^{evp}) \rho^s C_p^s}{H_{evp} \Delta t} \quad \text{Para } T^s \geq T^{evp} \quad (2-4)$$

- **Modelo de equilibrio:** Este modelo tiene en cuenta el gradiente de concentración de humedad entre la superficie de la biomasa y la humedad circundante como se muestra en la Ec. 2-5 (Dernbecher et al., 2019). La presión de vapor de agua está determinada por la presión de saturación (Jurena, 2012). El modelo de equilibrio se utiliza especialmente para temperaturas por debajo del punto de ebullición de agua. Para abordar temperaturas iguales o superiores, este modelo es combinado con el enfoque térmico mostrado en las ecuaciones 2-6 y 2-7, el cual tiene en cuenta el calor transferido por radiación y convección (Dernbecher et al., 2019).

$$\dot{r}_{dry} = S_p h_m (\rho_{H_2O}^s - \rho_{H_2O}^g) \quad \text{Para } T^s < T^{evp} \quad (2-5)$$

$$\dot{r}_{dry} = \frac{Q_{cr}}{H_{evp}} \quad \text{Para } T^s \geq T^{evp} \quad (2-6)$$

$$Q_{cr} = S_p \left(h_c (T^g - T^s) + \varepsilon_b \sigma (T_{env}^4 - T^s) \right) \quad (2-7)$$

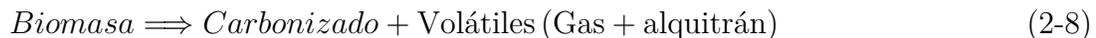
Dónde S_p es el área superficial (m^2/m^3), h_c es el coeficiente de transferencia de calor por convección (W/m^2K), h_m es el coeficiente de transferencia de masa (m/s), Q_{cr} es el calor transferido por convección y radiación (W), ε_b es la porosidad del lecho y σ es la constante de Stefan-Boltzmann (W/m^2K^4).

2.8.2 Pirólisis

El proceso de pirólisis es la degradación térmica o volatilización de la biomasa en ausencia de oxígeno. En este proceso se obtiene material sólido (carbonizado), una mezcla de gases (CO , CO_2 , CH_4 y H_2 principalmente) y condensados (alquitranes) (Dernbecher et al., 2019). La formación y distribución de estos productos depende de variables del proceso como el tipo de biomasa, temperatura, condiciones de la atmosfera de reacción, tasa de calentamiento y tiempos de residencia (Gómez et al., 2008). La pirólisis es una etapa fundamental que determina el rendimiento y la composición de la fracción volátil, así como en el rendimiento y la reactividad del carbonizado afectando el proceso de combustión de manera global.

Durante la descomposición térmica de la biomasa ocurren una amplia variedad de reacciones químicas sucesivas, paralelas y competitivas. Para comprender y describir cinéticamente los mecanismos de reacción se han propuesto modelos, los cuales, de acuerdo con Gómez et al. (2008), pueden ser clasificados en cuatro grupos que son descritos a continuación:

- **Modelos de una reacción global sencilla:** Este modelo es la forma más sencilla de representar la descomposición de la biomasa, dado que considera que esta ocurre a través de una reacción de un paso y una energía de activación como se muestra en la ecuación 2-8. Este mecanismo no proporciona detalles sobre cómo ocurre la volatilización de la biomasa.



- **Modelos de reacciones múltiples:** Consideran dos reacciones de carácter paralelos y competitivo. La primera es la reacción de deshidratación, la cual es la responsable de la generación de carbonizado y se asocia la producción de CO , CO_2 , y H_2O . La segunda, se da a través de la despolimerización conduciendo a la formación de materia volátil condensable.
- **Modelos centrados en la formación de productos:** Estos modelos describen la formación y distribución de productos a partir de la suposición de reacciones competitivas separadas y no tienen en cuenta la composición química de la biomasa.

2. Planteamiento del problema

- **Modelos semiglobales de reacción:** Este tipo de modelos intentan relacionar las características químicas de la biomasa con la formación de productos de la pirólisis. Para esto, emplean un esquema de reacciones independientes y paralelas de los componentes de la biomasa (celulosa, hemicelulosa y lignina) y hacen uso de un modelo cinético para la formación de gases, condensados y sólidos (carbonizado).

2.8.3 Combustión

Es el último paso de la conversión termoquímica de la biomasa donde toman lugar las reacciones homogéneas y heterogéneas de los productos gaseosos y sólidos generados durante el proceso de pirólisis.

- **Combustión de volátiles:** Los volátiles corresponden a gases livianos y alquitranes generados durante la pirólisis. Las reacciones homogéneas de la fase gaseosa incluyen la oxidación de estos volátiles, así como reacciones que se pueden dar entre estos mismos. Las reacciones que se dan en fase gaseosa pueden ser descritas a partir de reacciones individuales, mecanismos de reacción globales o mecanismos de reacción detallados (Dernbecher et al., 2019).
- **Combustión de carbonizado:** La oxidación del carbón es una reacción heterogénea, y la velocidad de reacción se encuentra limitada por la cinética química (adsorción del reactivo, reacción, desorción de los productos) o la difusión gaseosa de reactantes o productos en los poros de la partícula (Bauer et al., 2010; Skinner and Smoot, 1979). De acuerdo con Skinner and Smoot (1979), se han postulado la existencia de diferentes zonas o regímenes de temperatura que determinan la resistencia que rige el proceso. Como se muestra en la figura 2-5 La primera zona ocurre a bajas temperaturas, donde las partículas son grandes y la reacción química es la que determina la velocidad. La zona 2 está caracterizada por el control inherente a la reacción química y a la difusión porosa. Por último, la zona III ocurre a altas temperaturas y se caracteriza por las limitaciones de la transferencia de masa a granel.

Como la velocidad de reacción del carbonizado está limitada por los mecanismos de difusión y cinética química, su modelación depende de la combinación de la velocidad reacción cinética y la velocidad de difusión del oxígeno en la superficie de la partícula (Khodaei et al., 2015; Jurena, 2012). Esta velocidad de reacción puede ser obtenida a partir de la siguiente correlación (Verissimo et al., 2020):

$$\dot{r}_{char} = \frac{S_p n_p}{\frac{1}{k_c} + \frac{1}{k_d}} C_{O_2} \quad (2-9)$$

Dónde n_p es el número de densidad de partícula, k_c y k_d son las resistencias cinéticas y difusivas, respectivamente y C_{O_2} es la concentración de oxígeno en la superficie de la partícula. El número de densidad de partícula es utilizado en conjunto con el área

superficial de partícula para transformar la tasa de reacción de una tasa superficial a una tasa volumétrica (Verissimo, 2018). Este es definido en la Ec. 5-17.

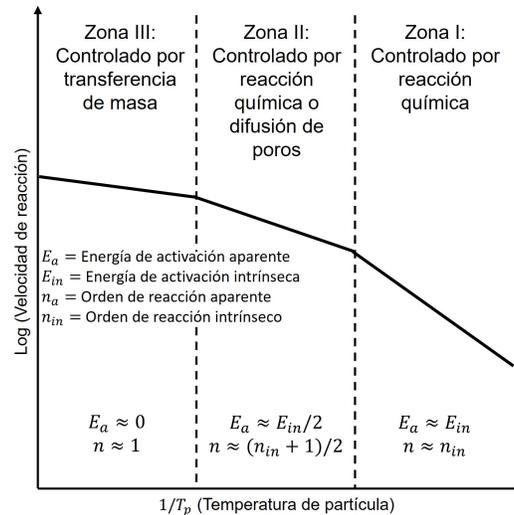


Figura 2-5: Regímenes de control de velocidad para la oxidación heterogénea de carbonizado. Fuente: Skinner and Smoot (1979).

Por otra parte, la reacción de oxidación de carbonizado puede ser expresada de acuerdo con Di Blasi (2004) así:



Dónde la relación de producción η_{CO}/η_{CO_2} depende de la temperatura del combustible y generalmente es expresada como (Khodaei et al., 2015; Zhou et al., 2005):

$$\frac{\eta_{CO}}{\eta_{CO_2}} = A_{CO/CO_2} \exp\left(\frac{-E_{a,CO/CO_2}}{RT^s}\right) \quad (2-11)$$

2.9 Objetivos

De acuerdo con contexto planteado en la sección anterior, se plantea un objetivo general que tiene en cuenta el planteamiento de un modelo matemático. Para alcanzar este propósito, se han delineado objetivos específicos que actuarán como guía durante el proceso de construcción del modelo como se muestra a continuación.

2.9.1 Objetivo general

Modelar matemáticamente el proceso de combustión de bagazo de caña en una cámara de combustión de lecho fijo

2.9.2 Objetivos específicos

- Desarrollar un modelo matemático para la combustión de bagazo de caña en una cámara de combustión de lecho fijo a partir de las ecuaciones de conservación de masa, energía y especies que rigen dicho sistema.
- Solucionar el modelo matemático planteado mediante el planteamiento de un método numérico adecuado y su implementación computacional.
- Diseñar y llevar a cabo un plan experimental de combustión de bagazo de caña en una cámara de combustión de lecho fijo que permita la adquisición de variables de proceso.
- Validar el modelo matemático con base en los resultados experimentales obtenidos en el objetivo específico anterior.

3 Ecuaciones de conservación del modelo

Como se indicó en la sección 2.6, la modelación matemática del proceso de combustión de bagazo de caña en una cámara de combustión de lecho fijo se realizó implementando un modelo heterogéneo de fase sólida continua que consta de una fase sólida y otra gaseosa. La fase sólida inicialmente consta de biomasa (bagazo de caña), a medida que avanzan los procesos de degradación térmica esta se convierte en volátiles y en carbonizado. La fase gaseosa corresponde al agente oxidante (aire) y los volátiles generados durante el proceso de conversión termoquímica.

El tipo de configuración de las cámaras de combustión en los módulos de producción de ANC es en forma de corriente paralela (ver Fig. 2-4). Como se muestra en la figura **3-1a**, en la parte superior de la cámara se realiza el suministro de biomasa y los gases de combustión son expulsados. En la parte inferior de la misma donde se encuentra localizada la rejilla, se realiza el suministro del agente oxidante (aire) y se expulsa la ceniza. La ignición del lecho es iniciada desde la región de la parrilla y suministra la energía térmica para los procesos endotérmicos de pirólisis y secado. Posteriormente el frente de flama se propaga en el lecho en la dirección del agente oxidante.

3. Ecuaciones de conservación del modelo

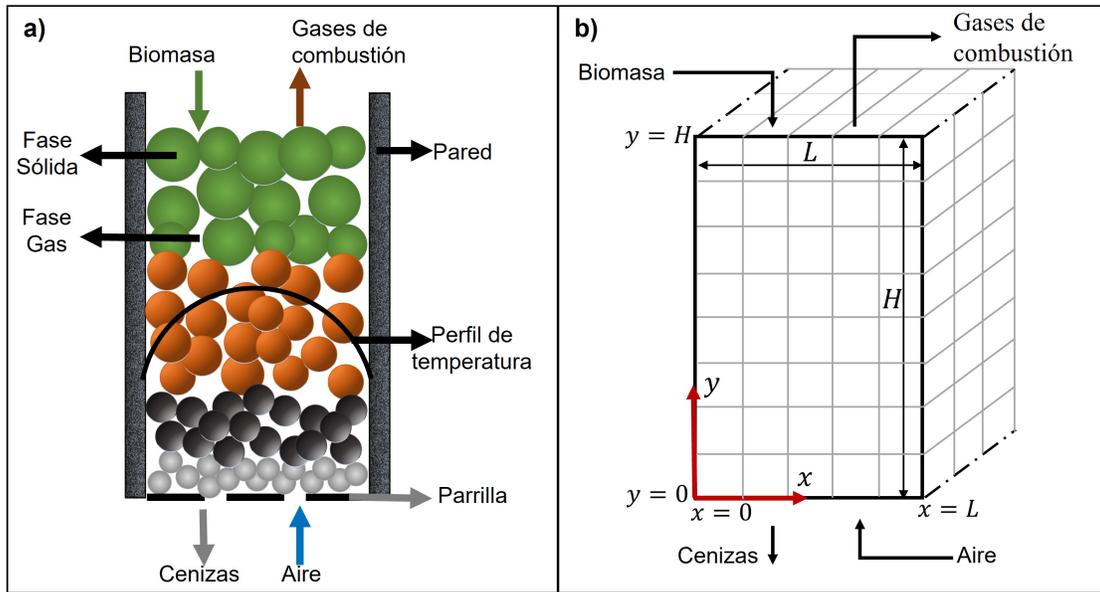


Figura 3-1: a) Esquema general de la cámara de combustión y b) Sistema de coordenadas para el planteamiento de las ecuaciones de balance.

3.1 Suposiciones del modelo matemático

El planteamiento del modelo matemático está basado en la formulación de las ecuaciones de conservación de masa y energía para las fases gas y sólida. Las siguientes suposiciones generales son planteadas:

- Considerando la configuración cúbica del lecho de partículas se facilita su representación en un sistema de coordenadas cartesianas como se muestra en la figura 3-1b). Además, la dirección ascendente (corriente arriba) del agente oxidante y el frente de flama, como se ilustra en la Figura 3-1a, provoca los gradientes más pronunciados de temperatura y concentración de especies en la dirección y , en comparación con la dirección z . En el modelo, también se consideran las pérdidas de calor por las paredes, lo que genera gradientes significativos en la dirección x . Como consecuencia, el caso puede simplificarse en una geometría bidimensional, como se muestra en la Figura 3-1b, lo que resulta en una reducción en los costos de recursos computacionales.
- La combustión es un proceso dinámico que conlleva variaciones en la concentración de especies químicas, la temperatura y otros parámetros a lo largo del tiempo. Estos parámetros pueden exhibir inestabilidades y fluctuaciones temporales. Por ende, se adopta un enfoque de estado transitorio para capturar de manera más precisa la evolución temporal de estos fenómenos.
- El gas fluye hacia la parte superior de la cámara de combustión en un régimen de flujo pistón. La justificación detallada de esta suposición es presentada en la sección 4.1.

- Las partículas de la fase sólida fluyen hacia la parte inferior de la cámara de combustión en un régimen de flujo pistón. En consecuencia, solo el componente de velocidad axial está presente en la fase sólida, puesto que el flujo en la dirección x es insignificante (ver Fig. 3-1b). Una justificación detallada de esta suposición es presentada en la sección 4.2.
- La transferencia de cantidad de movimiento entre las dos fases no es tenida en cuenta. Por lo tanto, el perfil de velocidad de una fase no se ve afectado por el flujo de la otra fase. De acuerdo con de Souza-Santos (2010), esta suposición es razonable para este tipo de equipos de combustión dado que las partículas no alcanzan a ser arrastradas por la fase gas, por lo cual, las velocidades para ambas fases son relativamente pequeñas.
- Se supone un flujo no viscoso para las dos fases debido a la aproximación de los regímenes de flujo pistón, donde los esfuerzos cortantes entre las capas se asumen despreciables. Por lo tanto, la turbulencia no es considerada en la formulación de las ecuaciones de conservación. Sin embargo, se tiene en cuenta implícitamente en las correlaciones de los coeficientes de transferencia de calor y masa (Di Blasi, 2004).
- Los gradientes de concentración y temperatura en la interfaz entre las fases sólida y gaseosa de la partícula fueron considerados.
- Existe una ausencia de gradientes intrapartículas de concentración de especies y temperatura.
- El transporte de energía entre las fases sólida y fluida es incluido a través de los coeficientes de transferencia de calor.
- El bagazo está compuesto por C, H y O. Las especies gaseosas incluidas en el modelo son CO, CO₂, CH₄, H₂, H₂O, O₂, N₂, C₆H₆O (alquitrán) y N₂ como gas inerte.
- El alto flujo de gas en la dirección y conlleva a que el mecanismo de transferencia de calor y masa por convección sea predominante en comparación con la dispersión de calor y masa.
- La velocidad del gas en el eje de las abscisas (dirección- x) es insignificante, por lo tanto, se consideran los mecanismos de transferencia de calor y masa por dispersión, mientras que se desestima la convección.
- La porosidad del lecho de partículas es constante.
- La transferencia de calor por radiación para cada fase y entre las fases es tenida en cuenta a partir de la conductividad térmica efectiva. Esto se explica en la sección 4.1.5.

3.2 Ecuaciones de gobierno

3.2.1 Ecuación de conservación de especies para la fase gas

La ecuación de conservación de especies para una especie i de la fase gaseosa es expresada de la siguiente manera:

$$\varepsilon_b \rho^g \frac{\partial Y_i^g}{\partial t} = \varepsilon_b \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{e,x,i,m}^g \rho^g \frac{\partial Y_i^g}{\partial x} \right) - \varepsilon_b \frac{\partial (u_y^g \rho^g Y_i^g)}{\partial y} + \dot{S}_{i,m}^g \quad (3-1)$$

dónde i representa las especies individuales ($i = \text{CO}, \text{CO}_2, \text{CH}_4, \text{H}_2, \text{O}_2, \text{N}_2, \text{Tar}$), Y_i^g es la fracción masa de las especies, $D_{e,x,i,m}^g$ es el coeficiente de dispersión efectiva transversal asociado a la transferencia de masa y el término fuente $\dot{S}_{i,m}^g$ representa la tasa de producción o destrucción de masa por especie durante los procesos de secado, pirólisis y combustión de volátiles y carbonizado.

Condiciones de frontera:

- No se presenta transferencia de masa entre la pared de la cámara de combustión y el gas:

$$x = 0 \quad \text{y} \quad x = L : \quad \frac{\partial Y_i^g}{\partial x} = 0 \quad (3-2)$$

- En la entrada de la cámara de combustión, la composición de la fase gaseosa es establecida y corresponde a la del agente oxidante (aire):

$$y = 0 : \quad Y_i^g = Y_{air}^g \quad (3-3)$$

- En la salida de la cámara de combustión no hay diferencias en la concentración de masa:

$$y = H : \quad \frac{\partial Y_i^g}{\partial y} = 0 \quad (3-4)$$

Condición inicial: La composición de la fase gaseosa en toda la cámara de combustión es conocida y corresponde a la del agente oxidante:

$$t = 0 : \quad Y_i^g = Y_{air}^g \quad (3-5)$$

3.2.2 Ecuación de conservación de energía para la fase gas

La ecuación de conservación de energía para la fase gas es expresada de la siguiente manera:

$$\varepsilon_b \rho^g C_p^g \frac{\partial T^g}{\partial t} = \varepsilon_b \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{e,x,th}^g \frac{\partial T^g}{\partial x} \right) - \varepsilon_b u_y^g \rho^g C_p^g \frac{\partial (T^g)}{\partial y} - \varepsilon_b h_{gs} S_p (T^g - T^s) - \dot{S}_{th}^g \quad (3-6)$$

Dónde C_p^g es el calor específico de la mezcla de gases, $D_{e,x,th}^g$ es la dispersión térmica efectiva transversal, h_{gs} es el coeficiente de transferencia de calor entre las fases gas y sólida. El penúltimo término de la ecuación corresponde a la transferencia de calor por convección entre la fase gas y la fase sólida. El término fuente \dot{S}_{th}^g corresponde al calor liberado en las reacciones químicas homogéneas y el término de porosidad está incluido en el mismo como se detalla en la sección 5.5

Condiciones de frontera:

- La pérdida de calor a través de la pared de la cámara de combustión es modelada a partir de un coeficiente de pérdida de calor por pared:

$$x = 0 \quad y \quad x = L : \quad \frac{\partial T^g}{\partial x} = h_w (T_\infty - T_{x,L}^g) \quad (3-7)$$

- A la entrada de la cámara de combustión, la temperatura del gas se encuentra a una temperatura establecida:

$$y = 0 : \quad T^g = T_0^g \quad (3-8)$$

- En la salida de la cámara de combustión los gases de combustión calientes emiten radiación hacia la superficie libre que esta por encima del lecho. Ignorar el efecto de la transferencia de calor por radiación en esta frontera puede llevar a subestimar o sobreestimar la distribución de temperatura dentro de la cámara de combustión, lo que impacta en la precisión de la simulación.

$$y = H : \quad \frac{\partial T^g}{\partial y} = \epsilon^g \sigma (T_\infty^4 - T_{x,L}^{g4}) \quad (3-9)$$

Condición inicial: La temperatura de la fase gaseosa es conocida:

$$t = 0 : \quad T^g = T_0^g \quad (3-10)$$

3.2.3 Ecuación de conservación de especies para la fase sólida

La ecuación de conservación de especies para una especie i (i = humedad, volátiles, carbonizado) de la fase sólida es expresada de la siguiente manera:

$$(1 - \epsilon_b) \rho^s \frac{\partial Y_i^s}{\partial t} = - (1 - \epsilon_b) \frac{\partial (u_y^s \rho^s Y_i^s)}{\partial y} - \dot{S}_{i,m}^s \quad (3-11)$$

El término fuente $\dot{S}_{i,m}^s$ representa la tasa de producción o destrucción de masa por especie durante los procesos de secado, pirólisis y combustión del carbonizado.

Condiciones de frontera:

3. Ecuaciones de conservación del modelo

- No se presenta transferencia de masa entre la pared de la cámara de combustión y el sólido:

$$x = 0 \quad y = x = L : \quad \frac{\partial Y_i^s}{\partial x} = 0 \quad (3-12)$$

- En la parte superior de la cámara se asigna una condición de alimentación de biomasa. Se supone que no hay conversión de biomasa, por lo tanto, su densidad es conocida y es igual a la densidad inicial. De igual manera, la fracción de humedad es conocida y es igual al contenido de humedad inicial. Para las restantes especies (volátiles y carbonizado) la fracción es 0.

$$y = H : \quad Y_{H_2O}^s = Y_{H_2O,0}^s; \quad Y_i^s = 0 \quad (3-13)$$

$$y = H : \quad \rho^s = \rho_0^s \quad (3-14)$$

- En la parte inferior de la cámara de combustión no se presenta transferencia de masa:

$$y = 0 : \quad \frac{\partial Y_i^s}{\partial y} = 0 \quad (3-15)$$

Condición inicial: La composición en toda la fase sólida es conocida. La densidad y el contenido de humedad son iguales a la densidad y el contenido de humedad inicial de la biomasa, respectivamente.

$$t = 0 : \quad Y_{H_2O}^s = Y_{H_2O,0}^s \quad (3-16)$$

$$t = 0 : \quad \rho^s = \rho_0^s \quad (3-17)$$

3.2.4 Ecuación de conservación de energía para la fase sólida

La ecuación de conservación de energía para la fase sólida es expresada de la siguiente manera:

$$\rho^s C_{p,e}^s \frac{\partial T^s}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Lambda_e^s \frac{\partial T^s}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Lambda_e^s \frac{\partial T^s}{\partial y} \right) - u_y^s \rho^s C_{p,e}^s \frac{\partial T^s}{\partial y} - \frac{h_{gs} S_p (T^s - T^g)}{(1 - \varepsilon_b)} - \dot{S}_{th}^s \quad (3-18)$$

Dónde $C_{p,e}^s$ y Λ_e^s corresponden al calor específico efectivo y la conductividad térmica efectiva de la fase sólida. \dot{S}_{th}^s es el término fuente que representa la ganancia o pérdida de calor debido a los procesos de degradación térmica.

Condiciones de frontera:

- La pérdida de calor a través de la pared de la cámara de combustión es modelada a partir de un coeficiente de pérdida de calor por pared:

$$x = 0; \quad x = L : \quad \frac{\partial T^s}{\partial x} = h_w (T_\infty - T_{x,L}^s) \quad (3-19)$$

- A la entrada de la cámara de combustión, la biomasa se encuentra a una temperatura conocida:

$$y = 0 : \quad T^s = T_0^s \quad (3-20)$$

- En la salida de la cámara de combustión la biomasa se encuentra a una temperatura establecida. Esta temperatura es explicada en la sección 8.2.3.

$$y = H : \quad T^s = T_0^s \quad (3-21)$$

Condición inicial: La temperatura de la fase sólida es conocida:

$$t = 0 : \quad T^s = T_0^s \quad (3-22)$$

4 Propiedades físicas y químicas de fases gas y sólida

En esta sección se determinan las propiedades físicas, químicas, los coeficientes de transferencia de calor y masa para las fases sólida y gas con el fin de dar solución a las ecuaciones de conservación planteadas en la sección anterior.

4.1 Propiedades para la fase gaseosa

Las propiedades de mezcla de gases son determinadas a partir de las propiedades de cada especie que compone el gas. Las especies gaseosas corresponden a CO, CO₂, CH₄, H₂, H₂O, O₂, N₂ y alquitranes (Tar). Como agente oxidante se utiliza aire a condiciones ambiente (T = 25 °C, P = 1 atm). La cámara de combustión opera a bajas presiones, por lo tanto, se supone que el gas se comporta como un gas ideal y todas las propiedades de las especies son calculadas de acuerdo con este criterio.

Los alquitranes son generados durante el proceso de pirólisis y constituyen la mayor parte de los compuestos generados durante este proceso. Según Mitsakis (2011), la formación de alquitranes a partir de biomasa esta determinada por la temperatura. En un rango de 500 °C a 1000 °C se destaca la formación de compuestos fenólicos, oleofinas y compuestos aromáticos como los fenoles. Siguiendo esta premisa y con el propósito de determinar las propiedades físicas y químicas de los alquitranes, se considera el fenol (C₆H₆O) como representante de este grupo y se determinan cada una de sus propiedades como gas.

4.1.1 Viscosidad dinámica por especie de gas

La viscosidad dinámica de cada especie fue determinada de acuerdo con la metodología descrita por Reid et al. (1987), donde los valores fueron calculados en función de la temperatura y a presión constante utilizando los métodos de Chung y de Lucas. Los valores para ambos métodos a diferentes temperaturas fueron tabulados y comparados con los valores reportados por Allison (2013) (NIST) y Cengel (2014). Como se muestra en la Fig. 4-1, para las especies

CO, CO₂, CH₄, H₂O, O₂, N₂ y Tar, el método de Chung presenta una buena aproximación con los valores reportados en literatura, mientras que para la especie H₂, el método de Lucas presenta una mejor aproximación. Los métodos utilizados son descritos en el apéndice A.1.

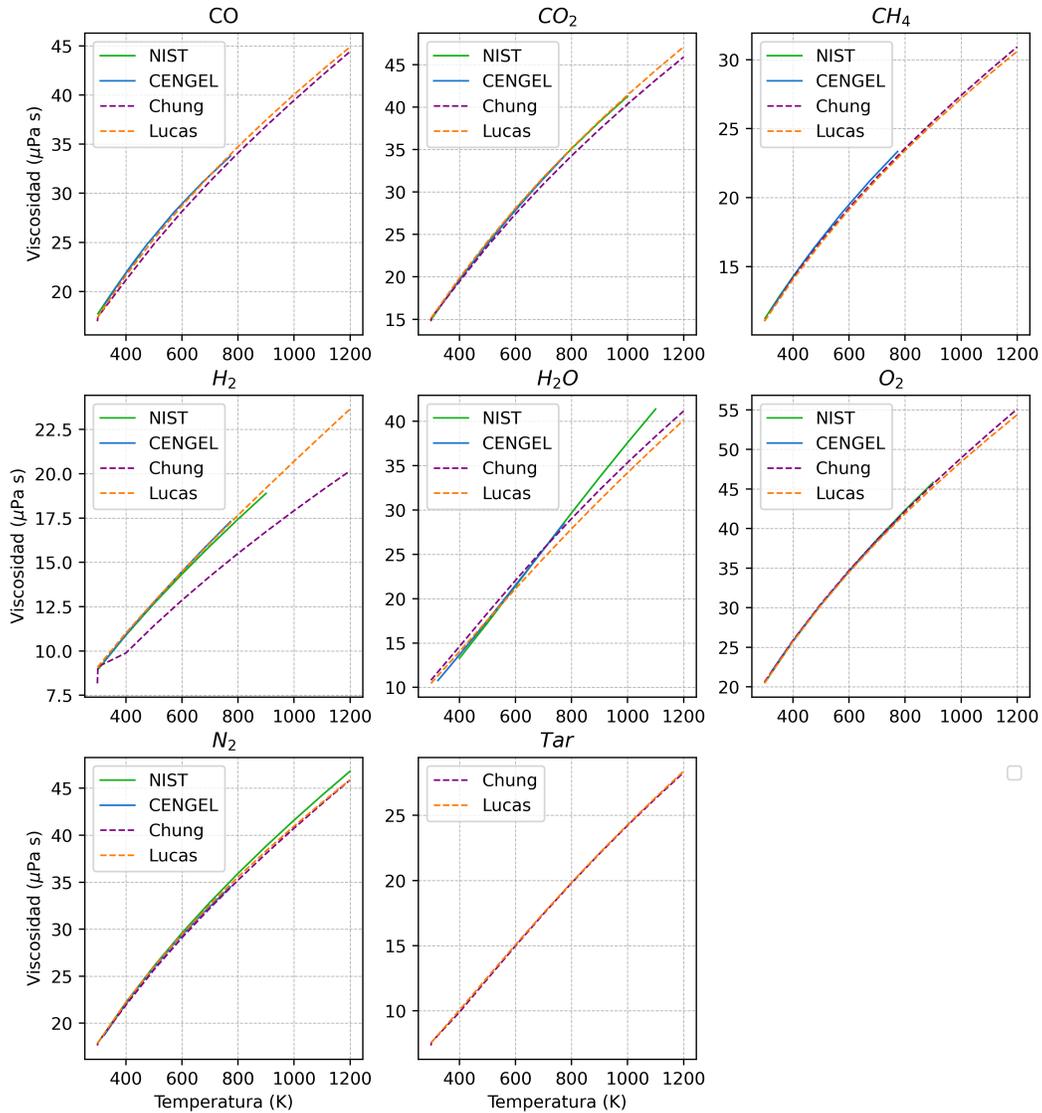


Figura 4-1: Viscosidad dinámica para diferentes especies: comparación valores de literatura y valores calculados.

4.1.2 Viscosidad dinámica para mezcla de gas

La viscosidad dinámica para la mezcla de gases fue determinada a partir del método de Wilke, el cual es una simplificación adicional del enfoque de la teoría cinética de los gases

4. Propiedades físicas y químicas de fases gas y sólida

(Reid et al., 1987):

$$\eta^g = \sum_{i=1}^n \frac{X_i \eta_i}{\sum_{j=1}^n x_j \phi_{ij}} \quad (4-1)$$

Dónde el parámetro de interacción ϕ_{ij} es determinado de la siguiente manera:

$$\phi_{ij} = \frac{\left[1 + \left(\frac{\eta_i}{\eta_j} \right)^{1/2} \left(\frac{M_j}{M_i} \right)^{1/4} \right]^2}{\left[8 \left(1 + \left(\frac{M_i}{M_j} \right) \right) \right]^{1/2}} \quad (4-2)$$

Y ϕ_{ij} es calculado intercambiando los subíndices:

$$\phi_{ji} = \left(\frac{\eta_j}{\eta_i} \right) \left(\frac{M_i}{M_j} \right) \phi_{ij} \quad (4-3)$$

Dónde:

η^g : Viscosidad de la mezcla de gases ($\mu\text{Pa s}$)

η_i, η_j : Viscosidad de los componentes puros ($\mu\text{Pa s}$)

X_i, X_j : Fracción mol de los componentes.

4.1.3 Conductividad térmica por especie de gas

La conductividad para cada especie de gas fue determinada de acuerdo con la expresión polinomial (Ec. A-12) reportada por Reid et al. (1987), la cual está en función de la temperatura y para presiones entre 0.001 a 10 bar. Los valores obtenidos a partir de este método fueron comparados con los valores reportados por Allison (2013) (NIST) y Cengel (2014), en donde se obtuvo una buena aproximación (Fig. 4-2). Los coeficientes y las ecuaciones utilizadas para el cálculo de la conductividad térmica para cada especie son mostrados en el apéndice A.2.

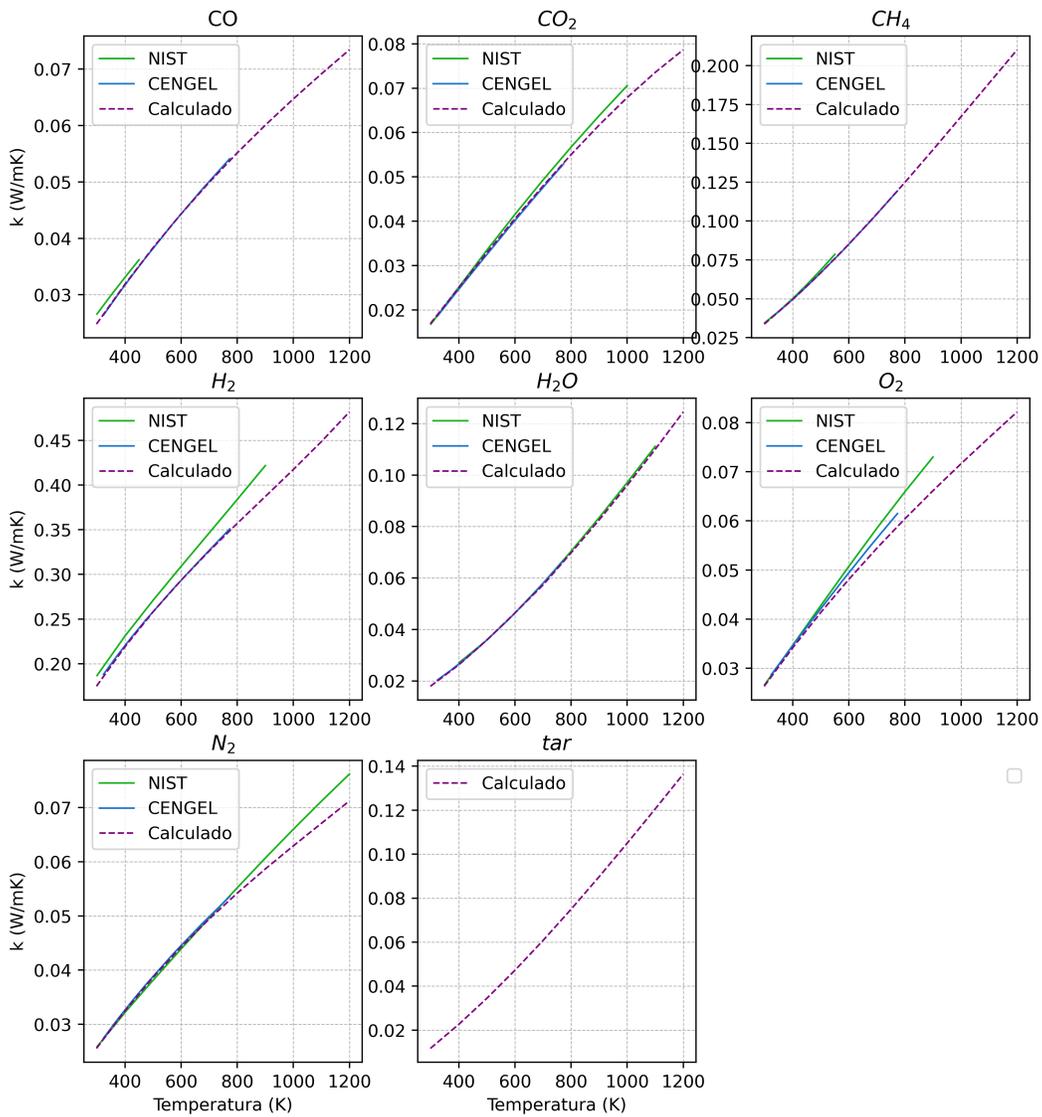


Figura 4-2: Conductividad térmica para diferentes especies: comparación valores de literatura y valores calculados.

4.1.4 Conductividad térmica para mezcla de gas

La conductividad térmica para la mezcla de gases es determinada utilizando la ecuación de Wassiljewa (apéndice A.3, Ec. A-13), la cual es una forma análoga a la relación teórica para la viscosidad de mezcla de gases (Reid et al., 1987).

4.1.5 Conductividad térmica efectiva por radiación entre partículas

La transferencia de calor por radiación entre partículas es considerada a partir de un término equivalente a la conductividad térmica como se muestra en la Ec. 4-4 (van Antwerpen et al., 2010).

$$\lambda_{rad} = 4\sigma d_p (T^s)^3 \left(\frac{\epsilon_p}{2 - \epsilon_p} \right) \left(\frac{\epsilon_b}{1 - \epsilon_b} \right) \quad (4-4)$$

Dónde λ_{rad} representa la conductividad térmica equivalente debida a la radiación (W/mK). La emisividad de partícula (ϵ_p) para bagazo de caña es obtenida a partir de la correlación de Lu et al. (2008) (Ec. 4-5), la cual es el resultado ponderado en masa de cada componente de la partícula sólida: biomasa, cenizas y carbón. Se supone que todos los componentes ocupan el mismo volumen total. Los datos para determinar la emisividad de partícula son mostrados en la tabla 4-1.

$$\epsilon_p = \frac{\rho_{ash}}{\sum \rho_i} \epsilon_{ash} + \frac{\rho_{biomasa}}{\sum \rho_i} \epsilon_{biomasa} + \frac{\rho_{char}}{\sum \rho_i} \epsilon_{char} \quad (4-5)$$

Tabla 4-1: Emisividad y densidad para componentes de bagazo de caña. Fuente: Lu et al. (2008).

Componente	Emisividad	Densidad (kg/m ³)
Ceniza	0.7	1900
Biomasa	0.85	492.34
Carbonizado	0.95	1900

El promedio de densidad real de bagazo de caña mostrado en la Tabla 4-1, fue determinado de acuerdo con la correlación presentada por Rasul et al. (1999), la cual está basada en la medida de la densidad de cada uno de sus componentes (ver tabla 4-2):

$$\frac{1}{\rho_{biomasa}} = \frac{y_{medula}}{\rho_{medula}} + \frac{y_{fibra}}{\rho_{fibra}} + \frac{y_{corteza}}{\rho_{corteza}} \quad (4-6)$$

Tabla 4-2: Emisividad y densidad para componentes de bagazo de caña. Fuente: Rasul et al. (1999).

Componente	Fracción masa	Densidad (kg/m ³)
Médula	0.05	220
Fibra	0.73	520
Corteza	0.33	550

4.1.6 Conductividad térmica efectiva del gas

La conductividad térmica efectiva de la fase gaseosa se calcula como la suma de la conductividad térmica del gas (Ec. A-13), y la conductividad térmica equivalente debida a la radiación, de acuerdo con la Ec. 4-4, dado que ambos procesos se desarrollan de forma paralela (van Antwerpen et al., 2010):

$$\lambda_e^g = \lambda^g + \lambda_{rad} \quad (4-7)$$

4.1.7 Calor específico y entalpía molar por especie de gas

El calor específico y la entalpía molar para cada especie de gas fue determinado utilizando las correlaciones reportados por McBride et al. (1993) (apéndice A.4, Ecs. A-14 y A-15, respectivamente) y los coeficientes mostrados en las tablas **A-3** y **A-4** (apéndice A.4). Los valores calculados fueron comparados con los valores reportados por Allison (2013) (NIST) y Cengel (2014), donde se obtuvo un buen ajuste entre los datos como se muestra en la figura **4-3** y la tabla **A-7**.

4. Propiedades físicas y químicas de fases gas y sólida

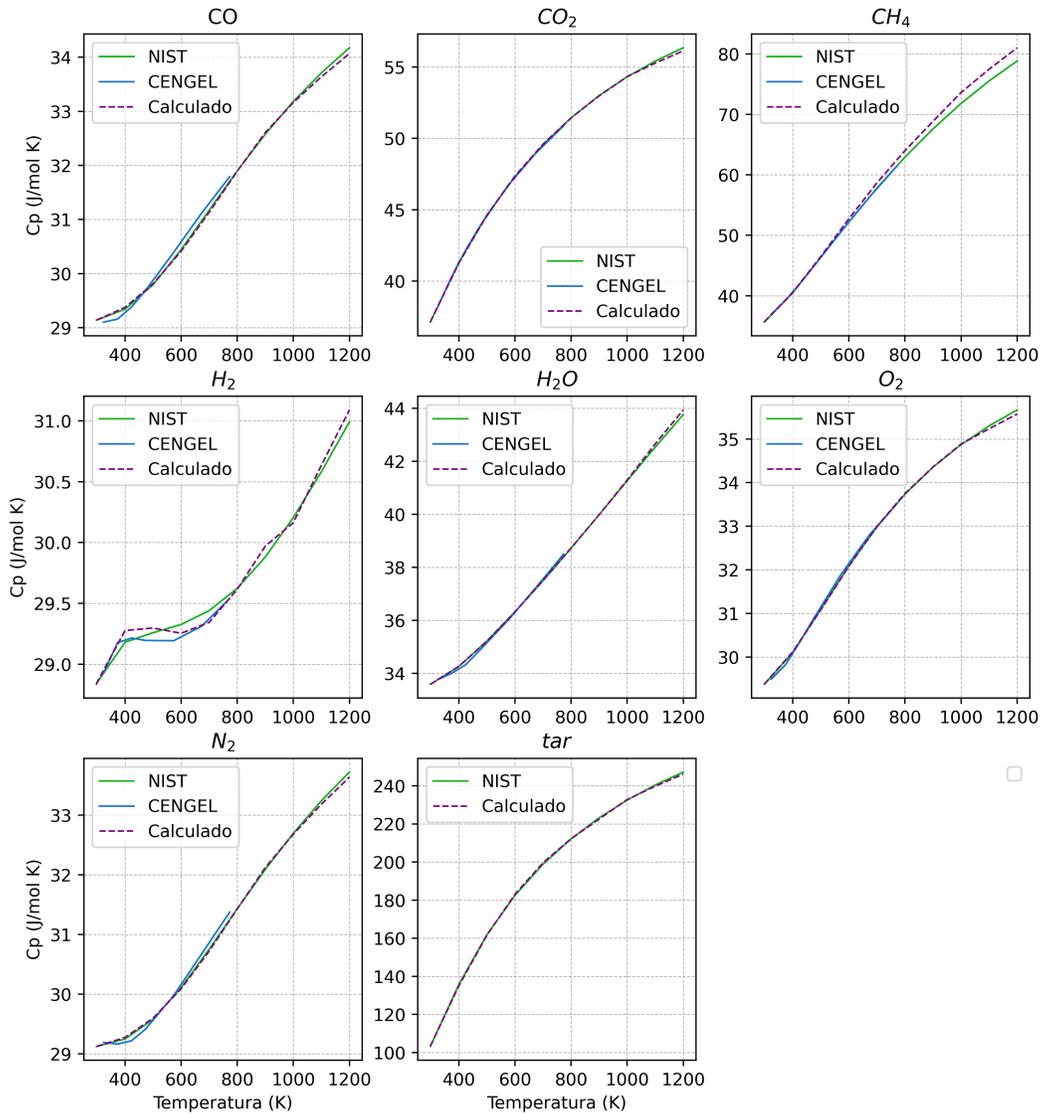


Figura 4-3: Calor específico molar para diferentes especies: comparación valores de literatura y valores calculados.

4.1.8 Calor específico molar para mezcla de gas

El calor específico molar para una mezcla de gases ideales es obtenido de acuerdo con la siguiente correlación:

$$C_p^g = \sum_{i=1}^n C_{p,i}^g X_i^g \quad (4-8)$$

Dónde C_p^g y $C_{p,i}^g$ es el calor específico molar de la mezcla de gases y del componente puro i en (J/molK), respectivamente.

4.1.9 Coeficiente de difusión binario

Para calcular el coeficiente de difusión binario se utilizó el enfoque mostrado por Reid et al. (1987), el cual se basa en la metodología teórica de Chapman Enskog para mezclas binarias de gases a presiones bajas (Turns, 2000). La expresión para determinar el coeficiente de difusión binario es mostrada en la Ec. A-16 (ver apéndice A.5).

4.1.10 Coeficiente de difusión para gases con componentes múltiples

El coeficiente de difusión molecular para gases con componentes múltiples se determina de acuerdo con la correlación descrita por Reid et al. (1987), donde los componentes de difusión binarios se asumen independientes de la composición del gas:

$$D_{i,m} = \left(\sum_{j=1, j \neq i}^n \frac{x_j}{D_{ij}} \right)^{-1} \quad (4-9)$$

4.1.11 Coeficiente de dispersión transversal asociado a la transferencia de masa

El coeficiente efectivo de dispersión transversal asociado a la transferencia de masa, el cual es descrito en la ecuación 3-1, se calcula a partir de la correlación indicada en la Ec. 4-10:

$$D_{e,x,i,m}^g = \frac{u_0^g d_p}{Pe_{i,x,m}} \quad (4-10)$$

Dónde $Pe_{i,x,m}$ es el número de Peclet efectivo, el cual es calculado de acuerdo con la expresión reportada por Gunn (1987):

$$\frac{1}{Pe_{i,x,m}} = \frac{1}{Pe_f} + \frac{\varepsilon_b}{\tau Pe_{i,0,m}} \quad (4-11)$$

Pe_f , es el número de Peclet fluido-mecánico para dispersión transversal y τ es la tortuosidad. El número Pe_f es función del número de Reynolds y de acuerdo con Gunn (1987) puede ser expresado por la siguiente ecuación:

$$Pe_f = 40 - 29 \exp^{-7/Re} \quad \text{Para esferas} \quad \tau = \sqrt{2} \quad (4-12a)$$

$$Pe_f = 11 - 4 \exp^{-7/Re} \quad \text{Para cilindros sólidos} \quad \tau = 1,93 \quad (4-12b)$$

$$Pe_f = 40 - 29 \exp^{-7/Re} \quad \text{Para cilindros huecos} \quad \tau = 1,93 \quad (4-12c)$$

4. Propiedades físicas y químicas de fases gas y sólida

$Pe_{i,0,m}$, está definido en función de la velocidad de vacío u_0 , el diámetro de partícula d_p y el coeficiente de difusión molecular $D_{i,m}$ como se muestra en la Ec. 4-13:

$$Pe_{i,0,m} = \frac{u_0^g d_p}{D_{i,m}} \quad (4-13)$$

4.1.12 Coeficiente de dispersión transversal asociado a la transferencia de calor

De manera análoga a la que se calcula el coeficiente de dispersión transversal asociado a la transferencia de masa (Ec. 4-10), se determina el coeficiente de dispersión transversal asociado a la transferencia de calor (descrito en la Ec. 3-6) de acuerdo con la siguiente correlación:

$$D_{e,x,th}^g = \frac{\rho^g C_p^g u_0^g d_p}{Pe_{i,x,th}} \quad (4-14)$$

El número de Peclet efectivo para el transporte de calor se determina a partir de la Ec. 4-15:

$$\frac{1}{Pe_{i,x,th}} = \frac{1}{Pe_f} + \frac{\varepsilon_b}{\tau Pe_{i,0,th}} \quad (4-15)$$

Dónde $Pe_{i,0,th}$ es calculado en la Ec. 4-16:

$$Pe_{i,0,th} = \frac{\rho^g C_p^g u_0^g d_p}{\lambda^g} \quad (4-16)$$

4.1.13 Velocidad de fase gas

Dado que la corriente de flujo del gas se da en una dirección principal a través del lecho de partículas (Fig. 3-1a) y a presión constante, se realiza la suposición de un régimen general de flujo pistón. De acuerdo con de Souza-Santos (2010) y como se muestra en la figura 4-4, esta hipótesis, se sustenta en el hecho de que a medida que el gas se filtra en el lecho, este pasa a través de pequeños canales entre las partículas. Sin importar el tipo de régimen de flujo (laminar o turbulento), la combinación de estas pequeñas corrientes imita un flujo pistón para la fase gaseosa. Se asume que la velocidad del gas es uniforme en toda la sección transversal del lecho, entonces los perfiles de temperatura y concentración se pueden modelar de igual manera como perfiles planos.

Por otra parte, los procesos de degradación térmica causados por las reacciones químicas producen un aumento del volumen y un cambio en la masa del gas como consecuencia de los cambios de temperatura. Este incremento en el volumen del gas provoca que el volumen que ocupa sea superior al del volumen de control produciendo una diferencia volumétrica, la cual, debe ser evacuada a través de las áreas superficiales del elemento de volumen durante

el intervalo de tiempo examinado. Teniendo en cuenta el modo de operación del equipo, la evacuación se presenta a través del área superior del volumen de control, lo que genera un aumento en la velocidad de la fase gas (Patiño, 2011). La velocidad de la fase gas es determinada a partir del planteamiento de la ecuación de conservación de masa para el volumen de control, donde la concentración de los gases y los términos fuentes asociados a las reacciones químicas son conocidos en el intervalo de tiempo analizado (Ec. 4-17).

$$\varepsilon \frac{\partial \rho^g}{\partial t} = \varepsilon_b \frac{\partial (u_y^g \rho^g)}{\partial y} + \dot{S}_{i,m}^g \quad (4-17)$$

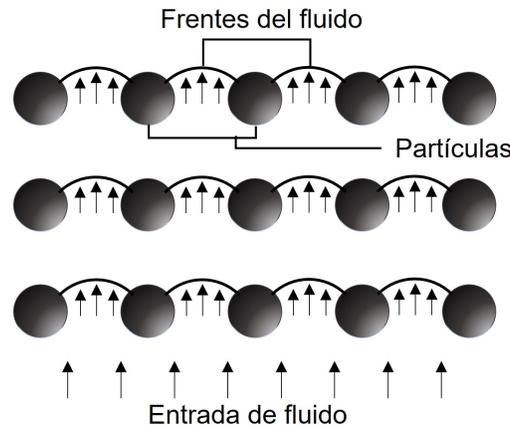


Figura 4-4: Ilustración para justificar la adopción del régimen de flujo pistón para la fase fluida. Fuente: de Souza-Santos (2010).

4.2 Propiedades para fase sólida

De acuerdo con lo indicado en la sección 2.6, la suposición del modelo heterogéneo de fase sólida continua conlleva a que en la fase sólida no se tengan en cuenta los gradientes intrapartícula de la temperatura y composición de las especies, por lo cual, estas propiedades son las mismas en la superficie y al interior de las partículas.

Se considera que la fase sólida es un material poroso compuesto por sólido y gas albergado en los poros. Las propiedades de las partículas son determinadas utilizando propiedades efectivas que combinan las propiedades de ambas fases.

4.2.1 Densidad y porosidad de partícula

A medida que avanzan los procesos de degradación térmica en la fase sólida, la densidad y porosidad de las partículas cambian. Para determinar el cambio de la densidad durante el

4. Propiedades físicas y químicas de fases gas y sólida

proceso de secado, se utilizó la correlación descrita por Lam et al. (2007), dónde la variación de la densidad está en función del contenido de humedad de la partícula como se describe en las ecuaciones 4-18 y 4-19. Para los procesos de pirólisis y combustión la densidad y porosidad fueron determinadas como un promedio ponderado entre las propiedades de la biomasa y del carbonizado en función del grado de conversión (α) como se presenta en las ecuaciones 4-20 y 4-21 (Jensen, 2001). Los valores de densidad y porosidad para el bagazo de caña y carbonizado son mostrados en la Tabla **A-5**.

$$\rho_p^s = \rho_{p,db}^s (1 + y_{H_2O}^s) \quad (4-18)$$

$$\rho_{p,db}^s = \frac{\rho_{p,0}^s}{(1 + y_{H_2O}^s)} \quad (4-19)$$

$$\rho_p^s = (1 - \alpha)\rho_{p,0}^s + \alpha\rho_{char,0}^s \quad (4-20)$$

$$\varepsilon_p^s = (1 - \alpha)\varepsilon_{p,0}^s + \alpha\varepsilon_{char,0}^s \quad (4-21)$$

Tabla 4-3: Valores de densidad y porosidad para bagazo de caña y carbonizado. Fuente: *Canedo et al. (2021); **Verissimo et al. (2020).

Componente	ε_p	ρ_p (kg/m^3)
Bagazo de caña	0.73*	573*
Carbonizado	0.003**	250**

4.2.2 Masa y volumen de partícula

La masa inicial de partícula es calculada a partir de la densidad y la porosidad inicial de la partícula como se muestra en la Ec. 4-22

$$m_{p,0,wb} = (1 - \varepsilon_{p,0}^s)(\rho_{p,0}^s)(V_{p,0}) = \rho_{aparente}V_{p,0} \quad (4-22)$$

La masa de partícula en cualquier instante de tiempo es obtenida teniendo en cuenta el proceso de conversión termoquímica. Cuando la temperatura de la fase sólida es inferior a 373.15 K, se supone que en este rango tiene incidencia únicamente el proceso de secado y la masa de partícula es obtenida en función del cambio de humedad de acuerdo a la Ec. 4-23. Cuando el valor de temperatura es superior a los 373.15 K, se da por finalizado el proceso de secado e inician los procesos de pirólisis y combustión. En consecuencia, la masa de partícula es obtenida en función de los componentes del sólido que se calculan a partir de la cantidad

de materia orgánica sin reaccionar, la masa de carbonizado formada durante el proceso de pirólisis y la masa de este carbonizado que ha reaccionado durante su combustión como se presenta en la Ec. 4-24.

$$m_p = m_{p,0,wb} - m_{p,0,wb} (y_{H_2O,0}^s - y_{H_2O}^s) \quad \text{Para } T^s \leq 373,15K \quad (4-23)$$

$$m_p = \underbrace{m_{p0,db} (w_b)}_{\text{Masa de materia orgánica disponible}} + \underbrace{m_{p0,db} (1 - w_b) y_{char,0}}_{\text{Masa de carbonizado formado}} - \underbrace{(m_{p0,db} (1 - w_b) y_{char,0}) y_{char}^s}_{\text{Masa de carbonizado que ha reaccionado}} \quad \text{Para } T^s > 373,15K \quad (4-24)$$

Por otra parte, el volumen de las partículas de la fase sólida es calculado a partir de la relación entre la masa de las partículas y la densidad aparente de la fase sólida, así:

$$V_p = \frac{m_p}{(1 - \varepsilon_p^s)} \quad (4-25)$$

4.2.3 Diámetro equivalente de partícula y área superficial volumétrica de partícula

Las partículas de bagazo de caña presentan una forma irregular, por lo tanto, se define un diámetro representativo para este tipo de partículas en el lecho suponiendo que existe una partícula esférica hipotética que tiene la misma relación de volumen de la partícula real como se muestra en la Ec. 4-25 (Figura and Teixeira, 2007):

$$d_p = \left(\frac{6V_p}{\pi} \right)^{(1/3)} \quad (4-26)$$

El área de superficie específica para materiales a granel se define como el área de superficie total expuesta a un gas o fluido que fluye a través del material poroso (Figura and Teixeira, 2007). Esta área específica representa el área de transferencia de calor entre las fases sólida y gaseosa por unidad de volumen. En partículas de forma irregular, el área superficial volumétrica de las partículas sólidas se puede expresar como (Johansson et al., 2007):

$$S_p = \frac{6(1 - \varepsilon_b)}{d_p} \quad (4-27)$$

4.2.4 Calor específico efectivo de la fase sólida

El calor específico de la fase sólida es obtenido en función del grado de conversión entre la zona del sólido correspondiente a la biomasa (material orgánico) y la otra que es carbonizado como se muestra en la Ec. 4-28 (Jurena, 2012). El calor específico para bagazo de caña a 298

4. Propiedades físicas y químicas de fases gas y sólida

K es de 1760 J/kg K (Verissimo et al., 2020) y el calor específico para el carbonizado de bagazo de caña es obtenido a partir de la correlación presentada en la Ec. 4-29a a Ec. 4-29d (Eisermann et al., 1980).

$$C_p^s = (1 - \alpha)C_{p,bm}^s + \alpha C_{p,char}^s \quad (4-28)$$

$$C_{p,char}^s = y_{cf,daf}C_{p,F} + y_{v_1,daf}C_{p,v_1} + y_{v_2,daf}C_{p,v_2} \quad (4-29a)$$

$$C_{p,F} = -0,218 + 3,807 \times 10^{-3}T^s - 1,758 \times 10^{-6}T^{s^2} \quad (4-29b)$$

$$C_{p,v_1} = 0,728 + 3,391 \times 10^{-3}T^s \quad (4-29c)$$

$$C_{p,v_2} = 2,273 + 2,554 \times 10^{-3}T^s \quad (4-29d)$$

Dónde:

F : fracción masa seca y libre de ceniza de carbon fijo

V_1 : Materia volátil primaria (90 % del total de la materia volátil en daf)

V_2 : Materia volátil secundaria (10 % si la mv >10 %; es igual a la mv si el contenido total de mv <10 %)

C_F : Calor específico del carbón fijo (kJ/kg K)

C_{p,v_1} : Calor específico de materia volátil primaria (kJ/kg K)

C_{p,v_2} : Calor específico de materia volátil secundaria (kJ/kg K)

El calor específico efectivo de la fase sólida es calculado a partir del calor específico de los gases contenidos en los poros de la partícula sólida y el calor específico del material sólido (Patiño, 2011):

$$(\rho C_p)_e^s = \varepsilon_p (\rho C_p)^g + (1 - \varepsilon_p) (\rho C_p)^s \quad (4-30)$$

4.2.5 Conductividad térmica efectiva de fase sólida

La conductividad térmica del sólido es descrita con base en la proporcionalidad entre el calor específico volumétrico del sólido y su conductividad térmica como se muestra en la Ec.4-31 (Patiño, 2011). La constante de proporcionalidad ($6,4141 \times 10^{-7}$) es obtenida a partir de mediciones para el grafito amorfo a 300 °C (Patiño, 2011).

$$\lambda^s = 6,4141 \times 10^{-7} \left(\frac{m^2}{s} \right) C_p^s \rho^s \quad (4-31)$$

4.3. Coeficiente de transferencia de calor entre fase sólida y fase gas

La conductividad térmica efectiva del lecho es calculada utilizando el modelo de celda de MISSENARD empleado por Jensen (2001). Este modelo es aplicable a sólidos dispersos y está en función de la conductividad térmica de la fase sólida y la conductividad térmica de la fase gaseosa:

$$\lambda_e^s = \lambda_e^g \left(1 + \frac{(1 - \varepsilon_b) (\lambda^s - \lambda_e^g)}{\lambda^s - (1 - \varepsilon_b)^{1/3} (\lambda^s - \lambda_e^g)} \right) \quad (4-32)$$

4.2.6 Velocidad de fase sólida

De acuerdo con el planteamiento realizado por de Souza-Santos (2010), la suposición de flujo pistón conduce a que el consumo de partículas sólidas sea casi uniforme para la sección transversal del lecho. Bajo este supuesto, es razonable deducir que las partículas de la fase sólida fluyen en un movimiento casi uniforme hacia abajo. Por lo tanto, se puede tomar como una aproximación válida al movimiento general de la fase sólida el régimen de flujo pistón.

Teniendo en cuenta el modo de operación del equipo, el desplazamiento de las partículas se presenta a través del área inferior del volumen de control y el movimiento es propiciado por los términos fuente asociados a los procesos de conversión del combustible. Consecuentemente, la velocidad de la fase sólida puede ser determinada a partir del planteamiento de la ecuación de conservación de masa para el volumen de control, donde la densidad del sólido y los términos fuentes asociados a las reacciones químicas son conocidos en el intervalo de tiempo analizado:

$$(1 - \varepsilon_b) \frac{\partial \rho^s}{\partial t} = (1 - \varepsilon_b) \frac{\partial u_y^s \rho^s}{\partial y} + \dot{S}_{i,m}^s \quad (4-33)$$

4.3 Coeficiente de transferencia de calor entre fase sólida y fase gas

El coeficiente de transferencia de calor entre la fase sólida y la fase gaseosa es determinado a partir del número de Nusselt:

$$h_{gs} = \frac{Nu_{gs} \lambda^g}{d_p} \quad (4-34)$$

La metodología para determinar el número de Nusselt para un lecho de partículas corresponde a la reportada por Schlünder and Tsotsas (1988), en la cual, este número se obtiene mediante la expresión:

$$Nu_{gs} = K f_{\varepsilon_b} Nu_{EK} \quad (4-35)$$

Dónde K y f_{ε_b} son factores de corrección, y Nu_{EK} es el número de Nusselt para la transferencia de calor en una partícula. Las variables de la Ec. 4-35 son explicados a continuación:

4. Propiedades físicas y químicas de fases gas y sólida

- **Factor de corrección (K):** Este factor considera la influencia de la dirección del flujo de calor (ya sea calentamiento o enfriamiento) en relación con el coeficiente de transferencia de calor, teniendo en cuenta la temperatura de los cuerpos involucrados (Patiño, 2011). Para la fase gas el factor de corrección esta dado por la siguiente correlación:

$$K = \left(\frac{T^g}{T^s} \right)^{0,12} \quad (4-36)$$

- **Factor de corrección (f_{ε_b}):** Este factor tiene en cuenta la presencia de otras partículas en el lecho de combustible que alteran el flujo del gas. Se determina de acuerdo con la siguiente ecuación:

$$f_{\varepsilon_b} = 1 + 1,5(1 - \varepsilon_b) \quad (4-37)$$

- **Número de Nusselt (Nu_{EK}):** Este número para la transferencia de calor sobre una sola partícula es calculado teniendo en cuenta la naturaleza turbulenta y laminar del flujo:

$$Nu_{EK} = 2 + \sqrt{Nu_{laminar}^2 + Nu_{turbulento}^2} \quad \text{Para: } 0,1 \leq Re_{eq} \leq 10^7 \quad \text{y} \quad 0,5 < Pr < 2500 \quad (4-38)$$

El número de Nusselt promedio para un flujo laminar y turbulento esta dado por las Ecs. 4-40 y 4-42, respectivamente:

$$Nu_{laminar} = 0,664 Re_{eq}^{1/2} Pr^{1/3} \quad (4-39)$$

$$Nu_{turbulento} = \frac{0,037 Re_{eq}^{0,8} Pr}{1 + 2,443 Re_{eq}^{-0,1} (Pr^{2/3} - 1)} \quad (4-40)$$

La longitud característica para los cálculos del número de Reynolds y Nusselt es el diámetro de partícula. El número de Reynolds equivalente (Re_{eq}) tiene en cuenta la incidencia de la convección natural en el coeficiente de transferencia de calor y se calcula de la siguiente manera:

$$Re_{eq} = \left(Re_{\varepsilon_b}^2 + \frac{Gr}{2,5} \right)^{1/2} \quad (4-41)$$

Dónde el número de Grashof esta dado por:

$$Gr = \frac{5Re_{\varepsilon_b}}{2} \quad (4-42)$$

5 Procesos de degradación térmica del combustible

Los procesos de degradación térmica durante la combustión de bagazo de caña son secado, pirólisis y combustión de volátiles y carbonizado. Estos procesos suceden de manera secuencial a medida que se incrementa la temperatura en el lecho. Es necesario especificados de manera adecuada para resolver los términos fuente del conjunto de ecuaciones mostrados en la sección 3.

5.1 Secado

La velocidad con la que ocurre el proceso de secado se describe por medio de la tasa de evaporación ($\dot{r}_{dry,m}^s$). Esta representa la influencia de la temperatura de la fase sólida en la tasa de evaporación y se describe por medio del modelo cinético de primer orden modificado por Miltner et al. (2008) para biomasa (Ec. 5-1). En la figura 5-1 se muestra la tasa de evaporación para diferentes temperaturas del sólido suponiendo una densidad, porosidad y contenido de humedad de partícula de 579 kg/m^3 , 0.73 y 0.40, respectivamente. El modelo de secado es dependiente de la temperatura de la fase sólida, por lo tanto, cuando la temperatura es cercana a la temperatura de ebullición, se presenta una mayor tasa de evaporación (Fig. 5-1). Este modelo está limitado hasta una temperatura de 475 K, por encima de este valor, el modelo no es válido y produce resultados no realísticos.

$$\dot{r}_{dry,m}^s = k_{H_2O}(1 - \varepsilon_b)(\rho^s)|T^s - 475|^7 \left[\frac{kg_{H_2O}}{m^3} \right] \quad (5-1)$$

En la Ec. 5-1, k_{H_2O} corresponde a la constante de la tasa de evaporación que se determina por medio de la expresión tipo Arrhenius de la Ec. 5-2 propuesta por Miltner et al. (2008).

$$k_{H_2O} = 2,822 \times 10^{-4} \exp\left(-\frac{10584}{T^s}\right) \quad (5-2)$$

Por otra parte, el término fuente en la ecuación de conservación de energía en fase sólida (Ec. 3-18) para el proceso de secado es obtenido a partir de la tasa de evaporación y el calor

5. Procesos de degradación térmica del combustible

latente de vaporización del agua:

$$\dot{r}_{dry,th}^s = \dot{r}_{dry,m}^s h_{fg} \quad \left[\frac{W}{m^3} \right] \quad (5-3)$$

El calor latente es calculado en función de la temperatura de la fase sólida (T en °C) de acuerdo con la correlación de Srikiatden and Roberts (2008):

$$h_{fg} = 2501,3 - 2,301T^s - 0,00142(T^s)^2 \quad [kJ/kg] \quad (5-4)$$

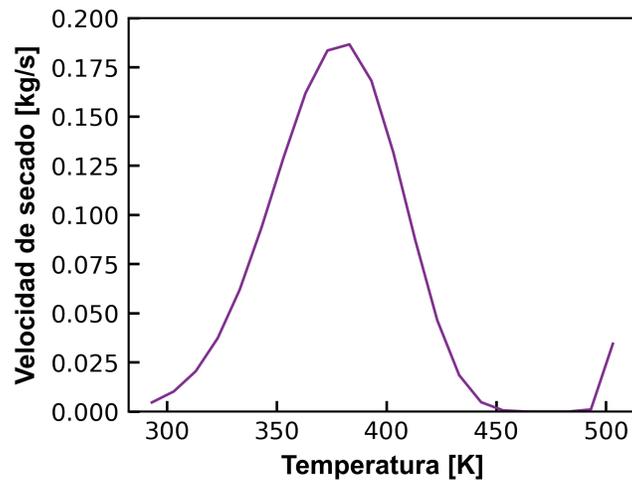


Figura 5-1: Velocidad de evaporación para diferentes temperaturas del sólido. Fuente: elaboración propia.

5.2 Pirólisis

La velocidad de reacción del proceso de pirólisis para bagazo de caña fueron modeladas utilizando el modelo de una reacción global sencilla (Ec. 2.8). Esta velocidad es el resultado de la ocurrencia de la descomposición de tres pseudo componentes de la biomasa: hemicelulosa, celulosa y lignina. Para modelar la descomposición de cada pseudo componente, se utilizó un modelo cinético de reacciones paralelas independientes como se muestra en la Ec. 5-5 Gómez et al. (2008):

$$\frac{dw_{bm}}{dt} = \sum_{k=1}^3 y_k r_k \quad (5-5)$$

Dónde w_{bm} es la masa normalizada de materia orgánica de biomasa que no ha reaccionado, k es un pseudo componente y y_k es la fracción masa de cada pseudo componente en la biomasa. La velocidad de reacción r_k de cada pseudo componente fue modelada de acuerdo con la Ec. 5-6 (Gómez et al., 2008), donde los parámetros cinéticos k_0 , Ea , w_i y n_i para bagazo de caña,

son obtenidos a partir del estudio reportado por Rincón and Gómez (2008) y mostrados en la tabla 5-1.

$$r_k = \frac{dw_{bm,k}}{dt} = k_{0,k} e^{-Ea/RT} w_k^{n_k} \quad (5-6)$$

Tabla 5-1: Parámetros cinéticos para pirólisis de bagazo de caña de azúcar. Fuente: Rincón and Gómez (2008).

Reacción pseudo componente (k)	Ea_k (kJ/mol)	$k_{0,k}$ (1/s)	w_k (%)	n_k
1	234.67	8.7e18	21	1
2	228.05	2.9e16	50	1
3	30.0	0.3	41	1

En la Figura 5-2 se muestra la comparación de los resultados experimentales reportados por Rincón and Gómez (2008) con los datos modelados para pirólisis de bagazo de caña donde se muestra la velocidad de reacción y la pérdida de masa utilizando una velocidad de calentamiento de 10 K/min. La curva de pérdida de masa presentada corresponde a la masa normalizada de biomasa remanente, donde el modelo propuesto presenta un buen ajuste con los datos experimentales como se muestra en la tabla A-8. De estos resultados se puede deducir que a 800 K la mayor parte de la materia orgánica de la biomasa ha reaccionado y estos resultados corresponden a los datos reportados por Rincón and Gómez (2008) para este mismo tipo de biomasa.

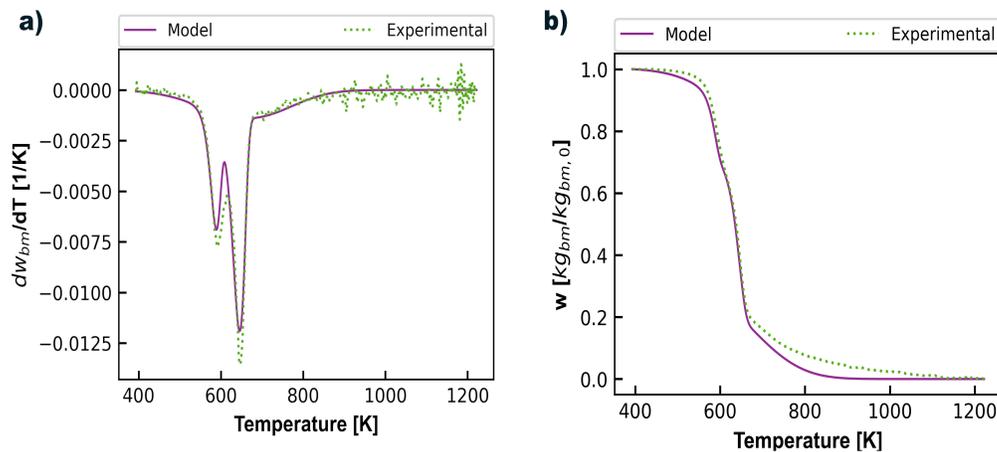


Figura 5-2: Pirólisis de bagazo de caña: a) velocidad de reacción y b) pérdida de masa.

Durante el proceso de pirólisis, cada pseudo componente (k) produce carbonizado, y gases (CO, CO₂, CH₄, H₂, H₂O y alquitrán), por lo tanto, la suma de la contribución realizada por

5. Procesos de degradación térmica del combustible

cada producto de cada pseudo componente da como resultado la cantidad total de producto obtenido, como se muestra en la ecuación 5-7:

$$\frac{dy_i}{dt} = K \sum_{k=1}^3 y_{i,k} \frac{dw_k}{dT} \quad (5-7)$$

Dónde K es la tasa de calentamiento [K/s] y $y_{i,k}$ es determinado a partir de la tasa de conversión de biomasa de cada pseudo componente usando la ecuación estequiométrica global 5-8 y la condición presentada en la ecuación 5-9:

$$w_{bm,k} = (y_{char,k}w_{char,k}) + (y_{CO_2,k}w_{CO_2,k}) + (y_{CO,k}w_{CO,k}) + (y_{CH_4,k}w_{CH_4,k}) + (y_{H_2,k}w_{H_2,k}) + (y_{Tar,k}w_{Tar,k}) \quad (5-8)$$

$$y_k = y_{char,k} + y_{CO_2,k} + y_{CO,k} + y_{CH_4,k} + y_{H_2,k} + y_{Tar,k} \quad (5-9)$$

A partir de las ecuaciones 5-8 y 5-9 (112) se determinaron los coeficientes estequiométricos de los productos de pirólisis para cada reacción paralela independiente y las fracciones totales de los productos al final del proceso de pirólisis como se muestra en la Tabla **5-2**. De igual forma, la Figura **5-3** muestra la comparación entre las curvas experimentales y modeladas del rendimiento másico y evolución de las diferentes especies gaseosas en el proceso de pirólisis en función de la temperatura. Los datos simulados muestran un buen ajuste con los datos experimentales (ver tabla **A-8**) para las especies que se generan en mayor cantidad (Carbonizado (char), CO₂, CO y alquitrán (Tar)).

Tabla 5-2: Coeficientes estequiométricos de productos de pirólisis para cada reacción paralela independiente k .

Reacción pseudo componente k	y_{char} (kg/kg _{bm})	y_{CO_2} (kg/kg _{bm})	y_{CO} (kg/kg _{bm})	y_{CH_4} (kg/kg _{bm})	y_{H_2} (kg/kg _{bm})	y_{Tar} (kg/kg _{bm})
1	0.0336	0.0260	0.0221	0.0197	0.0018	0.0829
2	0.0876	0.0444	0.0224	0.0001	0.0049	0.2871
3	0.0699	0.0409	0.0263	0.0098	0.0004	0.2188
Modelado (y_i)	0.1910	0.1113	0.0708	0.0296	0.0072	0.5887
Experimental (y_i)	0.1908	0.1110	0.0710	0.0296	0.0072	0.5888

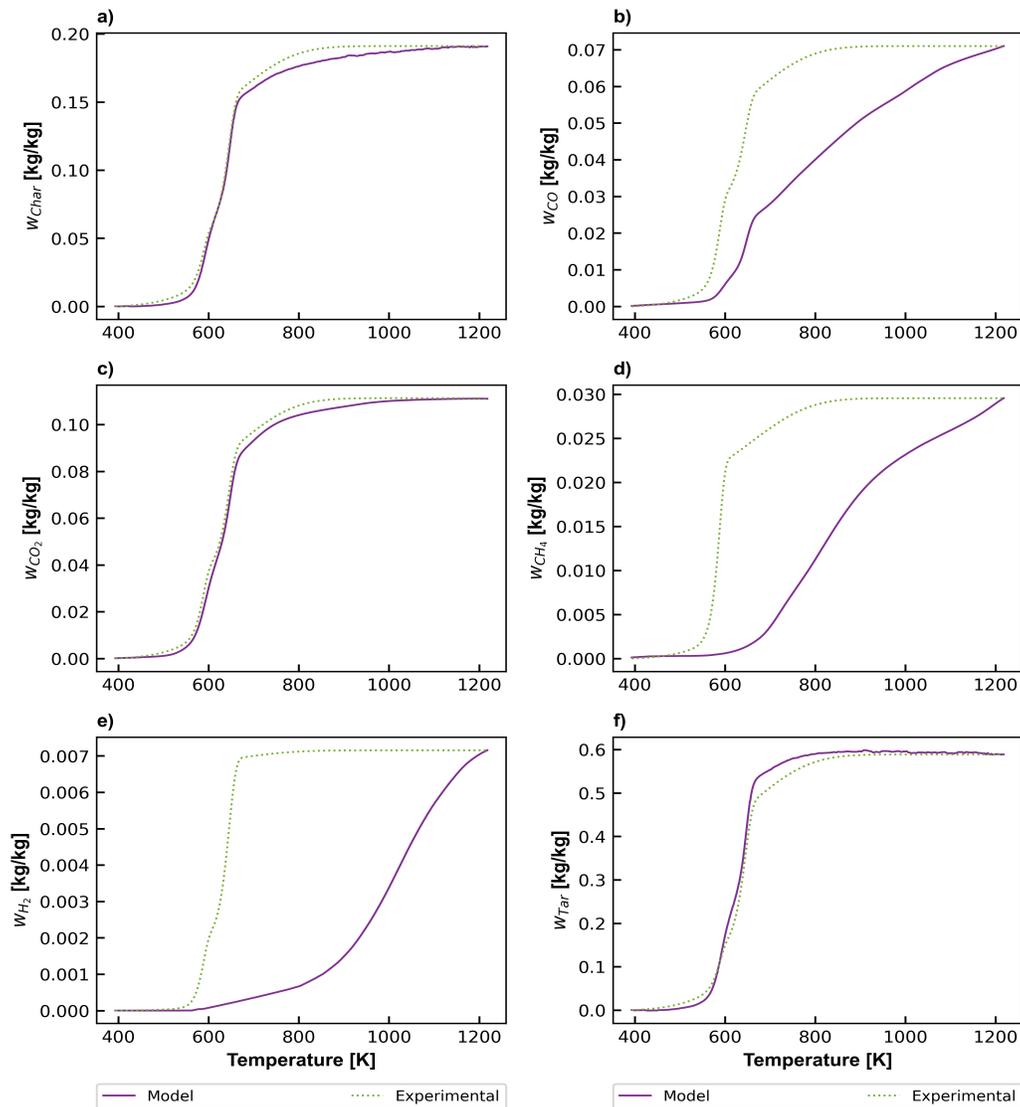


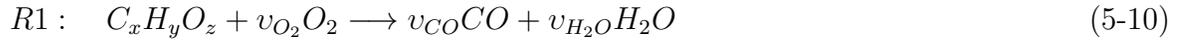
Figura 5-3: Especies generadas durante el proceso de pirólisis.

5.3 Combustión

El proceso de combustión comprende la combustión de volátiles y la del carbonizado. Los volátiles liberados de las partículas consisten en gases ligeros (CO, CO₂, CH₄, H₂O, H₂) y alquitrán. La combustión de estos compuestos es homogénea y no se produce ninguna reacción heterogénea del carbonizado durante este proceso (Khodaei et al., 2015). Una vez que los volátiles han sido liberados desde las partículas, en el producto sólido solo queda carbonizado puro y cenizas. Los productos principales de la combustión del carbonizado son CO, CO₂ y H₂O (Khodaei et al., 2015).

5.3.1 Combustión de volátiles

En la combustión de productos volátiles, se consideró el mecanismo de reacciones propuesto por Di Blasi (2004) para biomasa. Este mecanismo tiene en cuenta las reacciones para alquitrán (Ec. 5-10, R1), metano (Ec. 5-11, R2), monóxido de carbono (Ec. 5-12, R3) e hidrógeno (Ec. 5-13, R4) como se muestra a continuación:



Las velocidades de reacción cinética para las reacciones homogéneas durante la combustión de volátiles así como sus correspondientes parámetros cinéticos, fueron modelados de acuerdo con Di Blasi (2004). Estos parámetros son presentados en la tabla 5-3. El término de porosidad del lecho se incorpora en las ecuaciones de velocidad de reacción cinética para ajustar el volumen en el que tienen lugar las reacciones (en fase gaseosa) al volumen total del reactor.

Tabla 5-3: Velocidades de reacción para reacciones homogéneas. Fuente: Di Blasi (2004).

Reacción	Velocidad cinética (kmol/m ³ s)
R1	$r_{c1} = \varepsilon_b(9,2 \times 10^6) \exp\left(\frac{-9650}{T_g}\right) T^g C_{Tar} C_{O_2}$
R2	$r_{c2} = \varepsilon_b(9,2 \times 10^6) \exp\left(\frac{-9650}{T_g}\right) T^g C_{CH_4} C_{O_2}$
R3	$r_{c3} = \varepsilon_b(1,3 \times 10^{11}) \exp\left(\frac{-15105}{T_g}\right) C_{CO} C_{O_2} C_{H_2O}^{0,5}$
R4	$r_{c4} = \varepsilon_b(10^{11}) \exp\left(\frac{-10000}{T_g}\right) C_{O_2} C_{H_2}$

Los productos volátiles liberados desde las partículas deben mezclarse con el aire antes de que se produzca la combustión Khodaei et al. (2015). Por lo tanto, para una predicción precisa de la velocidad de reacción, no basta considerar únicamente la cinética de reacción limitada por la temperatura. Se hace necesario poder predecir el grado de mezcla entre el agente oxidante y los volátiles presentes en el lecho de combustible (Dernbecher et al., 2019; Khodaei et al., 2015). Para describir la mezcla de volátiles y aire primario dentro del lecho de combustible, se utilizó el modelo simplificado de Yang et al. (2002), el cual se basa en

la ecuación de Ergun para la caída de presión dentro del lecho de combustible. La tasa de mezclado se expresa así:

$$r_{mix,i} = k_{mix} C_{mix} \min \left\{ \frac{C_{gas,i} C_{O_2}}{v_{gas,i} v_{O_2}} \right\} \quad (5-14)$$

Dónde C_{mix} es la constante adimensional de mezclado que de acuerdo con Frigerio et al. (2008) adquiere un valor de 0.85. k_{mix} corresponde la constante de mezcla de gas con el aire que se determina como:

$$k_{mix,i} = 150 \frac{D_{im} (1 - \varepsilon_b)^{2/3}}{d_p^2 \varepsilon_b} + 1,75 \frac{\mu^g (1 - \varepsilon_b)^{1/3}}{d_p \varepsilon_b} \quad [1/s] \quad (5-15)$$

Finalmente, la velocidad de combustión de cada especie i se determina como el mínimo entre la velocidad cinética de oxidación y la velocidad de mezclado con el oxidante:

$$r_{R,i} = \min [r_{c,i}, r_{mix,i}] \quad \left[\frac{kmol}{m^3 s} \right] \quad (5-16)$$

5.3.2 Combustión de carbonizado

La reacción de oxidación del carbonizado es mostrada en la Ec. 5-17 (R5):



La relación CO/CO_2 es esencial para calcular la proporción entre las moles generadas de monóxido de carbono y dióxido de carbono. Esta relación se determinó utilizando la fórmula presentada por Anca-Couce et al. (2017) (Ec. 5-18), donde el parámetro v es dependiente de la temperatura. Este parámetro varía de 0 a 1, siendo 0 exclusivamente para la producción de CO_2 . De igual manera, se utilizaron los parámetros $A = 12$, $E_v = 3300K$ en la Ec. 5-18, los cuales han sido ampliamente utilizados para carbonizados provenientes de biomásas (Anca-Couce et al., 2017).

$$v = \frac{\frac{CO}{CO_2}}{1 + \frac{CO}{CO_2}} = \frac{A \times \exp\left(-\frac{E_v}{T^s}\right)}{1 + A \times \exp\left(-\frac{E_v}{T^s}\right)} \quad (5-18)$$

Para la velocidad de reacción del carbonizado se consideró una ecuación de tasa global de reacción (Ec. 5-19) donde se tienen en cuenta las resistencias cinéticas (k_c) y difusivas (k_d) además del área, el número de densidad de partícula y la concentración de oxígeno (Verissimo et al., 2020):

$$r_5 = \frac{A_{char} n_{char}}{\frac{1}{k_c} + \frac{1}{k_d}} [O_2] \quad (5-19)$$

5. Procesos de degradación térmica del combustible

La constante de velocidad cinética de reacción k_c viene dada por una ecuación tipo Arrhenius (Ec. 5-20) con los parámetros cinéticos $A = 3.85E01$ (m/s) y $Ea = 55.2$ (kJ/mol) reportados por Daood et al. (2010). Por otra parte, el área superficial A_{char} y el número de densidad de partícula n_{char} están dados por las ecuaciones 5-21 y 5-22, respectivamente, en las cuales se supone que las partículas de carbonizado son esféricas. Estos valores son utilizados para convertir una tasa de reacción superficial a una tasa volumétrica (Verissimo, 2018).

$$k_c = A_0 \exp\left(-\frac{Ea}{RT^s}\right) \quad (5-20)$$

$$A_{char} = \frac{\pi d_p^2}{4} \quad [m^2] \quad (5-21)$$

$$n_{char} = 2 \frac{(1 - \varepsilon_{char})}{\pi d_{p,char}^3} \quad [1/m^3] \quad (5-22)$$

La constante de transferencia de masa, indicada en la Ec. 5-19, se determina considerando la difusividad del oxígeno, el número de Sherwood y el diámetro de partícula, tal como se describe en la Ec. 5-23. La obtención del número de Sherwood se lleva a cabo mediante la correlación de Ranz-Marshall (Ec. 5-24). El cálculo del número de Schmidt se realiza conforme a lo demostrado en la Ec. 5-25.

$$k_d = \frac{D_{O_2} Sh}{d_{p,char}} \quad (5-23)$$

$$Sh = 2 + 0,6 Re^{1/2} Sc^{1/3} \quad (5-24)$$

$$Sc = \frac{\mu_{gas}}{\rho^g D_{O_2-gas}} \quad (5-25)$$

5.4 Entalpías de reacción

Para las reacciones homogéneas (R1 a R4 en Ec. 5-10 a Ec. 5-13, respectivamente), la entalpía global de reacción es calculada como la suma de las entalpías de cada una de las reacciones que se dan en la fase gas (Ec. 5-26). En el caso de la reacción heterogénea (R5 en Ec. 5-17), esta es obtenida a partir de la ecuación 5-27.

$$\Delta \bar{h}_R = \Delta \bar{h}_{R1} + \Delta \bar{h}_{R2} + \Delta \bar{h}_{R3} + \Delta \bar{h}_{R4} \quad (5-26)$$

La entalpía molar de cada reacción es calculada como:

$$\Delta \bar{h}_{R,i} = \sum_{Prod} v_i \left(\int_{T_0}^{T^g} C_{p,i} dT + \bar{h}_{f,i}^{\bar{g}} \right) - \sum_{Reac} v_i \left(\int_{T_0}^{T^g} C_{p,i} dT + \bar{h}_{f,i}^{\bar{g}} \right) \quad (5-27)$$

Dónde v_i es el coeficiente estequiométrico y $\bar{h}_{f,i}^{\bar{g}}$ es la entalpía de formación estándar de la especie i a la temperatura de referencia ($T_0 = 298,15K$).

5.5 Términos fuente

5.5.1 Términos fuente para la ecuación de conservación de especies para la fase gas

El término fuente para la ecuación de conservación de especies en la fase gaseosa ($\dot{S}_{i,m}^g$) mostrado en la Ec. 3-1, es calculado de la siguiente manera:

$$\dot{S}_{i,m}^g = \dot{S}_{CO,m}^g + \dot{S}_{CO_2,m}^g + \dot{S}_{CH_4,m}^g + \dot{S}_{CH_4,m}^g + \dot{S}_{H_2,m}^g + \dot{S}_{H_2O,m}^g + \dot{S}_{O_2,m}^g + \dot{S}_{Tar,m}^g \left[\frac{kg}{m^3s} \right] \quad (5-28)$$

Dónde los términos fuente para cada una de las especies generadas o destruidas en la fase gas durante los procesos de degradación térmica son los siguientes:

$$\dot{S}_{CO,m}^g = \dot{r}_{CO,pyr}^g \rho_{daf,0}^s (1 - \varepsilon_b) + (\dot{r}_{R1} v_{CO,R1} + \dot{r}_{R2} v_{CO,R2} + \dot{r}_{R3} v_{CO,R3} + \dot{r}_{R5} v_{CO,R5} (1 - \varepsilon_b)) M_{CO} \quad (5-29a)$$

$$\dot{S}_{CO_2,m}^g = \dot{r}_{CO_2,pyr}^g \rho_{daf,0}^s (1 - \varepsilon_b) + (\dot{r}_{R3} v_{CO_2,R3} + \dot{r}_{R5} v_{CO_2,R5} (1 - \varepsilon_b)) M_{CO_2} \quad (5-29b)$$

$$\dot{S}_{CH_4,m}^g = \dot{r}_{CH_4,pyr}^g \rho_{daf,0}^s (1 - \varepsilon_b) + (\dot{r}_{R2} v_{CH_4,R2}) M_{CH_4} \quad (5-29c)$$

$$\dot{S}_{H_2,m}^g = \dot{r}_{H_2,pyr}^g \rho_{daf,0}^s (1 - \varepsilon_b) + (\dot{r}_{R4} v_{H_2,R4}) M_{H_2} \quad (5-29d)$$

$$\dot{S}_{H_2O,m}^g = \dot{r}_{H_2O,dry} + \dot{r}_{H_2O,pyr}^g \rho_{daf,0}^s (1 - \varepsilon_b) + (\dot{r}_{R1} v_{H_2O,R1} + \dot{r}_{R2} v_{H_2O,R2} + \dot{r}_{R4} v_{H_2O,R4} + \dot{r}_{R5} v_{H_2O,R5} (1 - \varepsilon_b)) M_{H_2O} \quad (5-29e)$$

$$\dot{S}_{O_2,m}^g = (\dot{r}_{R1} v_{O_2,R1} + \dot{r}_{R2} v_{O_2,R2} + \dot{r}_{R3} v_{O_2,R3} + \dot{r}_{R4} v_{O_2,R4} + \dot{r}_{R5} v_{O_2,R5} (1 - \varepsilon_b)) M_{O_2} \quad (5-29f)$$

$$\dot{S}_{Tar,m}^g = \dot{r}_{Tar,pyr}^g \rho_{daf,0}^s (1 - \varepsilon_b) + (\dot{r}_{R1} v_{Tar,R1}) M_{Tar} \quad (5-29g)$$

5.5.2 Términos fuente para la ecuación de conservación de energía para la fase gas

El cálculo del término fuente para la ecuación de conservación de energía en la fase gaseosa, representado por $\dot{S}_{i,th}^g$ según la Ec. 3-6, se realiza considerando el producto de la velocidad y la entalpía de reacción para cada reacción homogénea:

$$\dot{S}_{i,th}^g = \dot{r}_{R1} \Delta \bar{h}_{R1} + \dot{r}_{R2} \Delta \bar{h}_{R2} + \dot{r}_{R3} \Delta \bar{h}_{R3} + \dot{r}_{R4} \Delta \bar{h}_{R4} \left[\frac{W}{m^3} \right] \quad (5-30)$$

5.5.3 Términos fuente para la ecuación de conservación de especies para la fase sólida

El término fuente para la ecuación de conservación de especies en la fase sólida ($\dot{S}_{i,m}^s$) mostrado en la Ec. 3-11, es calculado de la siguiente manera:

$$\dot{S}_{i,m}^s = \dot{S}_{dry,m}^s + \dot{S}_{vol,m}^s + \dot{S}_{char,m}^s \left[\frac{kg}{m^3} \right] \quad (5-31)$$

Dónde los términos fuente para cada una de las especies generadas o destruidas en la fase sólida durante los procesos de degradación térmica son los siguientes:

$$\dot{S}_{dry,m}^s = -\dot{r}_{dry,m}^s \quad (5-32a)$$

$$\dot{S}_{vol,m}^s = \dot{r}_{gas_{pyr}}^s \quad (5-32b)$$

$$\dot{S}_{char,m}^s = \dot{r}_{char_{pyr}}^s - \dot{r}_{R5} M_{char} \quad (5-32c)$$

5.5.4 Términos fuente para la ecuación de conservación de energía para la fase sólida

El cálculo del término fuente para la ecuación de conservación de energía en la fase sólida, representado por $\dot{S}_{i,th}^s$ según la Ec. 3-18, se realiza de la siguiente manera:

$$\dot{S}_{th}^s = -\dot{r}_{dry,m}^s h_{fg} - \dot{r}_{R5} \Delta \bar{h}_{R5} \left[\frac{W}{m^3} \right] \quad (5-33)$$

6 Técnicas de discretización y solución numérica

El conjunto de ecuaciones que conforman el modelo matemático de combustión para bagazo de caña presentadas en la sección 3 constituyen un sistema de ecuaciones acopladas y no lineales. Por lo tanto, se deben emplear métodos numéricos para resolver el sistema de ecuaciones planteado. Este capítulo describe las técnicas de discretización y solución del sistema de ecuaciones para la solución del modelo planteado.

6.1 Discretización de ecuaciones

Las ecuaciones fueron discretizadas utilizando el método de volúmenes finitos descrito por Patankar (1980), el cual reformula las ecuaciones diferenciales en un conjunto de ecuaciones algebraicas para su implementación en la simulación computacional.

El conjunto de las ecuaciones diferenciales parciales de balance de masa y energía presentadas en la sección 3, puede ser presentado por la ecuación general 2-1, donde la variable dependiente es denotada por ϕ . En la figura 6-1a se presenta el lecho de partículas representado como un rectángulo y el dominio computacional de cálculo es dividido en volúmenes de control que no se superponen y forman una malla regular uniformemente espaciada.

La ecuación diferencial es integrada sobre cada volumen de control dando como resultado la ecuación discretizada que contiene los valores de ϕ para cada uno de los volúmenes de control de la malla. El término transitorio en cada una de las ecuaciones de conservación fue discretizado utilizando un esquema temporal implícito. Los términos difusivos fueron discretizados utilizando el esquema de diferencias finitas centradas de segundo orden de precisión. Los términos convectivos para la ecuación de conservación de especies y energía en la fase gas fueron aproximados por el esquema Upwind de primer orden, mientras que para estas mismas ecuaciones en la fase sólida se utilizó el esquema Power-Law.

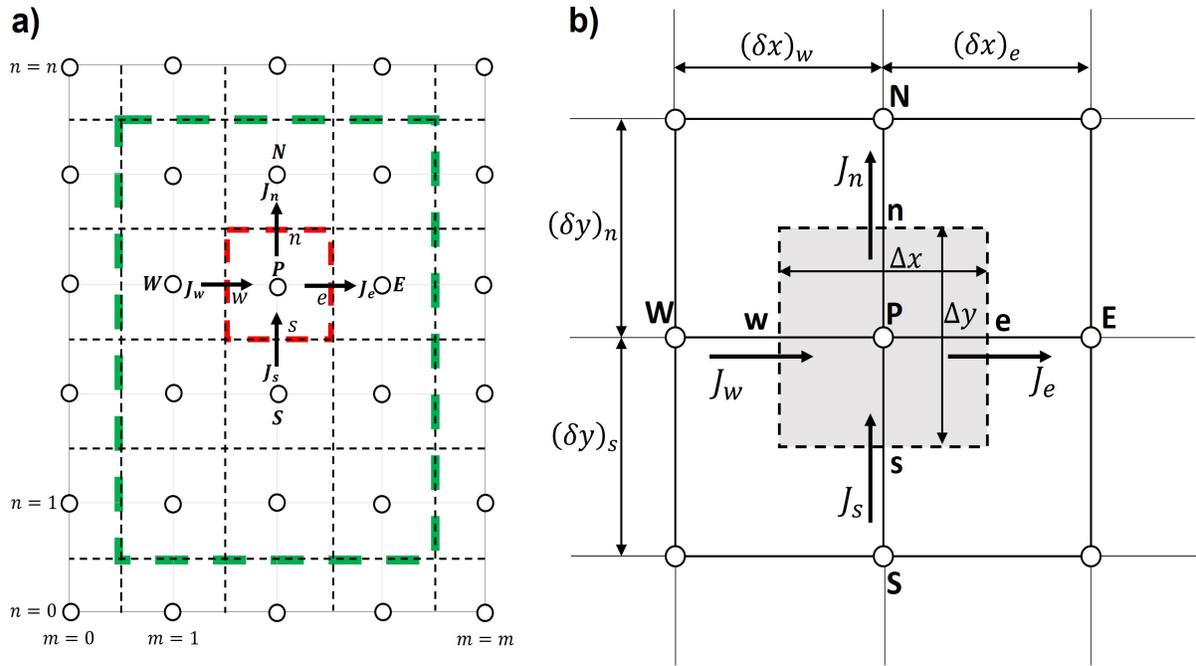


Figura 6-1: a) Malla computacional implementada y b) volumen de control.

En la figura 6-1, el punto P es el centro de celda del volumen de control, mientras que los puntos W, E, N y S son los puntos de centro vecinos oeste, este, norte y sur, respectivamente. En estos puntos las variables son almacenadas. El volumen de control mostrado en la Figura 6-1b está definido por las caras w, e, n y s, las cuales, rodean el punto P de la malla. Los flujos totales J_e , J_w , J_n y J_s están definidos por el término convectivo y difusivo y son integrados sobre las caras del volumen de control. El procedimiento de integración y discretización son mostrados en el apéndice A.6.

El proceso de discretización conduce a un conjunto de ecuaciones nominalmente lineales de la forma mostrada en la Ec.6-1, donde se utiliza la notación de puntos de centro para los nodos computacionales (centros de celda):

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + b \quad (6-1)$$

Dónde:

$$a_E = D_e A(|P_e|) + \max(-F_e, 0) \quad (6-2)$$

$$a_W = D_w A(|P_w|) + \max(F_w, 0) \quad (6-3)$$

$$a_N = D_n A(|P_n|) + \max(-F_n, 0) \quad (6-4)$$

$$a_S = D_s A(|P_s|) + \max(F_s, 0) \quad (6-5)$$

$$a_P^0 = \frac{\rho_P^0 \Delta V}{\Delta t} \quad (6-6)$$

$$b = S_C \Delta V + a_P^0 \phi_P^0 \quad (6-7)$$

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S + a_P^0 - S_P \Delta V \quad (6-8)$$

a_P^0 y ϕ_P^0 se refieren a los valores conocidos en el tiempo t , mientras que los otros valores ($\phi_P, \phi_E, \phi_W, \phi_N, \phi_S$) son los valores desconocidos en el tiempo $t + \delta t$. Las Tasas de flujo $F_{e,w,n,s}$ y las conductancias $D_{e,w,n,s}$ han sido definidas en el apéndice A.6 en la Ec. A-28a a Ec. A-28d y la Ec. A-38, respectivamente. La función $A(|P|)$ puede ser seleccionada de la tabla **A-6** para el esquema de discretización espacial deseado.

6.2 Métodos de solución numérica

Como resultado del proceso de discretización se obtiene un conjunto de ecuaciones algebraicas lineales o no lineales dependiendo de la naturaleza de la ecuación diferencial parcial de la que se deriva (Ferziger et al., 2019). Las matrices obtenidas de las ecuaciones diferenciales parciales son dispersas, donde los elementos distintos de cero se encuentran en un pequeño número de diagonales definidas. Para la solución de las ecuaciones algebraicas existen dos familias de técnicas: métodos directos y métodos indirectos o iterativos (Ferziger et al., 2019; Versteeg and Malalasekera, 2007).

En los métodos directos se supone que la matriz es muy dispersa lo que simplifica la solución (Ferziger et al., 2019). Algunos ejemplos de estos métodos son la eliminación de Gauss, descomposición LU, sistemas tri diagonales, entre otros. Sin embargo, los factores triangulares de las matrices dispersas no son dispersos, por lo tanto, el costo computacional de estos métodos es bastante alto (Ferziger et al., 2019).

Por otra parte, los métodos iterativos son utilizados preferiblemente para problemas no lineales, pero son igualmente válidos para sistemas lineales dispersos. Estos métodos suponen una solución y aplican un algoritmo para mejorarla sistemáticamente, lo que conduce a la convergencia tras un determinado número de iteraciones (Ferziger et al., 2019; Versteeg and Malalasekera, 2007). Los métodos iterativos presentan ventajas a nivel computacional en cuanto al uso eficiente de memoria y la fácil implementación en código informático (Jurena, 2012).

6. Técnicas de discretización y solución numérica

Para la solución del sistema de ecuaciones planteado en el capítulo 3, se implementó el método de Gauss-Seidel. Este método presenta mejores características de convergencia, es menos costoso en memoria puesto que no almacena nuevas estimaciones en una matriz separada y utiliza la última estimación disponible en los cálculos (Moukalled et al., 2016). La ecuación iterativa es la siguiente:

$$\phi_P = \frac{a_P^0 \phi_P^0 - a_E \phi_E - a_W \phi_W - a_N \phi_N - a_S \phi_S + S_C \Delta V}{a_P} \quad (6-9a)$$

$$\phi_P = \frac{b_P - a_E \phi_E - a_W \phi_W - a_N \phi_N - a_S \phi_S + S_C \Delta V}{a_P} \quad (6-9b)$$

El método de Gauss-Seidel utiliza los valores más recientes en la iteración de la variable ϕ_P utilizando los valores de los centros de celda cercanos ($\phi_E, \phi_W, \phi_N, \phi_S$). Una vez se ha obtenido el valor de ϕ en el punto P, se procede a calcular el valor de ϕ con el siguiente centro de celda vecino. Por lo tanto, se requiere el almacenamiento de las variables en la iteración actual y los valores en el instante de tiempo anterior. Cada intervalo de tiempo es iterado espacialmente hasta alcanzar el criterio de convergencia deseado.

6.3 Convergencia

Las ecuaciones de gobierno son resueltas de manera secuencial y desacoplada, en consecuencia, se deben realizar iteraciones sucesivas en cada paso de tiempo para obtener una solución convergente. Una vez se ha terminado el proceso de iteración espacial los valores de las propiedades y los coeficientes son actualizados de acuerdo con el valor actual de la variable solución (temperatura, fracciones masa, velocidad) en el correspondiente paso de tiempo. Este método de solución de las ecuaciones es útil por su efecto estabilizador en iteraciones sucesivas y en términos de memoria computacional es eficiente, aunque se requieren tiempos computacionales más largos (Jurena, 2012).

6.3.1 Criterio de convergencia

En los procesos de solución iterativa se debe determinar con qué precisión se han satisfecho las ecuaciones de conservación para obtener una solución lo suficientemente óptima. Por lo tanto, se debe establecer una forma para determinar el nivel de convergencia de las iteraciones realizadas. La convergencia de las iteraciones es juzgada mediante residuales escalados (adimensionales). Esto es un método estándar en aplicaciones CFD que esta basado en el imbalance del conjunto de ecuaciones discretizadas (Ec- 6-1) (Jurena, 2012). El imbalance de la ecuación discretizada para una variable escalar ϕ esta definido por el residual no escalado. Este puede ser escrito en forma matricial como se muestra en las Ecs. 6-10 y 6-11 o puede ser descrita de manera equivalente en términos de la ecuación discretizada para el escalar ϕ

como se describe en la Ec. 6-12.

$$\begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & A_{\dots} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & A_{\dots} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & A_{\dots} \\ A_{\dots} & A_{\dots} & A_{\dots} & A_{\dots} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_{\dots} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_{\dots} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} R_1 \\ R_2 \\ R_3 \\ R_{\dots} \end{bmatrix} \quad (6-10)$$

$$R_u = \| \mathbf{b} - \mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\phi} \| \quad (6-11)$$

$$a_P \phi_P - \sum_{CeldasP} a_{nb} \phi_{nb} - b_P = R_u \quad (6-12)$$

El residual no escalado R_u proporciona una medida de error en la solución $\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\phi} = \mathbf{b}$. Este residual se expresa en las mismas unidades de la variable que se está calculando. Mide la magnitud absoluta del error en cada celda o punto de la malla en la simulación. Por lo general, se expresa como la norma de algún tipo (por ejemplo, la norma L2). Con el objetivo de proporcionar una medida adimensional que facilite la interpretación del método numérico, este residual debe ser escalado.

El concepto de residual escalado se refiere a una versión normalizada del residual no escalado donde su objetivo es hacer que los residuos sean adimensionales y comparables entre diferentes condiciones o modelos. La escala puede basarse en la magnitud de las variables físicas o en otros parámetros relevantes. De acuerdo con Greenshields and Weller (2022) para reducir la dependencia del residual de la geometría y la variable solución, la escala se puede establecer a partir de las normas $\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\phi}$ y \mathbf{b} dando lugar al residual escalado:

$$R_s = \frac{\| \mathbf{b} - \mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\phi} \|}{\| \mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\phi} - \mathbf{A} \cdot \bar{\boldsymbol{\phi}} \| + \| \mathbf{b} - \mathbf{A} \cdot \bar{\boldsymbol{\phi}} \|} \quad (6-13)$$

Dónde $\| \dots \|$ es la norma de la matriz y $\bar{\boldsymbol{\phi}}$ es el valor medio de $\boldsymbol{\phi}$ en todas las celdas. Cuando se reduce la dependencia de la escala, el residual escalado se puede utilizar para comparar el nivel de error de manera equitativa entre simulaciones a diferentes escalas (Greenshields and Weller, 2022). El solucionador iterativo se detiene cuando se cumple la condición de que el residual absoluto es inferior a una tolerancia absoluta: $R_s < R_{abs}$.

6.3.2 Relajación de la solución iterativa

La relajación es un método que permite mejorar la convergencia de problemas no lineales y evita divergencias cuando se parte de un campo inicial supuesto que podría estar lejos de la solución. Las no linealidades pueden surgir a partir de la no ortogonalidad de la malla, la presencia de términos fuente, la naturaleza no lineal de las ecuaciones modeladas, entre otras, las cuales, generan grandes variaciones de ϕ entre iteraciones. Consecuentemente, se

6. Técnicas de discretización y solución numérica

presentan grandes fluctuaciones en los términos fuente y en los coeficientes que a su vez provocan la divergencia en la solución iterativa (Moukalled et al., 2016).

Para garantizar la convergencia y estabilizar el proceso de solución iterativa, es necesario ralentizar los cambios en ϕ entre las iteraciones aplicando el método de relajación (under - Relaxation). La relajación de la solución puede realizarse de manera explícita después de obtener la solución o implícitamente cuando se incorpora su efecto antes de obtener la solución como se muestra a continuación:

- **Relajación explícita:** En este método, cuando se finaliza cada iteración y se ha obtenido una nueva solución, el valor calculado en cualquier celda es modificado:

$$\phi_P^{new} = \phi_P^{old} + \lambda^\phi (\phi_{calculado}^P - \phi_P^{old}) \quad (6-14)$$

Dónde λ^ϕ es el factor de relajación, el cual, para los métodos explícito e implícito es interpretado de acuerdo con el valor asignado como (Moukalled et al., 2016):

- $\lambda^\phi < 1$: Resulta en una sub - relajación, la cual, ralentiza la velocidad de convergencia y aumenta la estabilidad del cálculo. Por lo tanto, disminuye la posibilidad de divergencia de la solución.
 - $\lambda^\phi = 1$: No se aplica relajación.
 - $\lambda^\phi > 1$: Resulta en sobre - relajación, la cual acelera la convergencia, pero disminuye la estabilidad numérica del cálculo.
- **Relajación implícita:** Existen varios enfoques en este tipo de método de relajación entre los cuales se destacan el enfoque de Patankar, el factor-E y la técnica de relajación transitoria falsa (Moukalled et al., 2016). En la solución del sistema de ecuaciones se utilizó el enfoque de Patankar:

$$\frac{a_P}{\lambda^\phi} + \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} = b_P + \left(\frac{1 - \lambda^\phi}{\lambda^\phi} \right) a_P \phi_P^{old} \quad (6-15)$$

En la Ec. 6-15 el factor de relajación λ^ϕ modifica el coeficiente de la diagonal y el lado derecho de la ecuación sin modificarla matemáticamente. Cuando se utiliza $\lambda^\phi < 1$, se aumenta el dominio de la diagonal del sistema algebraico y se mejora la estabilidad de la solución iterativa.

Según lo expuesto por Jurena (2012), las variables dependientes, como la temperatura, pueden ser subrelajadas mediante el uso de relajación explícita. No obstante, se ha observado que subrelajar las ecuaciones discretizadas resulta más beneficioso, ya que esto conduce a una matriz del sistema más diagonalmente dominante. Dicha característica ejerce un efecto estabilizador en las iteraciones subsiguientes. De acuerdo con esta consideración, se optó por implementar el método de relajación implícita.

6.3.3 Linealización de términos fuente

Los términos de transferencia de calor entre las fases gas y sólida de las ecuaciones 3-6 y 3-18 son funciones no lineales dependientes de la temperatura de cada fase. Estos términos fueron linealizados con el objetivo de estabilizar el proceso iterativo. La linealización del término fuente fue realizada aplicando la expansión en una serie de Taylor alrededor del último valor conocido. Para un volumen de control P, el término fuente puede ser escrito como se indica en la Ec. 6-16:

$$S = S_C + S_P \phi_P \quad (6-16)$$

Dónde S_C denota la parte constante de S y S_P denota el coeficiente de ϕ_P . Si se denota ϕ_P^* como el valor de ϕ_P en la iteración actual, ahora se puede escribir una expansión en serie de Taylor de S sobre ϕ_P^* como:

$$S = S^* + \left(\frac{dS}{d\phi_P} \right)^* (\phi_P - \phi_P^*) \quad (6-17)$$

Esto da como resultado las Ecs 6-18a y 6-18b:

$$S_C = S^* - \left(\frac{\partial S}{\partial \phi_P} \right)^* \phi_P^* \quad (6-18a)$$

$$S_P = - \left(\frac{\partial S}{\partial \phi_P} \right)^* \quad (6-18b)$$

Dónde $(dS/d\phi)^*$ es el gradiente de S evaluado en ϕ_P^* . Para el caso del término fuente para la fase gas S_C y S_P son calculados como:

$$S_C = a_{esp}^g T^s \quad (6-19a)$$

$$S_P = a_{esp}^g T^g \quad (6-19b)$$

Dónde el término a_{esp}^g y a_{esp}^s para las fases gas y sólida, respectivamente, es obtenido en términos del área superficial específica de partícula, el coeficiente de transferencia de calor entre las fases y la porosidad del lecho:

$$a_{esp}^g = h_{gs} S_s \quad (6-20a)$$

$$a_{esp}^s = \left(\frac{\varepsilon_b}{1 - \varepsilon_b} \right) h_{gs} S_s \quad (6-20b)$$

6.4 Algoritmo de solución

El algoritmo diseñado para resolver el sistema de ecuaciones propuesto se describe detalladamente a continuación. La entrada de datos es consolidada en un archivo de Excel que contiene información como las dimensiones de la geometría, el número de volúmenes de control, las condiciones de frontera, condiciones iniciales para las fases gaseosa y sólida, la configuración de la solución (definición de criterios de convergencia y discretización espacial) y la cinética de pirólisis del combustible.

La implementación y resolución del algoritmo se llevaron a cabo utilizando el software MATLAB R2023a. Una vez que se han establecido estos parámetros de entrada, se procede con la ejecución del siguiente algoritmo:

1. Generación de Geometría y Malla Computacional: Se crea la geometría y la malla computacional para la discretización de las ecuaciones.
2. Establecimiento de Esquemas de Discretización y Criterios de Convergencia: Se definen los esquemas de discretización espaciales y los criterios de convergencia para las ecuaciones.
3. Inicialización de Variables de la Solución: Se inicializan las variables de la solución, que incluyen el campo de flujo, coeficientes, propiedades, condiciones de frontera, términos fuente y otros, de acuerdo con las condiciones iniciales.
4. Ciclo Temporal: Inicia el ciclo temporal desde $t = 0$ hasta t_{final} .
 - 4.1. Actualiza el paso de tiempo $t + \Delta t$.
 - 4.2. Establecimiento de los valores iniciales de las variables para el tiempo actual.
 - 4.3. Inicia el ciclo de iteración:
 - 4.3.1. Inicialización del parche de reacción: Simula el encendido del lecho asignando un valor de temperatura dependiente del tiempo, como se detalla en la sección 8.
 - 4.3.2. Cálculo de propiedades para ambas fases.
 - 4.3.3. Obtención de perfiles de temperatura y velocidad.
 - 4.3.4. Solución de las ecuaciones de energía para ambas fases.
 - 4.3.5. Solución de las ecuaciones de conservación de especies para ambas fases.
 - 4.3.6. Cálculo de términos fuente.
 - 4.3.7. Verificación de la convergencia: Si los residuos están por debajo de los valores de criterio, las iteraciones se detienen y se procede al paso 4.5; de lo contrario, se continúa con el paso 4.3.1.
 - 4.4. Actualización de las variables de los balances de masa y energía.
 - 4.5. Almacenamiento de las soluciones del tiempo actual. Si $t < t_{final}$, regresa al paso 4.1; de lo contrario, procede al paso 5.

5. Almacenamiento de Resultados: Se guardan todas las soluciones temporales y resultados obtenidos durante la simulación.

7 Dispositivo experimental para la validación del modelo

Como se detalló en la Sección 2, la cámara de combustión del módulo de producción de ANC para este estudio adopta una configuración plana. Estas cámaras se caracterizan por una disposición espacial confinada, en la cual el bagazo de caña se introduce manualmente desde un costado lateral, a nivel de la parrilla (ver Fig. 2-3). La boquilla de suministro del bagazo permanece abierta de forma continua, lo que conduce a un exceso no controlado de aire durante el proceso. De igual manera, el suministro de aire se regula mediante el tiro natural de la chimenea. Estas condiciones locativas, junto con la falta de control preciso sobre las variables asociadas al suministro de combustible y aire, generan dificultades en las tareas de medición. Este inconveniente, por ende, repercute directamente en el proceso de validación del modelo.

Con el propósito de superar estas limitaciones y ejercer un control sobre las variables mencionadas, se diseñó y construyó un dispositivo experimental. Este dispositivo se concibió para replicar las condiciones de una cámara de combustión plana, pero al mismo tiempo permitir un control adecuado sobre las variables de suministro de aire y bagazo de caña. A continuación, se describe detalladamente el proceso de diseño, construcción y validación de este equipo experimental.

7.1 Diseño del dispositivo experimental

7.1.1 Parámetros de diseño

La cámara de combustión plana fue diseñada siguiendo los parámetros establecidos por Gordillo and García (1992) para este tipo de configuración. Las consideraciones de diseño comenzaron con la evaluación de la capacidad de producción de ANC, el factor de consumo de bagazo, la eficiencia térmica global del módulo de producción de ANC y la humedad del bagazo de caña. Con el propósito de adecuar la cámara de combustión a una escala piloto, se asumió una capacidad de producción de ANC de pequeña escala de 20 kg/h. Los valores correspondientes a los demás parámetros se determinaron con base en el rendimiento

promedio de una cámara plana, de acuerdo con lo reportado por Gordillo and García (1992) y Jader et al. (2018). A partir de estos valores, se calcularon la potencia térmica suministrada, el área de la parrilla y las dimensiones de la cámara de combustión. Las ecuaciones empleadas para calcular estos parámetros se presentan en el Apéndice B.1. Los valores específicos de los parámetros de diseño y las dimensiones de la cámara de combustión se muestran en la Tabla 7-1.

Tabla 7-1: Parámetros de diseño y dimensiones de la cámara de combustión.

Parámetro	Unidad	Valor
Capacidad de producción de ANC	kg/h	20
Factor de consumo de bagazo de caña	kg/kg	2.5
Eficiencia térmica	%	40
Contenido de humedad del bagazo	%	25
Dimensiones de la cámara de combustión		
Volumen	m ³	0.34
Ancho	m	0.47
Longitud	m	0.50
Altura	m	1.48

7.1.2 Alternativas de diseño del dispositivo experimental

Además de considerar las dimensiones de la cámara, el diseño incorporó dos aspectos fundamentales en relación al suministro de bagazo de caña y aire. El diseño conceptual es mostrado en la Fig. 7-1a. En cuanto al suministro de bagazo, se implementó un dosificador en la parte superior de la cámara, desde donde el bagazo es alimentado. Por otro lado, el suministro de aire se realiza desde la parte inferior de la parrilla. Con el objetivo de lograr una distribución uniforme de aire en la cámara, se generaron tres alternativas de diseño, variando la geometría de entrada de aire en la cámara de combustión como se muestra en la Fig. 7-1b a 7-1d.

La primera alternativa de diseño (D1) (Fig. 7-1b, considera una configuración típica de entrada de aire para una cámara de combustión plana. El segundo diseño (D2) Fig. 7-1c, realiza una variante en el ángulo de la entrada de aire con una inclinación aproximada de 15°. Finalmente, el tercer diseño (D3) Fig. 7-1d considera la entrada de aire separada de la cámara. El desplazamiento de aire se realiza a través de un ducto en forma de Y, el cual es conectado por los costados laterales de la cámara en la parte inferior de la parrilla. A partir de estas geometrías se realizaron simulaciones CFD en Ansys CFX para determinar la distribución del flujo de aire considerando una entrada de aire promedio de 4 m/s. Los contornos de velocidad para la sección lateral y superior del equipo mostrados en el apéndice B.1 Fig.B-1 y Fig.B-2, respectivamente. .

Como se observa en las Figs. B-2a B-2b, las alternativas D1 y D2 exhibieron zonas con

7. Dispositivo experimental para la validación del modelo

velocidades de aire cercanas a 0 m/s, abarcando aproximadamente el 25 % del área de la parrilla después de atravesarla. En contraste, el diseño D3 muestra una distribución más uniforme del perfil de velocidad en el interior de la cámara **B-1c**, logrando una mejor distribución en toda el área de la parrilla **B-2c**. Por consiguiente, se optó por el diseño D3 para la construcción del dispositivo experimental.

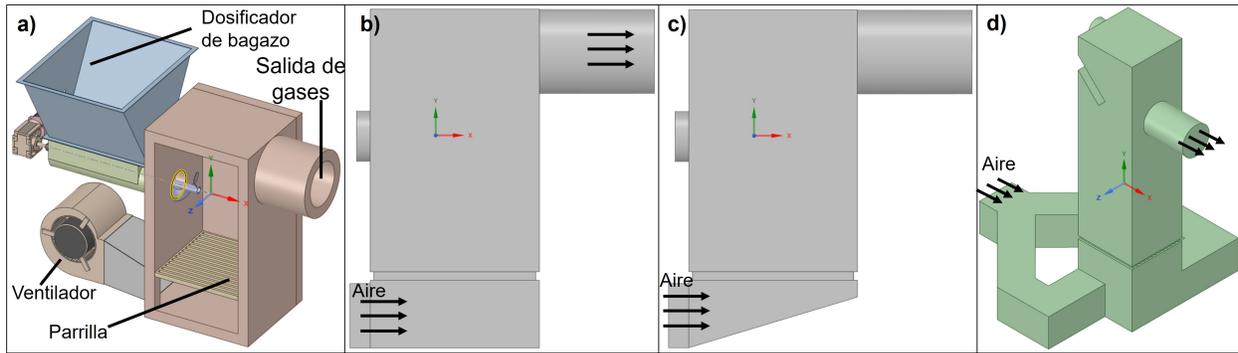


Figura 7-1: Diseño conceptual y alternativas de diseño para la cámara de combustión

7.1.3 Dispositivo experimental

La Figura 7-2 muestra el diseño definitivo del equipo experimental, así como la versión construida en la cual se llevaron a cabo las pruebas de validación. El equipo consta de dosificador para el suministro de combustible, un ventilador centrífugo, ducto de distribución de aire, rampa para la distribución homogénea de las partículas de combustible, cámara de combustión, parrilla, un ducto de homogenización del lecho y dos ductos para la salida de lecho y gases de combustión. En el equipo es posible simular las condiciones de operación de una cámara de combustión plana de un módulo de producción de ANC. Al mismo tiempo es posible controlar el suministro de aire y de combustible. La cámara de combustión se encuentra aislada con ladrillo refractario. Las dimensiones donde se almacena el lecho de combustible y se llevan a cabo las reacciones de degradación térmica son de 500 mm, 500 mm y 476 mm (altura, ancho y la profundidad, respectivamente).

Para calcular el caudal de aire suministrado, se procedió a llenar el equipo con bagazo de caña hasta alcanzar una altura de 0.5 m. En la sección transversal ubicada por encima de la superficie del lecho, se midió la velocidad en nueve puntos equidistantes mediante un anemómetro de hilo caliente. Se obtuvo una velocidad promedio de 0.2044 m/s \pm 0.0527, resultando en un caudal de 0.049 m³/s. En pruebas preliminares, se determinó de igual manera que el consumo de bagazo de caña con un contenido de humedad promedio del 25 % fue de 3kg por minuto. Durante las pruebas de ajuste, se notó una insuficiente evacuación de gases a través del ducto de salida de gases. Como solución, se instaló una chimenea en la parte superior de la cámara como se muestra en la Fig.7-2, lo cual resultó en una mejora significativa en la evacuación de los gases de combustión.

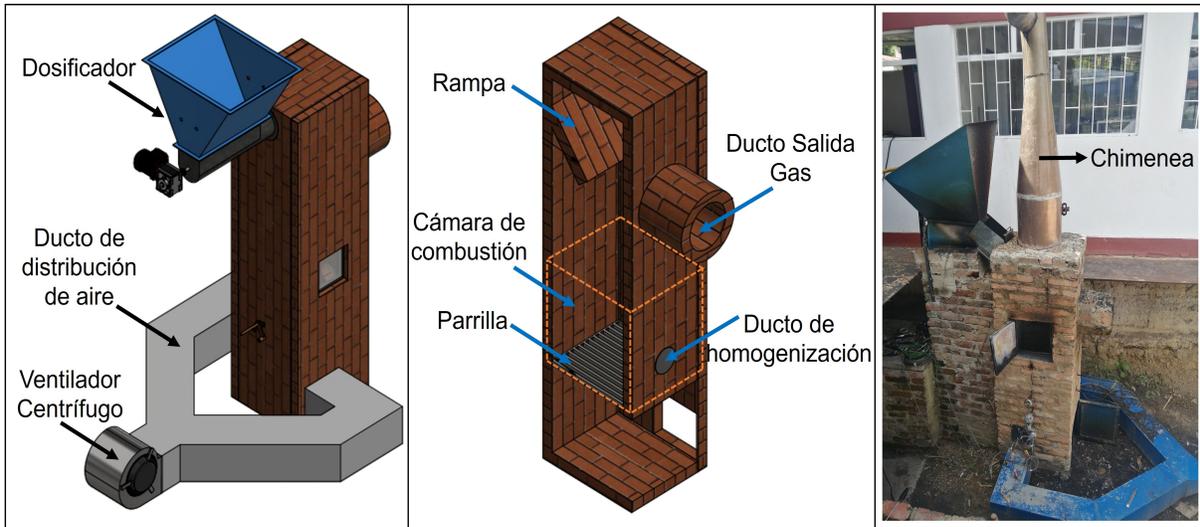


Figura 7-2: Equipo de validación experimental

7.2 Pruebas experimentales

Para validar el modelo matemático se plantearon pruebas experimentales dónde se midió los perfiles de temperatura y la concentración de especies de la fase gas. De igual manera, se reporta la caracterización del combustible en cuanto al tamaño de partícula y contenido de humedad.

7.2.1 Materiales

La caracterización de las partículas de bagazo de caña es fundamental para proporcionar datos confiables al modelo matemático, puesto que el tamaño de las partículas sólidas incide en la transferencia de calor y masa. Además, esta información es importante para el mismo proceso de validación experimental del modelo. Para el presente estudio, los datos de caracterización de las partículas fue realizado y reportado por Plaza (2022), con quien se trabajó en colaboración en las pruebas experimentales. A partir de estos resultados se puede suponer que la geometría de la partícula se asemeja a un prisma rectangular como se muestra en la Fig. 7-3. Los datos de las dimensiones promedio de las partículas son mostrados en la tabla 7-2.

7. Dispositivo experimental para la validación del modelo

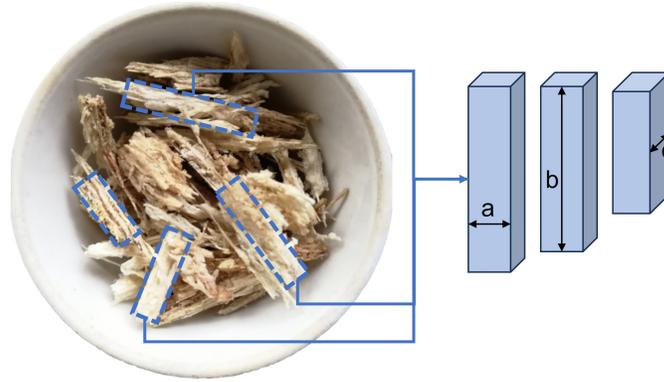


Figura 7-3: Partículas de combustible

Tabla 7-2: Tamaño promedio de partícula

Parámetro	Valor	Sd
a (mm)	11.60	4.99
b (mm)	74.44	10.01
c (mm)	6.20	4.06

7.2.2 Configuración del equipo y mediciones experimentales

El diagrama esquemático del equipo experimental con los puntos de medición es mostrado en la Fig. 7-4. La cámara de combustión fue alimentada desde la parte superior y para obtener un lecho uniforme, se realizó una agitación durante el procedimiento de llenado y el proceso de combustión. Para todas las pruebas, el caudal de aire y bagazo de caña se mantuvo constante a $0.049 \text{ m}^3/\text{s}$ y $3 \text{ kg}/\text{min}$, respectivamente. Las pruebas fueron realizadas por un período aproximado de 15 minutos. La ignición del combustible se realizó desde la parte inferior del lecho utilizando biomasa seca (bagazo de caña).

La medición de temperatura se realiza con 8 termocuplas tipo K fueron instaladas equidistantemente de acuerdo con la altura del lecho y 2 más que fueron colocadas antes de la parrilla y en el ducto de salida de gases (ver Fig. 7-4). La primera termocupla (T1) fue instalada a 50 mm de la parte superior de la parrilla. Las mediciones de gases de combustión incluyen CO , CO_2 y O_2 . La sonda de muestreo fue conectada a un analizador de gases Testo 350. Todas las termocuplas fueron conectadas a un equipo de adquisición de datos Testo 735-2. La frecuencia de medición para cada experimento fue de 5s durante aproximadamente 15 minutos. El contenido de humedad del bagazo de caña fue determinado secando muestras a $105 \text{ }^\circ\text{C}$ durante 24 horas.

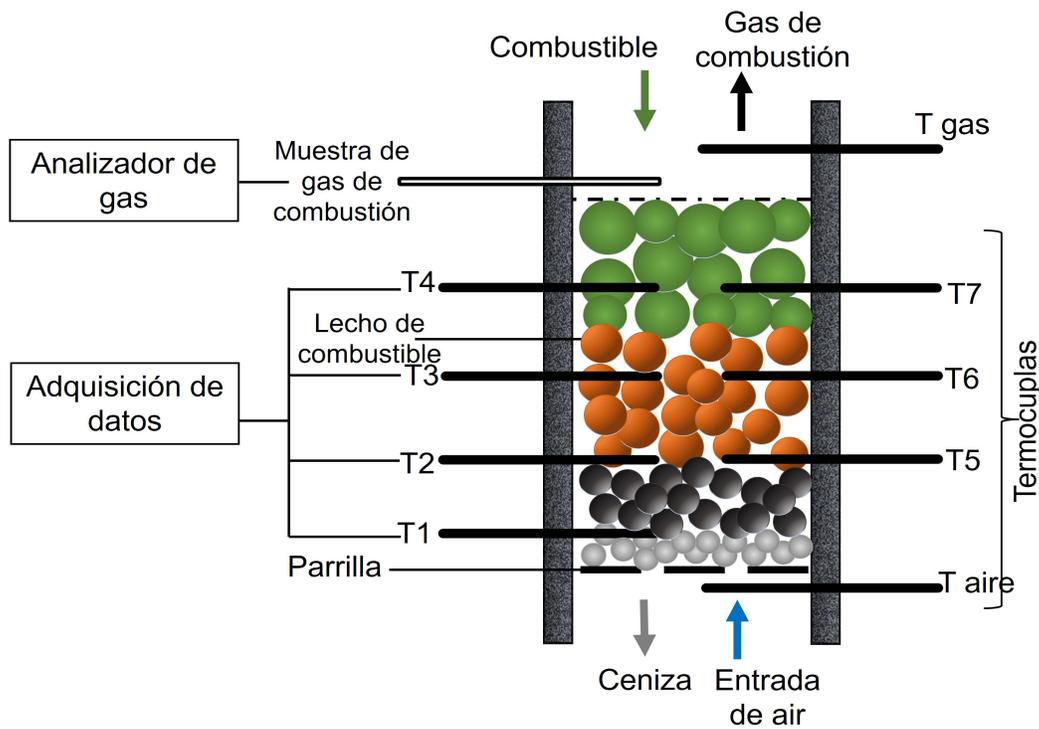


Figura 7-4: Diagrama esquemático de la cámara de combustión con puntos de medición de temperatura y concentración de gases

7.2.3 Pruebas experimentales

Como se muestra en la tabla 7-3, se realizaron un total de once pruebas experimentales dónde en cada una se determinó el contenido de humedad del bagazo de caña. En relación con el contenido de humedad, se utilizaron dos tipos de bagazo cuya humedad oscila en promedio entre 35 % (húmedo) y 10 % (seco). Al analizar los datos, se observó que en la mayoría de las pruebas, el perfil de temperaturas mostraba un comportamiento caótico, convergiendo hacia una única temperatura promedio entre todas las termocuplas instaladas. Detalles sobre este fenómeno son abordados en la sección 7.3. Esta complejidad dificulta la validación del modelo, ya que la uniformidad de temperaturas hace que sea complicado discernir gradientes. No obstante, se identificaron gradientes de temperatura diferenciables en las pruebas P6 y P10. Se eligieron específicamente estas pruebas para la validación del modelo porque ofrecían las condiciones más propicias para un análisis detallado. Además, presentan niveles contrastantes del contenido de humedad (P6 con un alto contenido y P10 con un bajo contenido), permitiendo así una comparación significativa. En la próxima sección, se realiza un análisis de los resultados experimentales basándose en los datos recopilados durante estas dos pruebas.

7. Dispositivo experimental para la validación del modelo

Tabla 7-3: Pruebas experimentales realizadas

Prueba	Contenido de humedad (%)	Sd
P1	30.26	1.32
P2	42.31	1.40
P3	43.05	1.79
P4	36.39	1.04
P5	45.22	1.28
P6	35.4	1.70
P7	10.91	0.66
P8	9.13	1.56
P9	24.13	1.69
P10	4.171	1.02
P11	3.40	0.51

7.3 Resultados experimentales

Las Fig. 7-5 y 7-6 muestran los resultados experimentales de los perfiles de temperatura y fracción volumétrica de especies de gas durante la combustión de bagazo de caña con contenidos de humedad del $35.40\% \pm 1.75$ (P6) y $4.17\% \pm 1.05$ (P11), respectivamente. Los perfiles de temperatura son presentados para los lados derecho (T1, T2, T3, T4) e izquierdo (T5, T6, T7) del reactor así como el perfil promedio de temperatura al interior. En el caso de la combustión de bagazo húmedo (7-5), se observa que la temperatura en la posición T1 aumenta rápidamente hasta una temperatura de $670\text{ }^\circ\text{C}$ en 145 s. Durante el experimento se registraron valores máximos de temperatura de $775\text{ }^\circ\text{C}$. Una vez se ha iniciado la ignición, el frente de flama se desplaza por cada termopar, donde se observan variaciones en el perfil de temperatura en ambos lados del reactor.

El perfil de temperatura fluctuante al interior del lecho puede ser evidenciado en las figuras 7-5c y 7-6c cuando se promedian las posiciones T2/T5 (Tm2), T3/T6 (Tm3) y T4/T7 (Tm4). Pueden existir las siguientes razones para las fuertes fluctuaciones observadas en el lecho:

- La diferencia y la irregularidad en el tamaño de partícula, así como una alimentación no constante del combustible, conllevan a que el proceso de formación del lecho no sea uniforme. Por lo tanto, se forman y destruyen canales en el lecho que provocan una combustión desigual y se observa una naturaleza caótica del proceso que altera el patrón de propagación de la flama. Este fenómeno ha sido observado en otros estudios, tal como se reporta en los estudios realizados por (Yang et al., 2003).
- Otra posibilidad es el cambio de la posición de la punta del termopar. La alta temperatura de combustión y el peso del combustible pueden provocar que las sondas entren y

salgan de contacto con el combustible constantemente.

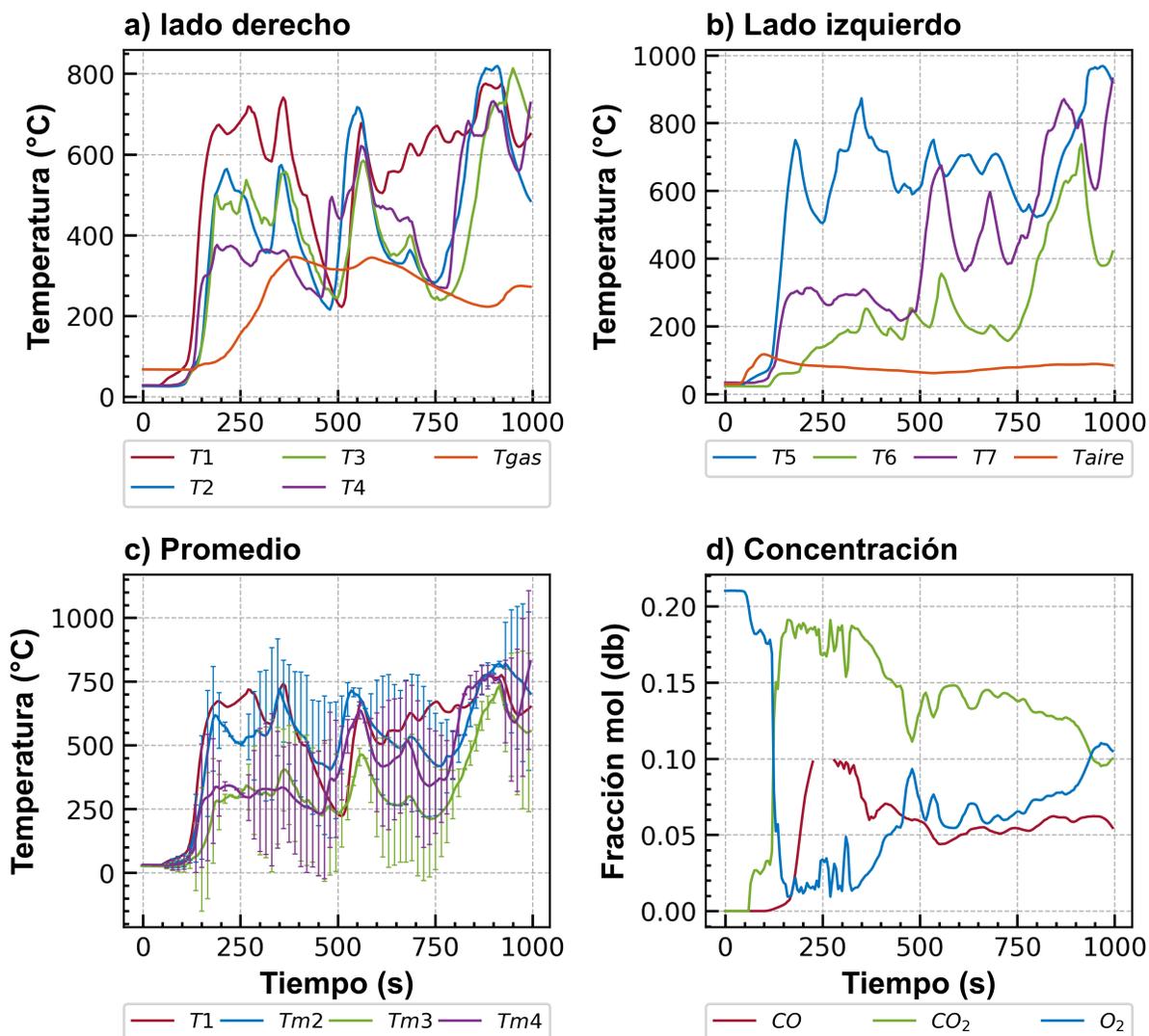


Figura 7-5: Combustión de bagazo de caña con contenido de humedad de 35.40 %. Perfiles de temperatura de para: a) lado derecho del reactor, b) lado izquierdo del reactor, c) promedio y d) perfil de concentración de especies de gas.

Por otra parte, la Fig. 7-5c permite diferenciar dos zonas de alta y baja temperatura durante los primeros 300 s del proceso correspondientes a las posiciones inferiores (T1, Tm2) y superiores del lecho (Tm3, Tm4), respectivamente. Durante este mismo periodo de tiempo las concentraciones de CO y CO₂ aumentan instantáneamente de 0 a 0.19 y 0.10 en fracción volumen, respectivamente, mientras que el O₂ cae rápidamente del 0.21 al 0.02. Posterior a este periodo de tiempo, se observa una disminución de temperatura en las posiciones inferiores y un aumento en las posiciones superiores. Lo anterior se correlaciona con los datos

7. Dispositivo experimental para la validación del modelo

reportados en la Fig 7-5d, dónde en este periodo de tiempo las concentraciones de CO y CO₂ dejan de ser constantes y empiezan a disminuir mientras que la concentración de O₂ empieza a aumentar.

El comportamiento mencionado anteriormente está relacionado con el desplazamiento del frente de llama (Zhou et al., 2005), en este caso, hacia la superficie del lecho, dónde se observa un aumento de la temperatura en los puntos de medición cercanos esta zona. Este fenómeno puede ser inducido en el experimento por la homogenización del lecho, la cual se realiza con el objetivo de evitar compactaciones, mitigar la formación de canales preferentes y para que el combustible pueda ser suministrado de una manera continua. Este proceso fue realizado golpeando el lecho desde la parte inferior, lo cual puede ocasionar una mayor difusión de O₂ que no es consumida por el carbonizado (Fig. 7-5d) y el posterior descenso de la temperatura en la posición T1 (Fig. 7-5c). Una vez se ha homogenizado el lecho de partículas, a partir de los 550 s se pueden evidenciar las dos zonas de temperatura iniciales, las cuales presentan fuertes fluctuaciones de temperatura y tienden a llegar a un mismo equilibrio térmico correspondiente a la temperatura máxima desarrollada durante la combustión.

En el caso de la combustión con bagazo seco (Fig. 7-6), se observa que la temperatura en la posición T1 aumenta rápidamente hasta 800°C en 135 s. Al mismo tiempo se observa que la concentración de O₂ disminuye de 0.21 a 0, mientras que el CO₂ aumenta súbitamente a un valor casi constante de 0.22. Después de un período de tiempo de 150 s aproximadamente se registra la producción de CO, la cual, de manera similar que el CO₂ alcanza un valor constante aproximado de 0.09. Durante un período de 400 s se pueden observar las zonas de alta (T1, Tm2), media (Tm3) y baja temperatura (Tm4), correspondientes a la zona de desplazamiento del frente de llama. Posterior a este período de tiempo, la temperatura sigue en aumento hasta los 550 s dónde se presenta una disminución en la temperatura para todas las posiciones, lo cual puede ser ocasionado por el suministro de bagazo fresco el cuál esta a una temperatura menor que la del lecho.

La combustión con bagazo húmedo tiende a generar perfiles más caóticos en la temperatura y concentración de especies a diferencia de la combustión con bagazo seco, donde se observan perfiles más uniformes. El alto contenido de humedad en el bagazo aumenta el tiempo de residencia en la cámara de combustión. A nivel experimental, esto propició la aglomeración de partículas que conllevó a realizar procesos de homogenización de forma consecutiva alterando de manera drástica los perfiles de temperatura y concentración de especies.

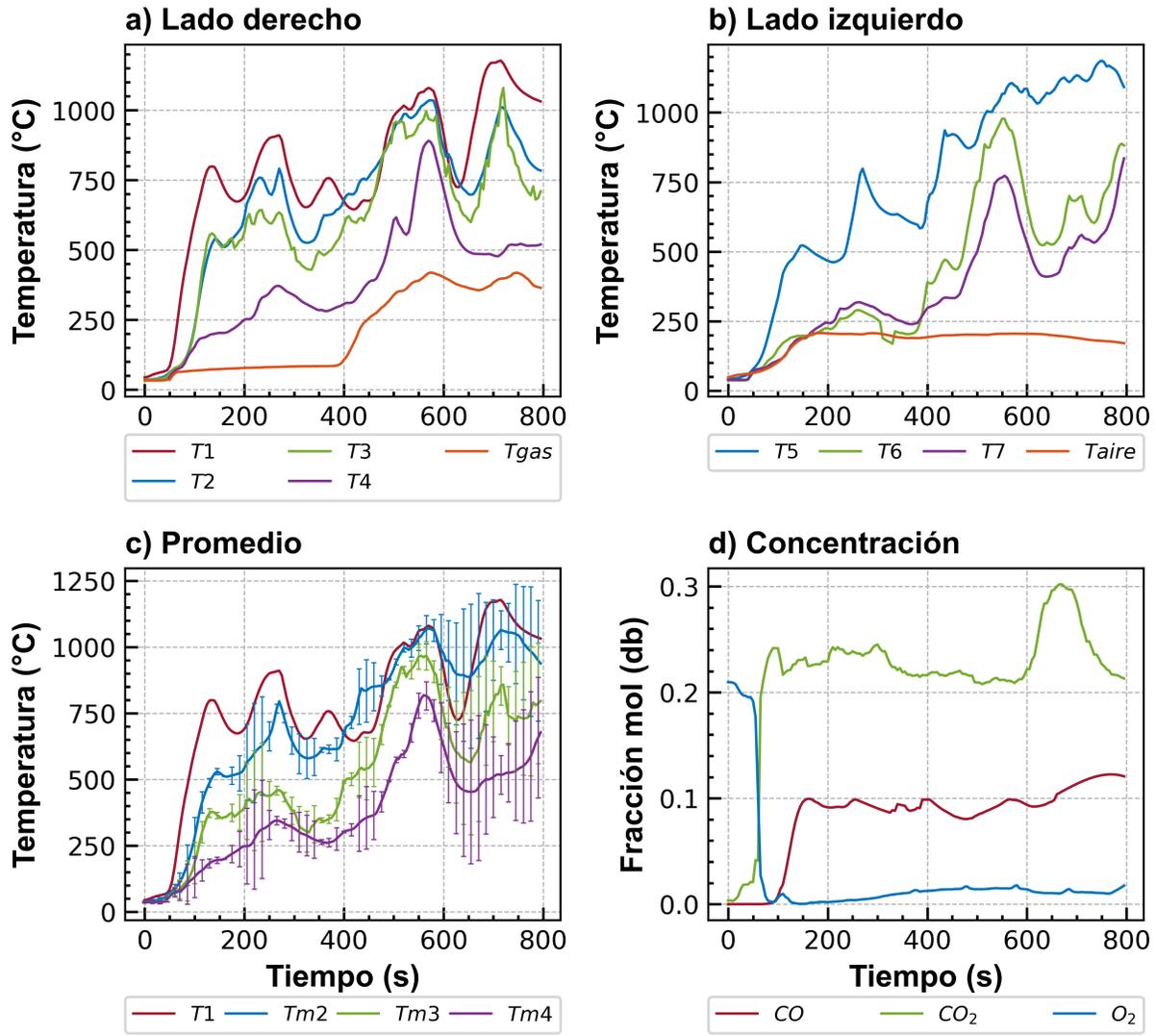


Figura 7-6: Combustión de bagazo de caña con contenido de humedad de 4.17%. Perfiles de temperatura para: a) lado derecho del reactor, b) lado izquierdo del reactor, c) promedio y d) concentración de especies de gas.

8 Resultados del modelo matemático y validación

En este capítulo se muestran los resultados obtenidos con el modelo desarrollado y los datos obtenidos son comparados con los datos experimentales.

8.1 Análisis de malla

Para determinar el número de volúmenes finitos y el paso de tiempo con los que se efectuaron las simulaciones, se realizaron pruebas para pasos de tiempo de 0.25 s y 0.5 s, donde el número de volúmenes fue variado de 500 a 1000. Para comparar los valores de las simulaciones se tomó los valores experimentales correspondiente a la termocupla T1 (ver Fig.7-4) en la prueba 3 donde se evidenciaron valores estables para esta posición. El análisis fue realizado durante 200 s del proceso de combustión y se calculó el error absoluto promedio. Los resultados son mostrados en la figura 8-1.

Un mayor margen de error con respecto al dato experimental es obtenido cuando se utiliza un paso de tiempo de 0.5 s, el cual, es propagado a medida que se incrementa el tamaño de malla (Fig. 8-1 a, c). Al disminuir el paso de tiempo a 0.25 s el error se disminuye, pero se mantiene la tendencia de propagación del error al aumentar el tamaño de malla. De acuerdo con Jurena (2012), este comportamiento se debe al esquema de discretización utilizado. Generalmente los esquemas de discretización de un orden superior se acercan a la solución exacta de manera más rápida que los esquemas de un orden inferior a medida que se refina la malla. En este caso, se implementó un esquema de primer orden para el término convectivo y uno de segundo orden para los términos difusivos, aunque los cálculos fueron realizados con precisión doble. Por otra parte, cuando los pasos de tiempo son más largos tienden a producir resultados oscilatorios de las iteraciones debido a los grandes valores de los términos fuente. Por lo tanto, los pasos de tiempo más cortos ayudan a resolver este tipo de situaciones (Jurena, 2012), aunque aumenta el tiempo de cálculo.

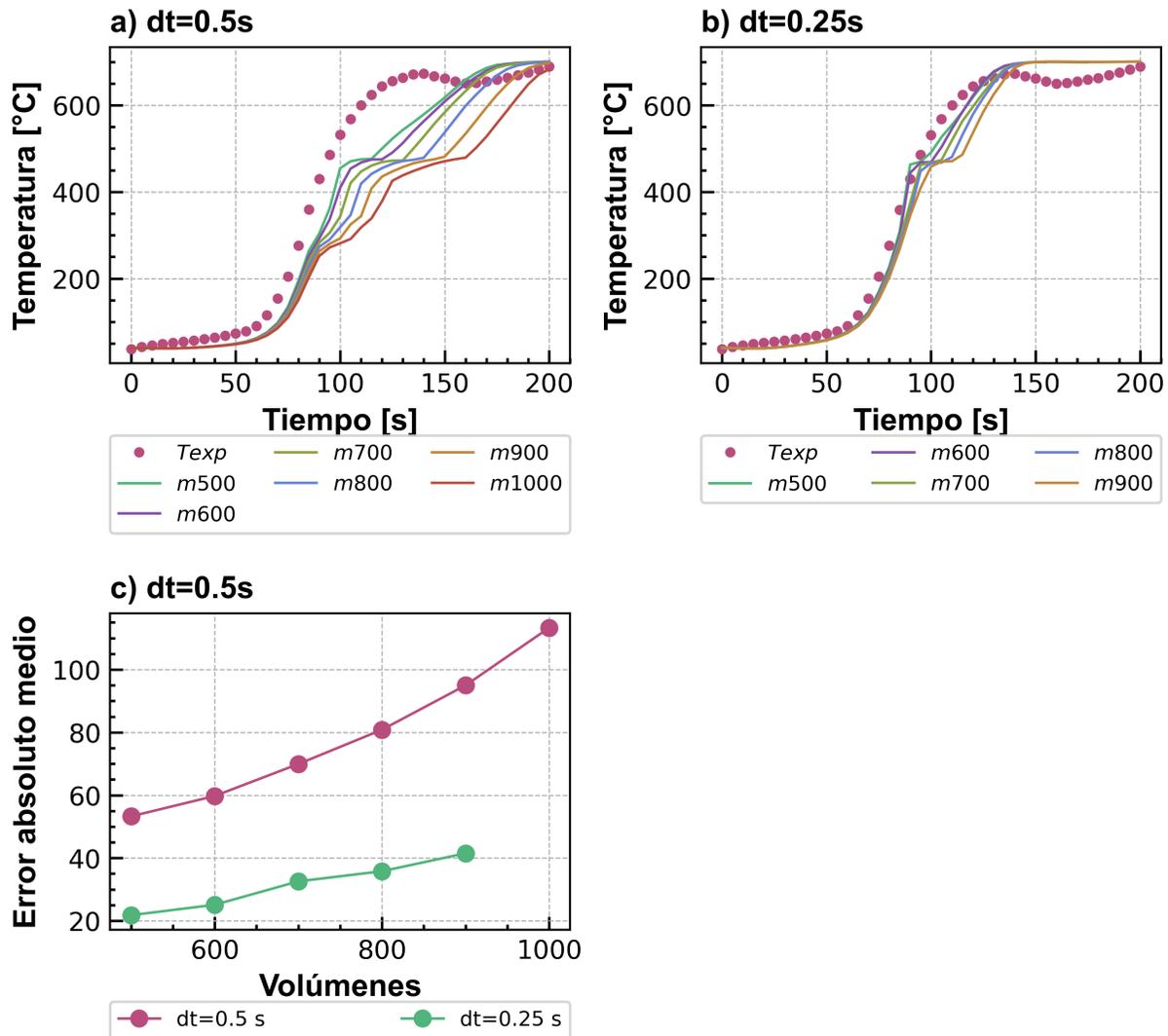


Figura 8-1: Perfiles de temperatura experimental y simulados con diferentes tipos de malla para a) 0.5 s y b) 0.25 s. c) Error absoluto medio para diferentes tipos de malla utilizando dos pasos de tiempo: 0.5 s y 0.25 s.

8.2 Configuración de las simulaciones

La siguiente sección describe los valores de las condiciones iniciales, los datos de entrada y las configuraciones realizadas con las cuales se ejecutaron las simulaciones.

8.2.1 Condiciones iniciales

Como agente oxidante se utilizo aire a temperatura ambiente. Las propiedades y condiciones iniciales son mostradas en la tabla **8-1**. Por otra parte, en la tabla **8-2** se muestran las propiedades utilizadas en la fase sólida, las cuales incluyen el análisis próximo y ultimo del combustible, las dimensiones y porosidad tanto del lecho como de las partículas y finalmente se muestra las propiedades del carbonizado de bagazo de caña. Las simulaciones fueron realizadas considerando que el lecho inicialmente está lleno de biomasa.

Los escenarios simulados se refieren a aquellos descritos en la sección 7.2.3, que ahora se designan como Caso 1 para P6 (bagazo húmedo) y Caso 2 para P11 (bagazo seco). Ambos casos de simulación fueron realizados con un paso de tiempo de 0.25 s durante 300s. Los datos son almacenados con una frecuencia de 5s. En total se resolvió un sistema de 13 ecuaciones diferenciales parciales, dónde el esquema de discretización, los valores de los factores de relajación y el criterio de convergencia utilizado (residual absoluto) para cada ecuación son mostrados en la tabla **8-3**. Los factores de relajación fueron asignados mediante simulaciones de prueba y error, ajustando su valor para lograr la convergencia de la solución.

Tabla 8-1: Propiedades iniciales para fase gas.

Variable	Unidad	Valor (Caso 1)	Valor (Caso 2)
Caudal	m ³ /s	0.049	0.049
Temperatura	K	298.15	298.15
Presión	Pa	101325	101325
Humedad relativa	%	0	0
O ₂	%	0.21	0.21
N ₂	%	0.79	0.79

Tabla 8-2: Propiedades iniciales para fase sólida.

Variable	Unidad	Valor (Caso 1)	Valor (Caso 2)	Referencia
Temperatura	K	303.15	303.15	--
Calor específico	kJ/kgK	1.76	1.76	--
Análisis próximo				
Humedad (ar)	%w	35.40	4.17	Gómez et al. (2008)
Materia volátil (db)	%w	78.27	78.27	
Carbón fijo (db)	%w	18.48	18.48	
Ceniza (db)	%w	3.25	3.25	
Análisis último (daf)				
Carbono	%w	53.37	53.37	Gómez et al. (2008)
Hidrógeno	%w	4.72	4.72	
Oxígeno	%w	41.91	41.91	
Lecho de combustible				
Porosidad	m	0.6	0.6	Verissimo et al. (2020)
Longitud	m	0.5	0.5	--
Ancho	m	0.5	0.5	--
Profundidad	m	0.5	0.5	--
Dimensiones y propiedades de partícula de combustible				
Longitud	m	0.0744	0.0744	Plaza (2022)
Ancho	m	0.0116	0.0116	
Profundidad	m	0.0062	0.0062	
Densidad	kg/m ³	579	579	Canedo et al. (2021)
Porosidad	m ³ /m ³	0.73	0.73	Canedo et al. (2021)
Carbonizado				
Carbono (db)	%w	66.52	66.52	Gómez et al. (2008)
Hidrógeno (db)	%w	5.11	5.11	
Oxígeno (db)	%w	2.57	2.57	
Ceniza (db)	%w	25.78	25.78	
Densidad	kg/m ³	250	250	Verissimo et al. (2020)
Porosidad	m ³ /m ³	0.003	0.003	Verissimo et al. (2020)
Entalpía de formación	J/kg	-6760598.95	-6760598.95	--

8. Resultados del modelo matemático y validación

Tabla 8-3: Esquemas de discretización, factores de relajación y criterio de convergencia asignados a las ecuaciones.

Ecuación	Esquema de discretización	Factor de relajación	Residual absoluto
Energía fase gas	UDS	0.99	1.00E-06
Energía fase sólida	Power Law	0.99	1.00E-06
CO	UDS	0.98	1.00E-06
CO ₂	UDS	0.98	1.00E-06
CH ₄	UDS	0.98	1.00E-06
H ₂	UDS	0.98	1.00E-06
H ₂ O	UDS	0.98	1.00E-06
O ₂	UDS	0.98	1.00E-06
Tar	UDS	0.98	1.00E-06
Húmedad	Power Law	0.20	1.00E-06
Volátiles	Power Law	0.35	1.00E-06
Carbonizado	Power Law	0.80	1.00E-06

8.2.2 Condiciones de frontera

A continuación, se detalla el proceso de ajuste de las condiciones de frontera para tener en cuenta el encendido del lecho, así como el enfoque aplicado para abordar la pérdida de calor en la parte superior del mismo.

- Ignición:** En la parte inferior del lecho ($y = 0$) se debe asignar una temperatura de valor conocido para las Ecs. 3-8 y 3-22, las cuales corresponden a las condiciones de frontera de la ecuación de energía para las fase gas y sólida, respectivamente. Este valor de temperatura simula el efecto de encendido asignando un valor específico para cada paso de tiempo hasta un tiempo límite. Para determinar el incremento de la temperatura cuando se da inicio al proceso de combustión, se tomaron los datos experimentales de tiempo y temperatura hasta dónde se observa una velocidad de calentamiento uiforme ($350^{\circ}\text{C} \pm 10$). A partir de estos datos, se realizó la extrapolación de la curva y se obtuvo una función polinómica de grado 5 para representar el calentamiento inicial del lecho y obtener el valor de temperatura para cada paso de tiempo. Los coeficientes del polinomio y el tiempo de proceso hasta el cual aplica para los casos de simulación son mostrados en la tabla 8-4. Una vez se ha completado el tiempo de ignición, la condición de frontera tipo Dirichlet es cambiada a una condición tipo Neumann nula.
- Pérdida de calor en la parte superior del lecho:** En la parte superior del lecho ($y = H$), cómo se observa en las figuras 7-5a y 7-6a, en la posición de los termopares que están por encima y en la parte superior del lecho (Tgas y T4, respectivamente), presentan una temperatura mucho menor que las del interior (T1-T3). La disminución

de la temperatura se atribuye principalmente a la introducción de combustible húmedo y a las pérdidas de calor por radiación. Como resultado, es necesario establecer un valor de temperatura en la sección que se encuentra por encima del lecho y asumir que este valor es igual en la superficie del lecho. Este valor se representa como T_∞ en la Ec. 3-9 y T_0^s en la Ec. 3-21 y varía con cada paso de tiempo. Al igual que en el caso anterior, para determinar este valor de temperatura en la parte superior del lecho, se implementó una función polinómica promedio a partir de los datos experimentales del termopar “Tgas”. Los coeficientes de la función son mostrados en la tabla 8-4.

Tabla 8-4: Coeficientes para polinomios de ignición y de pérdida de calor.

Coeficiente	Caso 1	Caso 2	Pérdida de calor
a0	2.4393E-05	-1.6295E-05	-1.3971E-07
a1	-2.3370E-03	4.7695E-03	8.4767E-05
a2	6.5408E-02	-2.4081E-01	-1.2041E-02
a3	1.4791E-01	3.8889E+00	6.3111E-01
a4	3.1189E+02	3.1326E+02	2.9327E+02
R^2	0.9998	0.9947	0.9971
Tiempo (s)	85	70	300

8.3 Resultados de simulaciones

A continuación se presentan los resultados de las simulaciones para el caso 1 presentado en la sección 8.2.1. A partir de los resultados de esta simulación se realizan las discusiones para las diferentes variables analizadas. La validación del modelo, es realizada considerando los resultados de las simulaciones de los dos casos.

8.3.1 Temperatura de fase gas y fase sólida

En la figura 8-2 se muestra la distribución promedio de la temperatura en diversas secciones transversales para las fases gaseosa y sólida a cinco alturas distintas del lecho: P1 = 0.05 m, P2 = 0.15 m, P3 = 0.30 m, P4 = 0.40 m y Pout = 0.50 m. De igual manera, en la Fig. 8-3 se muestran los contornos bidimensionales de temperatura para ambas fases durante el tiempo de simulación. El incremento inicial de temperatura en el lecho se debe a la asignación de la condición de frontera en la parte inferior del lecho. Una vez se ha completado el tiempo de ignición a los 80 s, en la posición P1, la temperatura aproximada es de 280°C y 160°C para la fase gas (FG) y fase sólida (FS), respectivamente. De igual manera, durante este período de tiempo se observa un mayor valor de temperatura en la fase gaseosa como se evidencia en el contorno de temperatura con t=50 s y 100 s (ver Fig. 8-3). La menor temperatura en

8. Resultados del modelo matemático y validación

la fase sólida es por la energía que se usa en el secado, dónde el contenido de humedad del combustible actúa como una resistencia para el calentamiento del lecho.

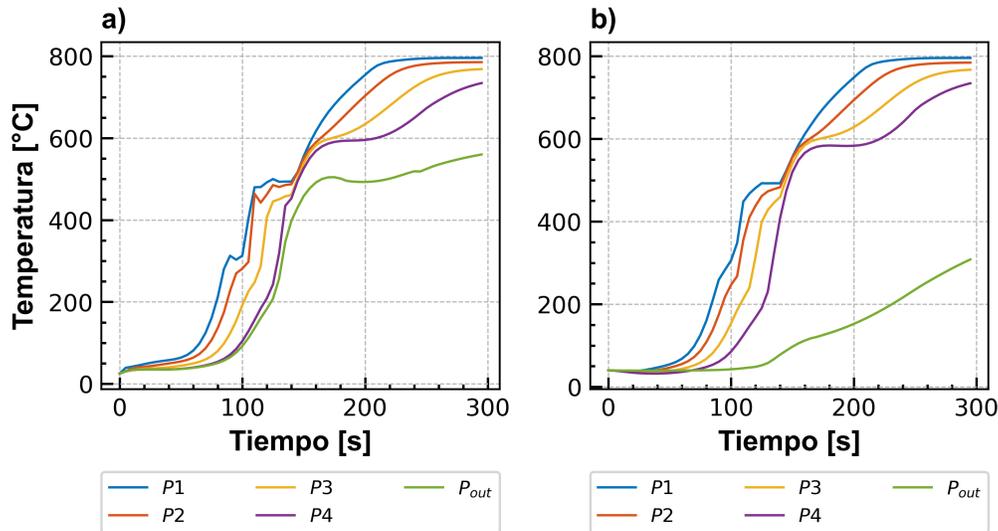


Figura 8-2: Distribución de temperaturas en la cámara de combustión para: a) fase gas y b) fase sólida. Distancia desde la parte inferior del lecho $P1 = 0.05$ m, $P2 = 0.15$ m, $P3 = 0.30$ m, $P4 = 0.40$ m y $P_{out} = 0.50$ m

Las reacciones homogéneas tienen lugar a partir de los 75 s, donde tiene inicio el proceso de pirólisis a 120°C . A partir de este tiempo y hasta un tiempo de 105 s, estas reacciones son las responsables del incremento de la temperatura en el lecho, por lo tanto, esto también explica el mayor valor de temperatura en la fase gaseosa. Sin embargo, desde de los 105 s, se presenta un fuerte incremento de temperatura, donde los gradientes de temperatura entre las posiciones (P1-P4) tienden a ser uniformes para ambas fases. Este incremento se debe al inicio de la reacción heterogénea y el desplazamiento del frente de llama hacia la parte superior del lecho, el cual es evidenciado en los contornos de temperatura de ambas fases (contornos más oscuros, $t = 140$ s, 150 s en la Fig. 8-3). Finalmente, a los 220 s, se puede apreciar que el lecho alcanza el estado estacionario y no hay cambios significativos en el perfil de temperatura (Fig. 8-3, $t = 200$ s, 250 s y 300 s).

Por otra parte, se observa que en la salida del lecho las temperaturas son menores a diferencia de las otras posiciones, lo cual es consecuencia de la condición de frontera aplicada. Esta condición en la parte superior del lecho para ambas fases junto con la condición de pérdida de calor por las paredes de la cámara conduce a la generación de los gradientes de temperatura en el lecho y provoca que el perfil de temperatura sea curvo (Fig. 8-3). No obstante, a partir de los 200 s de simulación, la temperatura tiende a ser casi homogénea en todo el dominio del lecho.

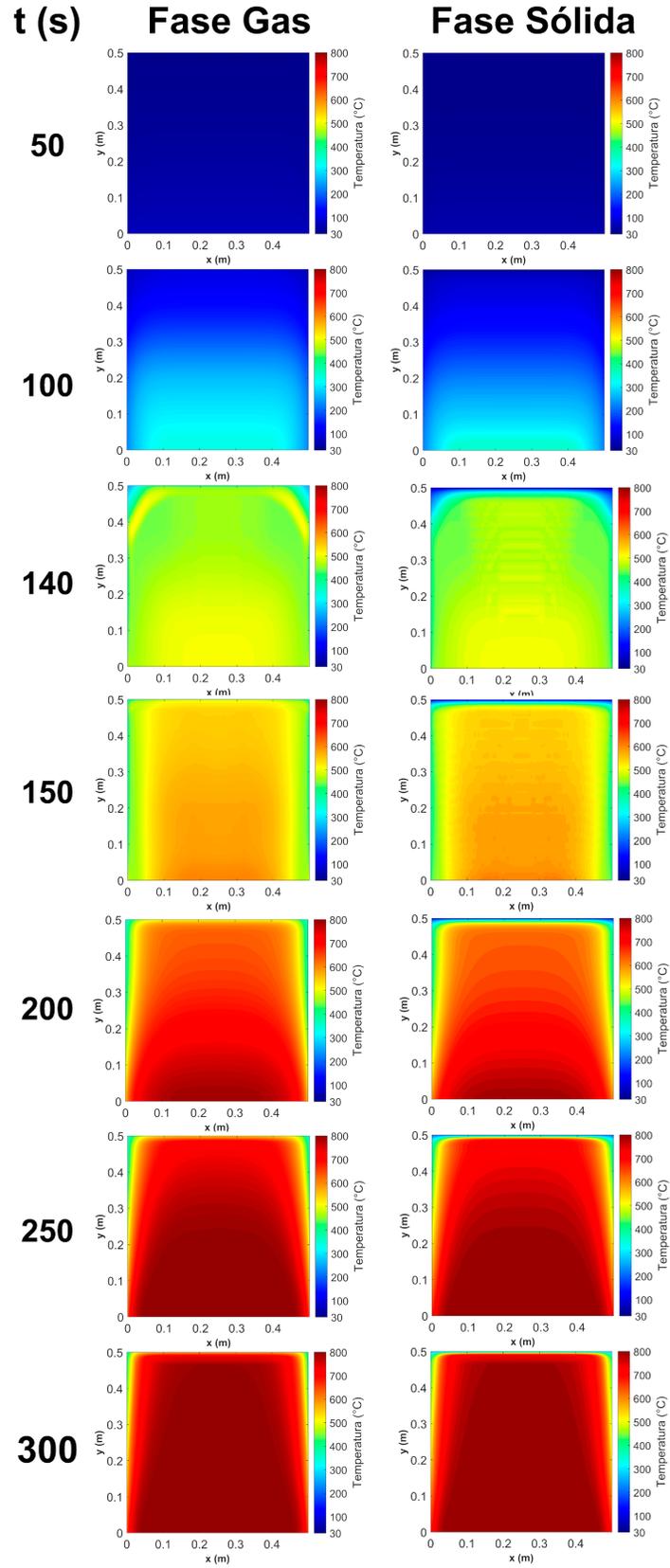


Figura 8-3: Contornos de temperatura para fase gas y fase sólida

8.3.2 Composición de especies de la fase gas

En la figura 8-4 se muestra la distribución promedio de las especies de la fase gas en el lecho para las mismas 5 alturas descritas en el análisis anterior. Del mismo modo, en las Fig. 8-5 y 8-6 se muestran los contornos bidimensionales de cada especie durante el tiempo de la simulación. Durante el tiempo de calentamiento del combustible se produce el proceso de secado del combustible observándose un aumento en la concentración de la humedad en la fase gas alcanzando una fracción volumétrica máxima de 0.03 como se puede observar en la Fig. 8-4e.

El proceso de formación de las demás especies comienza con el proceso de pirólisis a una temperatura de 120 °C, la cual se alcanza en un lapso de 75 segundos. Desde este periodo de tiempo y hasta los 105 s no se presenta una formación significativa de especies (Fig. 8-4) y esto se da como consecuencia de la baja temperatura en la posición P1 (348 °C, ver Fig. 8-2). La formación más importante de especies se da cuando inicia la reacción heterogénea ($t = 105$ s), dónde se forman principalmente CO, CO₂ y H₂O, además se produce un fuerte consumo de O₂ (Fig. 8-4a, b, e, f). A partir de este punto, como se muestra en la figura 8-4c y 8-4d, en la posición P1, la producción de CH₄ y H₂ se detiene, mientras que los alquitranes (tar) son destruidos. El incremento de temperatura y la alta difusión de O₂ en esta sección del lecho son causantes de este comportamiento. Es decir, hay una destrucción casi instantánea de estas especies, la cual es observable hasta la posición P3.

La principal formación de las especies CO, CO₂ y H₂O es producto de la ocurrencia de la reacción heterogénea del carbonizado con el oxígeno (Ec. 5-17) y de la misma forma, de la relación de producción de CO/CO₂. Cuando se da la condición de una alta temperatura y disponibilidad de O₂, esta reacción se da de una manera veloz lo que produce una rápida destrucción del carbonizado formado y un desplazamiento del frente de reacción hacia las regiones intermedias y superiores del lecho. Este fenómeno puede ser evidenciado en los contornos bidimensionales de la distribución de especies de la Fig. 8-5 y 8-6 en el lapso de tiempo igual a 140 s. En este periodo, se presenta una formación pronunciada de CO₂ a una altura del lecho entre 0.15m y 0.48 m y el oxígeno que estaba presente en el lecho sufre un decrecimiento súbito. Así mismo, se observa un fuerte incremento de la temperatura en casi toda la totalidad del lecho como se muestra en la Fig. 8-3 ($t = 140$ s).

Una vez se ha consumido la mayor parte del carbonizado ($t = 150$ s), la producción de CO, CO₂ y H₂O es localizada en la parte inferior del lecho donde hay más disponibilidad de oxígeno (P1) y siguen sucediendo reacciones de formación y destrucción de carbonizado. Estas reacciones tienen lugar hasta un tiempo aproximado de 220s, dónde hay un agotamiento del carbonizado que conlleva a una mayor difusión de O₂ en la posición P1 (Fig. 8-4f). Por otra parte, en el resto de las posiciones (P2, P3, P4 y Pout) del lecho se presenta una ausencia de oxígeno, lo cual inhibe la producción de estas especies y se alcanza el estado estacionario.

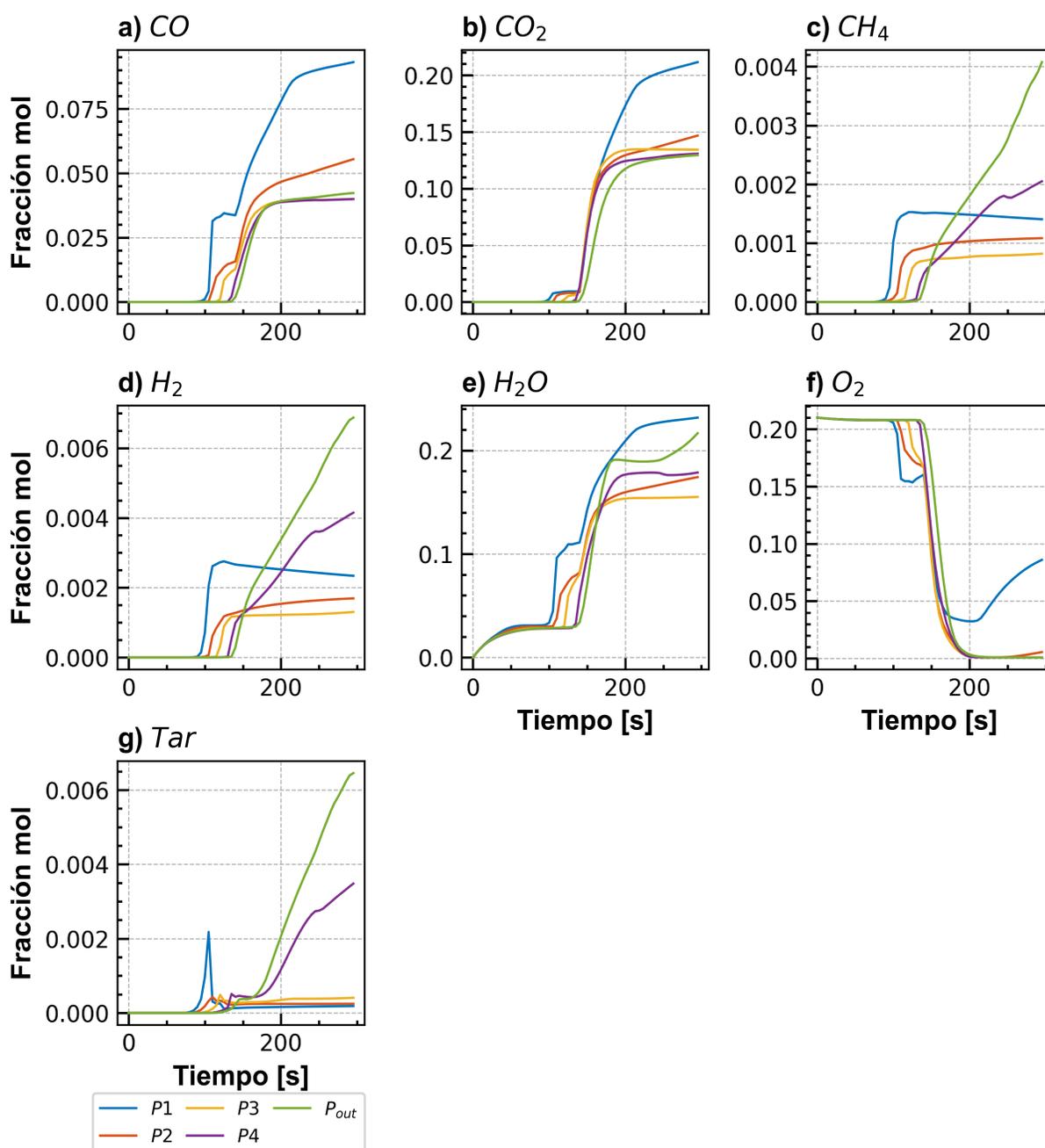


Figura 8-4: Distribución de especies de la fase gas en el lecho para diferentes alturas. Distancia considerada desde la parte inferior del lecho: P1 = 0.05 m, P2 = 0.15 m, P3 = 0.30 m, P4 = 0.40 m y Pout = 0.50 m

Sin embargo, a partir de los 250 s en la posición P1 se observa un aumento levemente progresivo en la producción de CO, CO₂ y H₂O (Fig. 8-4 a, b y e, respectivamente), el cual es evidenciado de igual manera en la Fig. 8-5, en los extremos inferiores del reactor. Este aumento está correlacionado con inestabilidades numéricas que comienzan a presentarse

8. Resultados del modelo matemático y validación

cuando el sistema tiende a un estado estacionario. A medida que se realiza cada iteración temporal, tienden a generarse pequeñas fracciones de la especie, lo cual se va propagando.

Por otra parte, la suma de factores como la ausencia de oxígeno, una temperatura aproximada de 600°C, el cese de las reacciones heterogéneas y la disponibilidad de biomasa en la parte superior del lecho (Posiciones P4 y Pout), propiciaron la formación de las especies CH₄, H₂ y Tar en esta zona después de transcurridos 150 s, como se evidencia de manera similar en la Fig. **8-6** (t=200s-300s).

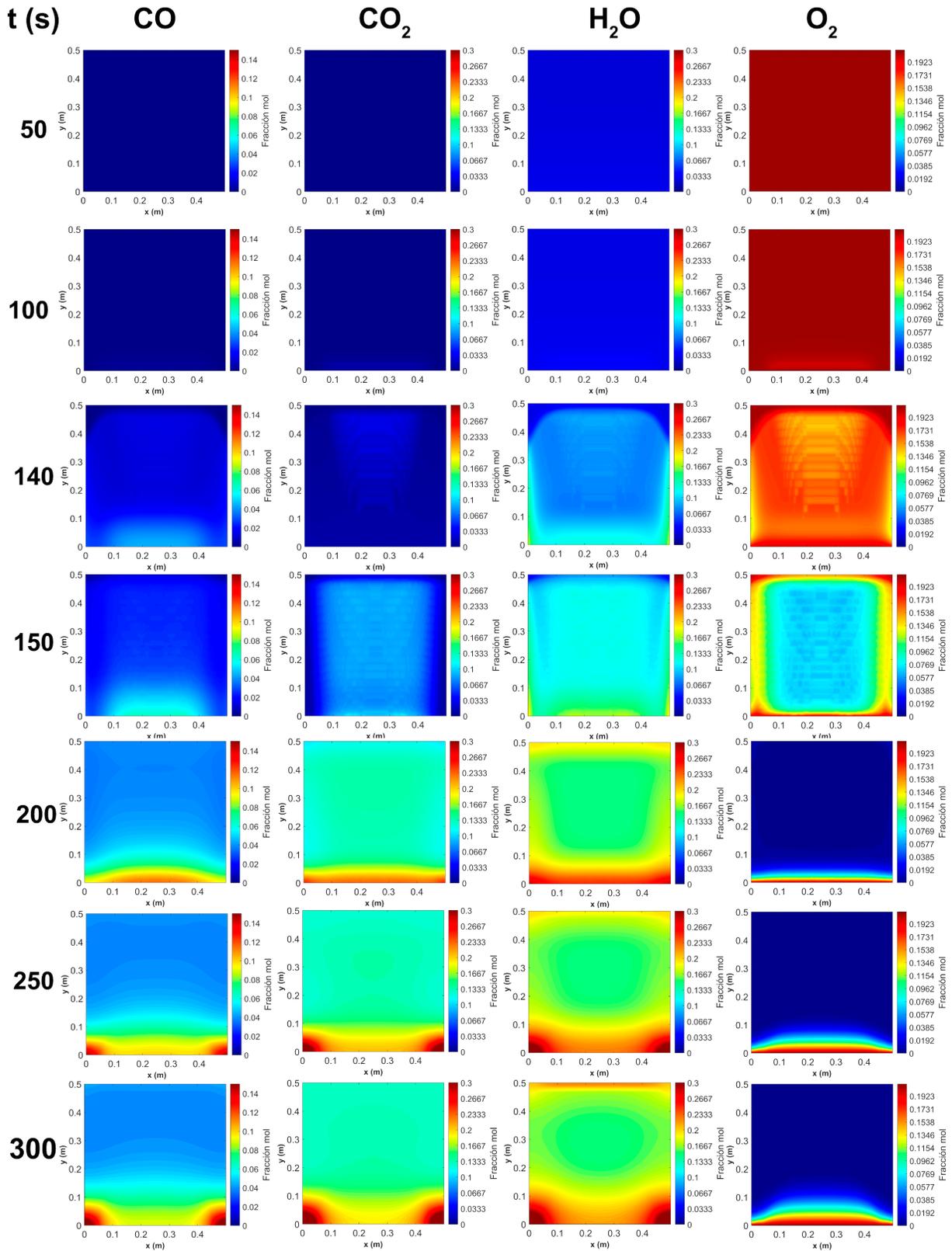


Figura 8-5: Contornos de concentración de especies para fase gas: CH_4 , H_2 , y Tar

8. Resultados del modelo matemático y validación

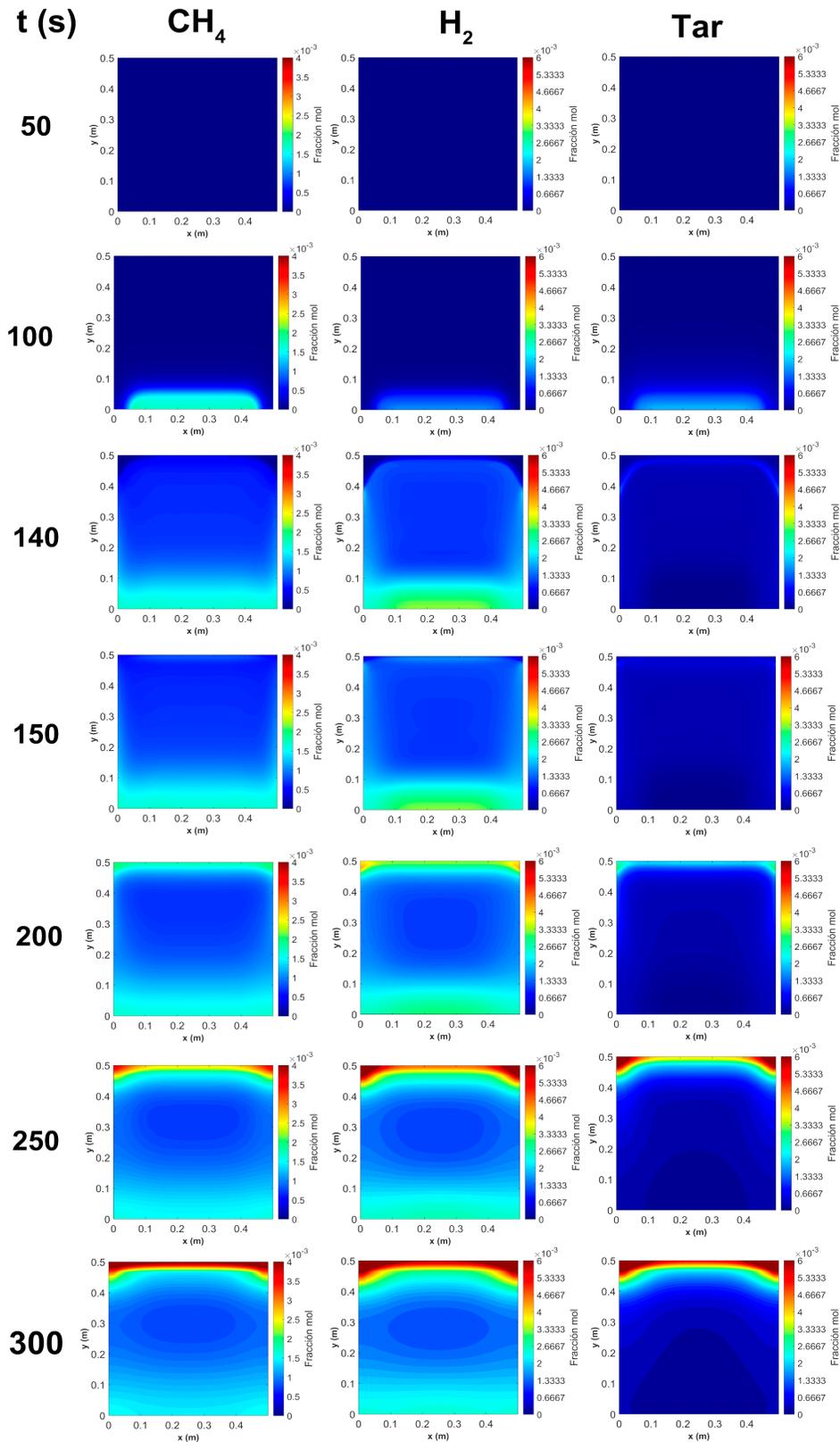


Figura 8-6: Contornos de concentración de especies para fase gas: CO , CO_2 , H_2O y O_2

8.3.3 Composición de especies para la fase sólida

En la figura 8-7 se muestra la distribución promedio de las especies de la fase sólida en el lecho para las 5 alturas diferentes $P1 = 0.05$ m, $P2 = 0.15$ m, $P3 = 0.30$ m, $P4 = 0.40$ m y $P_{out} = 0.50$ m. La evaporación de la humedad en el lecho se realiza de manera instantánea, tardando alrededor de 70 s, 80 s, 90 s, 105 s para las posiciones P1 a P4, respectivamente. Esto sucede como consecuencia del modelo utilizado para el proceso de secado, la cual, está definida en función de la temperatura y el contenido de humedad. Cuando se ha alcanzado una temperatura de 100°C se presenta una tasa máxima de evaporación que reduce el contenido de humedad a valores cercanos a 0.

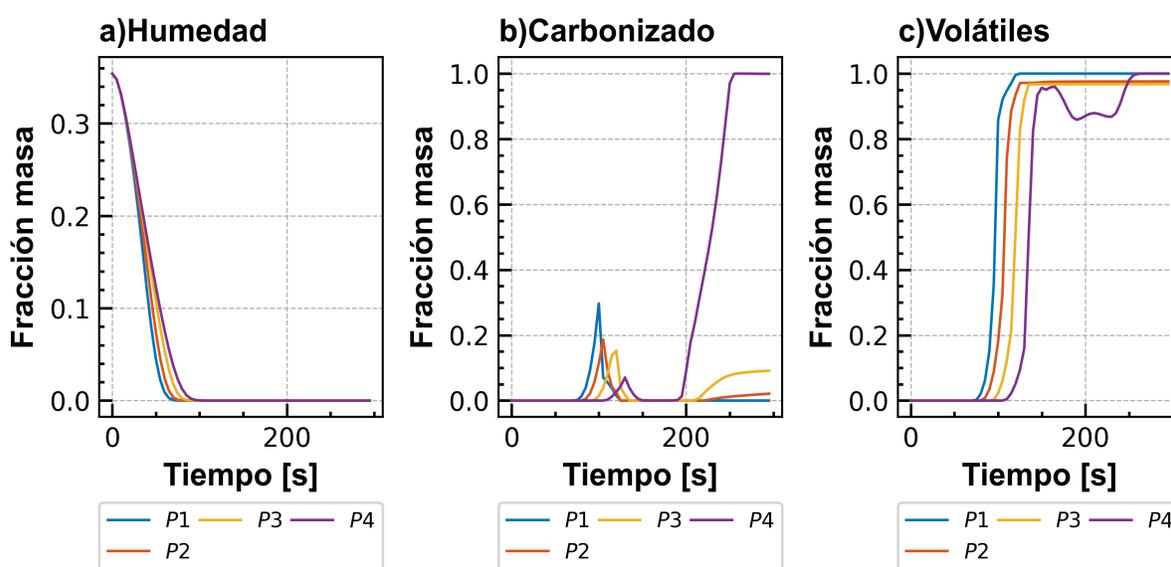


Figura 8-7: Distribución de especies de la fase sólida en el lecho

En la figura 8-7b se pueden observar las curvas de producción y destrucción del carbonizado en las 4 posiciones diferentes. Similarmente, en la Fig. 8-9 se muestran los contornos de producción para la fracción masa del carbonizado. Como se mencionaba en la sección 8.3.2, a los 105 s inicia la oxidación del carbonizado, la cual es propiciada cuando se tiene una temperatura mayor a 350°C y la disponibilidad de O_2 en el medio. A partir de este tiempo inicia las reacciones de oxidación en la posición P1, las cuales, posteriormente se desplazan a las restantes posiciones, hasta agotar casi en su totalidad el reactivo. Después de un tiempo mayor a 200s se puede apreciar la formación de carbonizado en la parte superior del lecho y de igual manera en las paredes de este (Fig. 8-9). Esto se correlaciona con el movimiento de partículas desde la parte superior y la ausencia de oxígeno. En la siguiente sección se realiza una aclaración sobre este tema.

Por otra parte, la fracción de volátiles formada durante el proceso de pirólisis es mostrada

8. Resultados del modelo matemático y validación

en la figura 8-7c. Como se mencionó anteriormente, este proceso inicia a 120 °C ($t = 75$ s) y se propaga rápidamente por el aumento súbito de la temperatura. La fracción tiende a valores cercanos a uno, puesto que la generación de especies en el termino fuente de pirólisis es dependiente de la temperatura y se encuentra limitado por la cantidad de biomasa disponible a reaccionar como se muestra en la ecuación 4-24. Esto se puede evidenciar en la curva de formación de carbonizado, dónde debido a la disponibilidad de biomasa en la parte superior del lecho, el movimiento de partículas, la ausencia de O_2 y la condición favorable de temperatura, se favorece la formación de carbonizado en la posición P4.

8.3.4 Velocidad de fase gas y fase sólida

Los perfiles de velocidad para ambas fases son mostrados en la figura 8-8 y la Fig. 8-9. Durante el proceso de secado, la evaporación de la humedad en la biomasa produce un aumento hasta un valor aproximado de 0.26 m/s en la fase gaseosa. Cuando se han completado los procesos de pirólisis y combustión, el valor promedio de la velocidad en el lecho es de 0.69 m/s. Dado que el perfil de velocidad de la fase gas es dependiente de la velocidad de las reacciones, los perfiles mostrados en la Fig. 8-8 y la Fig. 8-9 son similares a los perfiles de temperatura desarrollados por la fase gas.

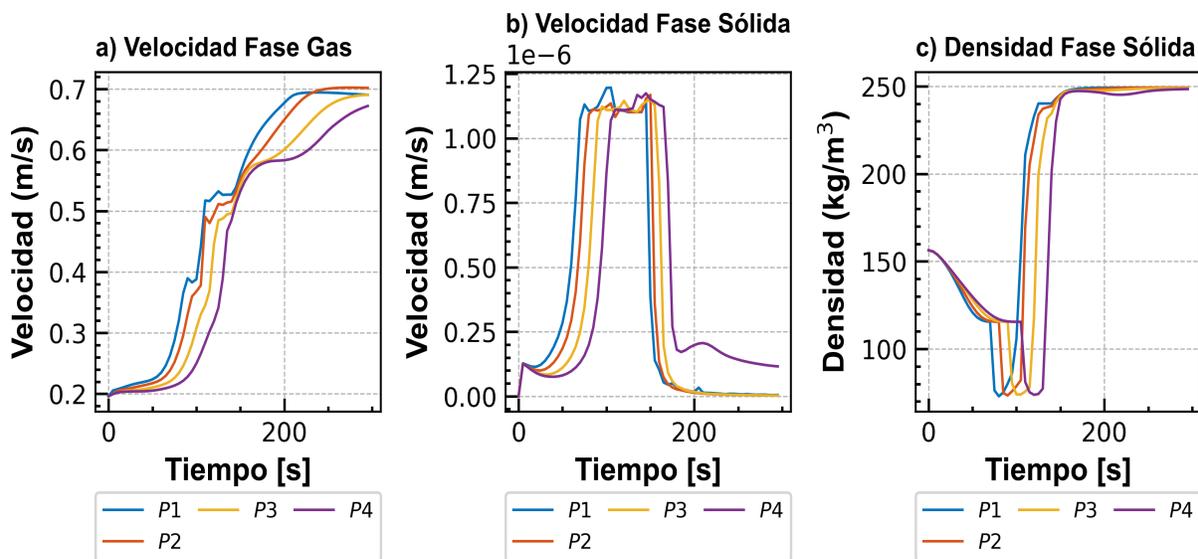


Figura 8-8: a) Velocidad de fase gas, b) velocidad de fase sólida y c) Densidad aparente

En la fase sólida, el movimiento del lecho se da a medida que avanzan los procesos de degradación térmica, iniciando con la etapa secado. La velocidad aumenta a medida que tienen lugar los procesos de pirólisis y oxidación del carbonizado propagándose desde la

parte inferior del lecho (P1) hacia la parte superior (P4) de la misma manera que aumenta la temperatura. El incremento de la velocidad de la fase sólida se detiene cuando la mayor parte del carbonizado ha sido destruida ($t=150s$). Desde este momento inicia un descenso en la velocidad, donde las partículas siguen reaccionando, generando un perfil descendente (Fig. 8-9, $t = 140 s, 150 s$). Similarmente, la velocidad va disminuyendo en la parte inferior del lecho. Cuando la mayor parte del carbonizado ha sido consumida, la velocidad en las posiciones P1 a P3 tiende a 0, mientras que en la parte superior (P4) aun se presentan reacciones, por lo tanto, la velocidad es mayor.

La suposición de flujo pistón en una sola dirección al movimiento de la fase sólida, la dependencia del movimiento a la variación de los términos fuente y asumir que la fase sólida en cada elemento de volumen es idealmente mezclada, afectan la continuidad del movimiento en el lecho. En este caso, la tasa de combustión del carbonizado es tan alta que genera un vaciado instantáneo en todas las celdas, las cuales, posteriormente, se reponen de manera muy lenta. Como los términos de secado y pirólisis son cercanos a 0, el único término fuente que incide en la velocidad del lecho es el del carbonizado, sin embargo, este tiende a 0 cuando se presenta una ausencia de oxígeno. Consecuentemente, esto ocasiona que el sistema alcance un estado estacionario.

Una estrategia para solucionar esto en la combustión de biomasa la presenta Gómez et al. (2014), planteando un método que trabaja en la transferencia de energía y masa entre celdas con agrupación de masa. Este método no produce una contracción directa del volumen del lecho sino un intercambio de masa (y volumen) entre celdas con el consiguiente agrupamiento de masa, vaciando las células superiores y llenando las inferiores. Además, el modelo considera las variaciones en las fracciones de humedad, volátiles y carbonizados en cada movimiento de masa.

Por otra parte, La densidad aparente de partícula (Fig. 8-8c) muestra dos tipos de comportamientos: decreciente y creciente. La disminución de la densidad durante la etapa de secado se da como consecuencia de la evaporación de la humedad del sólido como se muestra en la Ec. 4-18. Cuando el sólido se encuentra seco, el cambio de la densidad para las etapas de pirólisis y combustión es modelada en función del grado de conversión (Ec. 4-20). Por lo tanto, los cambios abruptos en la temperatura producen el aumento súbito del valor de la densidad hasta alcanzar el valor constante correspondiente a la densidad del carbonizado. Esto indica que el grado de conversión de biomasa es cercano a 1, por ende, la alta tasa de oxidación del carbonizado acelera el grado de conversión de la biomasa.

8. Resultados del modelo matemático y validación

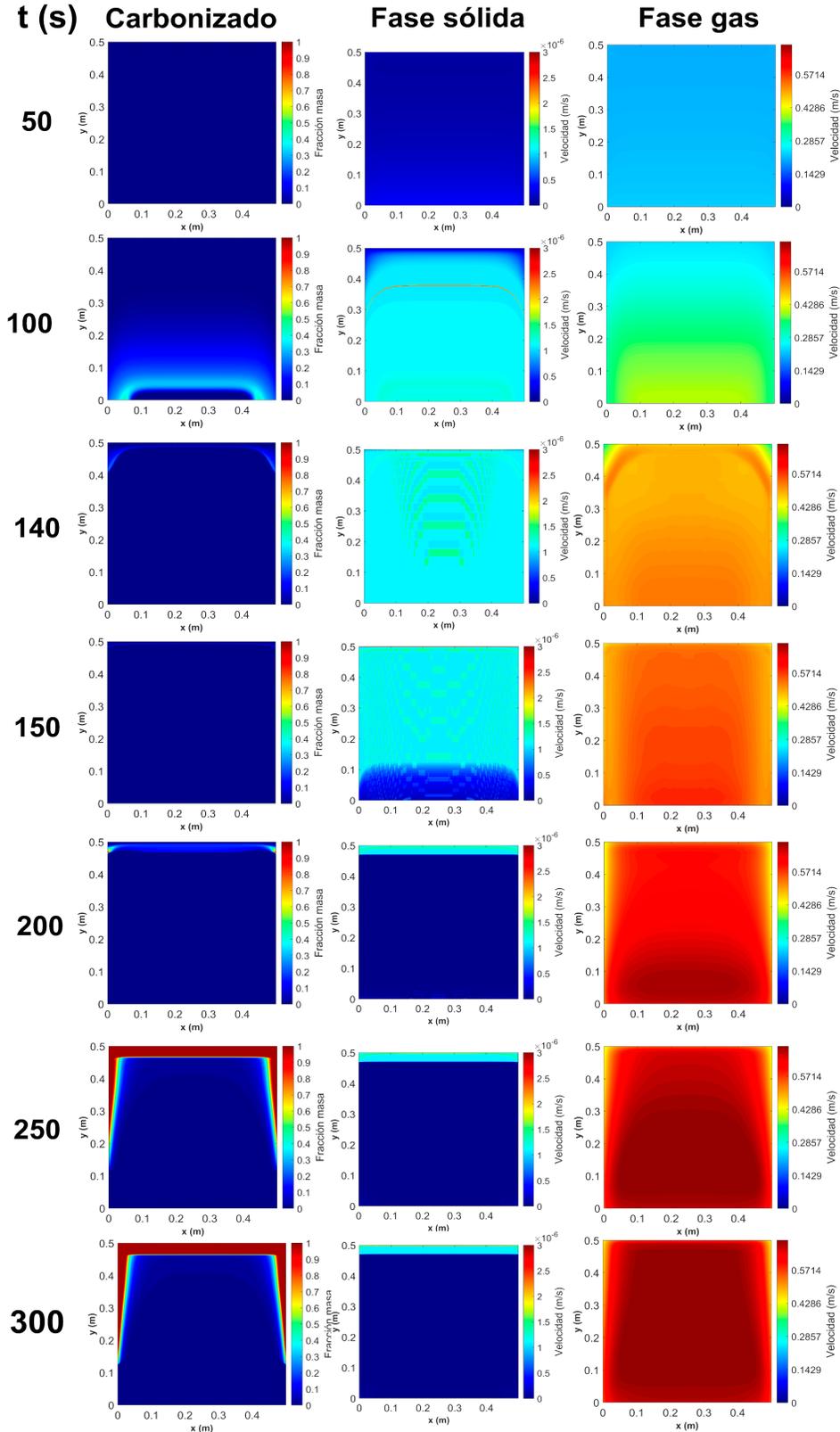


Figura 8-9: Contornos de fracción masa para carbonizado, velocidad de fase sólida y velocidad de fase gas

8.4 Validación del modelo

La validación del modelo propuesto fue realizada en función de la distribución de temperaturas al interior del reactor para los puntos de medición indicados en la sección 7.3 y los datos experimentales tomados a esta misma distancia (ver Fig. 7.4c y 7.5c). Para el caso de composición de especies de la fase gas, la validación fue realizada en la salida del reactor donde fue el único punto de muestreo. Se simularon los dos casos planteados en la sección 7.2.3 que corresponden a P6 (Caso 1) y P11 (Caso 2).

8.4.1 Perfil de temperatura

En la figura **8-10** se muestra la distribución promedio de temperaturas experimentales y modeladas para los dos casos simulados en las posiciones P1 a P4 (alturas: 0.05 m, 0.15 m, 0.30 m, 0.40 m). donde fueron colocados los termopares y posteriormente se hacen las comparaciones para la validación del modelo. En cuanto a los datos simulados, el valor de temperatura en la sección transversal se calcula como el promedio de las temperaturas de la fase sólida en todos los volúmenes correspondientes a esa altura. Como se mencionó en la sección anterior, las simulaciones fueron realizadas hasta un periodo de 300 s. A partir de este tiempo no hay cambios significativos en el comportamiento de la temperatura y la concentración de especies.

Para ambos casos se presenta una buena aproximación del modelo en las dos primeras posiciones. Las restantes posiciones, no presentan un buen ajuste como consecuencia del agotamiento del reactivo y la falta de renovación de este. Esto conduce a que en los datos modelados, los valores de temperatura lleguen a un rápido equilibrio y no se genere un mayor gradiente de temperatura entre las posiciones. Este gradiente puede ser observado en la figura **8-11**, la cual representa el promedio de la temperatura cuando se ha alcanzado el estado estacionario entre los datos medidos experimentalmente y los datos modelados.

De acuerdo con el promedio de temperatura en los datos experimentales, las barras de desviación muestran que las fluctuaciones de temperatura son significativas y tienden a tener un mismo valor promedio. Este comportamiento es similar al presentado por el modelo. Una buena aproximación en términos del promedio de temperatura se presenta en el caso1-P1 y caso 2 – P1 a P3, las cuáles pueden dar una aproximación de la temperatura promedio que puede desarrollar la cámara de combustión.

8. Resultados del modelo matemático y validación

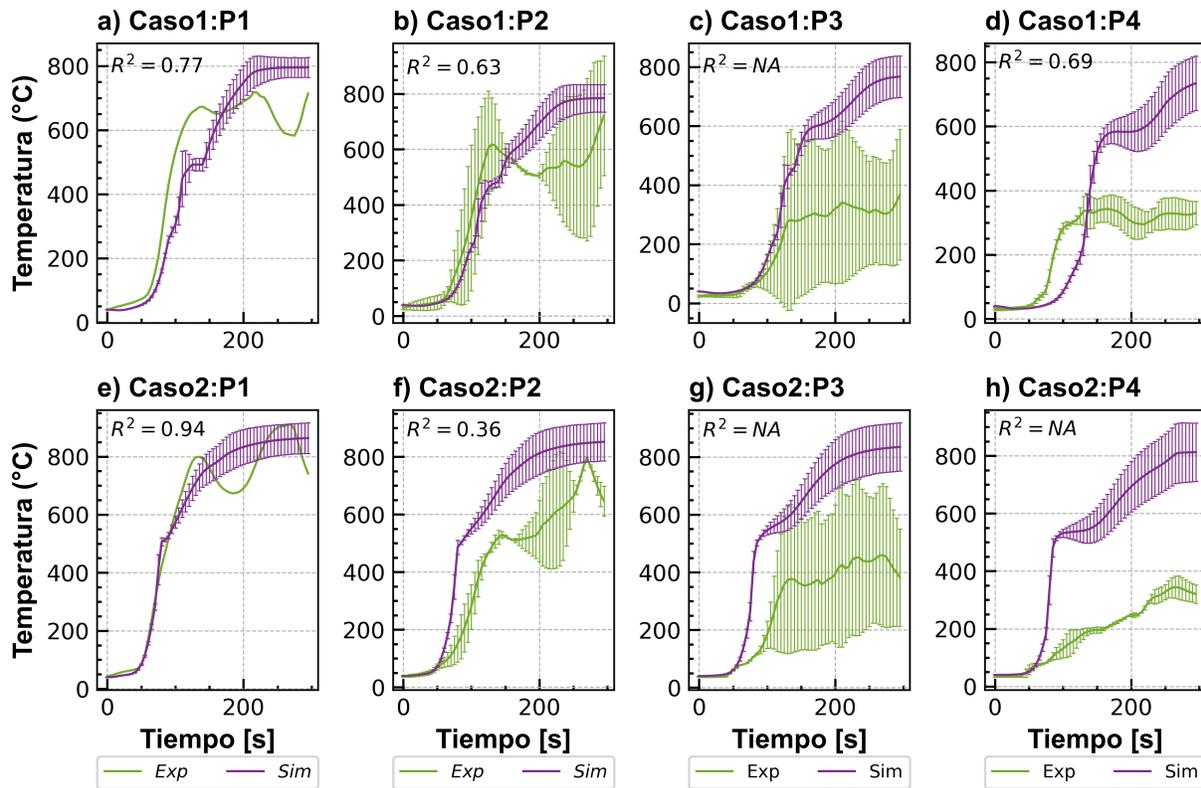


Figura 8-10: Distribución promedio de temperaturas experimentales y modeladas para combustión con bagazo húmedo (caso 1) y seco (caso 2). Validación en cuatro alturas diferentes del lecho: P1 = 0.05 m, P2 = 0.15 m, P3 = 0.30 m y P4 = 0.40m

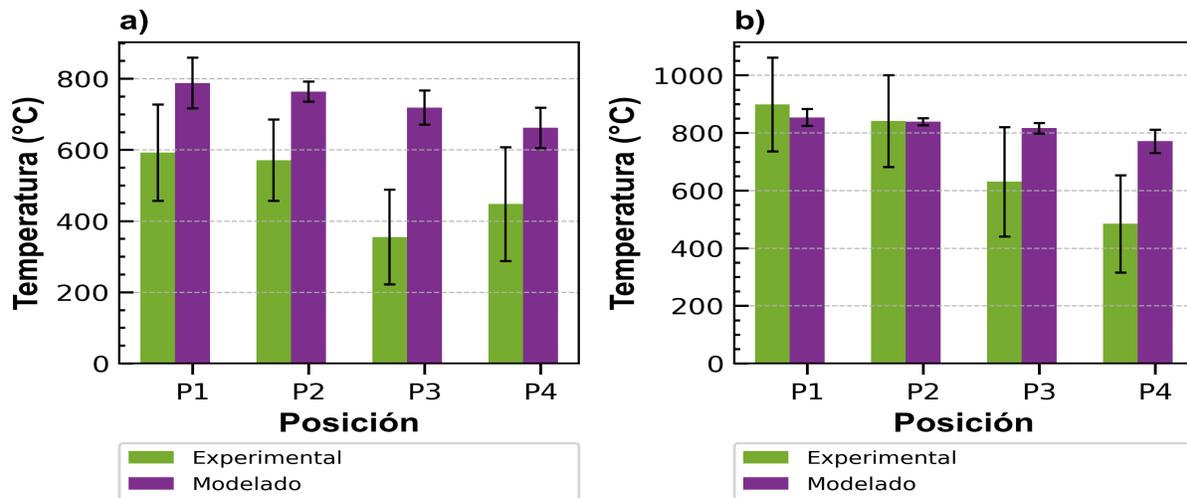


Figura 8-11: Promedio de la temperatura cuando se ha alcanzado un estado estacionario entre los datos medidos experimentalmente y los datos modelados para: a) combustión con bagazo húmedo (caso 1) y b) combustión con bagazo seco (caso 2)

8.4.2 Concentración de especies para la fase gas

En la figura 8-12 se muestra la distribución de las especies experimentales y modeladas para los dos casos simulados. La comparación entre los datos experimentales y modelados se realiza con los datos tomados en la parte superior libre del lecho y el promedio de los datos modelados en el borde superior del mismo. Las especies comparadas corresponden a las fracciones en base seca de CO , CO_2 y O_2 . En el caso de la combustión con bagazo húmedo (caso 1), en los datos obtenidos por el modelo, se observa una tendencia tardía en la generación de CO , CO_2 y la destrucción de O_2 en comparación con los datos experimentales. Esto se encuentra correlacionado con el alto contenido de humedad en el combustible que provoca un calentamiento tardío en el lecho retrasando la generación de especies. De acuerdo con la Fig. 8-10a, en la prueba experimental, el proceso de combustión inicia a los 85 s alcanzando una temperatura aproximada de 486 °C. Este mismo valor de temperatura es alcanzado por el modelo en un periodo de tiempo de 120 s. Por lo tanto, el modelo de secado condicionado por la temperatura y la humedad del combustible genera un sumidero de energía que incide en la generación tardía de las especies.

8. Resultados del modelo matemático y validación

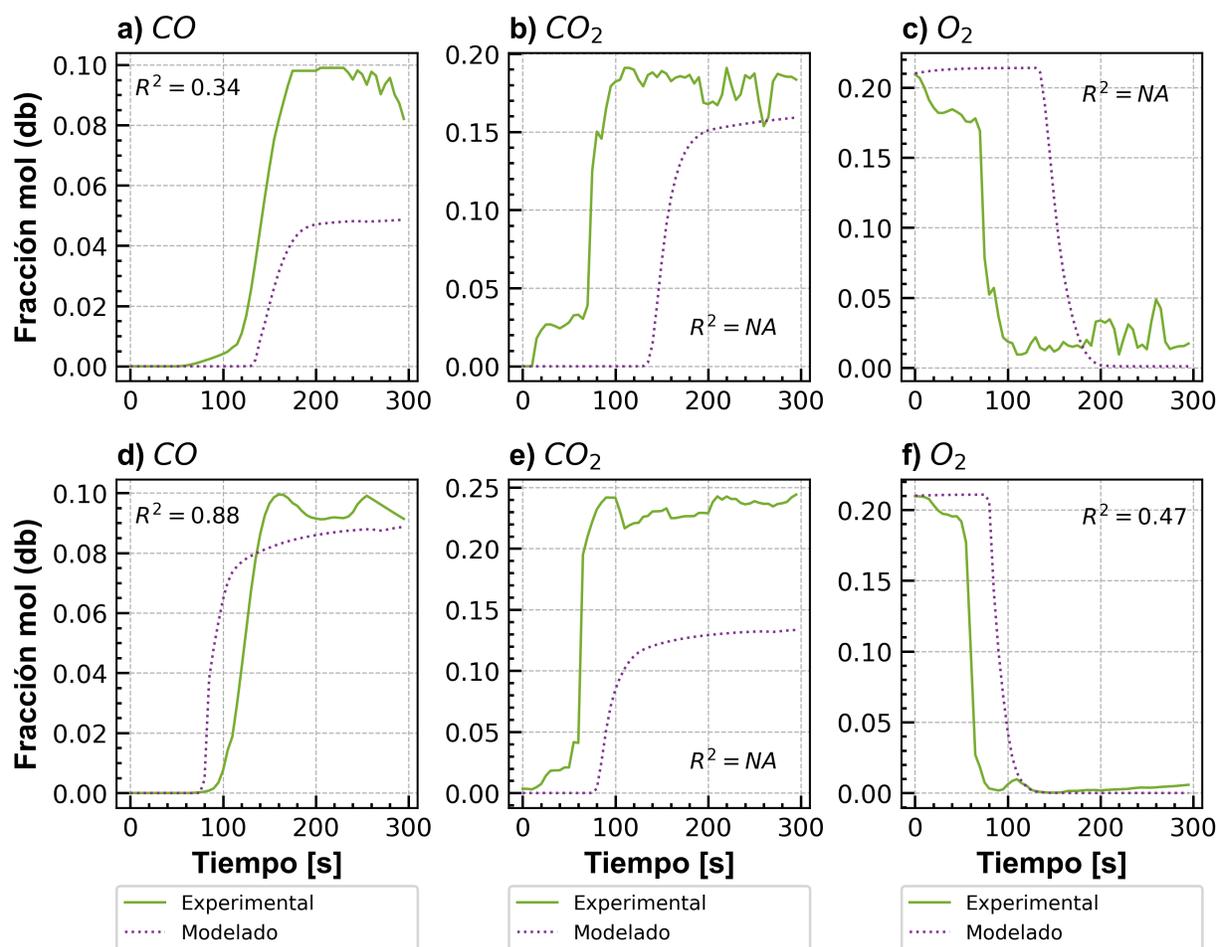


Figura 8-12: Distribución promedio de concentración de especies. Valores experimentales y modelados para combustión con bagazo húmedo (a-c) y seco (d-e).

De manera similar, esta incidencia del contenido de humedad se puede evidenciar en el comportamiento de las especies en el caso 2, donde se utiliza combustible seco. Los valores del modelo presentan un mejor ajuste con los datos experimentales como consecuencia de la generación de altas temperaturas en un menor tiempo ($t = 85$ s, $T = 512$ °C en P1). Aunque la predicción de las concentraciones en el tiempo se acerca bastante a la de los datos simulados, aun se presenta una diferencia temporal aproximada de 20 s entre ambas curvas. Esto se correlaciona con la dependencia del cálculo de la velocidad de la fase gas a los términos fuente de las reacciones químicas, lo cual genera una subestimación o sobrestimación temporal en la generación y destrucción de las especies.

Las concentraciones promedio de las especies cuando se ha alcanzado el estado estacionario fueron comparadas y son mostradas en la figura 8-13. El modelo presenta un buen ajuste con la concentración de CO para los dos casos simulados. Sin embargo, para CO₂ el ajuste es

adecuado para el caso 1, mientras que para el caso 2 se presenta una subestimación del valor de la concentración. Estos bajos valores en la concentración de CO_2 generado fue propiciada por la limitación de oxígeno y la ausencia de carbonizado en el lecho, lo cual, conllevó a la supresión de las reacciones de combustión y por ende a la limitación del valor de temperatura. Respecto a la concentración de O_2 , el modelo predice valores cercanos a 0, lo cuales están por debajo del rango de tolerancia del equipo de medición. Una diferencia significativa se presenta en el caso 1, dónde se presenta una mayor difusión promedio de O_2 en el dato experimental. Esta razón obedece a una condición experimental descrita en la sección 7.3 La concentración de especies reportadas por el modelo puede describir una aproximación promedio de los datos medidos experimentalmente, aunque se necesitan realizar ajustes en la modelación matemática del proceso de combustión para obtener mejores aproximaciones de temperatura y especies generadas.

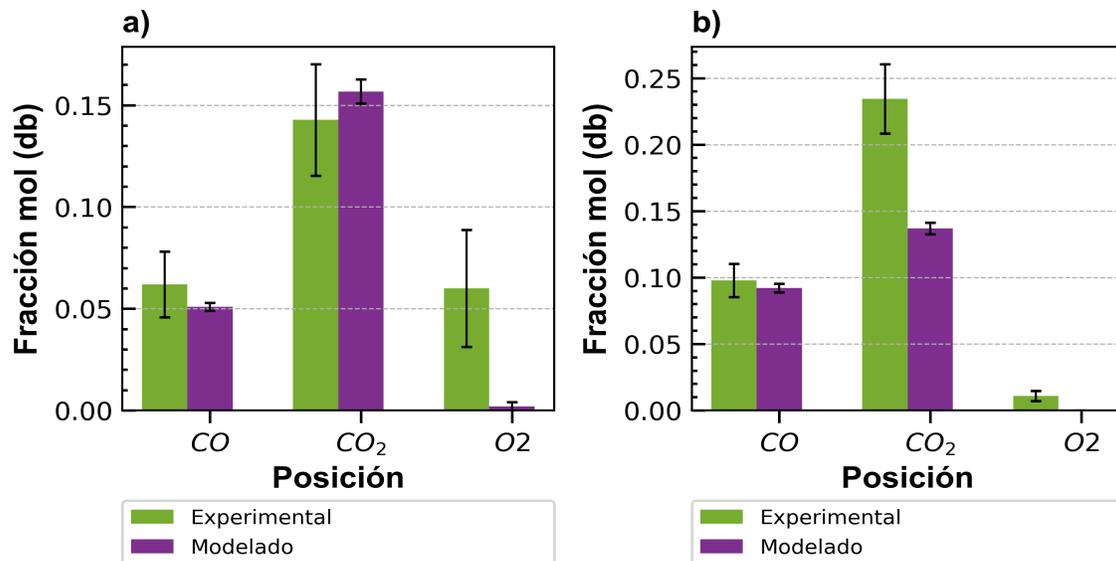


Figura 8-13: Promedio de la concentración de especies se ha alcanzado un estado estacionario entre los datos medidos experimentalmente y los datos modelados para: a) combustión con bagazo húmedo (caso 1) y b) combustión con bagazo seco (caso 2)

9 Conclusiones y perspectivas

El presente estudio aborda el desarrollo de la modelación numérica de la combustión de bagazo de caña en una cámara de combustión de lecho fijo para un módulo de producción de azúcar no centrifugada de caña. El modelo permite determinar la distribución de los perfiles de temperatura y la concentración de especies generadas o destruidas durante el proceso. La validación del modelo fue realizada mediante mediciones experimentales realizadas en una cámara de combustión que permite controlar el suministro de aire y combustible para un mejor estudio de las variables. A partir del estudio de validación se puede deducir que el modelo tiene la capacidad de predecir un comportamiento promedio de las variables estudiadas. Sin embargo, para investigaciones futuras es necesario realizar ajustes para aproximar de una manera más exacta los fenómenos de conversión al interior del lecho.

El modelo fue planteado con base en suposiciones tomadas de la literatura en combustión de biomasa. Consecuentemente, se realizó un cálculo simplificado para determinar las variaciones de la velocidad de la fase gas y la fase sólida en función de la velocidad de las reacciones químicas. No obstante, estas simplificaciones incidieron en los resultados obtenidos mostrando una necesidad de la implementación de las ecuaciones de cantidad de movimiento para ambas fases, así como la implementación de un modelo más robusto del proceso de compactación del lecho.

A nivel experimental es necesario realizar un estudio a una escala menor para obtener un mejor control de las variables y una mejor aproximación a los fenómenos de degradación térmica. De la misma forma se recomienda realizar un estudio cinético de carbonizado de bagazo de caña para tener una mejor claridad en las tasas de oxidación del carbonizado. Finalmente, el código computacional desarrollado puede ser optimizado mediante la implementación de métodos numéricos más eficaces en tiempo computacional. Similarmente, este código puede ser tomado como base para implementación en software de CFD especializados.

El modelo permite comprender detalles sobre los procesos de secado, pirólisis y combustión facilitando la correlación de estos fenómenos con la distribución de perfiles de temperatura y concentración de especies al interior del lecho. Esto proporciona información esencial para entender los procesos de degradación térmica del bagazo de caña en este tipo de cámaras

de combustión. Aunque la falta de inclusión de las ecuaciones de cantidad de movimiento restringe la capacidad de acercarse más a la realidad del proceso, el modelo sirve como punto de partida para futuras mejoras y refinamientos. La identificación de áreas específicas de mejora, a través de los inconvenientes encontrados en el modelo, proporciona una guía clave para ajustes y optimizaciones futuras.

La capacidad del modelo para describir patrones de temperatura y concentración de especies sientan la base para la creación de modelos más precisos. Este avance puede ser fundamental en el diseño óptimo de cámaras de combustión para bagazo de caña u otros combustibles derivados de biomasa. A pesar de las limitaciones actuales, el modelo representa una herramienta que impulsa el camino hacia soluciones más efectivas y eficientes en el ámbito del aprovechamiento de biomasa para la generación de energía en los módulos de producción de ANC.

A Apéndice 1

A.1 Cálculo de viscosidad dinámica para gases

- **Método de Chung:** La expresión para determinar la viscosidad de un gas a baja presión de acuerdo con el método de Chung descrito por Reid et al. (1987) y es mostrado en la Ec. A-1:

$$\eta = 40,785 \frac{F_c (MT)^{0,5}}{V_c^{2/3} \Omega_v} \quad (\text{A-1})$$

Dónde:

η : viscosidad (μP)

M : Masa molecular (g/mol)

T : Temperatura (K)

V_c : Volumen crítico (cm^3/mol)

Ω_v : Integral de colisión para viscosidad

F_c : Factor que tiene en cuenta las formas moleculares y las polaridades de los gases diluidos.

La integral de colisión para viscosidad es obtenida a partir de la siguiente Ec:

$$\Omega_v = A (T^*)^{-B} + C (\exp(-DT^*)) + E (\exp(-FT^*)) \quad (\text{A-2})$$

Dónde T^* es la temperatura adimensional obtenida en la Ec. A-3 en función de la temperatura reducida (T_r) (Ec. A-4). Esta última es obtenida a partir de la relación de la temperatura del gas y la la temperatura crítica.

$$T^* = 1,2593T_r \quad (\text{A-3})$$

$$T_r = \frac{T^g}{T_c} \quad (\text{A-4})$$

En la Ec. A-1, F_c es obtenido en función del factor acéntrico ω , el factor de corrección para sustancias altamente polares κ y el momento dipolo reducido μ_r (Ec. A-5). μ_r es

calculado de acuerdo con la Ec. A-6, la cual está en función del momento dipolo (μ), el volumen y la temperatura crítica, respectivamente.

$$F_c = 1 - 0,2756\omega + 0,059035\mu_r^4 + \kappa \quad (\text{A-5})$$

$$\mu_r = 131,3 \frac{\mu}{(V_c T_c)^{1/2}} \quad (\text{A-6})$$

- **Método de Lucas:** La forma específica para el cálculo de la viscosidad sugerido por Lucas es mostrado en la Ec. A-7 (Reid et al., 1987):

$$\eta\xi = \left[0,807T_r^{0,618} - 0,357\exp(-0,449T_r) + 0,340\exp(-4,058T_r) + 0,018 \right] F_P^0 F_Q^0 \quad (\text{A-7})$$

Dónde ξ es la viscosidad inversa y es definida en la Ec. A-8, η es la viscosidad del gas (μP), F_P^0 y F_Q^0 son factores de corrección que tienen en cuenta el efecto de polaridad y el efecto cuántico, respectivamente.

$$\xi = 0,176 \left(\frac{T_c}{M_3 P_c^4} \right)^{1/6} \quad (\text{A-8})$$

Para obtener F_P^0 se utiliza el momento dipolo reducido planteado por Lucas:

$$\mu_r = 52,46 \frac{\mu^2 P_c}{T_c^2} \quad (\text{A-9})$$

Dónde μ es el momento dipolo (debyes), P_c es la presión crítica (bar) y T_c es la temperatura crítica (K). Los valores de F_P^0 son calculados de acuerdo con las siguientes ecuaciones:

$$F_P^0 = 1; \quad \text{Para: } 0 \leq \mu_r < 0,022 \quad (\text{A-10a})$$

$$F_P^0 = 1 + 30,55 (0,292 - Z_c)^{1,72} \quad \text{Para: } 0,022 \leq \mu_r < 0,075 \quad (\text{A-10b})$$

$$F_P^0 = 1 + 30,55 (0,292 - Z_c)^{1,72} | 0,96 + 0,1(T_r - 0,7) | \quad \text{Para: } 0,075 \leq \mu_r \quad (\text{A-10c})$$

Por otra parte, el factor F_Q^0 es determinado en la Ec. A-11 y es utilizado únicamente para los gases cuánticos (He , H_2). En la Ec. A-11, $Q = 1,38(He)$, $Q = 0,76(H_2)$.

$$F_Q^0 = 1,22Q^{0,15} \left\{ 1 + 0,00385 [(T_r - 12)^2]^{1/M} \text{sign}(T_r - 12) \right\} \quad (\text{A-11})$$

A. Apéndice 1

Las propiedades con las cuales son calculadas las ecuaciones por los métodos de Chung y de Lucas son mostradas en la tabla **A-1**.

Tabla A-1: Propiedades de distintas especies gaseosas a 1 bar para determinar la viscosidad dinámica.

Especie	MW (g/mol)	T_c (K)	P_c (bar)	V_c (cm^3/mol)	Z_c	ω	μ	κ
CO	28.01	132.85	34.94	93.1	0.292	0.045	0.1	0
CO ₂	44.01	304.12	73.74	94.07	0.274	0.225	0	0
CH ₄	16.043	190.56	45.99	98.6	0.286	0.011	0	0
H ₂	2.016	32.98	12.93	64.2	0.303	-	0	0
H ₂ O	18.015	647.14	220.64	55.95	0.229	0.344	1.8	0.076
O ₂	31.999	154.58	50.43	73.37	0.288	0	0	0
N ₂	28.014	126.2	33.98	90.1	0.289	0.037	0	0
Tar (C ₆ H ₆ O)	94.113	694.25	61.3	229	0.243	0.442	1.6	0

MW: Peso molecular; T_c : Temperatura crítica; P_c : Presión crítica; V_c : Volumen crítico; Z_c : Factor de compresión; ω : Factor acéntrico; μ : momemnto dipolo (Debye); κ : factor de corrección para sustancias altamente polares.

A.2 Conductividad térmica por especie de gas

La expresión polinomial para calcular la conductividad térmica para cada especie de gas es la siguiente (Reid et al., 1987):

$$\lambda_i^g = A + BT + CT^2 + DT^3 \quad (\text{A-12})$$

Los coeficientes utilizados para el cálculo de la conductividad térmica para cada especie son mostrados en la siguiente tabla:

A.3. Conductividad térmica para mezcla de gas

Tabla A-2: Coeficientes para determinar la conductividad térmica a presión constante (1 bar).

Especie	A	B	C	D	Rango (K)
CO	5.0670E-04	9.1250E-05	-3.5240E-08	8.1990E-12	115-1670
CO ₂	-7.2150E-03	8.0150E-05	5.4770E-09	-1.0530E-11	185-1670
CH ₄	-1.8690E-03	8.7270E-05	1.1790E-07	-3.6140E-11	273-1270
H ₂	8.0990E-03	6.6890E-04	-4.1580E-07	1.5620E-10	115-1470
H ₂ O	7.3410E-03	-1.0130E-05	1.8010E-07	-9.1000E-11	273-1070
H ₂ O	7.9078E-04	4.0064E-05	6.8090E-08	-1.2947E-11	T>1070
O ₂	-3.2730E-04	9.9660E-05	-3.7430E-08	9.7320E-12	115-1470
N ₂	3.9190E-04	9.8160E-05	-5.0670E-08	1.5040E-11	115-1470
Tar	-1.3350E-02	6.3900E-05	7.2860E-08	-1.8430E-11	273-1270

Fuente: Reid et al. (1987).

A.3 Conductividad térmica para mezcla de gas

La ecuación para determinar la conductividad térmica para mezcla de gas es la siguiente:

$$\lambda^g = \sum_{i=1}^n \frac{x_i \lambda_i}{\sum_{j=1}^n x_j \phi_{ij}} \quad (\text{A-13})$$

Dónde:

λ^g : Conductividad térmica de la mezcla de gases (W/mK)

λ_i : Conductividad térmica del componente puro i (W/mK)

x_i, x_j : Fracción mol de los componentes

ϕ_{ij} : Parámetro de interacción

$\phi_{ii} = 1$ El parámetro de interacción ϕ_{ij} s calculado de manera similar al utilizado en la obtención de la viscosidad de mezcla de gases (Ecs. 4-2 y 4-3).

A.4 Calor específico y entalpía molar por especie de gas

Las siguientes son las correlaciones utilizadas para calcular el calor específico y entalpía molar por especie de gas:

$$\frac{C_{p,i}^{\ddagger}(T)}{R} = a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3 + a_5 T^4 \quad (\text{A-14})$$

$$\frac{H_i^{\ddagger}(T)}{RT} = a_1 + a_2 \frac{T}{2} + a_3 \frac{T^2}{3} + a_4 \frac{T^3}{4} + a_5 \frac{T^4}{5} + \frac{b_1}{T} \quad (\text{A-15})$$

A. Apéndice 1

En las tablas **A-3** y **A-4** se muestran los coeficientes utilizados para determinar el calor específico y la entalpía molar:

Tabla A-3: Coeficientes para determinar el calor específico molar a presión constante (1 bar) para $T < 1000$ K. Fuente: McBride et al. (1993).

Especie	a_1	a_1	a_3	a_4	a_5	b_1
CO	3.5795E+00	-6.1035E-04	1.0168E-06	9.0701E-10	-9.0442E-13	-1.4344E+04
CO ₂	2.3568E+00	8.9846E-03	-7.1236E-06	2.4592E-09	-1.4370E-13	-4.8372E+04
CH ₄	5.1499E+00	-1.3671E-02	4.9180E-05	-4.8474E-08	1.6669E-11	-1.0247E+04
H ₂	2.3443E+00	7.9805E-03	-1.9478E-05	2.0157E-08	-7.3761E-12	-9.1794E+02
H ₂ O	4.1986E+00	-2.0364E-03	6.5204E-06	-5.4880E-09	1.7720E-12	-3.0294E+04
O ₂	3.5310E+00	-1.2366E-04	-5.0300E-07	2.4353E-09	-1.4088E-12	-1.0470E+03
N ₂	-2.9105E-01	4.0857E-02	2.4282E-05	-7.1448E-08	3.4600E-11	-1.3413E+04
Tar	3.5795E+00	-6.1035E-04	1.0168E-06	9.0701E-10	-9.0442E-13	-1.4344E+04

Tabla A-4: Coeficientes para determinar el calor específico molar a presión constante (1 bar) para $1000 \text{ K} > T < 5000 \text{ K}$. Fuente: McBride et al. (1993).

Especie	a_1	a_1	a_3	a_4	a_5	b_1
CO	3.0485E+00	1.3517E-03	-4.8579E-07	7.8854E-11	-4.6981E-15	-1.4266E+04
CO ₂	4.6366E+00	2.7413E-03	-9.9583E-07	1.6037E-10	-9.1610E-15	-4.9025E+04
CH ₄	1.6355E+00	1.0084E-02	-3.3692E-06	5.3496E-10	-3.1552E-14	-1.0006E+04
H ₂	2.9329E+00	8.2661E-04	-1.4640E-07	1.5410E-11	-6.8880E-16	-8.1307E+02
H ₂ O	2.6770E+00	2.9732E-03	-7.7377E-07	9.4434E-11	-4.2690E-15	-2.9886E+04
O ₂	3.6610E+00	6.5637E-04	-1.4115E-07	2.0680E-11	-1.2991E-15	-1.2160E+03
N ₂	2.9526E+00	1.3969E-03	-4.9263E-07	7.8601E-11	-4.6076E-15	-9.2395E+02
Tar	1.4155E+01	1.9935E-02	-7.1822E-06	1.1623E-09	-6.9715E-14	-1.8129E+04

A.5 Coeficiente de difusión binario

La ecuación para determinar el coeficiente de difusión binario es la siguiente:

$$\mathcal{D}_{ab} = \frac{0,0266T^{3/2}}{P \left(M_{ab}^{0,5} \right) \left(\sigma_{ab}^2 \right) \Omega_D} \quad (\text{A-16})$$

Dónde M_{ab} es el peso molecular de la mezcla, el cual se calcula de acuerdo con la Ec. A-17:

$$M_{ab} = 2 \left(\frac{1}{M_a} + \frac{1}{M_b} \right)^{-1} \quad (\text{A-17})$$

M_a y M_b son los pesos moleculares de las especies a y b, respectivamente; el diámetro de colisión promedio (σ_{ab}) es obtenido a partir de diámetros de colisión de esferas duras de las

especies a y b, respectivamente (Ec. A-18). Los valores de σ_{ab} son mostrados en la Tabla **A-5**.

$$\sigma_{ab} = \frac{\Omega_a + \Omega_b}{2} \quad (\text{A-18})$$

La integral de colisión (Ω_D) es una cantidad adimensional y se calcula de acuerdo con la siguiente ecuación:

$$\Omega_D = \frac{A}{(T^*)^B} + \frac{C}{\exp(DT^*)} + \frac{E}{\exp(FT^*)} + \frac{G}{\exp(HT^*)} \quad (\text{A-19})$$

Dónde $A = 1,06036$, $B = 0,15610$, $C = 0,19300$, $D = 0,47635$, $E = 1,03587$, $F = 1,52996$, $G = 1,76474$, $H = 3,89411$, T^* es la temperatura adimensional definida en función de los valores de la energía característica de Lennard-Jones ε_i (Tabla **A-5**):

$$T^* = \frac{K_b T}{\varepsilon_{ab}} = \frac{K_b T}{(\varepsilon_{ab})^{1/2}} = \frac{T}{\varepsilon_{ab}/K_b} \quad (\text{A-20})$$

Dónde:

$$\frac{\varepsilon_{ab}}{K_b} = \left[\left(\frac{\varepsilon_a}{K_b} \right) \left(\frac{\varepsilon_b}{K_b} \right) \right]^{1/2} \quad (\text{A-21})$$

Tabla A-5: Parámetros de Lennard Jones para especies seleccionadas. Fuente: Turns (2000).

Especie	MW (g/mol)	σ (Å)	ε/K_b (K)
CO	28.01	3.69	91.7
CO ₂	44.01	3.941	195.2
CH ₄	16.043	3.758	148.6
H ₂	2.016	2.827	59.7
H ₂ O	18.015	2.641	809.1
O ₂	31.999	3.467	106.7
N ₂	28.014	3.798	71.4
Tar	94.113	5.349	412.3

A.6 Discretización de ecuaciones

De acuerdo con la Fig. **6-1b**, los flujos totales J_e , J_w , J_n y J_s están definidos por el término convectivo y difusivo y son integrados sobre las caras del volumen de control:

$$J_x = \rho u \phi - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (\text{A-22})$$

$$J_y = \rho v \phi - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \quad (\text{A-23})$$

$$J_e = \int J_x dy; \quad J_n = \int J_y dx \quad (\text{A-24})$$

Dónde u y v son los componentes de la velocidad en las direcciones x y y , respectivamente. Reemplazando en la Ec. 2-1 se obtiene la Ec. A-25:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y} = S \quad (\text{A-25})$$

La integración de la ecuación A-25 sobre el volumen de control mostrado en la figura **6-1b** utilizando un esquema temporal implícito da como resultado:

$$\frac{(\rho_P\phi_P - \rho_P^0\phi_P^0)\Delta V}{\Delta t} + J_e - J_w + J_n - J_s = (S_c + S_c\phi_P)\Delta V \quad (\text{A-26})$$

ρ_P y ϕ_P son los términos transitorios en el tiempo actual, los términos del tiempo anterior son denotados como ρ_P^0 y ϕ_P^0 y el término fuente ha sido linealizado (Patankar, 1980). La linealización de algunos términos fuente es mostrada en la sección 6.3.3. En relación con el esquema temporal implícito utilizado, los términos sin superíndice son relacionados como los valores en el tiempo actual. De manera similar a la Ec. A-26, la ecuación de continuidad puede ser integrada sobre el volumen de control:

$$\frac{(\rho_P - \rho_P^0)\Delta V}{\Delta t} + F_e - F_w + F_n - F_s = 0 \quad (\text{A-27})$$

Dónde $F_{e,w,n,s}$ es el flujo de masa pasando a través de la cara del volumen de control y está definido como:

$$F_e = (\rho u)_e \Delta y \quad (\text{A-28a})$$

$$F_w = (\rho u)_w \Delta y \quad (\text{A-28b})$$

$$F_n = (\rho u)_n \Delta x \quad (\text{A-28c})$$

$$F_s = (\rho u)_s \Delta x \quad (\text{A-28d})$$

Si la Ec. A-27 es multiplicada por ϕ_P y posteriormente este resultado le es restado a la Ec. A-26 se obtiene una discretización análoga a la combinación de la ecuación de continuidad y la ecuación general de gobierno como se presenta en la siguiente expresión (Patankar, 1980):

$$\left(\phi_P - \phi_P^0\right) \frac{\rho_P^0 \Delta V}{\Delta t} + (J_e - F_e \phi_P) - (J_w - F_w \phi_P) + (J_n - F_n \phi_P) - (J_s - F_s \phi_P) = (S_C + S_P \phi_P) \Delta V$$

$$(A-29)$$

Patankar (1980) proporciona una forma de expresar los términos $J_i - F_i\phi_P$ que aparecen en la Ec. A-29 de la siguiente manera:

$$J_e - F_e\phi_P = a_E(\phi_P - \phi_E) \quad (A-30)$$

$$J_w - F_w\phi_P = a_W(\phi_W - \phi_P) \quad (A-31)$$

$$J_n - F_n\phi_P = a_N(\phi_P - \phi_N) \quad (A-32)$$

$$J_s - F_s\phi_P = a_S(\phi_S - \phi_P) \quad (A-33)$$

Dónde:

$$a_E = D_e A(|P_e|) + \max(-F_e, 0) \quad (A-34)$$

$$a_W = D_w A(|P_w|) + \max(F_w, 0) \quad (A-35)$$

$$a_N = D_n A(|P_n|) + \max(-F_n, 0) \quad (A-36)$$

$$a_S = D_s A(|P_s|) + \max(F_s, 0) \quad (A-37)$$

Las conductancias ($D_{e,w,n,s}$) son definidas de acuerdo con la ecuación A-38 y la función $A(|P|)$ puede ser seleccionada desde la Tabla **A-6** de acuerdo con el esquema deseado.

$$D_e = \frac{\Gamma_e \Delta y}{(\delta x_e)}; \quad D_w = \frac{\Gamma_w \Delta y}{(\delta x_w)}; \quad D_n = \frac{\Gamma_n \Delta x}{(\delta y_n)}; \quad D_s = \frac{\Gamma_s \Delta x}{(\delta y_s)} \quad (A-38)$$

Tabla A-6: Función $A(|P|)$ para diferentes esquemas de discretización. Patankar (1980).

Esquema	Fórmula para $A(P)$
Diferencias centradas	$1 - 0,5 P $
Upwind	1
Híbrido	$\max(0, 1 - 0,5 Pe)$
Power Law	$\max(0, (1 - 0,5 Pe)^5)$
Exponencial	$\frac{ Pe }{[\exp(P) - 1]}$

La ecuación bidimensional discretizada es escrita cómo:

$$a_P\phi_P = a_E\phi_E + a_W\phi_W + a_N\phi_N + a_S\phi_S + B \quad (A-39)$$

A.7 Pruebas de bondad de ajuste

Tabla A-7: Error de porcentaje medio absoluto (EMA) para datos calculados de Viscosidad dinámica, Calor Específico y Conductividad térmica. Los datos calculados fueron comparados con los datos reportados por el NIST.

Especie	EMA para viscosidad dinámica (%)	EMA para Calor específico (%)	EMA para conductividad térmica (%)
CO	58.40	3.86	0.13
CO ₂	63.35	6.35	0.15
CH ₄	14.31	27.46	0.17
H ₂	20.22	5.84	2.20
H ₂ O	87.06	4.80	5.99
O ₂	12.14	2.75	0.37
N ₂	47.93	3.18	0.20
Tar	--	35.22	--

Tabla A-8: Error de porcentaje medio absoluto (EMA) entre los datos calculados y experimentales del proceso de pirólisis.

Especie	EMA (%)
Biomasa	2.44
Carbonizado	0.45
CO ₂	0.23
CO	1.45
CH ₄	0.93
H ₂	0.31
Tar	1.42

Tabla A-9: Temperatura mínima, máxima, promedio y desviación estándar para datos experimentales y modelados en cuatro posiciones diferentes en la cámara de combustión (P1 a P4).

Caso	Posición	Temperatura máxima (°C)	Temperatura mínima (°C)	Temperatura Promedio (°C)	Desviación Estándar
Caso 1: Datos experimentales	P1	775.40	222.10	592.51	135.29
	P2	820.55	352.90	571.13	114.03
	P3	732.45	105.10	355.16	132.75
	P4	777.15	232.35	447.97	159.98
Caso 1: Datos modelados	P1	795.60	305.63	788.03	71.27
	P2	784.33	246.70	763.78	28.00
	P3	767.82	153.65	719.00	47.77
	P4	737.67	85.25	661.88	56.91
Caso 2: Datos experimentales	P1	1177.60	304.60	898.45	162.92
	P2	1070.30	110.45	841.44	159.27
	P3	967.25	84.85	630.36	189.45
	P4	817.40	78.60	484.60	168.78
Caso 2: Datos modelados	P1	864.01	281.73	853.58	29.55
	P2	852.29	240.21	838.95	12.17
	P3	835.45	188.35	816.30	18.08
	P4	812.91	134.74	770.87	40.75

Tabla A-10: Fracción molar mínima, máxima, promedio y desviación estándar para CO, CO₂ y O₂.

Caso	Especie	Fracción molar máxima	Fracción molar mínima	Fracción molar Promedio	Desviación Estándar
Caso 1: Datos experimentales	CO	0.0990	0.0041	0.0620	0.0161
	CO ₂	0.1976	0.0951	0.1428	0.0274
	O ₂	0.1102	0.0025	0.0601	0.0287
Caso 1: Datos modelados	CO	0.0544	0.0000	0.0509	0.0019
	CO ₂	0.1664	0.0000	0.1568	0.0060
	O ₂	0.2141	0.0011	0.0020	0.0020
Caso 2: Datos experimentales	CO	0.1225	0.0076	0.0978	0.0125
	CO ₂	0.3020	0.2077	0.2344	0.0261
	O ₂	0.0178	0.0002	0.0108	0.0038
Caso 2: Datos modelados	CO	0.0980	0.0700	0.0921	0.0033
	CO ₂	0.1447	0.0752	0.1369	0.0043
	O ₂	0.0336	0.0000	0.0000	0.0000

B Apéndice 2

B.1 Diseño de cámara de combustión

B.1.1 Parámetros de diseño

A continuación se relacionan las correlaciones utilizadas para el cálculo de la cámara de combustión. El valor calorífico neto VCN es calculado a partir de la ecuación de Hugot and Jenkins (1986) así:

$$VCN = 17,85 - 20,35Y_{H_2O, bagazo} \quad (MJ/kg) \quad (B-1)$$

La Potencia térmica suministrada Q_{sum} es obtenida en relación con la producción de ANC (\dot{m}_{ANC} , kg/h), el factor de consumo de bagazo que relaciona el bagazo consumido por 1 kg de ANC producido y el valor calorífico neto del bagazo:

$$Q_{sum} = \frac{\dot{m}_{ANC} F_{cb} VCN}{3,6} \quad (kW) \quad (B-2)$$

El área de parrilla es determinada teniendo en cuenta la potencia térmica suministrada y un factor empírico reportado por Gordillo and García (1992) de la siguiente manera:

$$a_{parrilla} = Q_{sum}/1000 \quad (B-3)$$

Las parrillas se construyen a partir de secciones de rejillas, las cuales, comercialmente tienen una longitud y ancho definido. Para ajustar al área calculada se tomaron 3 secciones de rejillas con ancho de 0.55 m y longitud de 0.5m, dando un área de 0.2325 m².

El cálculo de las dimensiones de la cámara son mostradas en las Ecs. B-4a a B-4d. El volumen de la cámara de combustión es calculado de igual manera teniendo en cuenta la potencia térmica suministrada y un factor empírico reportado por Gordillo and García (1992). Para el ancho y la longitud de la cámara se tiene en cuenta las dimensiones del material de construcción, el cual es ladrillo refractario. La altura de la cámara es determinada a partir de la Ec. B-4d.

$$V_{camara} = Q_{sum}/300 \quad (B-4a)$$

$$Ancho_{camara} = N_{rejillas} Ancho_{rejilla} + 0,2 \quad (B-4b)$$

$$Longitud_{camara} = Longitud_{rejilla} + 0,1 \quad (B-4c)$$

$$Altura_{camara} = V_{camara} / (Ancho_{camara} Longitud_{camara}) \quad (B-4d)$$

B.1.2 Resultados de las alternativas de diseño

En las figuras B-1 y B-2 se muestran los contornos de velocidad para la sección lateral y superior de las alternativas de diseño del equipo experimental.

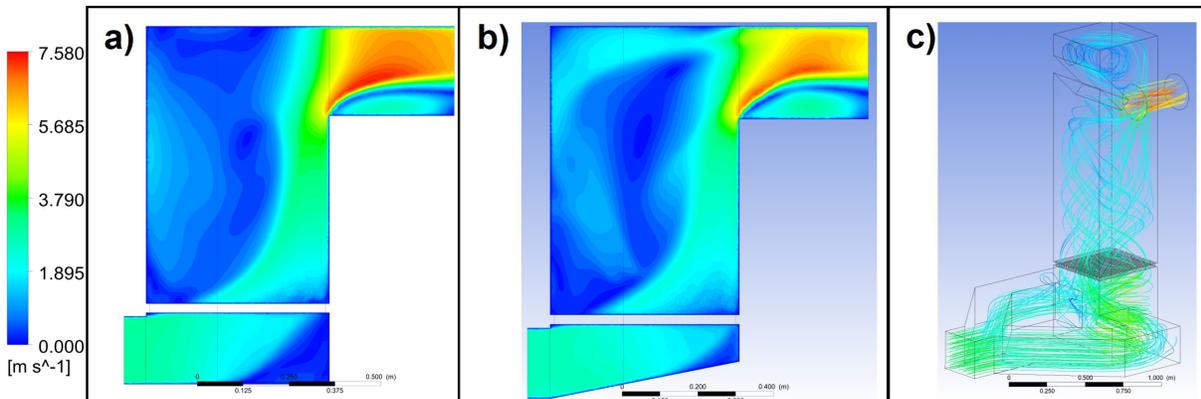


Figura B-1: Contornos de velocidad de la sección lateral para las alternativas de diseño.

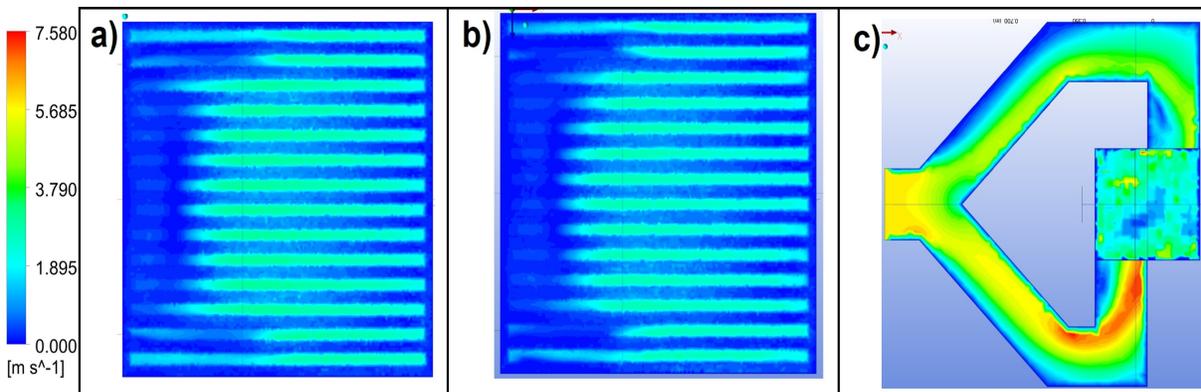


Figura B-2: Contornos de velocidad de la sección superior para las alternativas de diseño.

Referencias Bibliográficas

- Agronegocios (2021). Colombia es el segundo mayor productor de panela a nivel mundial. Excerpted from 5th edition of the APA Publication Manual.
- Allison, T. C. (2013). Nist-janaf thermochemical tables - srd 13 (version 1.0.2) [data set]. *National Institute of Standards and Technology*.
- Anca-Couce, A., Sommersacher, P., Shiehnejadhesar, A., Mehrabian, R., Hochenauer, C., and Scharler, R. (2017). CO/CO₂ ratio in biomass char oxidation. *Energy Procedia*, 120:238--245. INFUB - 11th European Conference on Industrial Furnaces and Boilers, INFUB-11.
- Anwar, S. (2010). Fuel and energy saving in open pan furnace used in jaggery making through modified juice boiling/concentrating pans. *Energy Conversion and Management*, 51(2):360--364.
- Bauer, R., Gölles, M., Brunner, T., Dourdoumas, N., and Obernberger, I. (2010). Modelling of grate combustion in a medium scale biomass furnace for control purposes. *Biomass and Bioenergy*, 34:417--427.
- Borray, G. A. R., Carranza, B. H., Murcia, S. M. P., Chavarro, C. F. G., Muñoz, J. L. T., Cortina, J. R., Ayala, F. A. V., Durán, J. R., González, J. J. E., and Zaraza, R. A. L. (2020). Modelo productivo de la caña de azúcar (*saccharum officinarum*) para la producción de panela en cundinamarca. (*No Title*).
- Cadavid, G. O. (2007). *Buenas prácticas agrícolas [BPA] y buenas prácticas de manufactura [BPM] en la producción de caña y panela*. Organización de las Naciones Unidas para la Agricultura y la Alimentación - FAO.
- Canedo, M. S., Figueiredo, M. F. S., Thomik, M., Vorhauer-Huget, N., Tsotsas, E., and Thoméo, J. C. (2021). Porosity and pore size distribution of beds composed by sugarcane bagasse and wheat bran for solid-state cultivation. *Powder Technology*, 386:166--175.
- Cengel, Y. (2014). *Heat and mass transfer: fundamentals and applications*. McGraw-Hill Higher Education.

Modelación de la combustión de bagazo de caña en un módulo de producción de azúcar no centrifugado

- Daood, S. S., Munir, S., Nimmo, W., and Gibbs, B. M. (2010). Char oxidation study of sugar cane bagasse, cotton stalk and pakistani coal under 1 % and 3 % oxygen concentrations. *Biomass and Bioenergy*, 34:263--271.
- de Souza-Santos, M. L. (2010). *Solid fuels combustion and gasification: modeling, simulation*. CRC Press.
- Dernbecher, A., Dieguez-Alonso, A., Ortwein, A., and Tabet, F. (2019). Review on modelling approaches based on computational fluid dynamics for biomass combustion systems. *Biomass Conversion and Biorefinery*, 9:129--182.
- Di Blasi, C. (1997). *Simultaneous Heat, Mass and Momentum Transfer during Biomass Drying*, pages 117--131. Springer Netherlands, Dordrecht.
- Di Blasi, C. (2004). Modeling wood gasification in a countercurrent fixed-bed reactor. *AIChE Journal*, 50(9):2306--2319.
- Edwards, C. M. L. (2018). Technical evaluation of available residual biomass in colombia for its thermochemical conversion in fluidized bed reactors.
- Eisermann, W., Johnson, P., and Conger, W. L. (1980). Estimating thermodynamic properties of coal, char, tar and ash. *Fuel Processing Technology*, 3:39--53.
- Espitia, J., Velásquez, F., López, R., Escobar, S., and Rodríguez, J. (2020). An engineering approach to design a non-centrifugal cane sugar production module: A heat transfer study to improve the energy use. *Journal of Food Engineering*, 274:109843.
- Ferziger, J. H., Perić, M., and Street, R. L. (2019). *Computational methods for fluid dynamics*. springer.
- Figura, L. O. and Teixeira, A. A. (2007). *Geometric Properties: Size and Shape*, pages 73--115. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg.
- Forero, L. E. P., Castro, Z. S., Bernal, H. R. G., and Ávila, H. S. R. (2012). Hornillas paneleras ward-cimpa: Validación de los modelos matemáticos de diseño corpoica-uis. *Fuentes: El reventón energético*, 10:6.
- Frigerio, S., Thunman, H., Leckner, B., and Hermansson, S. (2008). Estimation of gas phase mixing in packed beds. *Combustion and Flame*, 153:137--148.
- Gordillo, G. and García, H. (1992). Manual para el diseño y operación de hornillas paneleras. Technical report, Convenio de Investigación y Divulgación para el Mejoramiento de la Industria Panelera, Bogotá (Colombia).
- Greenshields, C. J. and Weller, H. G. (2022). Notes on computational fluid dynamics: General principles. (*No Title*).
- Guevara Enciso, J. I. (2014). Modelo computacional de la combustión del bagazo de caña en una cámara de combustión tipo ward-cimpa de una hornilla panelera. (*No Title*).

Modelación de la combustión de bagazo de caña en un módulo de producción de azúcar no centrifugado

- Gunn, D. J. (1987). Axial and radial dispersion in fixed beds. *Chemical engineering science*, 42:363--373.
- Gómez, A., Klose, W., and Rincón, S. (2008). *Pirólisis de biomasa: cuesco de palma de aceite*. kassel university press GmbH.
- Gómez, M., Porteiro, J., Patiño, D., and Míguez, J. (2014). Cfd modelling of thermal conversion and packed bed compaction in biomass combustion. *Fuel*, 117:716--732.
- Hugot, E. and Jenkins, G. (1986). *Manual de ingeniería de la caña de azúcar*. Estados Unidos: Elsevier Scienci.
- Invima (2015). Registro nacional de trapiches paneleros. *Instituto nacional de vigilancia de medicamentos y alimentos Invima*.
- Jader, R., Fabián, V., John, E., Sebastián, E., and Oscar, M. (2018). Thermal performance evaluation of production technologies for non-centrifuged sugar for improvement in energy utilization. *Energy*, 152:858--865.
- Jaffé, W. (2012). Non-centrifugal sugar: world production and trade. *Panela monitor*, pages 4--48.
- Jaffé, W. R. (2015). Nutritional and functional components of non centrifugal cane sugar: A compilation of the data from the analytical literature. *Journal of Food Composition and Analysis*, 43:194--202.
- Jensen, S. (2001). Zur modellierung eines indirekt beheizten festbettbiomassevergasers.
- Johansson, R., Thunman, H., and Leckner, B. (2007). Sensitivity analysis of a fixed bed combustion model. *Energy & Fuels*, 21:1493--1503. doi: 10.1021/ef060500z.
- Jurena, T. (2012). Numerical modelling of grate combustion. *Brno University of Technology, Brno*.
- Karim, M. R. and Naser, J. (2017). Numerical modelling of solid biomass combustion: Difficulties in initiating the fixed bed combustion. *Energy Procedia*, 110:390--395.
- Khodaei, H., Al-Abdeli, Y. M., Guzzomi, F., and Yeoh, G. H. (2015). An overview of processes and considerations in the modelling of fixed-bed biomass combustion. *Energy*, 88:946--972.
- Khodaei, H., Yeoh, G. H., Guzzomi, F., and Porteiro, J. (2018). A cfd-based comparative analysis of drying in various single biomass particles. *Applied Thermal Engineering*, 128:1062--1073.
- Klason, T. (2006). *Modelling of biomass combustion in furnaces*. Lund University.
- Kumar, A. and Tiwari, G. N. (2006). Effect of shape and size on convective mass transfer coefficient during greenhouse drying (ghd) of jaggery. *Journal of Food Engineering*, 73:121--134.

Modelación de la combustión de bagazo de caña en un módulo de producción de azúcar no centrifugado

- La Madrid, R., Marcelo, D., Orbegoso, E. M., and Saavedra, R. (2016). Heat transfer study on open heat exchangers used in jaggery production modules – computational fluid dynamics simulation and field data assessment. *Energy Conversion and Management*, 125:107--120. Sustainable development of energy, water and environment systems for future energy technologies and concepts.
- La Madrid, R., Orbegoso, E. M., Saavedra, R., and Marcelo, D. (2017). Improving the thermal efficiency of a jaggery production module using a fire-tube heat exchanger. *Journal of Environmental Management*, 204:622--636.
- Lam, P. S., Sokhansanj, S., Bi, X., Mani, S., Lim, J., and (or initial) (or initial) (2007). Physical characterization of wet and dry wheat straw and switchgrass - bulk and specific density. American Society of Agricultural and Biological Engineers.
- Lu, H., Robert, W., Peirce, G., Ripa, B., and Baxter, L. L. (2008). Comprehensive study of biomass particle combustion. *Energy & Fuels*, 22:2826--2839.
- MADR (2018). Cadena agroindustrial de la panela. (*No Title*), page 15.
- Manya, J. J., Velo, E., and Puigjaner, L. (2003). Kinetics of biomass pyrolysis: a reformulated three-parallel-reactions model. *Industrial and engineering chemistry research*, 42(3):434--441.
- McBride, B. J., Gordon, S., and Reno, M. A. (1993). Coefficients for calculating thermodynamic and transport properties of individual species.
- Mendes, R. F., Vilela, A. P., Farrapo, C. L., Mendes, J. F., Denzin Tonoli, G. H., and Mendes, L. M. (2017). 1 - lignocellulosic residues in cement-bonded panels. In Savastano Junior, H., Fiorelli, J., and dos Santos, S. F., editors, *Sustainable and Nonconventional Construction Materials using Inorganic Bonded Fiber Composites*, pages 3--16. Woodhead Publishing.
- Miltner, M., Makaruk, A., Harasek, M., and Friedl, A. (2008). Computational fluid dynamic simulation of a solid biomass combustor: modelling approaches. *Clean Technologies and Environmental Policy*, 10:165--174.
- Mitsakis, P. (2011). Online analysis of the tar content of biomass gasification producer gas.
- Moukalled, F., Mangani, L., and Darwish, M. (2016). *Solving the System of Algebraic Equations*, pages 303--364. Springer International Publishing, Cham.
- Patankar, S. V. (1980). *Numerical heat transfer and fluid flow*. Hemisphere Publishing Corporation.
- Patiño, H. J. G. (2011). Modelación de la gasificación de biomasa en un reactor de lecho fijo.
- Peters, B. (2002). Measurements and application of a discrete particle model (dpm) to simulate combustion of a packed bed of individual fuel particles. *Combustion and Flame*, 131:132--146.

Modelación de la combustión de bagazo de caña en un módulo de producción de azúcar no centrifugado

- Plaza, M. (2022). Evaluación del efecto de variables asociadas a la calidad del bagazo de caña en el proceso de combustión para uso en unidades productivas de cámara plana en la hoyo del río suarez.
- Pérez, N. P., Pedroso, D. T., Machin, E. B., Antunes, J. S., Tuna, C. E., and Silveira, J. L. (2019). Geometrical characteristics of sugarcane bagasse for being used as fuel in fluidized bed technologies. *Renewable Energy*, 143:1210--1224.
- Rasul, M. G., Rudolph, V., and Carsky, M. (1999). Physical properties of bagasse. *Fuel*, 78:905--910.
- Reid, R. C., Prausnitz, J. M., and Poling, B. E. (1987). The properties of gases and liquids.
- Rincón, S. and Gómez, A. (2008). Pyrolysis of agroindustrial biomass residues. pages 1200--1204.
- Ryu, C., Yang, Y. B., Khor, A., Yates, N. E., Sharifi, V. N., and Swithenbank, J. (2006). Effect of fuel properties on biomass combustion: Part i. experiments—fuel type, equivalence ratio and particle size. *Fuel*, 85(7):1039--1046.
- Sánchez Castro, Z. and Mendieta Menjura, O. A. (2014). Ajuste de un modelo matemático para la combustión de bagazo de caña en una cámara ward-cimpa. *Ciencia y Tecnología Agropecuaria*, 15(2):133--151.
- Schlünder, E.-U. and Tsotsas, E. (1988). *Wärmeübertragung in Festbetten, durchmischten Schüttgütern und Wirbelschichten*. Georg Thieme-Verlag.
- Skinner, F. D. and Smoot, L. D. (1979). *Heterogeneous Reactions of Char and Carbon*, pages 149--167. Springer US.
- Srikiatden, J. and Roberts, J. S. (2008). Predicting moisture profiles in potato and carrot during convective hot air drying using isothermally measured effective diffusivity. *Journal of Food Engineering*, 84:516--525.
- Telles, R. S. and Trevisan, O. V. (1993). Dispersion in heat and mass transfer natural convection along vertical boundaries in porous media. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 36(5):1357--1365.
- Thunman, H. and Leckner, B. (2003). Co-current and counter-current fixed bed combustion of biofuel—a comparison. *Fuel*, 82:275--283.
- Tiwari, G. N., Prakash, O., and Kumar, S. (2004). Evaluation of convective heat and mass transfer for pool boiling of sugarcane juice. *Energy Conversion and Management*, 45:171--179.
- Turns, S. (2000). An introduction to combustion: concepts and applications. *McGraw-Hill Companies, Inc.*

Modelación de la combustión de bagazo de caña en un módulo de producción de azúcar no centrifugado

- van Antwerpen, W., du Toit, C., and Rousseau, P. (2010). A review of correlations to model the packing structure and effective thermal conductivity in packed beds of mono-sized spherical particles. *Nuclear Engineering and Design*, 240(7):1803--1818.
- Velásquez, F., Espitia, J., Mendieta, O., Escobar, S., and Rodríguez, J. (2019). Non-centrifugal cane sugar processing: A review on recent advances and the influence of process variables on qualities attributes of final products. *Journal of Food Engineering*, 255:32--40.
- Velásquez Arredondo, H. I., Chejne Janna, F., and Agudelo Santamaría, A. F. (2004). Diagnóstico energético de los procesos productivos de la panela en colombia. *Revista Facultad Nacional de Agronomía Medellín*, 57(2):2453--2465.
- Verissimo, G. L. (2018). Simulação computacional e análise exérgica da gaseificação de bagaço de cana-de-açúcar em leitos fluidizados borbulhantes.
- Verissimo, G. L., Leiroz, A. J. K., and Cruz, M. E. (2020). Influence of the pyrolysis and heterogeneous char reactions modeling in the simulation of sugarcane bagasse gasification in a bubbling fluidized bed reactor. *Fuel*, 281:118750.
- Versteeg, H. K. and Malalasekera, W. (2007). *An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method*. Pearson Education, 2 edition.
- Yang, Y., Nasserzadeh, V., Goodfellow, J., and Swithenbank, J. (2003). Simulation of channel growth in a burning bed of solids. *Chemical Engineering Research and Design*, 81(2):221--232.
- Yang, Y. B., Goh, Y. R., Zakaria, R., Nasserzadeh, V., and Swithenbank, J. (2002). Mathematical modelling of msw incineration on a travelling bed. *Waste Management*, 22:369--380.
- Yin, C., Rosendahl, L., Kær, S. K., Clausen, S., Hvid, S. L., and Hille, T. (2008). Mathematical modeling and experimental study of biomass combustion in a thermal 108 mw grate-fired boiler. *Energy & Fuels*, 22:1380--1390.
- Zhou, H., Jensen, A. D., Glarborg, P., Jensen, P. A., and Kavaliauskas, A. (2005). Numerical modeling of straw combustion in a fixed bed. *Fuel*, 84:389--403.