

DESARROLLO DE UN MODELO TÉRMICO DE LA FASE VOLÁTIL DE UN
HORNO ROTATORIO MEDIANTE LOS MÉTODOS DE ELEMENTOS Y
VOLÚMENES FINITOS

JULIÁN DAVID ANGARITA HERNÁNDEZ
NAZHDA HABIB PICO

FUNDACIÓN UNIVERSIDAD DE AMÉRICA
FACULTAD DE INGENIERÍAS
PROGRAMA DE INGENIERÍA MECÁNICA
BOGOTÁ D.C.
2019

DESARROLLO DE UN MODELO TÉRMICO DE LA FASE VOLÁTIL DE UN
HORNO ROTATORIO MEDIANTE LOS MÉTODOS DE ELEMENTOS Y
VOLÚMENES FINITOS

JULIÁN DAVID ANGARITA HERNÁNDEZ
NAZHDA HABIB PICO

Proyecto integral de grado para obtener el título de
INGENIERO MECÁNICO

Director
Ing. JUAN FELIPE GIRALDO ÁVILA
Ingeniero mecánico

Codirector
Ing. ANDRÉS ZAPATA SAAD
Ingeniero mecánico

FUNDACIÓN UNIVERSIDAD DE AMÉRICA
FACULTAD DE INGENIERÍAS
PROGRAMA DE INGENIERÍA MECÁNICA
BOGOTÁ D.C.
2019

Nota de aceptación

Ingeniero Claudio Alberto Moreno A.

Ingeniero Jair L. Loaiza B.

Bogotá D.C., Agosto de 2019

DIRECTIVAS DE LA UNIVERSIDAD

Presidente institucional y rector del claustro

Dr. MARIO POSADA GARCIA PEÑA

Vicerrector de Desarrollo y Recursos Humanos.

Dr. LUIS JAIME POSADA GARCÍA-PEÑA

Vicerrectora Académica y de Posgrados.

Dra. ANA JOSEFA HERRERA VARGAS

Decano General Facultad de Ingenierías.

ING JULIO CESAR FUENTES ARISMENDI

Director del Programa de Ingeniería Mecánica.

ING. CARLOS MAURICIO VELOZA VILLAMIL

Las directivas de la Universidad de América, los jurados calificados y el cuerpo docente no son responsables por los criterios de ideas expuestas en el presente documento. Estos corresponden únicamente a los autores.

AGRADECIMIENTOS

Para llegar al final de este camino tuve la ayuda y fuerza de mis padres. Por esto le doy gracias a ellos porque con su apoyo logré culminar objetivo muy grande. Gracias por haberme alentado en momentos duros y darme la fuerza que no tenía.

Le doy gracias a mis padres por ser apoyo incondicional a lo largo de este camino, a mi hermana por alentarme en los momentos difíciles, a los directores del proyecto por el conocimiento transferido y a Dios por la oportunidad de vivir.

CONTENIDO

	pág.
RESUMEN	16
INTRODUCCIÓN	18
METODOLOGÍA	20
1.GENERALIDADES TEÓRICAS Y PARÁMETROS DEL HORNO ROTATORIO	
1.1 PIRÓLISIS Y GASIFICACIÓN	21
1.2 BIOMASA	23
1.2.1 Tipos de biomasa	23
1.2.2 Definición propiedades de la biomasa	23
1.3 HORNO ROTATORIO	24
1.3.1 Parámetros de operación y perfil de alturas	25
1.3.2 Definición de parámetros geométricos	25
1.4 FASE VOLÁTIL	27
1.4.1 Definición de propiedades de la fase volátil	28
1.5 TRANSFERENCIA DE CALOR	32
1.6.PERFILES DE TEMPERATURA	33
1.6.1 Perfil de temperaturas pared del horno rotatorio	33
1.6.2 Perfil de temperaturas de fase sólida	34
2. FORMULACIÓN DE LOS MODELOS MATEMÁTICOS	36
2.1 ECUACIONES DE GOBIERNO	36
2.2 MÉTODO NUMÉRICO DE VOLÚMENES FINITOS	36
2.2.1 Teorema de transporte de Reynolds	36
2.2.2 Ecuación de Laplace	37
2.3 MÉTODO NUMÉRICO DE ELEMENTOS FINITOS	38
2.3.1 Ecuación de Poisson	38
2.4 MÉTODO DE DISCRETIZACIÓN VOLÚMENES FINITOS	39
2.5 MÉTODO DE DISCRETIZACIÓN ELEMENTOS FINITOS	40
2.6 CONDICIONES DE FRONTERA Y CASOS DE ESTUDIO	42
2.7 MALLA Y CONVERGENCIA DE MALLA	45
3. IMPLEMENTACIÓN DEL MODELO COMPUTACIONAL	51
3.1 IMPLEMENTACIÓN DE MODELO COMPUTACIONAL TÉRMICO MEDIANTE VOLÚMENES FINITOS	51
3.1.1 Generalidades de OpenFOAM y Gmsh	51
3.1.2 Generación de la malla	52
3.1.3 Implementación del modelo matemático en OpenFOAM	52
3.1.4 Condiciones de borde	56
3.2 IMPLEMENTACIÓN DE MODELO COMPUTACIONAL TÉRMICO MEDIANTE ELEMENTOS FINITOS	57
3.2.1 Generalidades de Spyder y Fenics Project	57
3.2.2 Generación de malla	59
3.2.3 Implementación del modelo matemático en Fenics Project	59
3.2.4 Condiciones de borde	59

3.3 COMPARACIÓN Y ANÁLISIS ENTRE CASOS	63
4. VALIDACIÓN DE RESULTADOS	70
4.1 VALIDACIÓN DE LOS MÉTODOS DE VOLÚMENES FINITOS MEDIANTE PRUEBAS ESTANDARIZADAS	70
4.2 VALIDACIÓN DE LOS MÉTODOS DE LOS ELEMENTO FINITOS MEDIANTE PRUEBAS ESTANDARIZADAS	73
4.3 COMPARACIÓN ENTRE MÉTODOS	77
4.3.1 Error absoluto y relativo	77
4.3.2 Tiempos de simulación	78
4.3.3 Método de iteración y aproximación	78
4.4 COMPARACIÓN CON OTROS AUTORES	79
5. CONCLUSIONES	84
6. RECOMENDACIONES	85
BIBLIOGRAFÍA	86

LISTA DE TABLAS

	pág.
Tabla 1. Clasificación de la biomasa según contenido de humedad	22
Tabla 2. Propiedades químicas fase sólida	23
Tabla 3. Porcentaje en peso de compuestos gaseosos presentes en el interior del horno	27
Tabla 4. Coeficientes para calcular el color específico en función de cada especie	28
Tabla 5. Coeficientes para calcular conductividad térmica en función de cada especie	30
Tabla 6. Casos de estudio y condiciones de frontera	44
Tabla 7. Refinamiento de malla. Número de elementos y temperatura	47
Tabla 8. Condiciones de borde caso 1	62
Tabla 9. Condiciones de borde caso 2	63
Tabla 10. Condiciones de borde caso 3	65
Tabla 11. Condiciones de borde caso 4	65
Tabla 12. Condiciones de borde caso 5	67
Tabla 13. Comparación de resultados obtenidos analíticamente y en OpenFoam	71
Tabla 14. Comparación, Respuesta analítica Vs. respuesta método numérico	76
Tabla 15. Comparación error relativo y absoluto.	76
Tabla 16. Tiempos de cómputo para cada uno de los métodos	77
Tabla 17. Comparación resultados elementos finitos, volúmenes finitos y diferencias finitas.	80
Tabla 18. Comparación resultados elementos finitos, volúmenes finitos y Theodore Hanein.	81

LISTA DE FIGURAS

	pág.
Figura 1. Horno rotatorio	23
Figura 2. Volumen de control con nodos vecinos	38
Figura 3. Esquema análisis condiciones de borde	42
Figura 4. Factor de forma ideal Vs. elemento prohibido	45
Figura 5. Relación de ángulos para elementos	46
Figura 6. Comparación elementos bueno Vs. elemento prohibido	46
Figura 7. Fase volátil del horno rotatorio, coordenada utilizada para el refinamiento de malla	47
Figura 8. Malla Fase Volátil	49
Figura 9. Malla Fase Sólida	49
Figura 10. La estructura de archivos en los directorios de OpenFoam	52
Figura 11. Configuración de subdirectorio controlDict	52
Figura 12. Esquema numérico en subdirectorio fvSchemes	53
Figura 13. Configuración subdirectorio fvSolutions	54
Figura 14. Configuración subdirectorio transportProperties	54
Figura 15. Configuración de perfiles de temperatura como condiciones de borde en subdirectorio de tiempo 0	56
Figura 16. Perfil de temperatura de la pared escrito con sintaxis C++	58
Figura 17. Perfil de temperatura de la pared escrito con sintaxis C++	59
Figura 18. Condiciones de borde caso 1	59
Figura 19. Condiciones de borde caso 2	59
Figura 20. Condiciones de borde caso 3	59
Figura 21. Condiciones de borde caso 4	59
Figura 22. Condiciones de borde caso 5	60
Figura 23. Caso 1 y 2	60
Figura 24. Función espacial definida para el dominio. Figura 25 Elemento tetraédrico, designación en FEniCS.	60
Figura 25 Elemento tetraédrico, designación en FEniCS.	61
Figura 26. Funciones u-v definidas en V	61
Figura 27. Recta transversal utilizada para generar perfiles de temperatura	62
Figura 28. Perfiles de temperaturas obtenidos por los dos métodos caso 1	62
Figura 29. Perfiles de temperaturas obtenidos por los dos métodos caso 2	64
Figura 30. Perfiles de temperaturas obtenidos por los dos métodos caso 2	65
Figura 31. Perfiles de temperaturas obtenidos por los dos métodos caso 4	66

Figura 32. Perfiles de temperaturas obtenidos por los dos métodos caso 5	67
Figura 33. Malla 3D realizada en Gmsh	70
Figura 34. Funciones definidas en FEniCS para el problema analítico.	74
Figura 35 Definición de condiciones de borde para el problema analítico en FEniCS	74
Figura 36. Simulación problema con solución analítica	74
Figura 37. Resultados de modelamiento caso 5	79

LISTA DE GRÁFICAS

	pág.
Gráfica 1. Porcentaje de productos en función de la temperatura de operación	21
Gráfica 2. Perfil de alturas movimiento de rodado mediante Spyder	26
Gráfica 3. Perfil de temperaturas de la pared del horno rotatorio	33
Gráfica 4. Perfil de temperaturas de la fase sólida	34
Gráfica 5. Número de elementos Vs. Temperatura caso 1	48
Gráfica 6. Representación de condiciones de borde y disposición geométrica del problema	69
Gráfica 7. Comparación entre solución analítica y solución obtenida mediante LaplacianFoam	72
Gráfica 8. Comparación entre solución analítica y solución obtenida mediante Fenics Project	74
Gráfica 9. Resultado de modelamiento de pirólisis en un horno rotatorio.	79
Gráfica 10. Resultado de modelamiento térmico de un horno rotatorio en 1D	81

LISTA DE ECUACIONES

	pág.
Ecuación 1. Ecuación diferencial del perfil de alturas dentro del horno.	25
Ecuación 2. Forma general diferencia finita hacia adelante	26
Ecuación 3. Método diferencias finitas aplicado a el perfil de alturas	26
Ecuación 4. Relación polinomial calor específico en función de temperatura	28
Ecuación 5. Relación para el cálculo del calor específico global de la fase volátil.	28
Ecuación 6. Relación polinomial viscosidad dinámica en función de temperatura.	29
Ecuación 7. Relación polinomial conductividad térmica en función de temperatura.	29
Ecuación 8. Cálculo global de la conductividad térmica	30
Ecuación 9. Cálculo densidad para cada una de las especies	30
Ecuación 10. Cálculo densidad global para la fase volátil.	31
Ecuación 11. Cálculo de difusividad térmica	31
Ecuación 12. Ecuación transferencia de calor por conducción.	32
Ecuación 13. Teorema de transporte de Reynolds	36
Ecuación 14. Ecuación de Laplace	36
Ecuación 15. Poisson de forma general	37
Ecuación 16. Ecuación de Poisson para tres dimensiones	37
Ecuación 17. Poisson expresada de forma general para un problema térmico	37
Ecuación 18. Discretización de ecuación de Laplace en el nodo central P	39
Ecuación 19. Ecuación de gobierno discretizada para un nodo P en el centro de un volumen de control	39
Ecuación 20. Ecuación de Poisson definida en un dominio	40
Ecuación 21. Ecuación de Poisson definida	40
Ecuación 22. Problema variacional continuo	41
Ecuación 23. Problema variacional continuo con espacios finitos	41
Ecuación 24. Ecuación del flujo de transferencia de calor entre dos fases	42
Ecuación 25. Cálculo de Nusselt	43
Ecuación 26. Ecuación para encontrar valores de solución analítica	70
Ecuación 27. Ecuación de Poisson problema de calor en estado estable	73
Ecuación 28. Solución exacta	73

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolo	Término	Unidad SI
N	Propiedad intensiva	
F	Fuente de generación	
Cp	Calor específico a presión constante	kJ/kg K
Ps	Densidad a granel	kg/m ³
θr	Ángulo inclinación	Grados
ϕ	Ángulo inclinación del horno	Grados
q	Caudal	m ³ /min
R	Radio del horno	M
h	Altura de la cama	M
n	Velocidad angular	RPM
T	Temperatura	K
C_{pi}	Calor específico de cada especie	J·kg ⁻¹ ·K ⁻¹
C_{pG}	Calor específico global	J·kg ⁻¹ ·K ⁻¹
X_i	Concentración de cada especie	
n_G	Viscosidad dinámica	10 ⁻¹ kg·s ⁻¹ ·m ⁻¹
X_{ij}	Fracción molar	
M_{ij}	Masa molar de cada componente	
λ_G	Constante conductividad térmica global	
ρ_i	Densidad de cada especie	
R	Constante de los gases	(J/(kmol K))
K	Coefficiente de conductividad térmica	W/(m·K)
Q	Flujo de calor	W/(m·K)
Δ	Operador laplaciano	
A	Área	m ²
T_s	Temperatura de superficie	K
T_∞	Temperatura fija	k
Nu	Número de NUSSELT	
Dh	Diámetro hidráulico	m
η	Viscosidad dinámica	Pa s
λ	Conductividad térmica	w/m K
ρ	Densidad	kg/m ³
α	Difusividad térmica	m ² /s
v	Volumen	m ³
β	Función real o compleja desconocida	
Ω	Dominio	

GLOSARIO

Biomasa: es todo material de carácter orgánico y de origen vegetal o animal. La biomasa se puede utilizar para producir combustibles o biogás, aprovechable como un sustituto de combustibles fósiles como el gas natural, carbón mineral o los hidrocarburos.

Modelamiento computacional: se hace uso de computadoras para simular y estudiar la manera en que se comportan sistemas físicos, químicos, geológicos, entre otros. Mediante este modelamiento se pretende simular la realidad a través de modelos matemáticos

Elementos finitos: es un método numérico mediante el cual se hacen aproximaciones de ecuaciones diferenciales parciales para darle solución a problemas de ingeniería avanzada.

Volúmenes finitos: es un método numérico que permite hacer discretizaciones de ecuaciones diferenciales parciales, es utilizado para solución de problemas relacionados con fluidos.

Pirólisis: es la degradación termoquímica de un biomaterial, para llevar a cabo el procedimiento se debe manejar una atmósfera controlada de oxígeno o cualquier otro reactante que pueda interferir en la reacción. La transformación de la biomasa se realiza a temperaturas del orden de 573 K y 1073 K.

Gasificación: seguido a la pirólisis ocurre la gasificación, se busca aumentar la fracción molar de gases. Para ello se eleva la temperatura hasta 1073 K, para que así, ocurra la reacción química donde se convierten materiales orgánicos en estado sólido y líquido, en gases ricos en carbono y con un bajo poder calorífico.

Gas de síntesis: es un compuesto gaseoso de bajo poder calorífico, se obtiene mediante el proceso termoquímico de la biomasa (gasificación) sus principales componentes CO₂, CO, H₂, entre otros. Utilizado como combustible.

RESUMEN

En este proyecto de investigación se realizó un modelamiento térmico computacional mediante elementos y volúmenes finitos, de la fase volátil presente al interior de un horno rotatorio usado para la producción de biocombustibles, los cuales se obtienen mediante el calentamiento indirecto de biomasa. Los productos biocombustibles obtenidos son una fuente de energía amigable con el planeta y las cantidades que obtienen de cada uno, dependen de la temperatura de operación del horno, ya que puede ocurrir pirólisis o gasificación y cada uno de estos procesos generan productos diferentes. Al realizar la simulación computacional, se encontró la temperatura a la que se encuentra la fase volátil, con el fin de intentar predecir el comportamiento térmico al interior del horno. Al tener este modelo térmico se puede estudiar el comportamiento físico de la fase volátil.

Esta herramienta computacional facilita procesos de diseño de dispositivos que apunten a la obtención de biocombustibles, por medio de pirólisis y gasificación de biomasa. Se evaluaron cinco casos diferentes, en los cuales se realizan variaciones en las condiciones de frontera y se analiza el comportamiento de la temperatura de la fase volátil, en estos casos se utilizaron valores fijos, temperaturas promedio, fronteras adiabáticas y perfiles de temperatura.

Todo esto con el fin de encontrar el método numérico más óptimo para dar solución a problemas de transferencia de calor de este tipo. Fue posible desarrollar el modelo térmico por medio de los dos métodos numéricos tanto elementos como volúmenes finitos, al comparar las respuestas por cada uno de los métodos, se encontraron perfiles de temperatura con mínimas variaciones.

Para validar la implementación de modelo computacional por cada uno de los métodos se realizó una comparación entre los perfiles de temperaturas obtenidos y los reportados por otros autores. Así mismo se escogieron dos problemas con respuestas analíticas, los cuales fueron desarrollados por cada uno de los métodos numéricos y posteriormente se realizó un análisis de cada uno de los métodos con base en el error generado y los tiempos de cómputo. Por último, se pudo concluir que el método numérico que tiene un error de aproximación más bajo en la solución de problemas térmicos fue el de elementos finitos, más sin embargo los resultados obtenidos por medio de los dos métodos son muy cercanos y la diferencia no es muy representativa. Estas diferencias entre los resultados de los dos métodos se deben a que cada uno de ellos realiza la discretización matemática de manera distinta.

Palabras clave: Modelamiento, transferencia de calor, elementos finitos, volúmenes finitos, horno rotatorio, pirólisis, gasificación, biomasa, biogás.

OBJETIVOS

OBJETIVO GENERAL

Desarrollar un modelo computacional para el análisis térmico de la fase volátil de un horno rotatorio, mediante los métodos de los elementos y volúmenes finitos.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- ❖ Formular un modelo matemático parametrizado del comportamiento térmico de la fase volátil en un horno rotatorio, mediante el uso de los elementos y volúmenes finitos.
- ❖ Implementar computacionalmente el modelo planteado a través de un lenguaje de programación libre.
- ❖ Validar el modelo planteado a través de resultados reportados por otros autores y mediante comparación con pruebas estandarizadas o Benchmark.

INTRODUCCIÓN

La simulación computacional es una herramienta importante para el desarrollo de la ingeniería moderna. Mediante el uso de esta herramienta se pueden llegar a entender fenómenos físicos y comprobar que la teoría y la práctica se unen con la finalidad de encontrar los resultados más acertados y cercanos al comportamiento real del objeto analizado. En la actualidad la búsqueda de nuevas fuentes de energía renovables que contribuyan a la mitigación del cambio climático, es uno de los temas que más se abordan en las investigaciones.

Con este proyecto de grado se aporta al campo investigativo de la obtención de biocombustibles por medio de biomasa en hornos rotatorios a través de la pirólisis. Los hornos rotatorios pueden ser utilizados como reactores de lecho móvil, en la transformación termoquímica de biomasa por medio de procesos como la pirólisis y gasificación, con el fin de producir biocombustibles líquidos o gaseosos. Estos procesos termoquímicos, suelen tener diferentes tipos de productos, los cuales dependen directamente de cuatro variables de proceso como los son: el tiempo de residencia, cantidad de moles, cantidad de catalizadores involucrados y la temperatura de operación.

Este proyecto de grado hace parte de un macroproyecto en el cual se busca poder predecir el comportamiento al interior del horno rotatorio teniendo en cuenta todas las variables del proceso ya que dependen entre sí, así como también los productos obtenidos en el horno dependen de los valores de estas variables.

Es por ello que es importante conocer el valor ideal de las variables de proceso para poder tener un proceso termoquímico óptimo y que la producción de biocombustibles sea muy eficiente. Con el fin de encontrar estos valores se deben realizar experimentaciones, se pueden hacer de manera física o como se plantea en esta tesis, de manera computacional. Desarrollar experimentos computacionales es mucho más económico y rápido que realizar una experimentación física.

El presente proyecto tiene como objetivo desarrollar un modelo térmico de la fase volátil presente un horno rotatorio por medio de dos métodos numéricos como los son los volúmenes y los elementos finitos. Con este modelamiento se estudia el comportamiento térmico al interior del horno y se analiza el valor de temperatura de operación, con esto se logra encontrar las variables de trabajo requeridas para que la producción de biocombustibles sea lo más eficiente posible.

Al desarrollar el modelo térmico por medio de los elementos y volúmenes finitos, es posible realizar una comparación entre los resultados obtenidos por medio de cada uno de los métodos y determinar cuál de los dos es el óptimo para abordar problemas térmicos de esta clase.

Para realizar la discretización del problema térmico se utilizaron gestores matemáticos de software libre. los cuales permiten la creación de modelos totalmente parametrizados, modificables y que pueden ser utilizados como una herramienta para poder diseñar y optimizar procesos de pirólisis y gasificación, se utilizaron softwares libres con el fin de que cualquier persona interesada lo pueda utilizar, modificar y copiar. De esta manera se impulsa al desarrollo investigativo y se promueve la implementación y diseño de reactores que utilicen la pirólisis y gasificación para la obtención de biocombustibles.

METODOLOGÍA

Con el fin de dar cumplimiento a todos los objetivos de este proyecto de grado se realiza un plan de trabajo para poder tener claro los pasos a seguir en cada una de las etapas del modelamiento. En primera instancia se desarrolla el modelo matemático que describe el modelo térmico a estudiar, para ello se establecen los parámetros y propiedades de la biomasa, del horno rotatorio, de la fase volátil. Se define la geometría del horno, la composición y propiedades de la fase volátil, las propiedades de la fase sólida, los parámetros de operación del horno y los perfiles de temperatura que se generan en la pared y en la fase sólida. Seguido a ello se deben encontrar las ecuaciones de gobierno que rigen este tipo de problemas térmicos, cada uno de los métodos numéricos (elementos y volúmenes finitos) utiliza una ecuación de gobierno diferente para dar solución al modelo. De igual manera para discretizar estas ecuaciones se requieren las condiciones de borde del sistema, para ello se calculan promedios de los perfiles de temperatura y el flujo de calor de la fase sólida a la fase volátil. Teniendo entonces ya las ecuaciones de gobierno y las condiciones de borde, se procede a hacer la explicación de cómo se hace la discretización por medio de elementos y volúmenes finitos.

Seguido a esto se realiza la implementación computacional del modelo térmico desarrollado en la etapa anterior. Se realizó una introducción a cada uno de los softwares que se utilizaron en cada uno de los métodos, como lo fueron OpenFOAM, Fenics Project, Gmsh y Paraview. El primer paso es la generación y convergencia de la malla. Una vez lista la malla se empieza la implementación del modelo con las ecuaciones de gobierno, condiciones de borde, esquemas numéricos, esquemas de tiempo, propiedades de la fase volátil y otros requerimientos de los cuales se habla más adelante. De esta forma se cumple con el objetivo de la implementación computacional del modelo por medio de los dos métodos numéricos.

Finalmente se deben validar el modelo, de manera que se garantice que los resultados obtenidos son verdaderos, para ello se realizaron pruebas estandarizadas donde se comparan los resultados analíticos con los resultados obtenidos por elementos y volúmenes finitos. Esta comparación se realizó con un modelo térmico previamente resuelto y con una solución analítica dada, luego se simuló los modelos en Fenics Project y OpenFOAM, se utilizaron los mismos solvers que se usan para la solución del modelo térmico del horno. También se realizan comparaciones entre los dos métodos y se concluye cuál de los dos es más indicado para esta tarea. Y para finalizar se comparan los resultados obtenidos con los resultados obtenidos por el ingeniero Libardo Mendoza en su tesis de doctorado.

1. GENERALIDADES TEÓRICAS Y PARÁMETROS DEL HORNO ROTATORIO

Con el fin de cumplir con el objetivo principal del presente proyecto el cuál es “Desarrollar un modelo térmico de la fase volátil de un horno rotatorio mediante los métodos de los elementos y volúmenes finitos”, a continuación, se presentan algunos de los conceptos básicos para poder comprender completamente el proyecto y lograr interpretar los resultados finales. Se comienza por la descripción de los procesos termoquímicos que tiene lugar al interior del horno rotatorio, como lo son la pirólisis y gasificación. Asimismo, se presentan las propiedades tanto de la fase sólida como de la fase volátil, las cuales son necesarias para la discretización del problema térmico. Posteriormente se realiza la descripción detallada del horno rotatorio en cuanto a su funcionamiento, parámetros de operación y geométricos.

1.1 PIRÓLISIS Y GASIFICACIÓN

Las reservas de combustibles fósiles con las que se abastecen las necesidades energéticas de la población mundial son finitas. Debido a esta problemática los esfuerzos en la investigación se han centrado en la búsqueda de nuevas fuentes de energía renovables y ambientalmente sostenibles. En los últimos años los esfuerzos de la comunidad investigativa han dado como resultado procesos como pirólisis y gasificación que han sido optimizados para que sus resultados sean los mejores y sus aplicaciones puedan extenderse a todas las situaciones posibles.

El proceso de pirólisis consiste en la degradación termoquímica de un biomaterial¹; para llevar a cabo el procedimiento se debe manejar una atmósfera controlada de oxígeno o cualquier otro reactante que pueda interferir en la reacción. La transformación de la biomasa se realiza a temperaturas del orden de 573 K y 773 K, cuando el reactor alcanza dichas temperaturas se generan compuestos en diferentes estados de materia. Este proceso consta de tres etapas que son la dosificación y alimentación, la transformación de la biomasa y la obtención del biogás, bio-aceite y coque². La pirólisis puede ocurrir de dos maneras distintas y cada una de estas tiene tipos de productos distintos y condiciones de trabajo diferentes. La Pirólisis lenta o convencional ocurre cuando se trabaja a temperaturas bajas hasta 823 K, donde se producen alquitranes y aceites. La pirólisis rápida, por su parte, se realiza a altas temperaturas entre 823 K y 1073 K, en este proceso se obtiene un 10% de materia sólida y el 90% restante corresponde a productos gaseosos ricos en hidrógeno y monóxido de carbono. Algunos de los productos primarios en estado gaseoso están compuestos por CO, CO₂, CH₄ y una pequeña fracción de hidrocarburos ligeros. En fase líquida se encuentran compuestos como acetona, ácido acético y

¹ KLUG, Michael. Pirólisis, un proceso para derretir la biomasa. Revista de Química PUCP, 2012, vol. 26, nº 1-2.

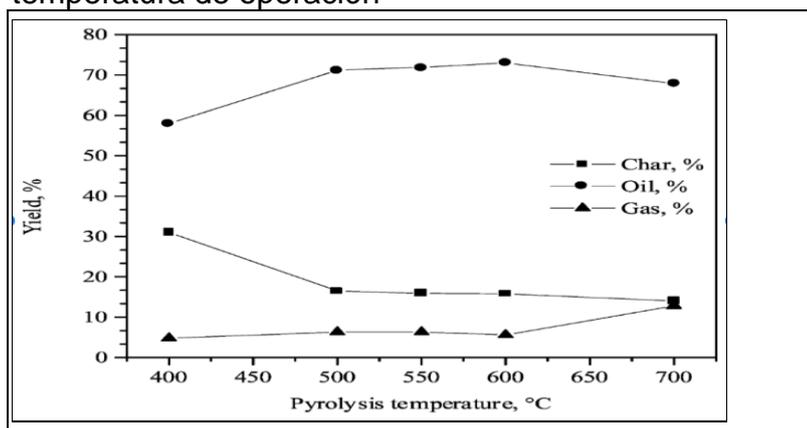
² Ibid.

algunos otros compuestos aromáticos. Entre los productos sólidos se encuentran residuos carbonosos, los cuales son usados para la producción de carbón activo³.

La idea principal de la gasificación es aumentar la fracción molar de los compuestos gaseosos hasta en un 85% (criterio de Mavitec Green Energy). Para ello se eleva la temperatura hasta⁴ 1073 K, para que así ocurra la reacción química donde se convierten materiales orgánicos en estado sólido y líquido en gases ricos en carbono y con un alto poder calorífico. La gasificación al igual que la pirólisis requiere de un reactor en donde realizar el proceso y debe contar con una atmósfera controlada de oxígeno. El producto principal de la gasificación es el CO, pero también se producen algunos otros gases de síntesis como el metano y el hidrógeno⁵. En la siguiente gráfica tomada se muestra el desarrollo del proceso de pirólisis y gasificación, a medida que la temperatura empieza a aumentar. Allí se observa el comportamiento molecular de la biomasa al ser sometida a diferentes temperaturas de operación.

Es por ello por lo que es de vital importancia tener en cuenta la temperatura de operación como variable del proceso, ya que de esta depende el tipo y la cantidad de productos biocombustibles que se van a generar cuando ocurren estos procesos termoquímicos. En la siguiente gráfica se observa cómo se relaciona el porcentaje de biogás, bioaceite y residuos sólidos, con la temperatura a la cual opera el reactor.

Gráfica 1. Porcentaje de productos en función de la temperatura de operación



Fuente: ONEY, Ozlem. Slow, fast and flash pyrolysis of rapeseed. 2003

³ MENDOZA GENEY, Libardo. Pirólisis de biosólidos en horno rotatorio. Universidad Nacional de Colombia (Bogotá), 2016. p. 1-249.

⁴ Ibid.

⁵ MOLINO, Antonio, CHIANESE, Simeone, & MUSMARRA, Dino. Biomass gasification technology: The state of the art overview. Journal of Energy Chemistry, 2016, Vol. 25, n° 1, 10–25.

1.2 BIOMASA

Se hace referencia a todo biomaterial de carácter netamente orgánico y renovable que tiene un origen vegetal tales como algas, plantas, árboles, desechos orgánicos o animal. La biomasa se puede utilizar para producir combustibles o biogás, aprovechable como un sustituto de combustibles fósiles como el gas natural, el carbón mineral o los hidrocarburos⁶. La biomasa es energía solar almacenada y convertida por la vegetación en materia orgánica que al pasar por los procesos descritos anteriormente libera la energía que contiene⁷.

1.2.1 Tipos de biomasa. Uno de los parámetros más relevantes y determinantes de la biomasa es su contenido de humedad, dado que la elección del proceso de conversión depende de esto. La biomasa húmeda puede ser sometida a procesos biológicos para lograr su transformación energética. Cuando la biomasa tiene bajos porcentajes de humedad es posible utilizar procesos fisicoquímicos como la pirólisis, la gasificación y la combustión con el fin de liberar la energía acumulada en la biomasa. De lo anterior se puede desprender una clasificación en función de la humedad para la biomasa:

Tabla 1. Clasificación de la biomasa según contenido de humedad

Tipo	Descripción
Plantas leñosas	Contenido de humedad bajo.
Plantas herbáceas o gramíneas	Se pueden presentar con alto o bajo contenido de agua dependiendo de las condiciones externas.
Abonos	Elevado contenido de agua.
Plantas acuáticas	Elevado contenido de humedad.

Fuente: elaboración propia

1.2.2 Definición propiedades de la biomasa. Algunas de las propiedades fisicoquímicas relevantes de la biomasa que están relacionadas con la eficiencia del biomaterial son la conductividad térmica y el calor específico. Las propiedades para la fase sólida la cual se asume homogénea, se tomaron de la tesis de Mendoza, dado que, para este proyecto se delimito que no se realizaría una caracterización específica de la biomasa.

Dichas propiedades se enlistan a continuación:

⁶ GARCÍA, Harold. Modelación de la gasificación de biomasa en un reactor de lecho fijo. Tesis presentada como requisito parcial para optar al título de Magíster en Ingeniería - Ingeniería Mecánica. Universidad Nacional de Colombia. Bogotá. 2011.

⁷ CERDÁ, Emilio. Energía obtenida a partir de biomasa. Cuadernos Económicos de ICE, 2012, n.º 83

Tabla 2. Propiedades químicas fase sólida

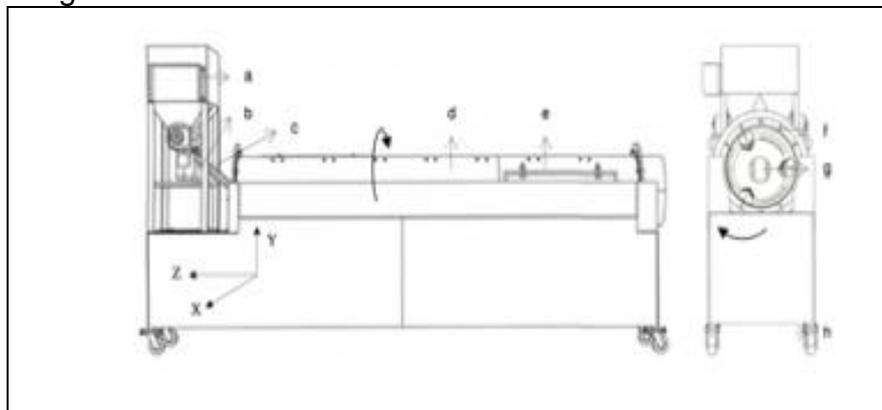
Propiedad	Valor
Calor específico (Cp)	$1.52 \frac{KJ}{KgK}$
Conductividad térmica (λ)	$0.85 \frac{w}{mk}$

Fuente: MENDOZA GENEY, Libardo. Pirólisis de biosólidos en horno rotatorio. Universidad Nacional de Colombia (Bogotá), 2016. p. 1-249

La determinación de las anteriores propiedades se realizó por Mendoza siguiendo metodologías establecidas y según los parámetros de las normas que aplican para cada caso, así como experimentos de los cuales se concluyó que los valores de dichas propiedades son medidas promedio y constantes.

1.3 HORNO ROTATORIO

Figura 1. Horno rotatorio



Fuente: HARSONO, Iwan. Heat Transfer Mechanism in an Indirectly Heated Rotary Kiln with Lifters and Role in Scaling. Department of Chemical Engineering. Thesis is presented for the Degree of Doctor of Philosophy of Curtin University of Technology. Australia. 2009.

El horno rotatorio es utilizado principalmente en la industria del cemento, en donde se encarga de la calcinación del coque⁸. La implementación de estos hornos se dio en los años 80 y en los últimos años sus usos y aplicaciones se extienden a otras ramas diferentes a la del cemento. Algunas industrias los buscan utilizar en pro de realizar tratamientos termoquímicos como pirólisis, gasificación y combustión, además de otras aplicaciones⁹. Debido a las características que este presenta se hace posible utilizarlo como un reactor de lecho móvil y calentamiento indirecto, que funciona bajo una atmósfera controlada de oxígeno gracias a sus sellos y aislamientos.

⁸ KLOSE, Wolfgang; RINCÓN, Sonia y GÓMEZ, Alexander. Procesos de transporte de biomasa y carbonizados en hornos rotatorios. Alemania: Kassel University Press, 2016

⁹ MENDOZA GENEY. Op. Cit.

El horno se compone de un tubo cilíndrico de acero revestido con material refractario, que es el componente principal del horno rotatorio, ya que es el lugar en el que ocurren las reacciones y por lo tanto se convierte en el área eficaz para realizar el estudio de la transferencia de calor¹⁰. Cuando se habla de que el horno cuenta con un sistema de calentamiento indirecto, lo que se quiere decir es que en ningún momento del proceso hay contacto entre el medio de calentamiento y los productos que se procesan al interior de este. Algunas de las ventajas de utilizar el calentamiento indirecto son la elevada tolerancia para el procesamiento de materia prima con diferentes propiedades físicas y químicas¹¹. Debido al tipo de calentamiento que se utiliza en el reactor el fenómeno de la transferencia de calor por radiación presenta es pequeño y para efectos del presente proyecto se considera despreciable.

Al interior del horno rotatorio se tiene una atmósfera controlada y limitada de oxígeno, por lo que no se presenta la combustión de la fase volátil y esto permite obtener una mezcla de gases combustibles con un alto poder calorífico; este último es fácil de transportar y puede ser usado en procesos de generación eléctrica y en procesos térmicos¹².

1.3.1 Parámetros de operación y perfil de alturas. El ingreso de la biomasa al horno rotatorio se realiza con determinado flujo másico mientras simultáneamente el horno gira con una velocidad rotacional constante a lo largo del proceso. Como consecuencia de esto y del grado de llenado se forma una cama de altura variable a lo largo del horno rotatorio. Dicha cama es de suma importancia para determinar los fenómenos de transferencia de calor que tienen lugar en la fase volátil. La altura variable de la cama de material cambia según la rotación del cilindro, el grado de inclinación, las características del material y las características físicas de la superficie de la pared del cilindro.

Como previamente se mencionó el tipo de movimiento se produce dependiendo de la velocidad de rotación del reactor y del grado de llenado, que es el volumen de la materia prima que se introduce en el cilindro. De acuerdo a Mendoza los perfiles más representativos de los producidos al interior del cilindro son: Deslizamiento generalmente se presenta cuando se tienen grados de llenado o volúmenes de materia prima bajos que no sobrepasan el 7,5% del total del horno y con velocidades de rotación altas¹³. Para este caso la cama de material de desliza completa y de manera continua sobre la pared del cilindro.

Estas son condiciones que no representan el funcionamiento habitual del horno rotatorio; El movimiento de Avalancha, se presenta una acumulación de partículas en la superficie provocando de esta manera la formación de avalanchas de material al interior del horno, se produce generalmente cuando se incrementa el grado de llenado local. Por último, en el movimiento de rodado el

¹⁰ MARTÍNEZ, Marcos. Cementos. Horno Rotatorio. Informe. [0]:2005.

¹¹ KUNII, Daizo y CHISAKI, Tatsu. Rotary Reactor Engineering. Science Direct. 2008.

¹² MENDOZA GENEY. Op. Cit.

¹³ Ibid.

material se desliza de una manera continua sobre la superficie de la cama de una forma armónica sin producir pendientes en la sección superior de la superficie de la cama, por lo que las condiciones de mezcla son mejores¹⁴. Dichos movimientos se pueden definir bajo ecuaciones diferenciales que describen la variación de la altura de la cama a lo largo del cilindro de acuerdo con cada uno de los parámetros a lo largo del horno.

1.3.2 Definición de parámetros geométricos. Para efectos del presente proyecto únicamente se trabajó con el perfil de alturas generado cuando el movimiento al interior del horno rotatorio es de rodado. Esto debido a que es el moviendo más estudiado en la bibliografía y con condiciones más estables, por lo que presenta unas condiciones de mezcla óptimas para la transferencia de calor, al no presentar grandes espacios entre partículas. Así como se mencionó anteriormente cada movimiento transversal de la biomasa dentro del horno corresponde a una ecuación diferencial; el perfil generado en el movimiento de rodado es:

Ecuación 1. Ecuación diferencial del perfil de alturas dentro del horno.

$$\frac{dh}{dz} = \frac{3q \sin \theta r}{4\pi n \cos \theta r ((2R - h)h)^{\frac{3}{2}}} - \frac{\phi}{\cos \theta r}$$

$\theta r = 41^\circ$, Ángulo de rodado (grados)

$\phi = 1.4^\circ$, Ángulo inclinación del horno

$q = \frac{4}{60} \text{ m}^3/\text{min}$, Caudal en m^3/min

$R = 0.064 \text{ m}$, Radio del horno (m)

$h =$ Altura de la cama (m)

$n = 2.5 \text{ RPM}$, Velocidad angular (rpm)

Con el fin de encontrar el área efectiva de transferencia de calor entre la fase volátil y la fase sólida se dio solución a la ecuación 1 por medio del método de las diferencias finitas hacia delante. La cual funciona para realizar discretizaciones de este tipo ya que aproxima la solución de ecuaciones diferenciales ordinarias y las derivadas parciales por medio de expresiones algebraicas con los valores de la variable dependiente en un determinado número de puntos¹⁵. A continuación en la ecuación 2 se muestra la forma general de aplicar las diferencias finitas para solucionar ecuaciones diferenciales.

¹⁴ Ibid.

¹⁵ HERNÁNDEZ GARCÍA, Guillermo. El método de diferencias finitas. [Internet]. s.f. Recuperado de http://mmc2.geofisica.unam.mx/cursos/hidrogeologia/NotasCurso/1-MDF1_1-10.pdf

Ecuación 2. Forma general diferencia finita hacia adelante.

$$\frac{du}{dx} = \frac{U(i+1) - U(i)}{\Delta x}$$

Ecuación 3. Método diferencias finitas aplicado a el perfil de alturas.

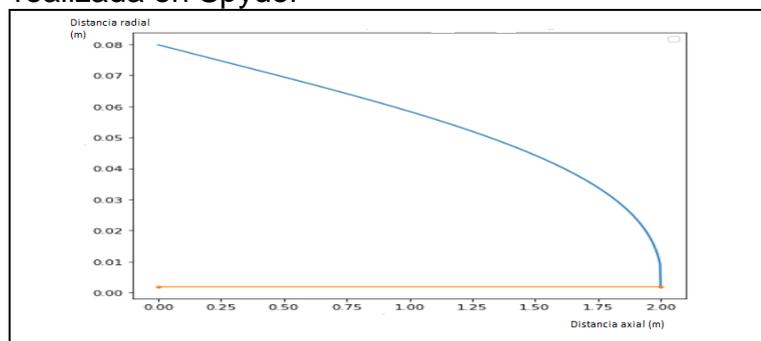
$$\frac{h(i+1) - h(i)}{\Delta x} = \frac{3q \sin \theta r}{4\pi n \cos \theta r ((2R - h)h)^{\frac{3}{2}}} - \frac{\phi}{\cos \theta r}$$

Al momento de realizar la aproximación, los resultados de la ecuación diferencial que describe el problema se reemplazan por un número determinado de ecuaciones algebraicas para este caso se escogieron 1000 puntos, cada una de estas ecuaciones en términos de los valores de la variable dependiente en los puntos seleccionados. Una vez se iguala la Ecuación diferencial del perfil de alturas a la diferencia finita hacia adelante y se ordenan los términos correctamente se obtiene la siguiente expresión:

$$h[i-1] = \left(\frac{3q \cdot \sin(\theta) \cdot \Delta x}{4\pi n \cdot \cos(\theta) \cdot ((2R - h[i]) \cdot h[i])^{3/2}} - \frac{\phi}{\cos(\theta) \cdot \Delta x} + h[i] \right)$$

Con ayuda de un gestor matemático llamado Spyder se desarrolló un algoritmo parametrizado que permite realizar fácilmente la iteración de los 1000 puntos, evaluando de esta forma la ecuación de rodado a lo largo del horno rotatorio hasta lograr un resultado muy aproximado del perfil de alturas.

Gráfica 2. Perfil de alturas movimiento de rodado realizada en Spyder



Fuente: elaboración propia

1.4 FASE VOLÁTIL

En este proyecto de tesis se realiza la simulación del comportamiento térmico de la fase volátil presente en el horno previamente descrito. Esto con el fin de poder conocer la temperatura a lo largo del reactor y saber con qué condiciones de

trabajo se debe trabajar para poder potenciar la producción de biocombustibles. Con fase volátil se hace referencia a la fracción de gases producidos mediante pirólisis y gasificación. Se compone principalmente por una mezcla de gases que contienen hidrógeno, metano, dióxido de carbono y monóxido de carbono¹⁶. Los compuestos y la calidad de estos son de suma importancia ya que son el resultado de los procesos termoquímicos que se tienen al interior del horno rotatorio. No se realizarán simulaciones de las reacciones químicas al interior del horno, la simulación que se hace estudia la transferencia de calor por conducción que ocurre entre la fase volátil y cada una de sus fronteras.

1.4.1 Definición de propiedades de la fase volátil. Adicionalmente, las composiciones de la fase volátil que se utilizaron para realizar la determinación de las propiedades se tomaron del trabajo reportado por Mendoza, en específico para el experimento que maneja un setpoint de 1123 k.

Tabla 3. Porcentaje en peso de compuestos gaseosos presentes en el interior del horno

Compuesto	Xi (kg/kg)
Alquitranes	0.19
H ₂ O	0.05
CO	0.18
CO ₂	0.18
CH ₄	0.05
H ₂	0.03
C ₂ H ₆	0.04
C ₃ H ₈	0.0006
C ₇ H ₈	0.02
C ₆ H ₆	0.13

Fuente: MENDOZA GENEY, Libardo. Pirólisis de biosólidos en horno rotatorio. Universidad Nacional de Colombia (Bogotá), 2016.

¹⁶ MENDOZA GENEY. Op. Cit.

Tabla 4. Coeficientes para calcular el color específico en función de cada especie.

Especie	A0	A1	A2	A3	A4
H2O	4,395	-4,186	1,405	-1,564	0,632
CO	3,912	-3,913	1,182	-1,302	0,515
CO2	3,259	1,356	1,502	-2,374	1,056
CH4	4,568	-8,975	3,631	-3,407	1,091
H2	2,883	3,681	-0,772	0,692	-0,213
N2	3,539	-0,261	0,007	0,157	-0,099
C2H6	4,178	-4,427	5,66	-6,651	2,487
C3H8	3,847	5,131	6,011	-7,893	3,079
C7H8	3,866	3,558	13,136	-18,659	7,69
C6H6	3,551	-6,184	14,365	-19,807	8,234

Fuente: POLING, Bruce; PRAUSNITZ, John y O'CONNELL, Jhon. The properties of gases and liquids. Fifth edition. New York: McGraw-Hill. 2001.

A. Calor específico para las especies de presentes en la fase volátil

Para este cálculo se dio solución a las relaciones polinomiales mostradas en la Ecuación 2, tomada de lo reportado por Bruce E. Poling y compañía en su libro The Properties of Gases and Liquids, la cual está en función de la temperatura planteada en grados absolutos o kelvin. Con los coeficientes correspondientes para cada compuesto, los cuales se encuentran descritos en la Tabla 5, se encuentra el valor de cada propiedad en función del compuesto. Asimismo, se hizo el cálculo de las propiedades globales con base en la ecuación número 2. De lo anterior se tiene que el valor para el calor específico de la fase volátil es $C_p = 2365.6944$ (J kg⁻¹ K⁻¹).

Ecuación 4. Relación polinomial calor específico en función de temperatura.

$$\frac{C_{pi}}{R} = a + bT + cT^2 + dT^3 + eT^4$$

Ecuación 5. Relación para el cálculo del calor específico global de la fase volátil.

$$C_{pG} = \sum_{i=1}^n (X_i)c_{pi}$$

Donde:

C_{pi} = Calor específico de cada especie

C_{pG} = Calor específico de cada especie

X_i = Concentración de cada especie

B. Viscosidad dinámica

Para el cálculo de la viscosidad dinámica se resolvieron las relaciones polinomiales dependientes de la temperatura en grados kelvin para encontrar la viscosidad dinámica de cada especie. Para el cálculo global de la propiedad se utilizó lo descrito por Bruce E. Poling y compañía. Una vez desarrollado el cálculo, se obtuvo que la viscosidad dinámica para la fase volátil es de 3.1953e-05 (Pa s).

Ecuación 6. Relación polinomial viscosidad dinámica en función de temperatura.

$$nG = \sum_{i=1}^n \left(\frac{x_i n_i}{\sum_{j=1}^n x_j \phi_{ij}} \right)$$

En donde

$$\phi_{ij} = \frac{\left(1 + \sqrt{\frac{n_i}{n_j}} \sqrt{\frac{M_i}{M_j}} \right)^2}{\sqrt{8 + \left(1 + \frac{M_i}{M_j} \right)}}$$

nG = viscosidad dinámica global

X_{ij} = Fracción molar

n_i = viscosidad dinámica de cada compuesto

M_{ij} = Masa molar de cada componente

C. Conductividad térmica

Se dio solución a la relación polinómica que describe la conductividad térmica para la fase volátil, de esta forma se encontraron los valores de conductividad térmica para cada especie. El cálculo de las propiedades globales se realizó de acuerdo con lo reportado por Wilkes descrita por Bruce E. Poling¹⁷ y se utilizaron los porcentajes de cada uno de los componentes previamente mencionados en la Tabla 3. De lo anterior se determinó que el valor para la conductividad térmica de la fase volátil es 0.1682 (W m⁻¹ K⁻¹).

Ecuación 7. Relación polinomial conductividad térmica en función de temperatura.

$$\lambda_i = A + BT + CT\lambda^2 + DT^3$$

¹⁷ POLING, Bruce; PRAUSNITZ, John y O'CONNELL, Jhon. The properties of gases and liquids. Fifth edition. New York: McGraw-Hill. 2001.

En donde se hace necesario utilizar la temperatura en grados absolutos, la conductividad térmica se obtiene en $W/m K$ y los coeficientes para cada una de las especies se muestran a continuación:

Tabla 5. Coeficientes para la determinación de la conductividad térmica para las especies de la fase volátil.

Especie	Coeficientes			
	$A \cdot 10^{-3}$	$B \cdot 10^{-5}$	$C \cdot 10^{-8}$	$D \cdot 10^{-11}$
CO	0.507	9.12	-3.52	0.812
CO2	-7.215	8.015	0.548	-1.053
CH4	-1.869	8.727	11.79	-3.614
H2	8.099	66.89	-41.58	0.553
N2	0.392	9.816	-5.067	1.504
H2O	7.341	-1.013	18.01	-9.1
Benceno	-8.455	3.618	9.799	-4.058
Tulueno	7.596	-4.008	0.237	-9.305

Fuente: MENDOZA GENEY, Libardo. Pirólisis de biosólidos en horno rotatorio. Universidad Nacional de Colombia (Bogotá), 2016

Ecuación 8. Cálculo global de la conductividad térmica

$$\lambda G = \sum_{i=1}^n \left(\frac{X_i \lambda_i}{\sum_{j=1}^n (X_j \phi_{ij})} \right)$$

Donde
$$\phi_{ij} = \frac{\left(1 + \sqrt{\frac{n_i}{n_j}} \sqrt{\frac{M_i}{M_j}} \right)^2}{\sqrt{8 + \left(1 + \frac{M_i}{M_j} \right)}}$$

λG = Constante de conductividad térmica global

X_{ij} = Fracción molar

M_{ij} = Masa molar de cada componente

D. Densidad

Se realizó el mismo procedimiento para calcular la densidad para cada una de las especies y considerando que la fase volátil se comporta como un gas ideal; este procedimiento se realizó a presión atmosférica constante dado a las condiciones del horno rotatorio. Posteriormente se calculó el valor de densidad global para la fase volátil, el cual es $0.21 \text{ (kg m}^{-3}\text{)}$.

Ecuación 9. Cálculo densidad para cada una de las especies.

$$\rho_i = \frac{p}{RT}$$

Donde:

ρ_i = Densidad de cada especie

R = Constante de los gases (J/(kmol K))

T = Temperatura en grados absolutos

Ecuación 10.
Cálculo densidad
global para la fase
volátil.

$$\rho_G = \sum_{i=1}^n (X_i \rho_i)$$

E. Coeficiente de difusividad térmica

Es el valor obtenido previamente para la conductividad térmica dividido en el producto entre el valor de la densidad y la capacidad calorífica específica. Este índice expresa la velocidad de cambio y el flujo de temperaturas entre el material hasta que este alcanza el equilibrio térmico, al utilizar la ecuación 5 se calculó el valor del coeficiente de difusividad térmica y arrojó un valor de $3.37 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$.

Ecuación 11.
Cálculo de
difusividad
térmica

$$\alpha = \frac{k}{\rho C_p}$$

Donde

α = Coeficiente de difusividad térmica

k = Coeficiente de conductividad térmica

ρ = Densidad

C_p = Calor específico a presión constante

1.5 TRANSFERENCIA DE CALOR

Es la energía en tránsito que, debido a una diferencia de temperaturas, siempre que existe una diferencia de temperaturas en un cuerpo o entre cuerpos ocurre una transferencia de calor¹⁸. Lo que quiere decir que el calor fluye de la región más caliente hacia la más fría en obediencia a la segunda ley de la termodinámica.

Cuando se habla de conducción se hace referencia a que el gradiente de temperatura se presenta en un medio estacionario que puede ser un fluido o un sólido. La velocidad a la que fluye el calor por conducción depende de la

¹⁸ INCROPERA, Frank y DEWITT, David. Fundamentos de transferencia de calor. Cuarta edición. México: Pearson Prentice Hall. 1999.

Conductividad Térmica K, la cual es una propiedad física de cada material y también del gradiente de temperatura por el área a través de la que se transfiere el calor (ver Ecuación 1). Partiendo de esta ecuación y del principio de conservación de energía, se obtiene una ecuación de gobierno que describe cómo dicha energía liberada se difunde tanto en el espacio como en el tiempo. Este comportamiento térmico ocasionado por conducción de calor, se describe con la Ley de Fourier. Esta ley explica cómo se transfiere calor de un sistema a otro, de esta manera se dice que el calor tiene magnitud y dirección. La transferencia de calor ocurre del sistema con mayor carga térmica hacia el sistema con menor carga térmica, este fenómeno ocurre debido al choque de las partículas en movimiento, esto solo cuando se habla de gases y líquidos.

Ecuación 12.
Ecuación
transferencia de calor
por conducción.

$$Q = -k \frac{dT}{dx}$$

Donde:

Q= flujo de calor

k= constante de conductividad térmica

$\frac{dT}{dx}$ = cambio de temperatura en función de distancia axial

1.6 PERFILES DE TEMPERATURA

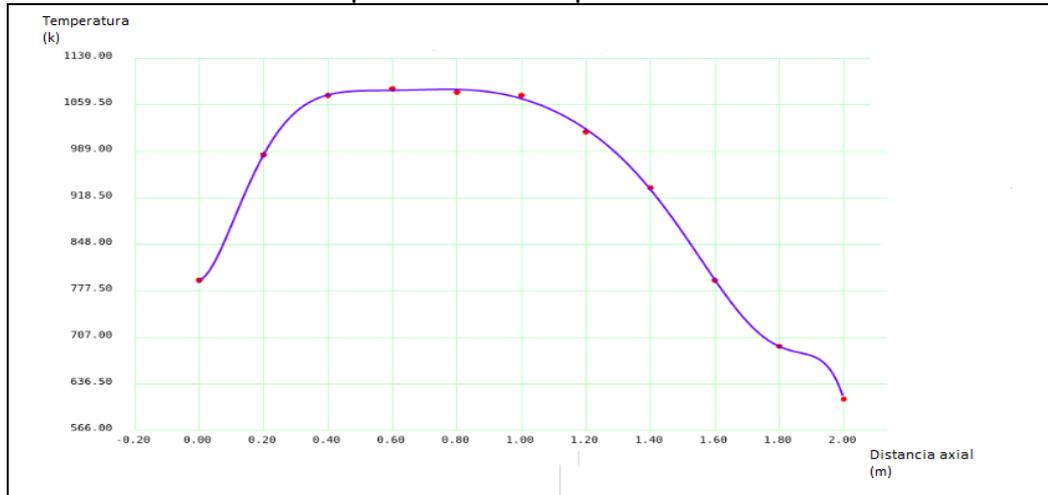
Con el fin de realizar la simulación de la transferencia de calor por conducción en la fase volátil, se deben conocer las condiciones térmicas de cada una de las fronteras de esta fase, por lo que es importante realizar un análisis de qué pasa en cada una de dichas fronteras.

Con unas condiciones de borde adecuadas y junto con las ecuaciones de gobierno es posible simular el comportamiento térmico al interior del horno. Es por ello que se necesitan las condiciones de temperatura a la entrada, a la salida, en la pared del horno y de la fase sólida. Estas son las cuatro condiciones de frontera que se deben establecer para lograr hacer la simulación computacional de la fase volátil.

1.6.1 Perfil de temperaturas pared del Horno Rotatorio. Para poder realizar un modelo térmico se deben establecer las condiciones de fronteras del sistema estudiado, en este caso la fase volátil. De esta forma se definen las condiciones físicas de los alrededores. La fase volátil tiene contacto con la pared del horno y la fase sólida, la entrada del horno y la salida del horno. Con el fin de definir la mejor condición de borde para la solución del problema, se decide trabajar con el perfil de temperaturas generado en la pared del horno, el cual fue determinado en la tesis de doctorado de Mendoza, por medio de pruebas en vacío y sin biomasa, donde se midió la temperatura a lo largo del horno rotatorio.

De esta manera, se establece el perfil de temperaturas que se muestra a continuación¹⁹:

Gráfica 3. Perfil de temperaturas de la pared del horno



Fuente: elaboración propia

En la gráfica 3 se observa cómo cambia la temperatura a lo largo del eje axial del horno rotatorio, cuyo largo es de dos metros. Después de establecer el comportamiento térmico de la pared del horno se realizó una regresión para encontrar el polinomio algebraico que describe el perfil de temperaturas. Se encontró que el polinomio más exacto y que más se acerca al perfil real era el de grado 9; se realizó entonces la regresión y se encontró una expresión válida para utilizar como una condición de borde como lo es el siguiente polinomio:

$$T = -1990.83 x^9 - 17902.17x^8 - 68151.39x^7 + 142963.46x^6 - 179451.30x^5 + 135920.01x^4 - 58610.58x^3 + 11552.63x^2 + 140.99x + 793.02$$

Una vez conocido el polinomio que describe el comportamiento térmico a lo largo de la pared del horno, es posible ingresar esta condición de frontera en cada una de las herramientas computacionales y lograr la discretización por medio de elementos y volúmenes finitos.

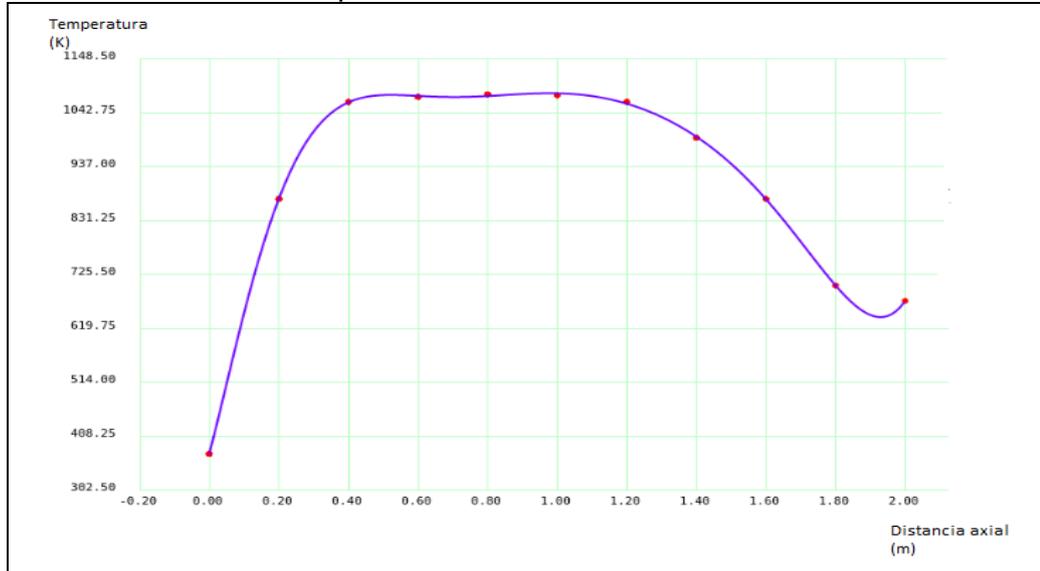
Para garantizar que el polinomio utilizado es adecuado se calculó el coeficiente de correlación, el cual demuestra la relación entre cada una de las variables de la ecuación. Este coeficiente es el cociente entre la covarianza de las variables y la desviación estándar de cada una de las mismas, este cálculo dio un coeficiente de correlación 0.99. Cuando se tiene un coeficiente cercano a uno se demuestra que relación entre las variables es positiva y casi ideal, ya que el resultado es muy cercano a cero. Con esto se demuestra que una variable es dependiente de la otra.

1.6.2 Perfil de temperaturas de fase sólida. Al igual que el perfil térmico anterior el perfil de la fase sólida se tomó de la misma fuente. Para encontrar

¹⁹ MENDOZA GENEY. Op. Cit.

este comportamiento, el autor también realizó experimentaciones para encontrarlo. Se tomó el perfil de la biomasa obtenido en el experimento que fue desarrollado a 1123 K, ya que, al ser la temperatura de operación más alta, es en la que se presenta la gasificación y pirólisis y por tanto hay mayor producción de biogases y combustibles líquidos.

Gráfica 4. Perfil de temperaturas de la fase sólida



Fuente: elaboración propia

Se realizó una regresión de grado 10, con el fin de tener una expresión la cual se pueda usar como condición de borde para dar solución al problema térmico. Con esto se obtuvo el siguiente polinomio para describir el perfil de temperaturas de la fase sólida.

$$T=7496.72x^{10}-75660.02x^9+328794.60x^8-804612.28x^7+1218478x^6-1176063.63x^5+715893x^4-257838.099x^3+44859.51x^2-346.18x+372.99$$

Para este polinomio también se calculó el coeficiente de correlación y se encontró al igual que en el caso anterior para determinar la relación de dependencia entre las variables, es decir la temperatura y la longitud del horno. Se calculó un coeficiente de correlación de 0.99, se concluye que es una relación positiva casi ideal, pues es muy cercana a uno.

2. FORMULACIÓN DE LOS MODELOS MATEMÁTICOS

2.1 ECUACIONES DE GOBIERNO

Para empezar con el desarrollo del método numérico se requiere un modelo matemático que está compuesto por un conjunto de ecuaciones diferenciales con sus respectivas condiciones iniciales y de borde²⁰. Dichas ecuaciones tienen como principal objetivo describir el problema que se desea estudiar. En aras de dar solución al sistema de ecuaciones diferenciales planteado se debe seleccionar alguno de los métodos numéricos existentes como volúmenes finitos, elementos finitos o diferencias finitas, para realizar la discretización del modelo matemático.

2.2 MÉTODO NUMÉRICO DE VOLÚMENES FINITOS

A continuación, se describen los teoremas y esquemas matemáticos que se utilizaron para darle solución al modelo térmico por medio de los volúmenes finitos.

2.2.1 Teorema de transporte de Reynolds. Al trabajar con fluidos en movimiento se utilizan volúmenes de control que son regiones espaciales por las que cruza una masa en un tiempo controlado; con el paso del tiempo las partículas atraviesan todo el volumen de control y lo abandonan, pero siempre habrá una cantidad constante de masa en el volumen establecido. En estos volúmenes la forma y el tamaño podrían variar según el análisis lo requiera. El teorema de transporte de Reynolds relaciona la manera en que cambia una propiedad extensiva ϕ con respecto al tiempo en un volumen de control, en otras palabras, la razón de cambio de ϕ en el sistema con respecto al tiempo es igual a la razón de cambio de ϕ con respecto al tiempo en el volumen de control más el flujo neto de ϕ hacia fuera de esta región.

Para evaluar el cambio de estas propiedades se da el teorema de Reynolds, donde ϕ es la propiedad que transporta el fluido y n es la propiedad intensiva del mismo. La rapidez de variación de ϕ dentro del sistema es igual a la rapidez de variación de ϕ dentro del volumen de control más el flujo de ϕ a través de la superficie de control. De lo anterior se deduce el siguiente teorema, donde ρ es la densidad del fluido, t es el tiempo, $dvol$ es la diferencial de volumen dentro del volumen de control, $v \cdot dA$ es el producto escalar entre la velocidad de flujo y la diferencial de área que atraviesa. La primera integral está evaluada en el volumen de control y la segunda en la superficie del volumen de control.²¹

²⁰ SEPÚLVEDA VILLARROEL, Víctor. Simulación de la cinética del secado a baja temperatura de *Eucalyptus nitens*. Universidad del Bío-Bío. Tesis presentada en el Departamento de Ingeniería en Maderas. Departamento de Ingeniería en Maderas. Santiago de Chile, 2014.

²¹ CENGEL, Yunus A; CIMBALA, John M. Mecánica de fluidos. Tercera edición. México: McGraw Hill. 2006.

Ecuación 13. Teorema de transporte de Reynolds

$$\frac{d\phi}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{vc} n \rho dvol + \int_{sc} n \rho v dA n$$

Este teorema de transporte es una generalización en tres dimensiones de la integral de Leibniz, que se basa en las leyes de conservación de energía en mecánica de fluidos. En virtud de trabajar con este teorema se utilizan volúmenes de control, acción que permite relacionar las ecuaciones de gobierno del sistema y las ecuaciones para cada volumen de control.

2.2.2 Ecuación de Laplace. Es importante destacar que las leyes de conservación son vitales para el desarrollo del modelo térmico, mediante estas leyes se va a garantizar que la energía y la masa se mantengan constantes tanto a la entrada como a la salida del sistema. Esto quiere decir que de toda energía y masa que entra debe salir la misma cantidad que entró al horno. Después de tener esto claro, se evalúa el comportamiento físico del problema a analizar y se determina si es de manera estable o transitoria.

El problema se analizará de forma estable por cuestiones de facilidad a la hora de hacer las simulaciones computacionales. Para darle solución a este tipo de problemas, se utiliza la ecuación parcial diferencial de Laplace. Esta es una ecuación de derivadas parciales de tipo elíptico, la misma puede ser utilizada en electrostática, mecánica cuántica y mecánica de fluidos. Esta ecuación describe la transferencia de calor por conducción de un fluido incompresible en flujo estable. Esta ecuación expresa cómo cambia una propiedad ϕ en función de su ubicación. Se iguala a cero la ecuación, pues el modelo térmico se tomó en estado estable.²²

Ecuación 14. Ecuación de Laplace

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} = 0$$

En esta ecuación se puede evaluar el cambio de una propiedad ϕ en cada una de las dimensiones del modelo. Es una ecuación armónica donde se relaciona el valor promedio en una superficie esférica y el valor en el centro de la esfera. Esta relación se establece en el teorema armónico de Gauss. Para utilizar el teorema de Laplace es necesario establecer las condiciones de frontera del problema evaluado.

²² ZILL, Dennis Ecuaciones diferenciales con aplicaciones de modelado. Sexta edición. Mexico: International Thompson Editores. 2003

2.3 MÉTODO DE NUMERICO DE ELEMENTOS FINITOS

2.3.1 Ecuación de Poisson. Es una ecuación en derivadas parciales al igual que la ecuación de Laplace, descrita anteriormente. Se conoce como la corrección de la ecuación diferencial parcial de segundo orden de Laplace para la energía potencial. Al igual que la ecuación de Laplace, Poisson puede ser utilizado para resolver diferentes tipos de problemas físicos no homogéneos. Incluidos problemas de conducción de calor, electrostática y difusión de sustancias, entre otras. Si la ecuación de Poisson es igual a cero se convierte en Laplace. De una manera muy general la ecuación de Poisson puede ser escrita de la siguiente forma²³:

Ecuación 15.
Poisson de forma
general

$$\Delta\beta = f$$

En donde f es el término fuente o de generación y β es una función real o compleja desconocida y Δ es el operador laplaciano. Para el caso de estudio se tiene en cuenta la ecuación de calor como la función real. El significado y el valor de cada una de las variables dependen del tipo de problema y de la rama de la física en la cual esta se aplica²⁴. Para tres dimensiones con coordenadas definidas la ecuación de Poisson se puede escribir así:

Ecuación 16. Ecuación de Poisson para tres dimensiones

$$\left(\frac{\delta^2}{\delta x^2} + \frac{\delta^2}{\delta y^2} + \frac{\delta^2}{\delta z^2}\right)\varphi(x, y, z) = f(x, y, z)$$

En general si se quiere aplicar la ecuación de Poisson a un problema térmico se expresa de la siguiente forma:

Ecuación 17. Poisson expresada de forma general para un problema térmico

$$\nabla^2 T = -\frac{Q(X, Y)}{\lambda}$$

DONDE: T = Campo de temperatura

$Q(x,y)$ = Término fuente de calor

λ = Conductividad térmica

²³ GABALDÓN, Felipe. Capítulo 2: la ecuación de Poisson. [Internet]. 2016. Recuperado de <http://w3.mecanica.upm.es/~felipe/mef0708/capitulo2.pdf>

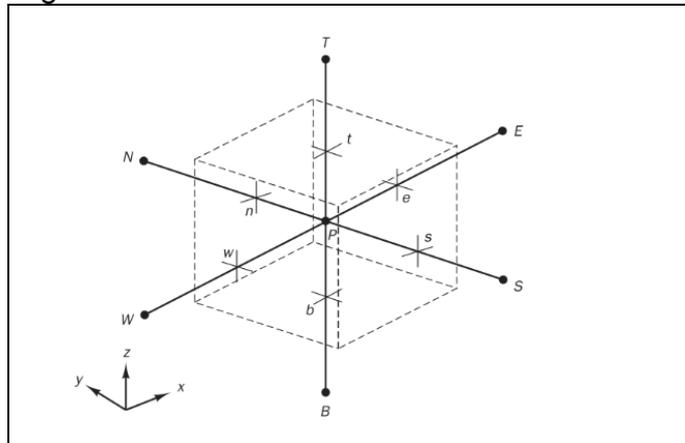
²⁴ CAÑIZO RINCÓN, José. Cosas sencillas sobre las ecuaciones de Laplace y Poisson. [Internet]. 2005. Recuperado de <http://canizo.org/tex/elipticas2.pdf>

2.4 MÉTODO DE DISCRETIZACIÓN VOLÚMENES FINITOS

Los volúmenes finitos son un método numérico que permite discretizar y resolver ecuaciones diferenciales de un alto grado de complejidad, este método divide el dominio en volúmenes de control muy pequeños donde se conservan las propiedades extensivas del objeto de estudio. Este es un método especial para usar con problemas de mecánica de fluidos. Con el fin de lograr la discretización del caso de estudio se relaciona la ecuación de Laplace con los volúmenes de control. La principal propiedad del sistema de ecuaciones discretizadas resultante es que la solución obtenida satisface de forma exacta las ecuaciones de gobierno consideradas.

Partiendo de las ecuaciones de transporte y de transferencia de calor se desarrolla un modelo matemático basado en integración. Como se ha dicho antes, el método de los volúmenes finitos requiere que se usen volúmenes de control. Es por ello que el primer paso para la discretización es la creación de esta red, entonces se debe dividir el dominio en los volúmenes de control. Al interior de cada uno de estos se encuentra un nodo principal P y este a su vez tiene seis nodos vecinos a la misma distancia, que se conoce como aproximación en celdas centradas.

Figura 2. Volumen de control con nodos vecinos



Fuente: VERTEEG Y MALALASEKERA. An introduction to computational fluid dynamics. Pearson Education (Inglaterra), 2007.

Luego de tener creada la red de celdas volumétricas se hace la integración de la ecuación de gobierno para cada uno de los volúmenes de control establecidos y así lograr discretizar la ecuación en el nodo P. El paso siguiente es la discretización de las ecuaciones de gobierno para el volumen de control determinado en el nodo central del mismo. Para el caso de los volúmenes finitos la ecuación de gobierno es la ecuación de Laplace que fue descrita anteriormente.

Es importante destacar que no se tiene en cuenta la generación de energía de ningún tipo, es por este motivo que no se incluye tal término en la discretización.²⁵

Para el caso de este modelamiento térmico, ϕ es la variable en la cual se enfoca el análisis y α será el coeficiente de difusividad térmica calculada en el capítulo uno. Este coeficiente es un valor que depende de la densidad, del calor específico y del coeficiente de transferencia de calor de la mezcla de gases analizada. De esta forma, la propiedad extensiva es el coeficiente de difusividad térmica; dado que el objetivo de esta tesis es encontrar la temperatura óptima de operación, entonces la propiedad intensiva para este caso será la temperatura T. Así se discretiza la ecuación de Laplace de la siguiente manera:

Ecuación 18. Discretización de ecuación de Laplace en el nodo central P

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\alpha \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\alpha \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\alpha \frac{\partial T}{\partial z} \right) = 0$$

Teniendo en cuenta lo anterior se debe hacer un análisis en función de los nodos vecinos del nodo central P. De tal manera que si se suman los valores de temperatura (ϕ), cada uno de los volúmenes vecinos y el valor de generación interior se encontrará el valor de temperatura para el nodo P.

Ecuación 19. Ecuación de gobierno discretizada para un nodo P en el centro de un volumen de control

$$a_p \phi_p = a_w \phi_w + a_e \phi_e + a_s \phi_s + a_n \phi_n + a_b \phi_b + a_t \phi_t$$

a_w	a_e	a_s	a_n	a_b	a_t	a_p
$\frac{\alpha_w A_w}{\delta x_{WP}}$	$\frac{\alpha_e A_e}{\delta x_{EP}}$	$\frac{\alpha_s A_s}{\delta y_{SP}}$	$\frac{\alpha_n A_n}{\delta y_{NP}}$	$\frac{\alpha_b A_b}{\delta z_{BP}}$	$\frac{\alpha_t A_t}{\delta z_{TP}}$	$a_w + a_e + a_s + a_n + a_b + a_t$

2.5 MÉTODO DE DISCRETIZACIÓN ELEMENTOS FINITOS

Una de las formas para dar solución a una ecuación diferencial compleja es el método de los elementos finitos. Dicho método consiste en la división de un dominio en varios subdominios, lo que permite ir desde un problema general hacia uno más específico con el fin de posteriormente alcanzar una respuesta global. El método de los elementos finitos es una aproximación numérica, por esto se debe calcular el error en la solución obtenida.

Así pues, es de vital importancia realizar un estudio en el cual se involucre la cantidad de elementos o subdominios utilizados y la convergencia de la respuesta a medida que estos subdominios aumentan. Es un método muy usado

²⁵ VERSTEEG, H. K; MALALASEKERA W. An introduction to computational fluid dynamics the finite volume method. Second edition. Inglaterra. Pearson. 2007

puesto que se tiene la facilidad de introducir dominios de cálculos complejos ya sea en dos o tres dimensiones de igual importancia para la generalidad del método.

Si se desea realizar la discretización de los elementos finitos, uno de los primeros pasos para lograr comprender su funcionamiento y aplicación es entender la solución de la ecuación de Poisson, puesto que este es su punto de partida; dicha ecuación debe ser multiplicada por una función V , que está definida por el dominio espacial y el tipo de elementos utilizados para abordar el problema; la ecuación de allí resultante debe ser integrada en un dominio Ω con el fin de convertir la ecuación diferencial en un problema variacional.

Ecuación 20. Ecuación de Poisson definida en un dominio²⁶.

$$-\int_{\Omega} (\nabla^2 u)v \, dx = \int_{\Omega} f v \, dx$$

Donde:

∇^2 =Término Laplaciano

Ω = Dominio espacial

V = Función espacial

F = Término fuente

u = Función desconocida

Al momento de realizar la formulación variacional se debe velar por mantener el orden de las derivadas de u y V lo más pequeño posible²⁷. El paso a seguir es aplicar la integración por partes para convertir la primera derivada en la ecuación 7, así:

Ecuación 21. Ecuación de Poisson definida

$$-\int_{\Omega} (\nabla^2 u)v \, dx = \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v \, dx - \int_{\partial\Omega} \frac{\partial u}{\partial n} V \, dS$$

En donde:

Ω = Dominio espacial

V = Función espacial

F = Término fuente

u = Función desconocida

Con el fin de definir de manera correcta el problema y que el término desconocido u sea determinado con éxito, es necesario que la ecuación se valide para todas las funciones V en un espacio \hat{V} adecuado. Con lo anterior se define la función variable de la siguiente forma²⁸:

²⁶ Kirby, Robert C. FIAT: Automated Solution of Differential Equations by the Finite Element Method, Volume 84 of Lecture Notes in Computational Science and Engineering. Springer. 2012.

²⁷ KIRBY, Robert C. and LOGG, Anders. A Compiler for Variational Forms. En: ACM TRANSACTIONS ON MATHEMATICAL SOFTWARE. vol. 32, no. 3, 2007.

²⁸ LOGG, Anders, et al. Automated Solution of Differential Equations by the Finite Element Method. Springer, 2012.

Ecuación 22. Problema variacional continuo

$$\int_{\Omega} (\nabla u) \cdot \nabla v \, dx = \int_{\Omega} f v \, dx \quad v \in V$$

La definición correcta del problema se convierte ahora en que se debe encontrar una función que pertenezca a la función de dominio V.

Ecuación 23. Problema variacional continuo con espacios finitos

$$\int_{\Omega} \nabla u_h \cdot \nabla v \, dx = \int_{\Omega} f v \, dx \quad \forall v \in \hat{V}_h \subset \hat{V}.$$

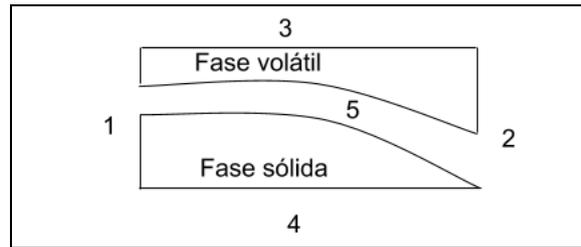
2.6 CONDICIONES DE FRONTERA Y CASOS DE ESTUDIO

Establecer las condiciones de borde para el análisis térmico es una parte fundamental en el desarrollo del problema. Así que si se presentan errores en estas se da lugar a la falta de unicidad en la solución y si se excede la imposición de más condiciones de las necesarias la solución no tendrá sentido mecánica ni numéricamente. Las condiciones de borde se clasifican según el estado inicial en el cual se encuentre el límite del sistema de estudio, y de acuerdo con esto se logra determinar la interacción con los alrededores. Las condiciones iniciales pueden pertenecer a cualquiera de las siguientes tres clases:

1. Condición de tipo Dirichlet, condiciones en las cuales se fija el valor de las variables dependientes en el contorno. Se asignan valores fijos al estado de la frontera. En este caso se asignan valores de temperatura.
2. Condición de tipo Neumann, condiciones en las cuales se fija el valor de la derivada de la variable en los bordes del sistema, es decir, se asigna un cambio de temperatura en cierto tiempo o un flujo de calor.
3. Condición de tipo mixto que es una combinación de las dos anteriores.

En el desarrollo de esta tesis se realizó el análisis particular a cinco casos especiales. Allí se pudo ver cómo los resultados dependen de las condiciones de frontera establecidas. Cada uno de los casos fue simulado por medio de los elementos y volúmenes finitos, lo que permitió la comparación de resultados entre cada método numérico. A continuación, se describe cada uno de los casos a partir de la geometría del problema al interior del horno rotatorio. Se realizaron variaciones en cada una de las fronteras del sistema, esto con el fin de ver la afectación en el comportamiento térmico de la fase volátil cuando se cambian las condiciones de trabajo en el horno. Esto va a permitir que se hagan evaluaciones a la hora de hacer el diseño de reactores para procesamiento de biomasa. Ya que se logra predecir la temperatura de la fase volátil y esto en conjunto con la elaboración del modelamiento térmico de la fase sólida se puede predecir el comportamiento en conjunto al interior del horno. La simulación térmica de la fase sólida hace parte de el mismo macro proyecto al cual este pertenece, pero no se realiza en esta tesis.

Figura 3. Esquema análisis condiciones de borde



Fuente: elaboración propia

En la entrada del horno (punto 1) se ingresó la biomasa a temperatura y presión del ambiente, por lo cual se establece una temperatura de 300 K. En cuanto a la condición de frontera para la pared del horno (punto 4 y 3), se tuvo en cuenta el perfil de temperaturas que genera la resistencia eléctrica que rodea la pared del horno, cuando se configura el horno en un *setpoint* de 1123.15 K. Se hicieron dos variaciones en las condiciones de frontera con la fase sólida y la pared del reactor, en unos casos se tomaron en cuenta los perfiles de temperatura de la fase sólida y de la pared del horno descritos en el capítulo uno en la sección de perfiles de temperatura, y en otros se utilizaron los valores promedio de estos perfiles térmicos.

Caso 1. Para la condición de frontera en la biomasa (punto 5), se tomó una temperatura media fija de 934 K, calculada con el perfil de temperaturas que describe la fase sólida en el capítulo uno. Esta será una condición de tipo Dirichlet, pues se toma una temperatura constante a lo largo del horno. En cuanto a la salida del horno (punto 2), se estableció otra condición Dirichlet con una temperatura fija de 673 K, y para la interacción con la pared se utilizó el perfil de temperaturas que presenta el horno rotatorio, sobre el cual se habló en el capítulo uno, sección 1.6.

Caso 2. Para este caso se decidió usar condiciones tipo Dirichlet en cada una de las cuatro fronteras. Para la entrada se conservó la temperatura ambiente fija de 300 K, en la salida una temperatura de 673 K, en la biomasa se usó la temperatura media calculada de 934 K y para la condición de la pared del horno se usó la temperatura media calculada de 971 K.

Caso 3. Para encontrar la condición de borde entre la fase sólida y la fase volátil se tuvo que calcular el flujo de calor que se genera entre estas dos fases. Como primer paso para encontrar este flujo se estableció que el proceso ocurre a una temperatura constante, en este caso se tiene que el flujo se puede calcular mediante la siguiente ecuación.

Ecuación 24. Ecuación del flujo de transferencia de calor entre dos fases

$$q = hA(T_s - T_\infty)$$

Con esta ecuación se logra calcular la transferencia de calor (q) entre las dos fases, mediante el producto de coeficiente de convección (h), el de contacto entre las dos fases (A) y la diferencia entre las temperaturas de cada fase. Con ayuda del perfil de alturas calculado por medio de diferencias finitas en el capítulo uno, se encontraron las alturas de la fase sólida a lo largo del horno, con estas se calcularon las áreas transversales de tanto la fase sólida y la fase volátil, puesto que se conoce que el diámetro del horno es de 0.13m. El valor del coeficiente de convección h es desconocido y para encontrarlo se calculó el diámetro hidráulico (Dh) en varios puntos a lo largo del eje axial del reactor, para encontrar este diámetro se utilizaron las áreas encontradas anteriormente y el perímetro. Para el cálculo del coeficiente de convección h se utilizó la siguiente ecuación:

Ecuación 25. Cálculo de Nusselt

$$Nu = \frac{h Dh}{k}$$

Teniendo en cuenta que la conducción se da al interior de un cilindro, se tuvo que el Nusselt (Nu) sería de 3.66 ²⁹, (esto está determinado en el libro de mecánica de fluidos de Cengel) y la conductividad térmica (k) fue calculada previamente en el capítulo uno. Entonces, con estos valores se pudo determinar cuánto es el coeficiente de convección de la fase volátil, luego de realizar los cálculos se encontró que h es 7.14 W/m² K, para este cálculo se utilizaron los diámetros hidráulicos encontrados, el número de Nusselt (3.66), y la conductividad térmica promedio de 0.16 W/m K. De esta manera, se identificó que el flujo de calor promedio entre las dos fases es de 12.15 W. Conociendo este valor, se estableció que la condición de borde entre las fases sería de tipo Neumann gradiente fijo, pues se tenía un flujo de calor constante.

Caso 4. En la cama de material o fase sólida (punto 5) se estableció como condición de frontera el perfil de temperaturas producto de la transferencia de calor desde las paredes del horno y obedece a una función reportada por Mendoza en su tesis de maestría que se mostró en el capítulo uno. Para la salida del horno (punto 2) se determinó como condición inicial considerar esta pared como adiabática o aislada con respecto al medio exterior. De igual manera, otras condiciones de frontera como las paredes exteriores del horno rotatorio (punto 3) y entrada (punto 1) se conservan constantes como en el caso 2.

Caso 5. Para el último caso se estableció una temperatura a la entrada igual que en las demás situaciones. La temperatura de la pared del horno se describe mediante un perfil de temperaturas establecido por el ingeniero Libardo Mendoza en su tesis. Al igual que en el caso anterior, la temperatura de la biomasa fue descrita mediante un perfil de temperaturas. Finalmente, la condición a la salida fue una temperatura constante de 673 K.

²⁹ CENGEL, Yunus A; CIMBALA, John M. Mecánica de fluidos. Tercera edición. México: McGraw Hill. 2006.

A continuación, se muestran cada uno de los casos previamente definidos y sus respectivas condiciones de frontera, con esto se define el plan experimental llevado a cabo y el que tiene por finalidad dar diferentes posibilidades al sistema, para realizar un análisis de resultados y una comparación entre los dos métodos matemáticos.

Tabla 6. Casos de estudio y condiciones de frontera

Caso	Entrada (1)	Pared (3-4)	Salida (2)	Fase sólida (5)
1	T= 300 K	Perfil de T°	T=673 K	T=934 K
2	T= 300 K	T= 971 K	T=673 K	T=934 K
3	T= 300 K	T= 971 K	T=673 K	Q=12.15 W
4	T= 300 K	T= 971 K	Aislado	Perfil de T°
5	T= 300 K	Perfil de T°	T=673 K	Perfil de T°

Fuente: elaboración propia

2.7 MALLA Y CONVERGENCIA DE MALLA

Para dar solución y poder discretizar ecuaciones diferenciales por medio de un método numérico es necesario después de definir la forma en la cual se realizaría la aproximación numérica definir un dominio espacial. Dicho dominio se representa por medio de la malla, que tiene por objetivo dividir el modelo en un número exacto o finito de subregiones.

Para la creación de la malla fue necesario identificar los parámetros geométricos del horno como la longitud, el diámetro y el perfil de alturas de la fase sólida. Teniendo en cuenta estos parámetros fue posible llegar a la correcta aproximación geométrica de la fase volátil.

La generación de la malla se realizó por medio de un *software* libre llamado Gmsh. Como ya se sabe, la malla es la que asegura el grado de aproximación entre la respuesta numérica y la respuesta analítica³⁰. Lo anterior quiere decir que entre más robustos sean los elementos utilizados en la malla más pobre será la aproximación, y entre más refinados sean los elementos más recursos serán consumidos por el ordenador y entonces el error de aproximación será mucho menor. Gmsh permite crear mallas con elementos precisos, dado que se pueden especificar los tamaños de cada elemento con precisión. También es posible exportar la malla en varios tipos de archivos que son compatibles con librerías matemáticas.

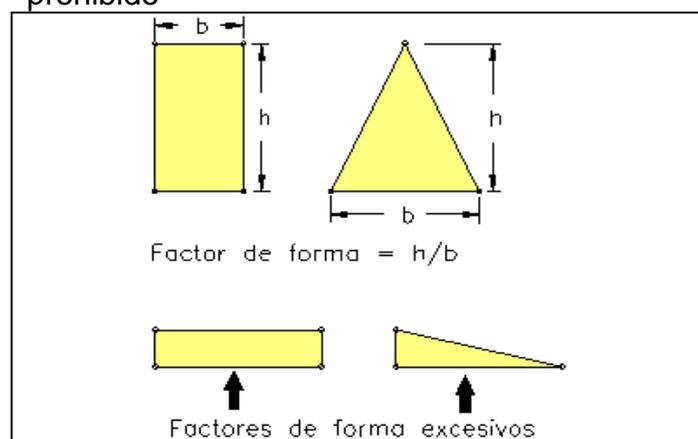
³⁰ GRUPO CARMAN. Mallado por elementos finitos. ¿Qué es la malla? [Internet]. 2014. Recuperado de <https://grupocarman.com/blog/mallado-por-elementos-finitos/>

Uno de los aspectos más importantes al momento de definir la malla es identificar el tipo de elementos que satisfagan las necesidades concretas del problema, debido a que no es lo mismo solucionar un problema con elementos rectangulares que hacerlo con elementos triangulares^{31,32}. Cuando existen geometrías complejas un mallado triangular/tetraédrico suele ser lo más apropiado y este requiere un número menor de celdas que un mallado cuadrilátero/hexaédrico³³.

Para que la aproximación numérica pueda llegar a ser lo más cercana a la respuesta ideal es necesario que los subdominios de la malla cumplan con algunos requisitos que se han de mencionar.

En primera instancia, la relación larga/ancho debe ser lo más cercana a uno para que pueda ser considerado un elemento ideal. En el caso de los elementos cuadriláteros, cuando sus ángulos no son ortogonales³⁴ se consideran elementos pobres. No se permiten desviaciones superiores a 30° del ángulo óptimo equilátero en elementos triangulares y del ángulo recto en cuadriláteros. De hecho, este tipo de elementos se deben evitar a toda costa, motivo por el cual se deben realizar verificaciones en el enmallado.

Figura 4. Factor de forma ideal Vs. elemento prohibido



Fuente: IBERISA. Reglas Básicas de Mallado por Elementos Finitos. [Internet]. s.f. Recuperado de http://www.iberisa.com/soporte/femap/reglas_mallado.htm

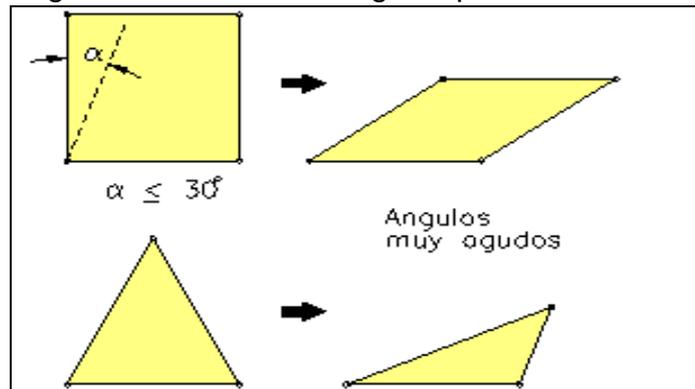
³¹ Ibíd.

³² AUTOFEM. Propósito y función de mallas de elementos finitos. [Internet]. s.f. Recuperado de https://autofem.com/help/es/purpose_and_role_of_meshes.html

³³ UNIVERSIDAD DE SEVILLA. Calidad de malla y condiciones de contorno periódicas. Anexo 1. [Internet]. s.f. Recuperado de <http://bibing.us.es/proyectos/abreproy/3848/fichero/Volumen+%C3%9Anico%252F07.ANEXO+I.pdf>

³⁴ IBERISA. Reglas Básicas de Mallado por Elementos Finitos. [Internet]. s.f. Recuperado de http://www.iberisa.com/soporte/femap/reglas_mallado.htm

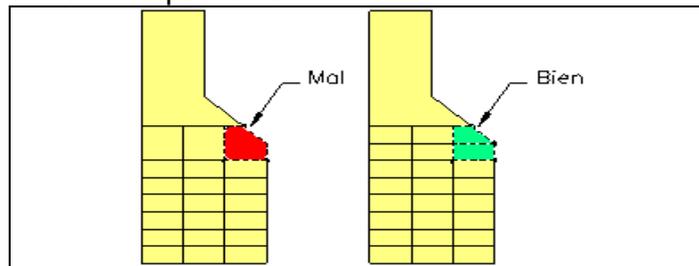
Figura 5. Relación de ángulos para elementos



Fuente: IBERISA. Reglas Básicas de Mallado por Elementos Finitos. [Internet]. s.f. Recuperado de http://www.iberisa.com/soporte/femap/reglas_mallado.htm

Por otra parte, con el objetivo de enmallar geometrías que tienen cambios bruscos de espesor, discontinuidades o que son muy irregulares lo mejor es utilizar elementos de menor tamaño o recurrir a nodos adicionales en dichos cambios.

Figura 6. Comparación elementos bueno Vs. elemento prohibido



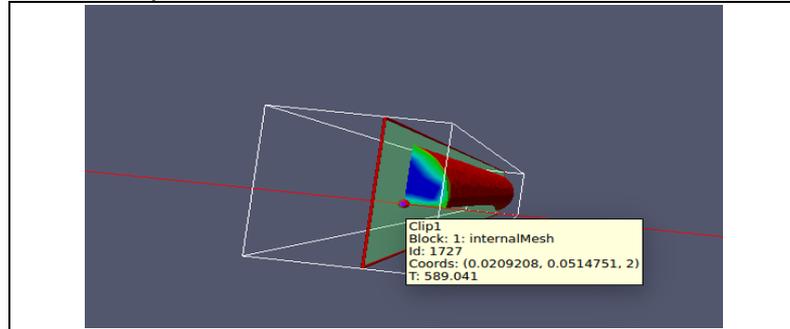
Fuente: IBERISA. Reglas Básicas de Mallado por Elementos Finitos. [Internet]. s.f. Recuperado de http://www.iberisa.com/soporte/femap/reglas_mallado.htm

Como se mencionó en el capítulo 1, sección 1.3.1 En donde se muestran los parámetros de operación y el perfil de alturas, la altura de la cama de biomasa cambia a lo largo del horno formando así una geometría irregular que varía. En este caso en concreto, con el fin de asegurar el mínimo error posible se utilizaron elementos tetraédricos y se hizo el correspondiente estudio de independencia de malla para garantizar el mejor tamaño de elemento para el problema.

Se decidió realizar la convergencia de malla solo para el caso 1, descrito en el capítulo 2 debido a que la geometría es constante para todos. Se escogió una

coordenada o punto específico en la fase volátil con el fin de definir una temperatura sensible al estudio y con una ubicación central en la fase volátil. Con esto se aseguró que el estudio no se realizará con los valores de las condiciones iniciales.

Figura 7. Fase volátil del horno rotatorio, coordenada utilizada para el refinamiento de malla



Fuente: elaboración propia

Asimismo, se realizaron variaciones de tamaño de elementos que repercuten directamente en la cantidad de elementos o subdominios involucrados en la solución. Como ya se mencionó anteriormente, el número de elementos que conforman la malla es proporcional a la calidad de la aproximación, pero de igual manera, aumentar desmesuradamente el número de elementos puede acarrear errores de truncamiento.

En adición a ello, los tiempos de cómputo de las simulaciones y el gasto computacional incrementaron, tal y como se evidencia en la Tabla 8, cuando la malla era pobre de elementos; en las simulaciones de la uno a la nueve los resultados aparentaban oscilar sin sentido alguno, pero después de que se excedían los 18586 elementos la temperatura empezaba a converger al valor de 187.341kelvin.

Tabla 7. Refinamiento de malla. Número de elementos y temperatura

Número de simulación o iteración.	Número de elementos	T en el elemento.
1	1293	974.96
2	1930	978.99
3	2567	979.49
4	3204	972.04
5	3924	980.58
6	5277	980.27
7	9720	982.71

Fuente: elaboración propia

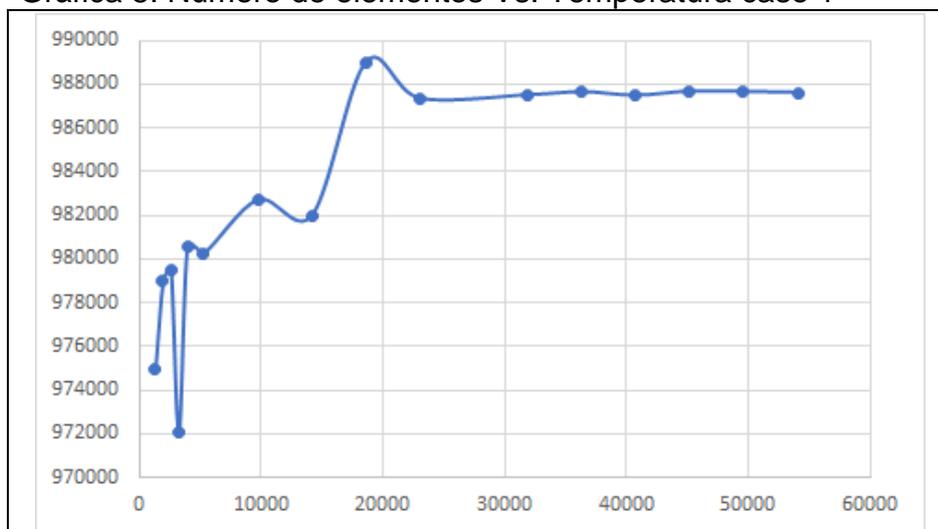
Tabla 7. (Continuación)

Número de simulación o iteración.	Número de elementos	T en el elemento.
8	14153	981.99
9	18586	989.006
10	23019	987.34
11	31885	987.50
12	36318	987.63
13	40751	987.79
14	45184	987.66
15	49617	987.65
16	54050	987.61

Fuente: elaboración propia

Cuando el número de elementos es de 36318 la respuesta empezaba a variar decimalmente, como se observa en la Gráfica 5, al seguir en aumento en cuanto al número de subdominios la respuesta no presentaba mayor variación, pero el tiempo de cómputo sí se veía afectado grandemente. A raíz de esto, se determinó que la malla con 45184 elementos era la mejor opción para abordar el problema térmico debido a que ofrece una buena aproximación y el tiempo de cómputo no es tan prolongado como lo es para mallas que exceden este número de elementos.

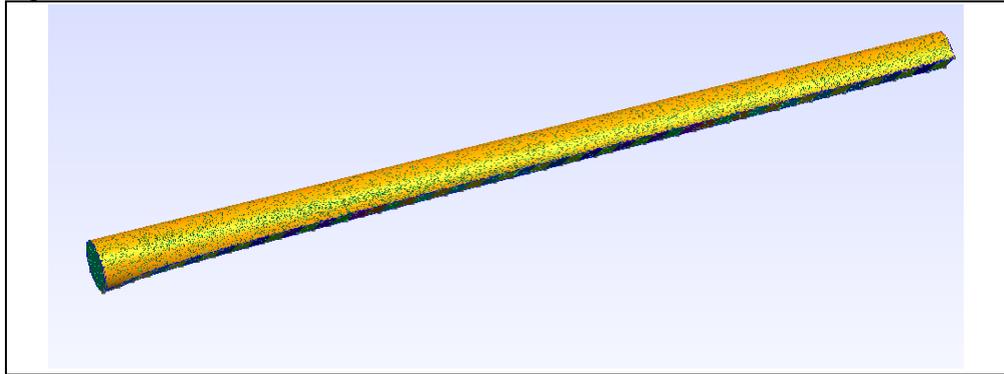
Gráfica 5. Número de elementos Vs. Temperatura caso 1



Fuente: elaboración propia

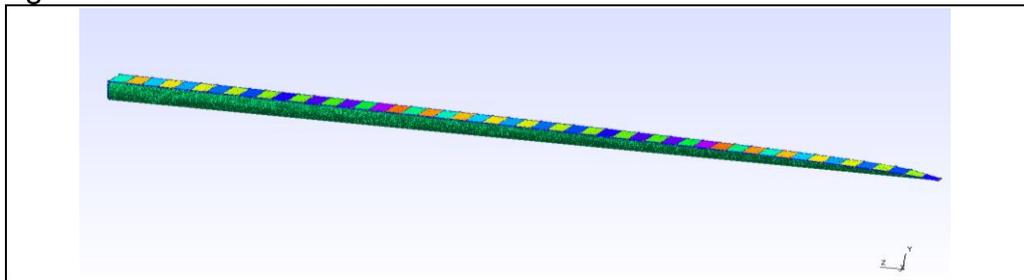
A continuación, se muestra la malla con 45184 elementos utilizada en la discretización del problema térmico para cada una de las fases existentes al interior del horno rotatorio.

Figura 8. Malla Fase Volátil



Fuente: elaboración propia

Figura 9. Malla Fase Sólida



Fuente: elaboración propia

La malla que se escoge para realizar el modelamiento consta de 45184 elementos tetraédricos, se eligió este tipo de elementos debido a la geometría irregular de la fase volátil. Este número de elementos según el estudio de convergencia de malla que se realizó asegura que la respuesta no se va a ver afectada por falta de elementos o exceso de estos en la discretización de la geometría. Así mismo se asegura que la malla utilizada no incrementa el tiempo de cómputo y por consiguiente.

3. IMPLEMENTACIÓN DEL MODELO COMPUTACIONAL

3.1 IMPLEMENTACIÓN DE MODELO COMPUTACIONAL TÉRMICO MEDIANTE VOLÚMENES FINITOS

3.1.1 Generalidades de OpenFOAM y Gmsh **OpenFOAM.** Es un software de acceso gratuito y de código abierto creado en el Imperial College de Londres. Es utilizado en el campo de la dinámica de fluidos computacionales para dar solución a problemas relacionados con transferencia de calor, reacciones químicas, turbulencias, entre otros. OpenFOAM está disponible para MacOS, Windows 10 y Linux.

En este se utiliza un conjunto de módulos escritos en lenguaje de programación C++ para dar solución a los modelos planteados. Está constituido por librerías que son utilizadas para crear ejecutables, los cuales a su vez se clasifican en dos tipos, los solvers y las utilidades. Por su lado, los solvers están diseñados para resolver problemas mecánicos continuos, mientras que las utilidades se encargan de hacer solucionar los asuntos relacionados con manejo de información o datos.³⁵

Ahora bien, OpenFOAM cuenta con tres etapas, el preprocesamiento, la solución y el postprocesamiento. Dentro del preprocesamiento se encuentran las utilidades y las herramientas de mallado; para la solución se pueden utilizar aplicativos establecidos por el usuario o algunos de los que vienen incluidos por defecto y en cuanto al postprocesamiento se utiliza Paraview, este es un aplicativo de código abierto que permite la visualización de los resultados obtenidos en la etapa anterior a esta. Entre las funciones de OpenFOAM se encuentra el modelado físico/dinámico de fluidos, geometría y mallado, así como análisis de datos y solución numérica.

Para la realización de la malla se utilizó Gmsh, un *software* gratuito (un generador de malla) que utiliza el método de los elementos finitos. Gmsh tiene cuatro módulos, a saber, la descripción de la geometría, el mallado, la solución y el postprocesamiento. Con la ayuda de este generador se puede encontrar el mejor tipo de elementos constitutivos de la malla para cumplir con criterios de convergencia y calidad. Como estos dos *softwares* son libres se decidió instalar Ubuntu para así poder trabajar en un mismo sistema operativo.³⁶

OpenFOAM está diseñado para la utilización de mallas no estructuradas, se rige bajo la ecuación de transporte de Reynolds, que permite estudiar la variación de una variable ϕ . Para este modelo se utilizó un esquema espacial, que hace uso del teorema de Gauss, así se transforman las integrales de volumen a integrales de superficie. El *software* tiene varios esquemas espaciales, pero para este caso

³⁵ OpenCFD Ltd. Openfoam the CFD open source toolbox. [Internet]. 2016. Recuperado de <https://www.openfoam.com/>

³⁶ GEUZAINÉ, Christophe. Gmsh. [internet].2006. Recuperado de <http://gmsh.info/>

particular se utilizó el esquema Laplacian, el cual utiliza la ecuación de Laplace como base para la discretización por medio de volúmenes finitos.

3.1.2 Generación de la malla. Se dijo antes que para la generación de la malla se utilizó Gmsh y se creó un archivo. geo, donde se introdujo toda la información de la malla de manera que se pudieran hacer las aproximaciones por triangulación correspondientes. En este archivo se nombró cada una de las caras de la malla; así la entrada, la salida, la pared del horno y la superficie que entra en contacto con la biomasa tenían un nombre específico.

Una vez se tuvo este archivo, se introdujo en el directorio de cada uno de los casos. Fue necesario convertir la malla, de manera que OpenFOAM pudiera sacar los datos y realizar la interpolación. Para ello se utilizó el comando gmshToFoam, seguido con el nombre del archivo. geo. De esta manera OpenFOAM ajustó el lenguaje de programación y quedó listo para realizar la simulación.

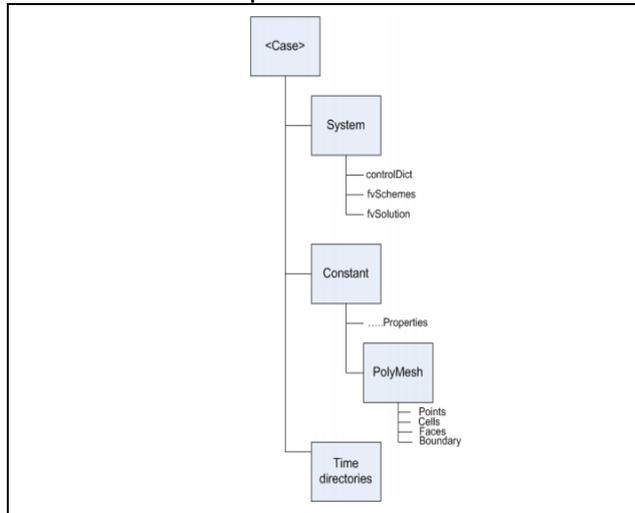
3.1.3 Implementación del modelo matemático en OpenFOAM. OpenFOAM ofrece muchos solvers para lograr realizar la simulación de problemas que van desde la combustión, el análisis de esfuerzo en sólidos, los problemas térmicos, entre algunos otros. El solver utilizado para el desarrollo de esta tesis fue LaplacianFoam, que soluciona la ecuación de Laplace en problemas de transferencia de calor por conducción.

Como se dijo en el capítulo anterior, se utiliza una ecuación de gobierno (ecuación de Laplace), este solver puede solucionar problemas de tipo estable y transitorio, inclusive, se utiliza para casos donde la materia es incompresible. Para el caso de este proyecto el modelo se tomó de manera estable, así que los resultados no varían con el tiempo. De la misma manera, se utilizó la ecuación de transferencia de calor por conducción, en esta se relaciona la difusividad térmica con la temperatura.

Para el desarrollo de esta tesis, se estableció la temperatura como la variable que se deseaba encontrar. LaplacianFoam no tiene en cuenta la generación de calor a la hora de realizar la discretización, pero se puede ajustar para que esta sea tomada en cuenta. Teniendo esto claro, se empezó a realizar la implementación y creación de la solución en OpenFOAM. Los archivos directorios en OpenFOAM son utilizados para establecer las necesidades físicas y matemáticas del modelo y las condiciones del problema. Estos casos tienen una estructura establecida para poder discretizar dicho problema y realizar las interpolaciones necesarias. A continuación, se muestra la estructura general que se usó para el desarrollo de los cinco casos planteados. Cabe añadir que siempre están presentes tres directorios, esto es, de tiempo, constant y system. Los primeros se crean a medida que se hace la simulación, además de que se crea una nueva carpeta en cada paso. En el directorio de tiempo 0 se establecen las condiciones de frontera; en el directorio constant se establecen las

propiedades físicas del modelo, y finalmente, el directorio system contiene el procedimiento que permite dar solución a la discretización.

Figura 10. La estructura de archivos en los directorios de OpenFOAM



Fuente: VITENARKIV, Brage. Vitenarkiv i Bragekonsortiet. [Internet]. 2019. Recuperado de <https://www.unit.no/vitenarkiv-i-bragekonsortiet>

Una de las variables que se tuvo en cuenta a la hora de empezar el proceso de simulación fue el control del tiempo. Todo esto se manejó desde un archivo. gedit llamado *ControlDict*. En este se controla el tiempo entre pasos y la escritura de los resultados.

Figura 11. Configuración de subdirectorio controlDict

```

application    laplacianFoam;
startFrom      startTime;|
startTime      0;
stopAt         endTime;
endTime        5;
deltaT         0.005;
writeControl   timeStep;
writeInterval  3;
purgeWrite     0;
writeFormat    ascii;
writePrecision 6;
writeCompression off;
timeFormat     general;
timePrecision  6;
runTimeModifiable true;
  
```

Fuente: elaboración propia

Es así como se estableció que el inicio de la simulación era el tiempo cero y terminaba pasados los cinco segundos. Para establecer el tiempo entre cada paso se usó Δt y se determinó un tiempo de 0.005 segundos. En cuanto al tiempo para la generación de datos de salida se utilizó `writeInterval`, en este caso de 3. Usar estos valores permitió llegar a la solución, en la que los valores se estabilizan y se llegó a un punto en el que se comportaba de manera estable y los valores de temperatura convergen.

En segunda instancia, se analizaron los esquemas numéricos que se iban a usar para darle solución al modelo térmico. Para ello se utilizó el directorio `fvSchemes`, los términos que se asignan en este directorio son interpolaciones gradientes y derivadas. OpenFOAM permite establecer el o los términos que mejor se ajusten al problema del usuario. El programa ofrece una opción de discretización por volumen finito gaussiano estándar, esta integración se basa en la suma de valores en las caras de las celdas para interpolar desde el centro de estas. En este subdirectorio se establecen esquemas de tiempo, de gradientes, de divergencia, gradientes en superficies normales, de interpolación, laplacianos y de flujo de calor. En primera instancia el esquema de tiempo `ddtSchemes` se establece de manera que el valor de las derivadas sea igual a cero, ya que el modelo está en un estado estacionario y no hay variaciones respecto al tiempo. En cuanto al esquema de gradientes `gradSchemes` se utilizó el estándar que utiliza OpenFOAM, uno de tipo discretización lineal de Gauss y donde se establece la T como variable de estudio. En cuanto al esquema de divergencia no se utiliza ya que es un modelo laplaciano y se excluye. Para el esquema laplaciano `laplacianSchemes` se establece nuevamente una discretización lineal de Gauss pero se ordena al software realizar una corrección para obtener mejores resultados. En el esquema de interpolación `interpolationSchemes` se establece que software realice interpolaciones lineales.³⁷

Figura 12. Esquema numérico en subdirectorio `fvSchemes`

```

ddtSchemes
{
    default          steadyState;
}

gradSchemes
{
    default          Gauss linear;
    grad(T)         Gauss linear;
}

divSchemes
{
    default          none;
}

laplacianSchemes
{
    default          none;
    laplacian(DT,T) Gauss linear corrected;
}

interpolationSchemes
{
    default          linear;
}

snGradSchemes
{
    default          corrected;
}

```

Fuente: elaboración propia

³⁷ GREENSHIELDS, Chris. OpenFOAM v6 User Guide: 4.4 Numerical Schemes. [Internet]. 2018. Recuperado de <https://cfd.direct/openfoam/user-guide/v6-fvschemes/>

En la siguiente etapa se debe controlar el tipo de solver, el algoritmo y la tolerancia al problema, todo esto se hace desde el subdirectorio fvSolution. Para este caso se utilizó un solver gradiente (bi-) conjugado pre condicionado (PCG). Teniendo en cuenta que se utilizó un gradiente conjugado, se debe escoger una matriz pre condicionada para el modelamiento. Se escogió la matriz diagonal incompleta Cholesky (DIC).

Los solvers para una matriz dispersa son iterativos, pues intentan reducir la residual de la ecuación en una sucesión de soluciones. La tolerancia del solucionador representa el nivel en el que el residuo es lo suficientemente pequeño como para que la solución pueda considerarse lo suficientemente precisa. Para este caso se utilizó una tolerancia de 0.000001. A Continuación, se muestra cómo se configuró el subdirectorio fvSolution.

Figura 13. Configuración subdirectorio fvSolution

```
solvers
{
  T
  {
    solver          PCG;
    preconditioner  DIC;
    tolerance       1e-06;
    relTol          0;
  }
}
```

Fuente: elaboración propia

Es relevante indicar que el esquema laplaciano evalúa la temperatura en función de la difusividad térmica y del esquema de gradiente, que determina el gradiente de la propiedad. Teniendo en cuenta esto, se debe ingresar en el directorio *constant* el valor de la difusividad térmica calculado en el capítulo uno, al interior de este se encuentra una carpeta llamada polyMesh y un archivo. gedit *transportProperties*, en el que se ingresó el valor calculado para la difusividad térmica de la fase volátil (0.0003371165 m²/s). Se utiliza el valor del coeficiente de difusividad térmica ya que esta propiedad está dada en función del calor específico, de la conductividad térmica y de la densidad del fluido. De esta propiedad depende la transferencia de calor pues las velocidades en que se realizan los cambios de temperatura dependen del valor de la difusividad térmica. Esta propiedad cuantifica la capacidad de los materiales de difundir temperatura internamente.³⁸

Figura 14. Configuración subdirectorio transportProperties

```
DT [0 2 -1 0 0 0] 0.0003371165
```

Fuente: elaboración propia

³⁸ GREENSHIELDS, Chris. OpenFOAM v6 User Guide: 2.1 Lid-driven cavity flow. [Internet]. 2018. Recuperado de <https://cfd.direct/openfoam/user-guide/v6-cavity/#x5-50002.1.1/>

3.1.4 Condiciones de borde. Las condiciones de frontera permiten establecer el estado en el que se encuentran los límites del sistema analizado y esto es vital para lograr la correcta discretización y poder interpolar de manera acertada. Para este caso se especificó la temperatura en la que se encontraba la fase sólida (biomasa), la pared del horno rotatorio, la entrada y la salida del mismo. Como se dijo en el capítulo dos, existen varios tipos de condiciones de frontera, tales como la Dirichlet, Neumann y la mixta. En aras de establecer las condiciones de borde de cada uno de los casos se buscó el directorio de tiempo 0 y dentro de este la carpeta T, ya que la variable que se deseaba evaluar era la de temperatura.

En este archivo se encuentran condiciones como *internalField*, en donde se asigna la temperatura a la cual se encuentra el campo interno. Sin embargo, para situaciones de tipo estable este valor no representa cambios en los resultados. En este mismo archivo se determinan las unidades con las cuales se trabaja. Finalmente, en *boundaryField* se asigna el tipo de condición de frontera, el nombre de la frontera y el valor de la condición de borde. Esto debe establecerse para cada uno de los límites del sistema. A continuación, se explica cómo se establecieron para cada uno de los cinco casos.³⁹

El caso uno consta de cuatro condiciones tipo Dirichlet, pues son valores que no cambian con el tiempo. Para la salida, la materia y la entrada se tomaron valores de temperatura fijos en K y para la condición de la pared se utilizó el perfil de temperaturas descrito en la tesis del ingeniero Libardo Mendoza. Para ingresar los perfiles a OpenFOAM se realizó una regresión de grado 9 y el polinomio obtenido fue la condición de frontera asignada con la pared del horno.

En el segundo caso se usaron cuatro condiciones Dirichlet, cada una de las cuales tomó valores de temperatura fijos. La entrada tomó una temperatura ambiente de 300 K, la salida 673 K, la pared del horno 971 K y la materia sólida 934 K.

Para el caso tres se utilizó el valor del flujo de calor calculado anteriormente como condición de borde con la materia. Esta es una condición tipo Neumann, pues la temperatura varía con respecto al tiempo. Las otras tres condiciones se mantuvieron iguales que en el caso anterior, es decir, son tipo Dirichlet. En este caso, al igual que en el anterior, hay una condición Neumann y otra Dirichlet, la primera es la salida adiabática, en la que se establece un gradiente temperatura de cero. Para la condición de frontera con la materia, se usó un polinomio de grado 10 para representar el perfil de temperaturas que presenta la fase sólida.

En este caso se utilizaron cuatro condiciones Dirichlet, dado que las temperaturas se mantenían constantes. En este caso se utilizaron temperaturas

³⁹ GREENSHIELDS, Chris. OpenFOAM v6 User Guide: 5.2 Boundaries [Internet]. 2018. Recuperado de <https://cfd.direct/openfoam/user-guide/v6-boundaries/#x24-1750005.2.2>

invariantes en el tiempo y los perfiles de temperatura descritos anteriormente respecto a las condiciones de frontera con pared y para la fase sólida.

Es importante resaltar que a la hora de implementar estas condiciones hubo que establecer el tipo de condición y el valor que tomaban. Para el caso de valores fijos en temperatura y flujo de calor se configuró el directorio de tiempo 0 como una variable de valor fijo *fixedValue*. Para el caso en el que se utilizó una salida adiabática se asignó *zeroGradient*, pues no se presentaban cambios de temperatura y no era necesario asignar un valor para esta condición.

En el caso de las condiciones que utilizan un perfil de temperaturas fijo se utiliza una configuración especial, para el caso de la pared se utilizó un polinomio de grado 9 y para la materia uno de grado 10.

Figura 15. Configuración de perfiles de temperatura como condiciones de borde en subdirectorio de tiempo 0

```

materia
{
    type          uniformValue          uniformFixedValue;
    polynomial
    (
        (372.99882075686827 0)
        (-346.18429972398962 1)
        (44859.510510961874 2)
        (-257838.09984343275 3)
        (715893.95777643227 4)
        (-1176063.6354900154 5)
        (1218478.6477928068 6)
        (-804912.28149120917 7)
        (328794.60302614683 8)
        (-75660.025913813850 9)
        (7496.7242211047142 10)
    );
}

wall
{
    type          uniformValue          uniformFixedValue;
    polynomial
    (
        (793.01912836716713 0)
        (140.99589700613751 1)
        (11552.632301488144 2)
        (-58610.585654063572 3)
        (135920.00228498731 4)
        (-179451.30353451901 5)
        (142963.46436094466 6)
        (-68151.397902488359 7)
        (17902.177266458675 8)
        (-1990.8326698597459 9)
    );
}

```

Fuente: elaboración propia

Luego de tener las cinco carpetas con sus condiciones se realizó la solución de cada uno mediante el comando `laplacianFoam`, con este se aseguró que la ecuación de gobierno que se utilizara en este método es la ecuación de Laplace.

3.2 IMPLEMENTACIÓN DE MODELO COMPUTACIONAL TÉRMICO MEDIANTE ELEMENTOS FINITOS

3.2.1 Generalidades de SPYDER y Fenics Project. Para conocer el perfil de temperatura de la fase volátil por medio de los elementos finitos se implementó Spyder, un gestor matemático. Este es un *software* de código abierto y libre que utiliza como sintaxis de programación Python, el cual es reconocido como un lenguaje poderoso a la hora de programar. La gran acogida de los usuarios y su interés en Python se debe a que tiene un enfoque bastante simple pero muy efectivo, en la medida en que se basa en tener una escritura que favorezca un

código legible e interpretable. Como resultado Python cuenta con una interfaz un poco más amigable⁴⁰.

Por consiguiente, es este uno de los ambientes de desarrollo integrado más optado para trabajar, gracias a que proporciona un editor para la programación, una ventana para ejecutar el código y una ventana para inspeccionar las variables. Python está compuesto por una serie de librerías o gestores de programación, así como por diferentes distribuciones y enlaces de módulos libres de terceros o programas que facilitan el desarrollo de algoritmos ajustados a las diferentes necesidades y ya se ofrece de una manera gratuita puede ser distribuido sin ningún tipo de restricción⁴¹.

Por otra parte, resolver ecuaciones diferenciales es complejo y para dar solución al perfil de temperaturas de la fase volátil se hace necesario resolver la ecuación de Poisson, la cual fue abordada previamente en el capítulo 2.

Por otro lado, Spyder utiliza librerías creadas por usuarios que las ponen al servicio de los demás. Algunas de estas ayudan a realizar gráficas, operaciones matemáticas, operaciones vectoriales, entre otras. Como es de esperarse, existen librerías especializadas en la solución y la discretización de ecuaciones diferenciales por medio de los elementos finitos.

Fenics Project se origina en el 2003 y es una colaboración de investigadores de la Universidad de Tecnología Chalmers en Gothenburg y la Universidad de Chicago⁴². Esta librería de código abierto da solución parcial a ecuaciones diferenciales, por lo tanto, su función es permitir al usuario traducir rápidamente modelos científicos en un eficiente código de elementos finitos^{43 44}. Con esto es posible realizar simulaciones paralelas distribuidas y de alto rendimiento a una gran escala, esto se logra por medio de la función que permite crear mallas distribuidas y refinamientos locales en las que sea necesario para el usuario⁴⁵. Algunas de las razones por las cuales se decidió trabajar en FEniCS fueron la generación automatizada del código, que es la clave para lograr la óptima discretización del problema y el hecho de que FEniCS permite que los sistemas generales de ecuaciones diferenciales se expresen con facilidad debido a la utilización de Python, lo que hace que el lenguaje sea muy cercano a las

⁴⁰ PYTHON SOFTWARE FOUNDATION. Tutorial de Python. Introducción. [Internet]. 2017. Recuperado de <http://docs.python.org.ar/tutorial/3/real-index.html>

⁴¹ Ibid.

⁴² EUROPEAN CONSORTIUM MATHEMATICS IN INDUSTRY. FEniCS Project. [Internet]. 2015. Recuperado de <https://ecmiindmath.org/2015/11/18/fenics-project/>

⁴³ LANGTANGEN, Peter y LOGG, Anders. Solving PDEs in Python. The FEniCS Tutorial Volume I. Center for Biomedical Computing, Simula Research Laboratory and Department of Informatics, University of Oslo. 2017

⁴⁴ DUPONT, T.; HOFFMAN, J.; JOHNSON, C; KIRBY, R.; LARSON, M.; LOGG, A. y SCOTT, R. The FEniCS project. Chalmers Finite Element Center. Göteborg Sweden 2003

⁴⁵ EUROPEAN CONSORTIUM MATHEMATICS IN INDUSTRY. Op. Cit.

matemáticas. Este gestor incluye una plataforma de álgebra lineal de alto rendimiento⁴⁶.

3.2.2 Generación de la malla. Se realizó la importación de la malla desde Gmsh a Spyder. Posteriormente se introdujeron las condiciones de borde previamente mencionadas al *software*. Para la pared y la entrada del horno se asignaron condiciones tipo Dirichlet, con valores fijos establecidos. En la salida del horno una condición adiabática y para la parte de contacto de las dos fases una tipo Neumann, con el valor del flujo de calor calculado anteriormente⁴⁷.

3.2.3 Implementación del modelo matemático en Fenics Project. A continuación, se muestra el funcionamiento del algoritmo utilizado con un poco más de detalle. Para resolver la ecuación de Poisson en FEniCS se hizo necesario identificar cuál es el dominio computacional (Ω) y saber cuál es la ecuación diferencial que rige el problema y sus correspondientes condiciones de contorno y términos fuente⁴⁸.

Para la discretización del problema térmico se definió el dominio computacional del problema (Ω), como la geometría de la fase volátil, la ecuación diferencial de Poisson expresada en términos de temperatura, el término fuente que es igual a cero, ya que no se tuvo en cuenta en el problema y en las condiciones de contorno que se aplican a cada uno de los casos que ya fueron previamente definidos en el capítulo 1.

3.2.4 Condiciones de borde. Uno de los requerimientos fundamentales para la solución del problema térmico y para que el método de los elementos finitos adquiera sentido y pueda ser discretizada la ecuación de Poisson es definir correctamente el tipo de condición inicial en cada uno de los casos de estudio definidos previamente. Es así como para solucionar el problema térmico se hizo necesario que cada una de las condiciones de borde previamente establecidas se clasificaran según lo descrito en el capítulo uno.

Para los casos en los que se utilizan perfiles de temperatura en la región de la pared y en la interfaz de la fase sólida fue necesario obtener las expresiones que definen los perfiles, esto se hizo por medio de una regresión de los puntos presentados por Libardo Mendoza en su tesis de doctorado. A continuación, se muestran cada uno de los casos de estudio y sus respectivas condiciones de frontera escritas en sintaxis C++⁴⁹.

⁴⁶ LANGTANGEN, Peter y LOGG, Anders. Op. Cit.

⁴⁷ *Ibíd.*

⁴⁸ LOGG, Anders, et al. FFC: The FEniCS Form Compiler. En: Anders Logg; Kent-Andre Mardal and Garth N. Wells eds. Automated Solution of Differential Equations by the Finite Element Method, Volume 84 of Lecture Notes in Computational Science and Engineering. Springer, 2012.

⁴⁹ LOGG, Anders; WELLS, Garth N. and HAKE, Johan. DOLFIN: A C++/Python Finite Element Library. En: Anders Logg; Kent-Andre Mardal and Garth N. Wells eds. Automated Solution of Differential Equations by the Finite Element Method, Volume 84 of Lecture Notes in Computational Science and Engineering. Springer, 2012.

Figura 16. Perfil de temperatura de la materia escrito con sintaxis C++:

```
51 T_s = 7.4967242211047142e+003*pow(((2.0-x[1])/2.0),10)-7.5660025913813850e+004*pbw(((2.0-x[1])/2.0),9)
52 +3.2879460302614683e+005*pow(((2.0-x[1])/2.0),8)-8.0491228149120917e+005*pow(((2.0-x[1])/2.0),7)
53 +1.2184786477928068e+006*pow(((2.0-x[1])/2.0),6)-1.1760636354900154e+006*pow(((2.0-x[1])/2.0),5)
54 +7.1589395777643227e+005*pow(((2.0-x[1])/2.0),4)-2.5783809984343275e+005*pow(((2.0-x[1])/2.0),3)
55 +4.4859510510961874e+004*pow(((2.0-x[1])/2.0),2)-3.4618429972398962e+002*pow(((2.0-x[1])/2.0),1)
56 +3.7299882075686827e+002*pow(((2.0-x[1])/2.0),0)'
```

Fuente: elaboración propia

Figura 17. Perfil de temperatura de la pared escrito con sintaxis C++

```
61 T_w = |1.9908326698597459e+003*pow(((2.0-x[1])/2.0),9)+1.7902177266458675e+004*pow(((2.0-x[1])/2.0),8)
62 -6.8151397902488359e+004*pow(((2.0-x[1])/2.0),7)+1.4296346436094466e+005*pow(((2.0-x[1])/2.0),6)
63 -1.7945130353451901e+005*pow(((2.0-x[1])/2.0),5)+1.3592000228498731e+005*pow(((2.0-x[1])/2.0),4)
64 -5.8610585654063572e+004*pow(((2.0-x[1])/2.0),3)+1.1552632301488144e+004*pow(((2.0-x[1])/2.0),2)
65 +1.4099589700613751e+002*pow(((2.0-x[1])/2.0),1)+7.9301912836716713e+002*pow(((2.0-x[1])/2.0),0)'
```

Fuente: elaboración propia

Figura 18. Condiciones de borde caso 1

```
88 if caso==1:
89     wall=101;    Dca = Expression(T_w,degree=5)
90     out=103;    Dout=673
91     inf=104;    DCC=T_in
92     material=102;
93     DCd= T_sprom
94
95
```

Fuente: elaboración propia

Figura 19. Condiciones de borde caso 2

```
99 elif caso==2:
100     wall=101;    Dca = T_wprom
101     out=103;    Dout= 673
102     inf=104;    DCC=T_in
103     material=102;
104     DCd= T_sprom
105
```

Fuente: elaboración propia

Para estos casos se utilizaron cuatro condiciones de borde tipo Dirichlet. En el caso 1 en la región de la pared se estableció como condición de frontera el perfil de temperatura de la pared del horno rotatorio calculado por Libardo Mendoza, por lo que es necesario especificar en el algoritmo que se utilizó una expresión polinomial⁵⁰.

Figura 20. Condiciones de borde caso 3

```
110 elif caso==3:
111     wall=101;    Dca = T_wprom
112     out=103;    Dout=673
113     inf=104;    DCC=T_in
114     material=102;
115     Nca = -Q_g
116
```

Fuente: elaboración propia

⁵⁰ MENDOZA GENEY. Op. Cit.

Figura 21. Condiciones de borde caso 4

```
124 elif caso==4:
125     wall=101;    Dca = T_wprom
126     out=103;    Nout=0
127     inf=104;    DCC=T_in
128     material=102;
129     Dcd = Expression(T_s, degree=5)
130
```

Fuente: elaboración propia

En estos dos casos se utilizaron tres condiciones tipo Dirichlet y una condición tipo Neumann. En el caso 3 se recurrió el flujo de calor promedio que va desde la región de la fase sólida hacia la fase volátil, que fue calculado previamente. En el caso 4 se decidió condicionar la salida del horno rotatorio como adiabática, lo que significa que su flujo de calor era igual a cero. Con este procedimiento se buscaba que la temperatura en la salida del horno aumentará.

Figura 22. Condiciones de borde caso 5

```
138 elif caso==5:
139     wall=101;    Dca = Expression(T_w,degree=1)
140     out=103;    Dout=673
141     inf=104;    DCC=T_in
142     material=102;
143     Dcd = Expression(T_s,degree=1)
144
```

Fuente: elaboración propia

Se trabajó con cuatro condiciones tipo Dirichlet; en la frontera de fase sólida se estableció como condición de frontera el perfil de temperatura de la fase sólida. Una vez definidas las condiciones de borde en FEniCS, es necesario agrupar las condiciones de acuerdo a su clasificación, la condición Dirichlet $u = u_D$ en $\partial\Omega$ se define de la siguiente manera:

En forma general $bc = \text{Dirichlet BC}(V, u_D, \text{boundary})$ en donde u_D es la expresión o valor escalar que define los valores en la frontera⁵¹. Boundary hace referencia a la expresión u objeto que definen los puntos de la región, en este caso, las paredes previamente definidas del horno y la interfaz entre la fase volátil y la fase sólida. A continuación, se muestran los dos primeros casos.

Figura 23. Caso 1 y 2

```
217 if caso ==1 or caso ==2:
218     bc = [fe.DirichletBC(V, Dca, boundaries, wall ),
219          fe.DirichletBC(V, DCC, boundaries, inf ),
220          fe.DirichletBC(V, DCd, boundaries, material ),
221          fe.DirichletBC(V, Dout, boundaries, out ),]
```

Fuente: elaboración propia

Se trata de reformular las ecuaciones diferenciales como un problema variacional de elementos finitos. El paso básico para volver un problema de ecuaciones

⁵¹ ALN AES, Martin S.; LOGG, Anders and MARDAL, Kent-Andre. UFC: A Finite Element Code Generation Interface. En: Anders Logg; Kent-Andre Mardal and Garth N. Wells eds. Automated Solution of Differential Equations by the Finite Element Method, Volume 84 of Lecture Notes in Computational Science and Engineering. Springer, 2012a.

diferenciales un problema variacional es multiplicar la ecuación de Poisson por una función v , la ecuación resultante debe ser integrada en un dominio Ω , posteriormente se debe realizar la integración por partes de los términos de segundo orden como se muestra en el capítulo dos. Una vez definido el dominio del problema térmico se puede crear la función de dominio espacial V , de la siguiente manera:

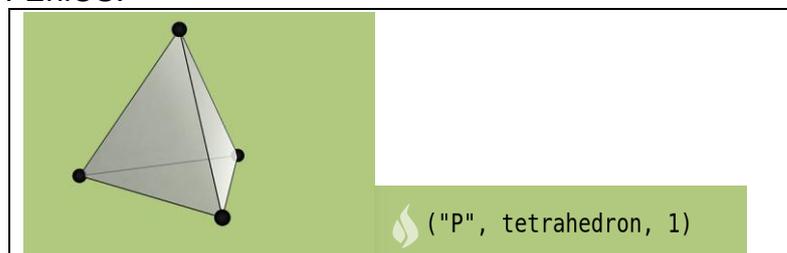
Figura 24. Función espacial definida para el dominio.

```
207 V = fe.FunctionSpace(mesh, 'P', 1)
208
```

Fuente: elaboración propia

El segundo argumento hace referencia al tipo de elemento utilizado, para este caso se usó 'p', que hace referencia a un elemento tetraédrico, típicamente utilizado en la solución de problemas tridimensionales⁵².

Figura 25 Elemento tetraédrico, designación en FEniCS.



Fuente: CITING, D.; ARNOLD, N y LOGG, A. Periodic Table of the Finite Elements, SIAM News, vol. 47 no. 9, November 2014.

A diferencia de la forma matemática del desarrollo de los elementos finitos, para FEniCS no es necesario especificar las condiciones iniciales como parte de la función V , por lo que es posible trabajar con el dominio espacial V en las dos funciones de la siguiente manera:

Figura 26. Funciones u - v definidas en V

```
211 u = fe.TrialFunction(V)
212 v = fe.TestFunction(V)
```

Fuente: elaboración propia

Con estos parámetros se define un programa en lenguaje Python que define y establece cada uno de los parámetros previamente mencionados para los cinco casos a partir de las correspondientes abstracciones de FEniCS.

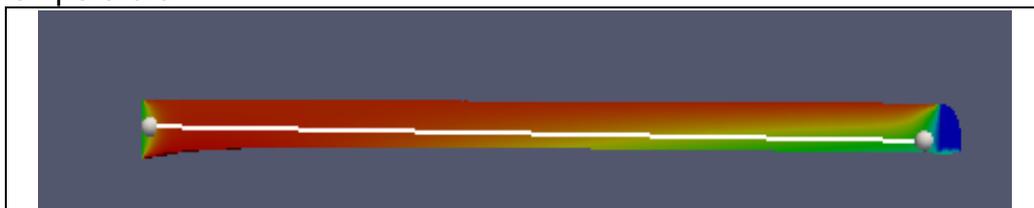
⁵² FINITE ELEMENTS. Periodic Table of the Finite Elements. [Internet]. s.f. Recuperado de <http://femtable.org/>

3.3 COMPARACIÓN Y ANÁLISIS ENTRE CASOS

Es importante enfocar el objetivo de este modelamiento térmico a la comparación entre los dos métodos numéricos utilizados, así como un análisis de los cambios en la temperatura de la fase volátil en cada uno de los casos, con base en las condiciones de borde utilizadas. Con ello lo que se busca es encontrar las mejores condiciones de operación del horno en función de la temperatura. El fin último de este modelo térmico es el desarrollo de una herramienta que permita hacer el diseño óptimo de dispositivos para procesamiento de biomasa, de manera que la experimentación se pueda realizar en computador y los costos de experimentación física sean reducidos. Así se disminuyen los costos para la producción de energías alternativas, también se brinda una herramienta construida con software libre, sin incurrir en gastos, para incentivar más investigación sobre este tipo de reactores para obtención de combustibles líquidos y gaseosos.

Para el análisis de los datos obtenidos luego de la simulación se decidió tomar un perfil de temperaturas a lo largo de una línea recta que pasaba justo por la mitad de la fase volátil, con el fin de obtener resultados independientes de las condiciones de frontera y así poder observar el comportamiento en la parte media de dicha fase. Esta se muestra en la siguiente imagen, al respecto se utilizaron dos puntos para determinar el origen y el final de la línea.

Figura 27. Recta transversal utilizada para generar perfiles de temperatura



Fuente: elaboración propia

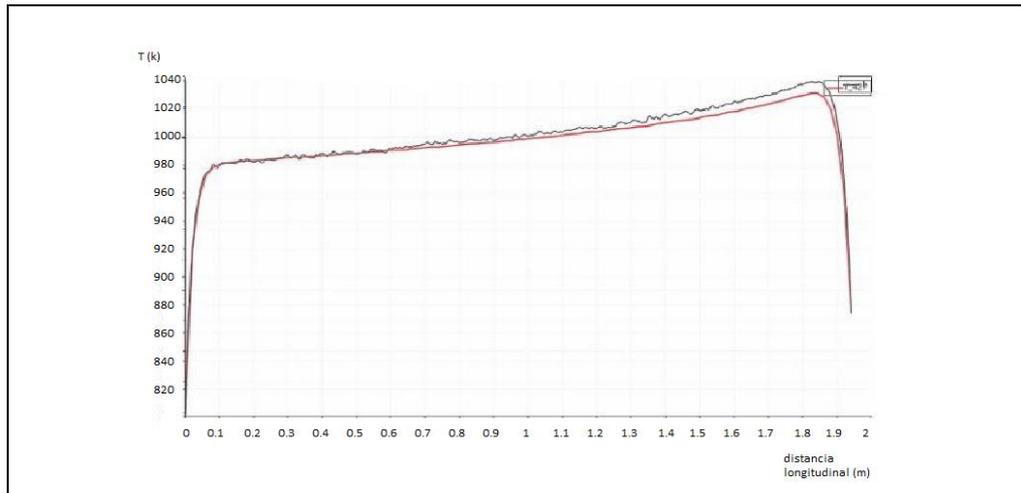
Igualmente, con el fin de comparar los dos métodos numéricos y determinar cuál de los casos planteados genera la mejor distribución de temperaturas, fueron sobrepuestos los gráficos de los perfiles de temperatura de la fase volátil por medio de los elementos finitos y volúmenes finitos, de tal forma es posible evidenciar la diferencia entre cada uno de los métodos utilizados.

Tabla 8. Condiciones de borde caso 1

Caso	Entrada (1)	Pared (3-4)	Salida (2)	Fase sólida (5)
1	T=300 K	Perfil de T	T=673 K	T=934 K

Fuente: elaboración propia

Figura 28. Perfiles de temperaturas obtenidos por los dos métodos caso 1



Fuente: elaboración propia

En el caso uno se utilizó el perfil de temperatura de la pared del horno como condición de borde. Este perfil fue obtenido por el ingeniero Libardo Mendoza, al realizar pruebas en vacío y sin biomasa donde se midió la temperatura de la pared a lo largo del horno rotatorio. En su tesis de doctorado el ingeniero Libardo Mendoza menciona de forma detallada la manera de medición y estimación de dichos perfiles.

Se puede observar que la temperatura de la fase volátil aumenta gradualmente a lo largo del horno. Este comportamiento se produce debido a la diferencia de temperaturas a la entrada y a la salida del horno. Para la entrada se considera una temperatura de 300K y a la salida una temperatura de 673K. Es por esta diferencia que la temperatura aumenta gradualmente desde la entrada a la salida, ya que la salida presenta una temperatura más elevada. Es importante tener en cuenta que la temperatura de la fase volátil varía a lo largo del horno, debido que la temperatura de operación es una variable de proceso importante a la hora de evaluar el proceso químico que ocurre. Al tener este comportamiento térmico en la fase volátil, se puede llegar a evaluar cómo se afecta el proceso de pirólisis cuando la temperatura no es constante en cada uno de los puntos del horno.

Al realizar la simulación por medio de los volúmenes finitos se obtuvo una temperatura máxima de 1029.48 K y una temperatura mínima de 965.15 K, en promedio se encontró una temperatura a lo largo del horno de 997.31 K. Tras realizar la discretización del problema por medio de los elementos finitos la temperatura máxima fue de 1025.48 K y la temperatura mínima de 957.288 K, la temperatura promedio obtenida fue de 990.30 K. Se puede ver que los valores encontrados por ambos métodos son muy similares y que las temperaturas halladas por medio de volúmenes finitos son mayores que las determinadas mediante elementos finitos.

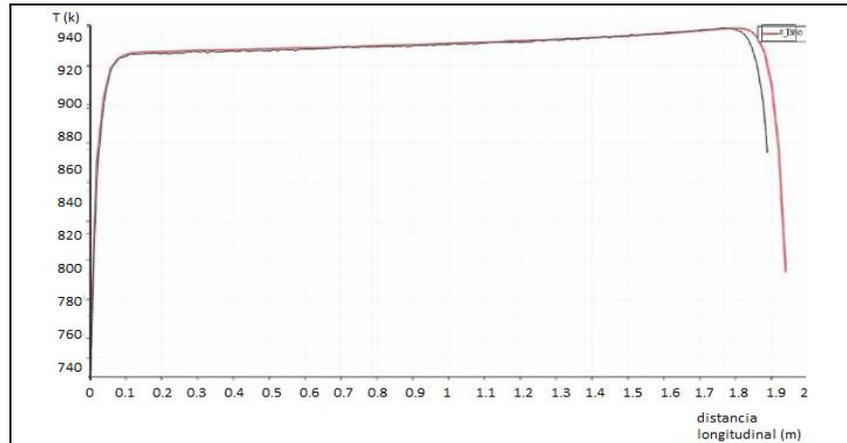
Como se puede ver en la figura 26, el perfil generado por lo elementos finitos (Perfil rojo) tiene un comportamiento sin oscilaciones a diferencia del perfil generado por medio de los volúmenes finitos. Estas oscilaciones se producen debido se realizaron más iteraciones en volúmenes finitos que en elementos finitos. Al utilizar un perfil de temperaturas como condición de borde fue necesario disminuir el paso de tiempo de la simulación y de esta manera lograr que el software realizará más iteraciones, para así poder lograr llegar a resultados estables. Con esto se evidencia que para obtener resultados muy similares mediante los dos métodos, el método de los volúmenes finitos necesito realizar más iteraciones para llegar a un resultado estable. Esto demuestra una ventaja clara de los volúmenes finitos sobre los elementos finitos, ya que al presentar comportamientos oscilantes los resultados obtenidos por volúmenes finitos no son tan acertados.

Tabla 9. Condiciones de borde caso 2

Caso	Entrada (1)	Pared (3-4)	Salida (2)	Fase sólida (5)
2	T=300 K	T= 971 K	T=673 K	T=934 K

Fuente: elaboración propia

Figura 29. Perfiles de temperaturas obtenidos por los dos métodos caso 2



Fuente: elaboración propia

Para este caso se utilizaron temperaturas promedio de los perfiles de temperatura de las paredes del horno y de la fase sólida como condición de borde con las mismas. Como se observa en la gráfica resultante para los dos métodos, la temperatura máxima alcanzada por medio de los elementos finitos fue de 956.64 K y la temperatura mínima es de 932.58K.

Si se observa el resultado obtenido para el caso 1, se puede ver que la forma de la gráfica es similar a la de este caso. En ambas situaciones se presentó un crecimiento gradual que llegó a la temperatura máxima cuando estaba muy cercano a la salida. Esto debido a que en los dos casos se mantiene la misma

condición de borde de temperatura constante en la salida del horno. La única diferencia es el rango de temperaturas obtenido, pues en el caso 1 se encontraron valores mucho más altos al interior del reactor, esto evidencia que al trabajar con los perfiles de temperatura referenciados del trabajo de Libardo Mendoza⁵³ los resultados son más altos que al trabajar con una temperatura promedio de dichos perfiles como condición de borde de la pared.

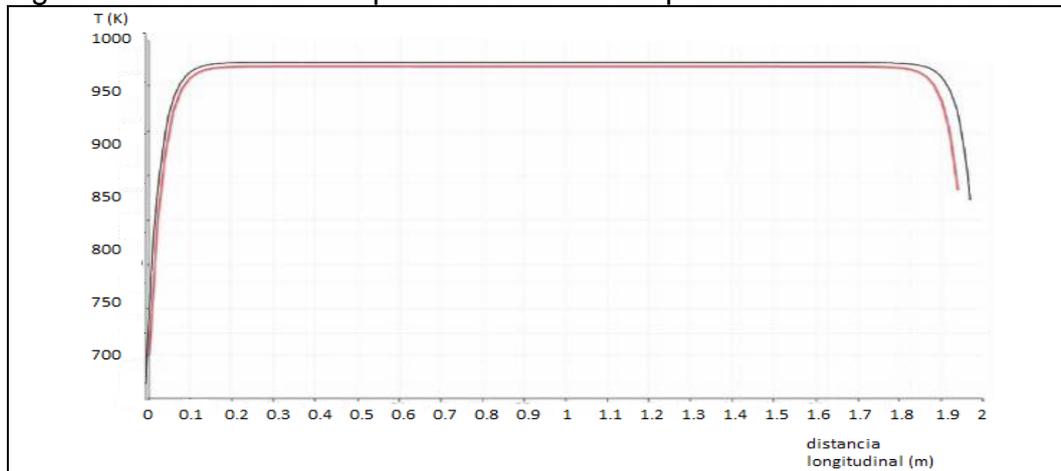
Se concluye que cuando se utiliza una temperatura fija promedio (temperatura promedio del perfil de temperaturas) como condición de borde para la pared del horno como en este caso, el resultado de la modelación varía de una manera muy significativa si se compara con el caso anterior. Ya que prácticamente en este caso se encuentra un rango de temperaturas de la fase volátil mucho inferior al encontrado en el caso uno. La diferencia entre un caso y el otro es del orden aproximado de 100 grados, lo que implica que al trabajar con un valor fijo de temperatura en la pared del horno se va a obtener una temperatura de operación mucho más baja y los resultados serán muy diferentes en comparación a el caso uno, en el cual se establece un perfil de temperaturas en la pared del horno. Es por ello que es importante encontrar las mejores condiciones de trabajo para alcanzar la temperatura de operación requerida para la obtención de biocombustibles.

Tabla 10 Condiciones de borde caso 3.

Caso	Entrada (1)	Pared (3-4)	Salida (2)	Fase sólida (5)
3	T=300 K	T= 971 K	T=673 K	Q=12.15 W

Fuente: elaboración propia

Figura 30. Perfiles de temperaturas obtenidos por los dos métodos caso 2



Fuente: elaboración propia

Para este caso se utilizó como condición de borde el flujo de calor de la fase sólida hacia la fase volátil calculado previamente en el capítulo uno. Debido a esto se observó un comportamiento uniforme y lineal en la mayoría del eje axial

⁵³ MENDOZA GENEY. Op. Cit.

del horno rotatorio, puesto que era un flujo constante aplicado a la frontera en la que coexisten la fase sólida y la volátil. Es en este caso donde se presenta el comportamiento térmico más uniforme de todos, es de esperarse ya que el flujo de calor es un valor constante en cada uno de los puntos del horno, esto genera que la temperatura de la fase volátil sea igual a lo largo del mismo. Lo que puede llegar a influir en los procesos que ocurren en la biomasa. En este caso se utilizaron valores de temperaturas fijos como condiciones de borde, así se evidencia también que el rango de temperaturas es mucho más bajo que los encontrados en el caso 1,4 y 5, en donde se utilizaron perfiles de temperatura como condiciones de borde.

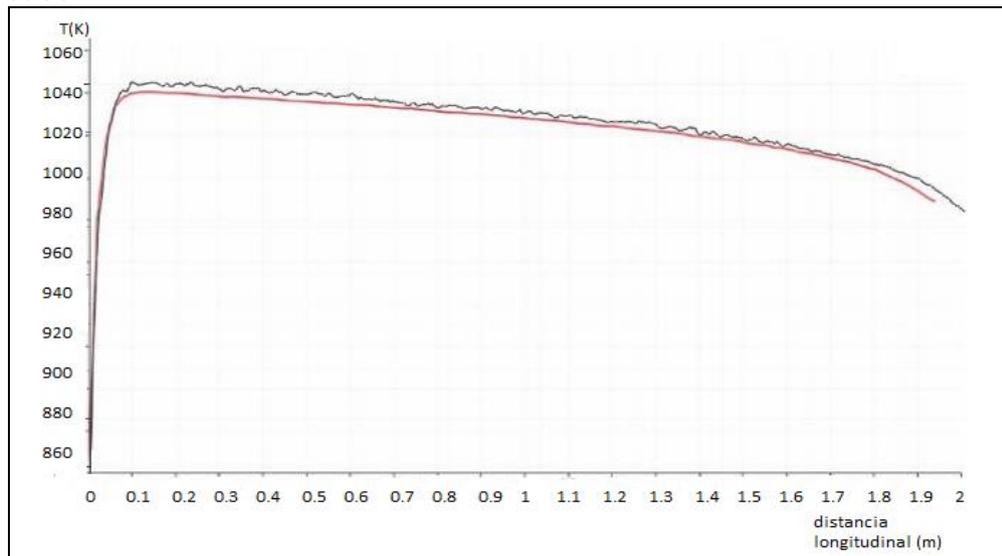
En este caso se alcanzó una temperatura máxima de 970.27 K por medio de los volúmenes finitos y 971.299 K tras realizar la discretización por medio de los elementos finitos, dicha temperatura se mantuvo constante a lo largo del perfil de temperatura. En este caso la temperatura mayor resultó ser la obtenida por medio de elementos finitos y la diferencia entre los valores hallados fue de 1.3 grados.

Tabla 11. Condiciones de borde caso 4

Caso	Entrada (1)	Pared (3-4)	Salida (2)	Fase sólida (5)
4	T=300 K	T= 971 K	Aislado	Perfil de T°

Fuente: elaboración propia

Figura 31. Perfiles de temperaturas obtenidos por los dos métodos caso 4



Fuente: elaboración propia

En este caso se trabajó con una salida del horno con recubrimiento térmico para aislarlo y así evitar la transferencia de calor hacia el exterior y hacia el interior de dicho horno. Se puede observar cómo cambió la forma de comportamiento de la temperatura al interior del horno a diferencia de los otros cuatro casos, en los

cuales se presentó una caída en los valores de la temperatura a medida que se acercaba a la salida adiabática.

Con la simulación mediante los volúmenes finitos se alcanzó una temperatura máxima de 1047.87 K a los pocos centímetros de la entrada y una temperatura mínima de 986.92 K a la salida del horno. La temperatura máxima fue de 1048,93 K y la temperatura mínima de 988.77 K cuando se realizó la simulación mediante los elementos finitos. Para este caso la mayor temperatura fue la obtenida mediante elementos finitos y la diferencia entre las temperaturas fue de un grado.

Era de esperarse que se generara este cambio de comportamiento, ya que en los casos anteriores se utilizó una salida con una temperatura constante de 673 K, lo que demuestra que el cambio de una de las condiciones de frontera genera que los resultados se alteren drásticamente. No es lo mismo tener una de las fronteras del sistema con una temperatura constante que una con condiciones adiabáticas. Teniendo en cuenta que fijar una condición adiabática a la salida repercute de manera tan drástica en el comportamiento térmico de la fase volátil, se evidencia que no es conveniente utilizar esta condición a la salida puesto que se va a presentar una disminución de temperatura a medida que se acerca a la salida aislada del horno. También se puede evidenciar nuevamente como el aumento del número iteraciones genera oscilaciones en el método de los volúmenes finitos, ya que en este caso se utilizó un perfil de temperatura en la fase sólida y fue necesario disminuir el paso de tiempo de la simulación para obtener resultados estables.

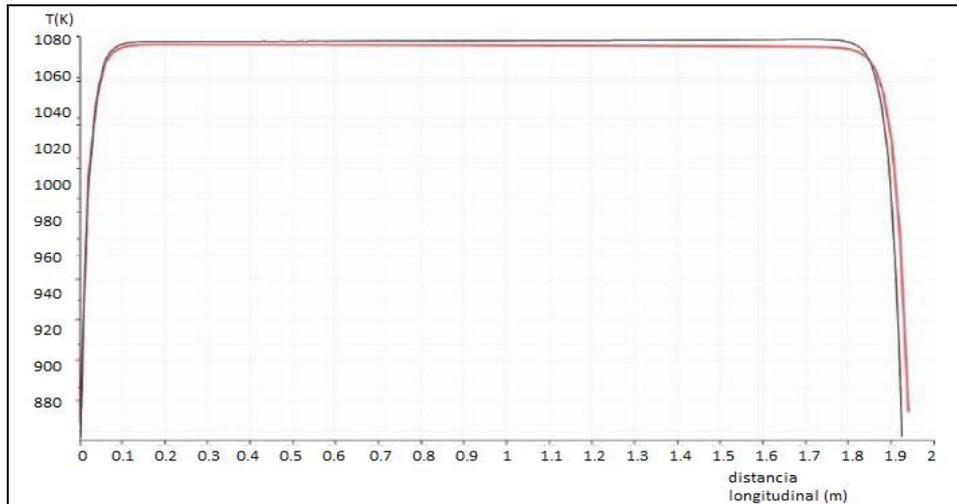
Como consecuencia de lo anterior se puede concluir que para alcanzar una temperatura uniforme a lo largo del horno, lo más indicado es establecer en la salida una temperatura fija, de esta manera se garantiza que el proceso de gasificación ocurra en cada una de las zonas del horno por donde fluye la biomasa. No resulta adecuado tener temperaturas fluctuantes, debido a que se puede presentar que las reacciones no alcancen la temperatura de operación y de esta manera no se aprovecha la cantidad de energía liberable disponible en la biomasa.

Tabla 12. Condiciones de borde caso 5

Caso	Entrada (1)	Pared (3-4)	Salida (2)	Fase sólida (5)
5	T=300 K	Perfil de T°	T=673 K	Perfil de T°

Fuente: elaboración propia

Figura 32. Perfiles de temperaturas obtenidos por los dos métodos caso 5



Fuente: elaboración propia

Este es el caso que describe los comportamientos más cercanos a la realidad, pues las condiciones de borde utilizadas fueron los perfiles de temperatura en el horno y en la fase sólida; esto permitió simular el problema de manera que el comportamiento del calor fuera más real. En este caso se disminuyó de manera significativa el paso de tiempo, ya que se utilizaron los dos perfiles de temperatura como condición de borde. Esto generó un aumento en el tiempo de cómputo, ya que se aumentó el número de iteraciones y se logró eliminar las oscilaciones que se presentan en los casos anteriores cuando se utilizan perfiles de temperatura.

Tras realizar la aproximación por medio del método de los volúmenes finitos se alcanzó una temperatura máxima de 1080.37 K, la cual se mantuvo a lo largo del reactor. Mediante los elementos finitos la temperatura máxima alcanzó los 1075,12 K. En comparación con la temperatura máxima obtenida en cada uno de los casos anteriores, se observó que es en este caso donde se encontró una temperatura de proceso más alta. En este caso se evidencia cómo afecta el uso de perfiles de temperatura como condiciones de borde, si se compara este con el caso uno se observa que el comportamiento térmico es muy diferente. En este escenario se predice que la fase volátil va a tener una temperatura estable a lo largo del horno, lo que favorece a que las reacciones químicas ocurran de manera homogénea y que los productos vayan a ser los esperados por el usuario de la herramienta computacional desarrollada. Al realizar esta serie de experimentaciones computacionales, se evidencia que utilizar valores de temperatura fijos o variables genera una afectación significativa del comportamiento térmico de la fase volátil al interior del horno. Es por ello que cuando se quiera hacer el diseño de dispositivos para procesamiento de biomasa, se deben establecer muy cuidadosamente las condiciones de trabajo, ya que tienen una repercusión en la temperatura al interior del horno. Al ser la temperatura una de las variables del proceso de pirólisis y gasificación, es vital ver como se ve afectada por la variación de las condiciones de borde del sistema.

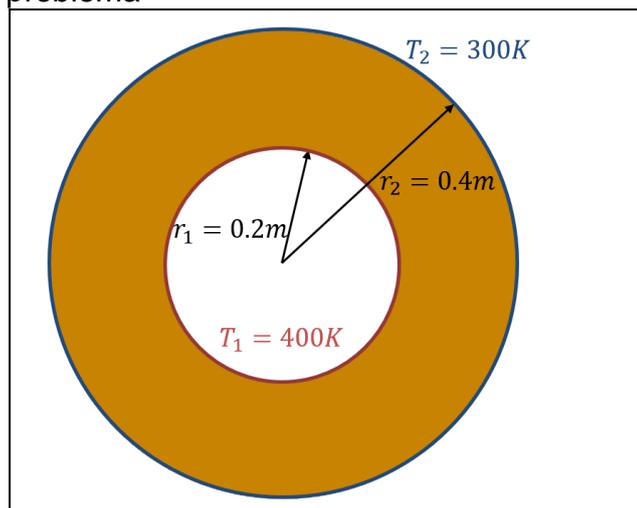
4. VALIDACIÓN DE RESULTADOS

4.1 VALIDACIÓN DE LOS MÉTODOS DE VOLÚMENES FINITOS MEDIANTE PRUEBAS ESTANDARIZADAS

Para poder validar el método de elementos finitos se realizaron pruebas al solver y al esquema laplacianFoam con el fin de demostrar que los valores obtenidos concuerdan con los calculados de manera teórica e iterativa. De esta forma, se compararon los resultados obtenidos de manera analítica y aquellos obtenidos por medio de OpenFoam. Entonces, se tomó un problema de transferencia de calor en 3D, de tipo estable y gobernado por la ecuación de Laplace. Teniendo la solución analítica del problema, se comenzó a hacer la simulación del caso en OpenFoam. A continuación, se muestra la descripción del caso de estudio y la manera en la que se le dio solución de forma analítica.

Se consideró un problema de flujo estable cuyo valor de generación de energía térmica es cero. Se tenían dos cilindros concéntricos, uno al interior de otro. Al ser un problema de difusión se debe definir el valor de la difusividad térmica, en este caso es de $0.00004 \text{ m}^2/\text{s}$. En el siguiente gráfico se observan las condiciones de frontera y la disposición geométrica del problema. La longitud de ambos cilindros es de 1 m. ⁵⁴

Gráfica 6. Representación de condiciones de borde y disposición geométrica del problema



Fuente: NOZAKI, Fumiya. Introduction to laplacianFoam and simple validation calculation. [Internet]. 2016. Recuperado de <https://caefn.com/openfoam/solvers-laplacianfoam>

⁵⁴ NOZAKI, Fumiya. Introduction to laplacianFoam and simple validation calculation. [Internet]. 2016. Recuperado de <https://caefn.com/openfoam/solvers-laplacianfoam>

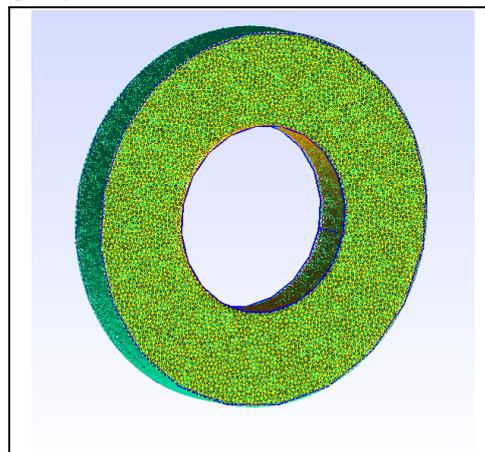
En el grafico 6 se pueden observar las temperaturas para cada cilindro T1 y T2 respectivamente y los radios de los mismos r1 y r2. En este punto es oportuno mencionar a Fumiya Nozaki, quien planteó una ecuación sencilla para dar solución a este problema térmico, la misma es mostrada en la Ecuación 16. De esta forma se estableció una relación entre la temperatura y el radio y se obtuvo una serie de temperaturas radiales. Para darle solución a esta ecuación se realizaron iteraciones para encontrar una cantidad significativa de valores para la temperatura a lo largo de una línea radial. Teniendo esta ecuación se calcularon una serie de valores de temperatura, los cuales se muestran en la Tabla 12.

Ecuación 26. Ecuación para encontrar valores de solución analítica

$$\frac{T_1 - T_R}{T_1 - T_2} = \frac{\ln(r/r_1)}{\ln(r_2/r_1)}$$

Una vez obtenidos los resultados de manera analítica se comenzó la elaboración del modelo computarizado del problema anterior. En primer lugar, se hizo una malla en Gmsh, según la geometría de los cilindros descrita. Esta malla era en 3D con 1218 elementos tetraédricos y un factor de tamaño de 0.1, en la siguiente figura se observa el resultado final.

Figura 33. Malla 3D realizada en Gmsh



Fuente: elaboración propia

Para darle solución al problema en OpenFoam se creó un nuevo directorio, luego se convirtió la malla para que pudiese ser leída adecuadamente por el *software* de volúmenes finitos. Más adelante, se establecieron las condiciones de borde en el subdirectorio correspondiente al tiempo cero. En este caso las condiciones de frontera son de tipo Dirichlet pues se tenían valores de temperatura fijos (400K y 300 K), en cuanto a las condiciones de borde, se utilizaron unas tipo Neumann a la entrada y a la salida, ya que se tomaron fronteras adiabáticas. La difusividad

térmica se estableció en el archivo de propiedades de transporte. Una vez establecidas todas las condiciones y los esquemas matemáticos para seguir se pudo dar solución al problema térmico de manera computacional.

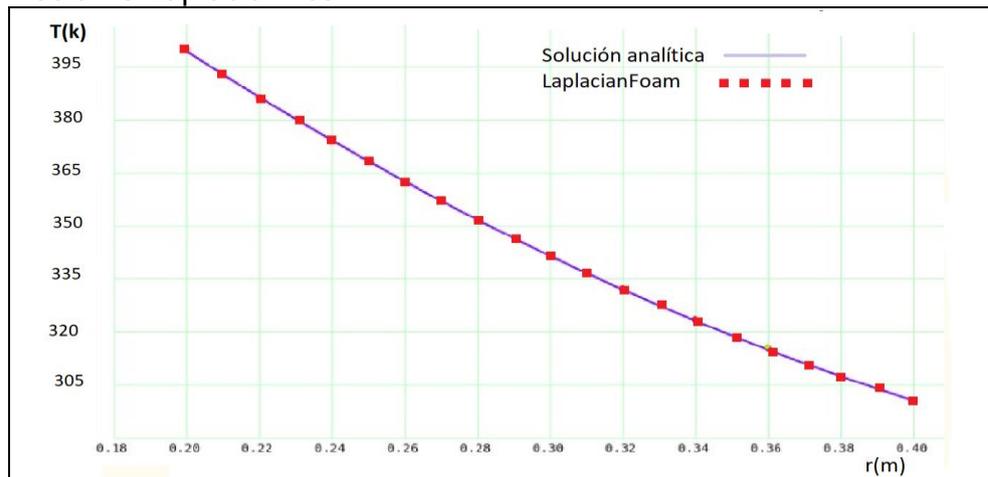
Luego de realizar la simulación se tomaron los valores obtenidos de manera analítica y se compararon con los encontrados al realizar la simulación. Los valores se pueden ver comparados en la siguiente tabla y gráfica.

Tabla 13. Comparación de resultados obtenidos analíticamente y en OpenFoam

Distancia radial (m)	Solución analítica (K)	LaplacianFoam (k)
0.200	400	400
0.215	389.62	389.90
0.230	379.91	380.29
0.245	370.77	371.18
0.260	362.15	362.55
0.275	354.02	354.36
0.290	346.34	346.60
0.305	339.07	339.22
0.320	332.16	332.20
0.335	325.59	325.52
0.350	319.31	319.14
0.365	313.27	313.03
0.380	307.45	307.17
0.395	301.80	301.52
0.400	300	300

Fuente: elaboración propia

Gráfica 7. Comparación entre solución analítica y solución obtenida mediante LaplacianFoam



Fuente: elaboración propia

Como se puede observar en la Gráfica 7, los resultados obtenidos de ambas formas son muy similares. Su similitud permite validar el correcto funcionamiento del esquema matemático y el solver utilizado para el desarrollo de este trabajo de grado. Es evidente que el margen de error entre ellos es muy bajo, este margen se calcula a continuación. Posteriormente, se procedió a calcular el error absoluto y el error relativo de los resultados obtenidos por medio de volúmenes finitos. Era importante confirmar que los resultados obtenidos por medio de la simulación fueran a tener un margen de error muy pequeño. Adicionalmente, era inevitable que se presentara error, ya que el *software* hace muchas aproximaciones e interpolaciones para llegar al resultado final.

El error absoluto muestra la diferencia entre los datos obtenidos por medio del *software* y los datos obtenidos por medio de la solución analítica. Sumado a ello, representa el error entre cada uno a manera porcentual. Realizando los debidos cálculos se encontró un error absoluto de 0.25 K, lo que quiere decir que en promedio los datos de la solución analítica y los obtenidos mediante OpenFoam variaban esa cantidad. Se realizaron los cálculos del error relativo y se encontró un 0.074%, este es un valor considerado como bajo, pues ni siquiera alcanza a un margen de error de 1%.

4.2 VALIDACIÓN DE LOS MÉTODOS DE ELEMENTOS FINITOS MEDIANTE PRUEBAS ESTANDARIZADAS

Con el fin de comprobar la veracidad de los resultados de FEniCS se hizo necesario buscar en la literatura un problema con una solución analítica, que en efecto permitió comprobar que la discretización por medio del algoritmo era correcta. Bajo esta finalidad, se escogió un problema sencillo encontrado en la

literatura revisada, el cual se centra en dar solución a la ecuación 7 de Poisson⁵⁵, en donde se utiliza un dominio espacial en 2D $\Omega = [0,1] \times [0,1]$, el cual es un simple cuadrado de una unidad por una unidad. Para su implementación en FEniCS se sigue el mismo procedimiento mostrado en el capítulo tres.

Dicho problema se desarrolló bajo el método de las soluciones manufacturadas, que consiste en un proceso simple; este comienza con una Ecuación Diferencial Parcial para la cual se requiere verificar su procedimiento de discretización⁵⁶. En este caso, se recurrió a la ecuación de Poisson aplicada a un problema de calor en estado estable que se muestra a continuación:

Ecuación 27. Ecuación de Poisson problema de calor en estado estable

$$\nabla^2 T = -\frac{Q(X,Y)}{K} \text{ PARA } \Omega$$

Donde:

T= Campo de temperatura

Q (x,y)= Término fuente de calor

K = conductividad

$T = T_b(x,y)$ para $\partial\Omega$ $T_b(x,y)$ = Temperatura conocida en el borde.

Se debe definir una solución analítica cerrada y sencilla, tales como funciones trigonométricas, exponenciales o polinómicas. Esto garantiza que se llegue fácilmente el orden teórico de precisión⁵⁷. Los polinomios de grado inferior son los más indicados para esto. Se define como la solución exacta del problema la siguiente ecuación cuadrática:

Ecuación 28.

Solución exacta

$$Ue = 1 + x^2 + 2y^2$$

Dicho polinomio debe ser sustituido en la EDP y de esta manera encontrar los términos fuente que se ajustan a la solución analítica previamente establecida, los mismos son:

$$Q = -6 \quad Td = Te = 1 + x^2 + 2y^2$$

Definiendo el problema variacional en FEniCS, como ya se mencionó previamente en el capítulo tres, en primera medida es necesario crear la función

⁵⁵ SALARI, Kambiz y KNUPP, Patrick. Code Verification by the Method of Manufactured Solutions. Sandia National Labs., Albuquerque, NM (US); Sandia National Labs., Livermore, CA (US). 2000.

⁵⁶ JELINEK, Michal y MAHAFFY, John. The Method of Manufactured Solutions. [Internet]. Penn State University, Applied Research Laboratory. s.f. Recuperado de http://www.personal.psu.edu/jhm/ME540/lectures/VandV/MMS_summary.pdf

⁵⁷ *Ibíd.*

para el dominio espacial V , posteriormente fue posible crear las funciones test y trial, asimismo definir el término fuente para el problema⁵⁸:

Figura 34. Funciones definidas en FEniCS para el problema analítico.

```
22 u = TrialFunction(V)
23 v = TestFunction(V)
24 f = Constant(-6.0)
```

Fuente: elaboración propia

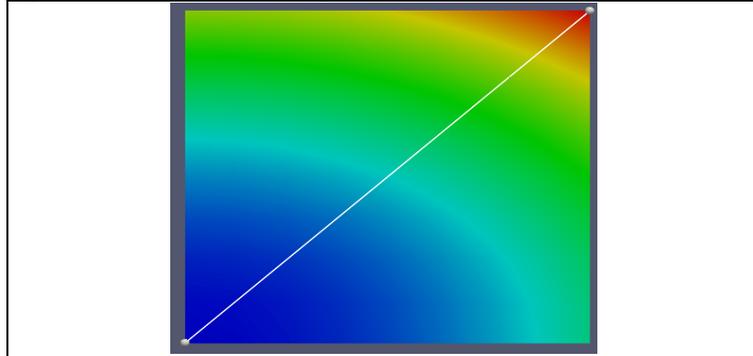
Por último, se implementó la respuesta exacta como la condición de borde del problema, dicha condición fue aplicada en el borde del eje X del dominio espacial cuadrado previamente definido. Para su implementación en FEniCS se escribió la ecuación cuadrática con sintaxis C++, de la siguiente manera:

Figura 35 Definición de condiciones de borde para el problema analítico en FEniCS.

```
u_D = Expression('1 + x[0]*x[0] + 2*x[1]*x[1]', degree=2)
def boundary(x, on_boundary):
    return on_boundary
bc = DirichletBC(V, u_D, boundary)
```

Fuente: elaboración propia

Figura 36. Simulación problema con solución analítica

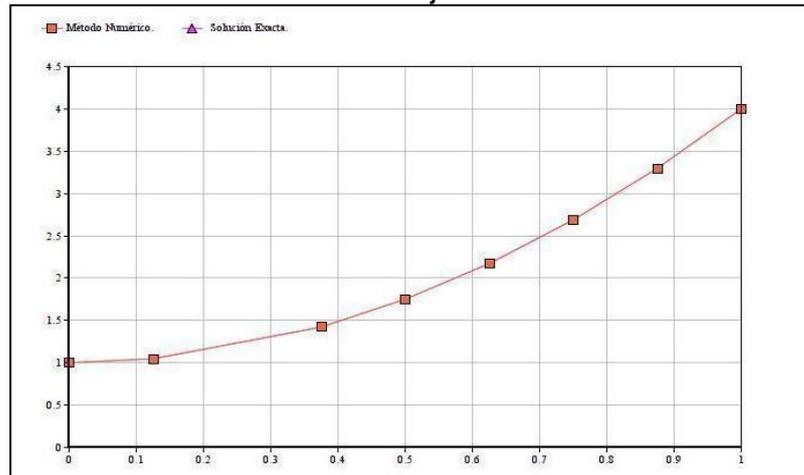


Fuente: elaboración propia

A continuación, se eligieron varios puntos a lo largo de una recta que atraviesa transversalmente el dominio cuadrado como se muestra en la Figura 34, con el fin de comparar la respuesta numérica con la respuesta exacta proporcionada por U_e .

⁵⁸ GOCKENBACH, Mark. Understanding and Implementing the Finite Element Method. SIAM, 2006.

Gráfica 8. Comparación entre solución analítica y solución obtenida mediante Fenics Project



Fuente: elaboración propia

Una de las maneras más sencillas de comprobar el método es comparar la solución numérica con la solución exacta por medio del error absoluto y relativo, si el error es lo suficientemente bajo el método es aceptable. Para calcular el error del método de los elementos finitos se utilizaron los siguientes puntos:

Tabla 14. Comparación, Respuesta analítica Vs. respuesta método numérico

Coordenada(x,y)	Método numérico	Solución Exacta
(0 0)	1	1
(0.125 0.125)	1,04688	1,046875
(0.25 0.25)	1,1875	1,1875
(0.375 0.375)	1,42187	1,421875
(0.5 0.5)	1,75	1,75
(0.625 0.625)	2,17187	2,171875
(0.75 0.75)	2,6875	2,6875
(0.875 0.875)	3,29687	3,296875
(1 1)	4	4

Fuente: elaboración propia

Para realizar la validación de las respuestas del problema solucionado mediante el método numérico se calculan el error relativo y el error absoluto, que como se mencionó con anterioridad, esta es una forma válida y muy útil de conocer las posibles variaciones del método numérico implementado.

El error absoluto encontrado para la discretización de la ecuación de Poisson por medio de los elementos finitos es $2,22E-06$ K, de igual forma el error relativo para el problema en mención es de $0,000134\%$, valor que se encuentra muy por debajo del 1% .

4.3 COMPARACIÓN ENTRE MÉTODOS

4.3.1 Error absoluto y error relativo. Con el fin de determinar cuál de los métodos era el más acertado para trabajar este tipo de problemas de transferencia de calor se calculó el error relativo y el error absoluto tanto para el método de los elementos finitos como para los volúmenes finitos, tal y como se muestra en cada uno de los problemas con solución analítica escogidos de la literatura revisada.

Tabla 15. Comparación error relativo y absoluto.

Método numérico	Error relativo	Error absoluto
Volúmenes finitos	0.07408%	0.25607
Elementos finitos	0,0001345%	2,22E-06

Fuente: elaboración propia

Al respecto, lo más deseable sería que el error fuera cero, pero se trata de dos métodos que mediante iteraciones realizan una aproximación y a pesar de que son problemas térmicos el manejo de las condiciones de borde, la discretización de las entidades, algunas funciones de interpolación y el método de iteración son diferentes. Esta situación influye directamente en el error que puede llevar implícito el método numérico⁵⁹.

Aunque la aplicación más popular para los volúmenes finitos es la mecánica de fluidos, los dos métodos tienen un margen de error pequeño y sus procedimientos comparten una serie de características como la discretización de la malla, realizar la discretización de los elementos finitos por medio de FEniCS tiene un error menor a los volúmenes finitos.

Se podría decir que los elementos finitos tienen un enfoque más general y que es más conciso en términos matemáticos⁶⁰, es por esto que el tiempo de cómputo mientras se da solución al problema térmico por medio de FEniCS Project es menor que el tiempo de OpenFoam al solucionar el perfil de temperaturas de la fase volátil.

Del mismo modo, se calculó la diferencia obtenida entre los resultados por cada

⁵⁹ AHMAD, N; RAPPAZ, J; DESBIOLLES, J; JALANTI, T; RAPPAZ, M; COMBEAU, H Y STOMP, C. Numerical simulation of macrosegregation: a comparison between finite volume method and finite element method predictions and confrontation with experiments. Metallurgical and materials Transactions, 1998. Vol. 29, n° 2; 615-630

⁶⁰ Ibíd.

uno de los métodos en cada uno de los casos. Esto permitió hacer una validación de los métodos matemáticos y computacionales utilizados para la solución del modelo planteado por medio de volúmenes finitos.

Esta es una forma de garantizar que los resultados obtenidos para el modelo teórico planteado del horno rotatorio sean reales y manejan un margen de error de 0.07408% y la fluctuación entre un método y otro sea muy baja. Así se tiene total certeza de que los resultados mostrados en el capítulo anterior son del todo verídicos y validados analíticamente.

4.3.2 Tiempos de simulación. Una de las cosas más importantes a tener en cuenta a la hora de definir un método de discretización óptimo, es el tiempo de cómputo que puede llegar a tardar para dar solución a un problema en específico.

Tabla 16. Tiempos de cómputo para cada uno de los métodos implementados.

	Volúmenes finitos (s)	Elementos finitos (s)
Caso 1	268	25
Caso 2	92	24
Caso 3	18	20
Caso 4	278	20
Caso 5	432	22

Fuente: elaboración propia

Dicho tiempo se refleja directamente en el costo computacional y los requerimientos de equipos para realizar la simulación. Cuando la discretización toma mucho tiempo se usa un equipo que tenga una capacidad de procesamiento alta. A mayor capacidad de procesamiento, el costo del equipo aumenta. Por lo tanto, se busca que la simulación se haga en un tiempo corto y que los equipos para hacerlo no sean muy costosos. De esta manera se disminuyen los costos computacionales, se logra hacer una experimentación computacional mucho más económica en comparación a experimentaciones físicas.

Según lo obtenido con el estudio, el método de los elementos finitos tiene menor tiempo de cómputo que los volúmenes finitos solucionados por medio de OpenFoam, en especial en los casos 1,4 y 5, en donde se utiliza un perfil de temperatura como condición de borde y el tiempo de cómputo se aumenta hasta 12 veces más que el del método de los elementos finitos solucionado por medio de FEniCS.

4.3.3 Métodos de iteración y aproximación. Por más preciso que sea un método numérico siempre va a existir un error implícito en la respuesta, los

métodos de los elementos finitos y volúmenes finitos son muy similares en cuanto a su implementación. En primer lugar la geometría es dividida en una cantidad finita de elementos o volúmenes muy pequeños y geoméricamente simples. Cuando se hace esta división se debe garantizar que los resultados no van a depender del tamaño de malla, esto se realiza al hacer convergencias de malla. Lo que hace diferente cada uno de los métodos radica en la forma de aproximación que cada uno utiliza para poder alcanzar la respuesta esperada⁶¹.

El método de los elementos finitos, se ajusta con facilidad a diferentes tipos de problemas físicos. Básicamente lo que hace el método es tomar la geometría y dividirla en un número finito de elementos, cada elemento tiene una función que describe los valores en cada una de las partes del mismo. El método utiliza funciones con altos grados de exactitud, lo que permite hacer una aproximación más precisa, ya que tiene más valores en el dominio. ⁶²Asimismo, este método captura los pequeños detalles en las soluciones de una forma más óptima debido a que la solución es interpolada de una manera precisa sobre cada uno de los elementos.

Los volúmenes finitos se basan en las leyes de conservación de las propiedades en el dominio. Este método divide en geometría en volúmenes de control, lo que ingresa a un lado de la celda debe salir del otro lado. La formulación consiste en ecuaciones de conservación de flujo definidas en un sentido sobre las celdas. Suele ser el método más eficiente en cuanto a tiempos y gasto computacional, pero en algunos problemas de alto grado de acoplamiento. Los volúmenes finitos son un poco lentos al momento de hacer la simulación debido a que se debe refinar la malla para realizar una discretización con buena precisión. El método calcula los promedios de los valores al interior de cada una de las celdas y realiza la integración de cada uno de estos valores promediados para cada uno de los volúmenes de control especificados.

Una de las desventajas del método de los volúmenes finitos es que cuando se quiere ver un resultado con una precisión es necesario realizar un refinado de la malla, mientras que los elementos finitos aproximan de una manera similar, pero realiza funciones de aproximación de alto grado de una manera mucho más sencilla.

4.4 COMPARACIÓN CON OTROS AUTORES

En su tesis de maestría, Libardo Mendoza realizó el modelamiento de la pirólisis en un horno rotatorio de calentamiento indirecto. El modelo cinético comprende modelos de transferencia de calor, balance de especies y de mecanismos de

⁶¹ PETERSON, Jeff. What exactly is a finite element analysis?. University of Cincinnati. 2010 [Internet]. Recuperado de <https://www.quora.com/What-exactly-is-Finite-element-analysis-How-would-one-explain-the-basic-concept-to-an-undergrad-friend/answer/Jeff-H-Peterson>

⁶² FONTES, Ed. FEM VS FVM. 2018. [Internet]. Recuperado de <https://www.comsol.com/blogs/fem-vs-fvm/>

transporte. Desarrolló un modelo en una dimensión en estado estacionario; con este desarrollo matemático el autor encontró los perfiles de temperatura de la fase sólida y de la fase volátil al largo del eje axial del horno.

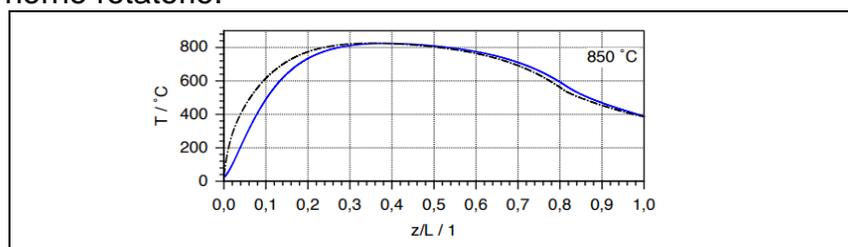
Para el modelamiento Mendoza tuvo en cuenta dos mecanismos de transferencia de calor, que son la conducción y la radiación y también tuvo en cuenta la liberación o absorción de energía cuando ocurren reacciones químicas. En cuanto a las condiciones de borde, estableció una temperatura de entrada de la fase sólida y la fase volátil a temperatura ambiente de 300 K. En cuanto a las condiciones del horno, utilizó el perfil descrito en el capítulo uno, el cual corresponde al obtenido mediante experimentación física al configurar el reactor en un *setpoint* de 1123.15 K.

Teniendo en cuenta lo anterior, se afirma que el modelo desarrollado por Mendoza difiere en muchas cosas con el modelamiento realizado en este proyecto de grado, ya que para este caso no se realizó el balanceo de especies, ni se tuvieron en cuenta los mecanismos de transferencia de calor por radiación. Uno de los aspectos más importantes en el que varían estos dos modelos es en el hecho de que el estudio de Mendoza fue realizado unidimensionalmente y este proyecto de grado fue modelado en tres dimensiones. El horno modelado por Mendoza es de 1 m de largo y el modelado en este proyecto es 1 m más largo.

Estas variaciones en las condiciones de los modelos hacen que los resultados obtenidos en cada uno de ellos sean muy diferentes entre sí. Sin embargo, se realiza la comparación entre los resultados obtenidos por Mendoza en su tesis y los resultados del caso 5 evaluado en este proyecto, ya que este es el más cercano en cuanto a condiciones con la situación modelada por Mendoza. Como se dijo anteriormente, en el caso 5 se utilizaron los perfiles de temperatura de la pared del horno y de la fase sólida tomados de la tesis de Mendoza. Esta es la mejor opción para realizar la comparación de resultados de cada uno de los modelos.

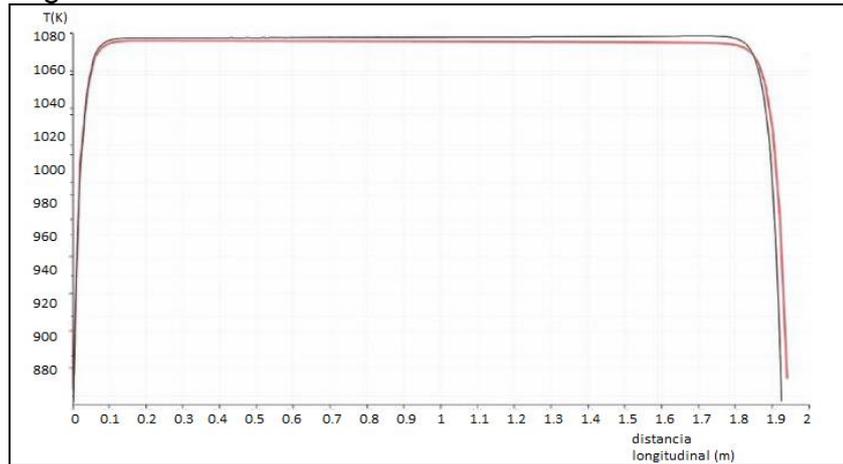
La siguiente gráfica muestra los resultados obtenidos en la tesis de maestría de Libardo Mendoza, allí se exponen los perfiles térmicos de la fase sólida (línea negra) y la fase volátil (línea azul). Estos resultados se obtuvieron por medio de diferencias finitas. Se obtuvo una temperatura máxima de 1078 K.

Gráfica 9. Resultado de modelamiento de pirólisis en un horno rotatorio.



Fuente: MENDOZA GENEY, Libardo. Pirólisis de biosólidos en horno rotatorio. Universidad Nacional de Colombia (Bogotá), 2016. p. 1-249.

Figura 37. Resultados de modelamiento caso 5



Fuente: elaboración propia

Es evidente que los resultados obtenidos varían mucho, Mendoza, por su parte, encontró que en la zona intermedia del horno es donde la temperatura es mayor y se observa que el valor de la temperatura cambia a lo largo del eje axial del reactor. En cuanto a los resultados obtenidos mediante elementos y volúmenes finitos, se observa que el comportamiento es homogéneo y estable en la mayor parte del horno. Sin embargo, si se comparan las temperaturas máximas obtenidas en el proyecto y en el trabajo de Mendoza, se encuentra que son muy cercanas. Las temperaturas máximas varían en tres grados, lo que evidencia que los resultados son similares en cuanto a este aspecto.

Las distinciones en cada uno de los modelamientos se dan porque las condiciones evaluadas fueron diferentes. El modelo realizado por Mendoza incluye muchos más factores como balance de especies, transferencia de calor por medio de radiación y generación de energía, los cuales no fueron tomados en cuenta en esta tesis. También se debe considerar que se hizo un modelamiento en 3D y no en 1D. Esto no significa que los resultados obtenidos en esta tesis sean equivocados, por el contrario, muestra que son muchas las variables involucradas en este procesamiento de biomasa y que para obtener un resultado real deben tenerse en cuenta e idealmente debe realizarse en 3D.

Tabla 17. Comparación resultados elementos finitos, volúmenes finitos y diferencias finitas

Método utilizado para la discretización.	Temperatura máxima
Volúmenes finitos, caso 5	1080.35 K
Elementos finitos, caso 5	1075.12K
Modelo 1D Mendoza, caso 5	1078 K

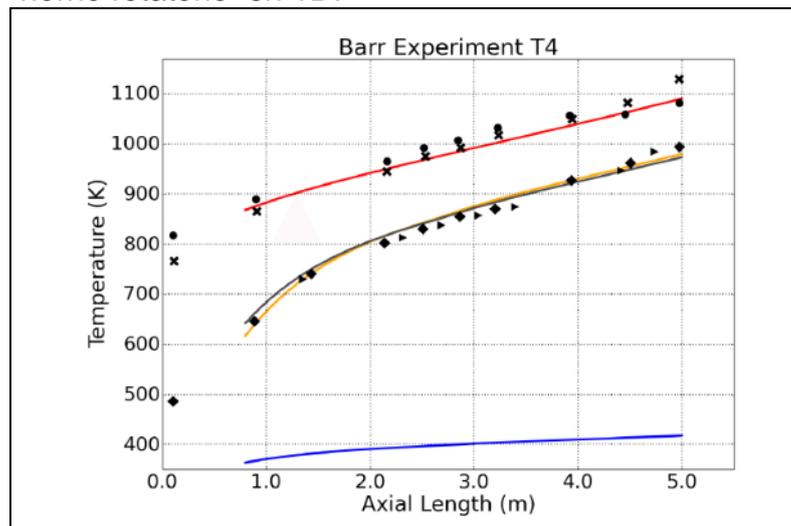
Fuente: elaboración propia

Asimismo se realizó la comparación con otro trabajo para validar los resultados obtenidos y cumplir a cabalidad los objetivos propuestos, para esto se tomó una

tesis de la universidad de Aberdeen en Reino Unido perteneciente a THEODORE HANEIN, Marcus N. En esta tesis se realiza el estudio experimental térmico 1D en un horno rotatorio, la experimentación se realizó en condiciones de flujo estable. Se evaluaron las temperaturas de la fase sólida y la fase volátil.

En este modelo se tuvieron en cuenta todos los mecanismos de transferencia de calor, es decir, conducción, convección y radiación. Se realizó balance de especies para el gas y el sólido, balance de masa y energía, también se tuvieron en cuenta mecanismos de transporte y propiedades radioactivas. Las temperaturas fueron registradas por medio de termopilas a lo largo del horno rotario. En el siguiente grafico se puede observar el perfil térmico encontrado por el autor.

Gráfica 10. Resultado de modelamiento térmico de un horno rotatorio en 1D.



Fuente: THEODORE HANEIN, Marcus N. 1D thermal model of rotary kilns used in cement production. School of Engineering, University of Aberdeen (United Kingdom), 2016.

En este caso la parte de los resultados que interesan para hacer la comparación es el perfil térmico que describe la línea roja del gráfico, este muestra la temperatura de la fase volátil a lo largo del horno. Se puede observar que la temperatura del gas va aumentando a medida que avanza a lo largo del reactor, se presenta un comportamiento creciente, y se puede observar que esta fase presenta las temperaturas más altas de todas las variables analizadas.

Si se compara este resultado reportado por el autor, con el resultado correspondiente al caso 1 de este proyecto de grado, se puede observar que ambos presentan comportamientos similares. Los dos perfiles térmicos muestran un crecimiento a medida que el gas va recorriendo axialmente el reactor.

Tabla 18. Comparación resultados elementos finitos, volúmenes finitos y Theodore Hanein.

Método utilizado para la discretización.	Temperatura máxima
Volúmenes finitos, caso 1	1029.48 K
Elementos finitos, caso 1	1025.48K
Modelo 1D Theodore Hanein	1123.15 K

Fuente: elaboración propia

En ambos casos se utiliza un setpoint de 1123.15K, por lo que las temperaturas son similares. De esta manera se evidencia que los resultados obtenidos en este trabajo de grado son validados con los resultados obtenidos por otros autores en experimentación térmica en hornos rotatorios.

5. CONCLUSIONES

- Para lograr elaborar el modelo matemático que describe el comportamiento térmico de la fase volátil, se establecieron parámetros geométricos del horno y de la fase volátil, los parámetros de operación del horno, las propiedades de cada fase. También se definieron los mecanismos de transferencia de calor que ocurren a lo largo del proceso. Con toda esta información se realizó el modelo matemático que describe lo que ocurre térmicamente con la fase volátil al interior del horno, este modelo se compone de las ecuaciones de gobierno y las condiciones de borde del sistema con lo que se evidenció la importancia de delimitar correctamente el problema que se quiere modelar, asimismo pudimos concluir que realizar simplificaciones a las condiciones iniciales puede generar cierto desacierto en el modelo.
- Una vez planteado el modelo matemático se realizó la implementación computacional del mismo, para ello se construyó una malla y se procedió con la discretización de las ecuaciones de gobierno. Se ingresaron las condiciones de borde de la fase volátil, mediante el uso de OpenFoam y Spyder. Con esto se constató la importancia del uso de una malla que cumpla con los parámetros necesarios para garantizar que los elementos utilizados para la discretización de la geometría no interfieren de ninguna manera con la aproximación, así mismo pusimos a prueba el uso de herramientas computacionales de uso libre, demostrando que son una buena alternativa para realizar modelados de alta calidad sin incurrir en altos costos de un software.
- Con el fin de realizar la validación de los resultados obtenidos por cada uno de los métodos, se realizaron pruebas para verificar que la discretización realizada fuera correcta. Se tomaron problemas con una solución analítica y se compararon con los resultados obtenidos computacionalmente para el mismo problema mediante cada uno de los métodos. El error relativo encontrado en el método de los volúmenes finitos fue de 0.07408% y el de los elementos finitos fue 0,0001345%, con esto se afirmó que el método de los elementos finitos es el método más preciso y el que va a generar resultados más veraces.

6. RECOMENDACIONES

- Para hacer uso de esta herramienta computacional se deben tener claro el tipo de biocombustibles que se quieran obtener, ya que esto depende de temperatura de operación del horno. De la misma manera si se quieren hacer experimentaciones computacionales diferentes, se debe rectificar la geometría del horno ya que de esta manera se debe cambiar la malla que se utiliza, también se debe tener en cuenta el valor del coeficiente de difusividad que se tenga en el modelo a simular.
- Si se quiere predecir el comportamiento físico de la fase volátil del horno rotatorio mediante una aproximación numérica, es necesario complementar este estudio con la discretización de la fase sólida y la modelación del flujo de la fase volátil generada durante el proceso de pirólisis de biomasa en uno de estos reactores.
- Para tener una aproximación más exacta del comportamiento de la temperatura en la fase volátil, es necesario realizar un estudio en donde se tenga en cuenta la liberación o absorción de energía cuando ocurren reacciones, balance de especies y la transferencia de calor por radiación.

BIBLIOGRAFÍA

AHMAD, N; RAPPAZ, J; DESBIOLLES, J; JALANTI, T; RAPPAZ, M; COMBEAU, H Y STOMP, C. Numerical simulation of macrosegregation: a comparison between finite volume method and finite element method predictions and confrontation with experiments. Metallurgical and materials Transactions, 1998. Vol. 29, n° 2; 615-630

AGROWASTE. Pirólisis. [Internet]. 2013. Recuperado de <http://www.agrowaste.eu/wp-content/uploads/2013/02/PIRÓLISIS.pdf>

ALN AES, Martin S.; LOGG, Anders and MARDAL, Kent-Andre. UFC: A Finite Element Code Generation Interface. En: Anders Logg; Kent-Andre Mardal and Garth N. Wells eds. Automated Solution of Differential Equations by the Finite Element Method, Volume 84 of Lecture Notes in Computational Science and Engineering. Springer, 2012a.

AUTOFEM. Propósito y función de mallas de elementos finitos. [Internet]. s.f. Recuperado de https://autofem.com/help/es/purpose_and_role_of_meshes.html

CAÑIZO RINCÓN, José. Cosas sencillas sobre las ecuaciones de Laplace y Poisson. [Internet]. 2005. Recuperado de <http://canizo.org/tex/elipticas2.pdf>

CENGEL, Yunus A; CIMBALA, John M. Mecánica de fluidos. Tercera edición. México: McGraw Hill. 2006.

CERDÁ, Emilio. Energía obtenida a partir de biomasa. Cuadernos Económicos de ICE, 2012, n.º 83

CITING, D.; ARNOLD, N y LOGG, A. Periodic Table of the Finite Elements, SIAM News, vol. 47 no. 9, November 2014.

DUPONT, T.; HOFFMAN, J.; JOHNSON, C; KIRBY, R.; LARSON, M.; LOGG, A. y SCOTT, R. The FEniCS prot. Chalmers Finite Element Center. Göteborg Sweden 2003

EUROPEAN CONSORTIUM MATHEMATICS IN INDUSTRY. FEniCS Project. [Internet]. 2015. Recuperado de <https://ecmiindmath.org/2015/11/18/fenics-project/>

FINITE ELEMENTS. Periodic Table of the Finite Elements. [Internet]. s.f. Recuperado de <http://femtable.org/>

FONTES, Ed. FEM VS FVM. 2018. [Internet]. Recuperado de <https://www.comsol.com/blogs/fem-vs-fvm/>

FORERO NUÑEZ, Carlos Andrés; GUERRERO FAJARDO, Carlos Alberto and SIERRA VARGAS, Fabio Emiro. Producción y uso de pellets de biomasa para la generación de energía térmica: una revisión a los modelos del proceso de gasificación. 2012,.vol. 9, no. 1.

GABALDÓN, Felipe. Capítulo 2: la ecuación de Poisson. [Internet]. 2016. Recuperado de <http://w3.mecanica.upm.es/~felipe/mef0708/capitulo2.pdf>

GARCÍA, Harold. Modelación de la gasificación de biomasa en un reactor de lecho fijo. Tesis presentada como requisito parcial para optar al título de Magíster en Ingeniería - Ingeniería Mecánica. Universidad Nacional de Colombia. Bogotá. 2011.

GEUZAINÉ, Christophe. Gmsh. [internet].2006. Recuperado de <http://gmsh.info/>

GOCKENBACH, Mark. Understanding and Implementing the Finite Element Method. SIAM, 2006.

GREENSHIELDS, Chris. OpenFOAM v6 User Guide: 4.4 Numerical Schemes. [Internet]. 2018. Recuperado de <https://cfdirect.openfoam/user-guide/v6-fvschemes/>

GRUPO CARMAN. Mallado por elementos finitos. ¿Qué es la malla? [Internet]. 2014. Recuperado de <https://grupocarman.com/blog/mallado-por-elementos-finitos/>

HERNÁNDEZ GARCÍA, Guillermo. El método de diferencias finitas. [Internet]. s.f. Recuperado de http://mmc2.geofisica.unam.mx/cursos/hidrogeologia/NotasCurso/1-MDF1_1-10.pdf

HARSONO, Iwan. Heat Transfer Mechanisms in an Indirectly Heated Rotary Kiln with Lifters and Its Role in Scaling. Department of Chemical Engineering. Thesis is presented for the Degree of Doctor of Philosophy of Curtin University of Technology. Australia. 2009.

INCROPERA, Frank y DEWITT, David. Fundamentos de transferencia de calor. Cuarta edición. México: Pearson Prentice Hall. 1999.

IBERISA. Reglas Básicas de Mallado por Elementos Finitos. [Internet]. s.f. Recuperado de http://www.iberisa.com/soporte/femap/reglas_mallado.htm

INSTITUTO COLOMBIANO DE NORMAS TECNICAS Y CERTIFICACIÓN. Compendio de normas para trabajos escritos. NTC-1486-6166. Bogota D.C.: El instituto, 2018. ISBN 9789588585773 153 p.

JELINEK, Michal y MAHAFFY, John. The Method of Manufactured Solutions. [Internet]. Penn State University, Applied Research Laboratory. s.f. Recuperado de http://www.personal.psu.edu/jhm/ME540/lectures/VandV/MMS_summary.pdf

KIRBY, Robert C. and LOGG, Anders. A Compiler for Variational Forms. En: ACM TRANSACTIONS ON MATHEMATICAL SOFTWARE. vol. 32, no. 3, 2007.

KLOSE, Wolfgang; RINCÓN, Sonia y GÓMEZ, Alexander. Procesos de transporte de biomasa y carbonizados en hornos rotatorios. Alemania: Kassel University Press, 2016

KLUG, Michael. Pirólisis, un proceso para derretir la biomasa. Revista de Química PUCP, 2012, vol. 26, nº 1-2.

KUNII, Daizo y CHISAKI, Tatsu. Rotary Reactor Engineering. Science Direct. 2008.

LANGTANGEN, Peter y LOGG, Anders. Solving PDEs in Python. The FEniCS Tutorial Volume I. Center for Biomedical Computing, Simula Research Laboratory and Department of Informatics, University of Oslo. 2017

LOGG, Anders, et al. Automated Solution of Differential Equations by the Finite Element Method. Springer, 2012.

LOGG, Anders, et al. FFC: The FEniCS Form Compiler. En: Anders Logg; Kent-Andre Mardal and Garth N. Wells eds. Automated Solution of Differential Equations by the Finite Element Method, Volume 84 of Lecture Notes in Computational Science and Engineering. Springer, 2012.

MARTÍNEZ, Marcos. Cementos. Horno Rotatorio. Informe. [0]:2005.

MENDOZA GENEY, Libardo. Pirólisis de biosólidos en horno rotatorio. Universidad Nacional de Colombia (Bogotá), 2016. p. 1-249.

MOLINO, Antonio, CHIANESE, Simeone, & MUSMARRA, Dino. Biomass gasification technology: The state of the art overview. Journal of Energy Chemistry, 2016, Vol. 25, nº 1, 10–25.

NOZAKI, Fumiya. Introduction to laplacianFoam and simple validation calculation. [Internet]. 2016. Recuperado de <https://caefn.com/openfoam/solvers-laplacianfoam>

OpenCFD Ltd. Openfoam the CFD open source toolbox. [Internet]. 2016. Recuperado de <https://www.openfoam.com/>

ONEY, Ozlem. Slow, fast and flash pyrolysis of rapeseed. 2003

PETERSON, Jeff. What exactly is a finite element analysis?. University of Cincinnati. 2010 [Internet]. Recuperado de <https://www.quora.com/What-exactly-is-Finite-element-analysis-How-would-one-explain-the-basic-concept-to-an-undergrad-friend/answer/Jeff-H-Peterson>

POLING, Bruce; PRAUSNITZ, John y O'CONNELL, Jhon. The properties of gases and liquids. Fifth edition. New York: McGraw-Hill. 2001.

PYTHON SOFTWARE FOUNDATION. Tutorial de Python. Introducción. [Internet]. 2017. Recuperado de <http://docs.python.org.ar/tutorial/3/real-index.html>

SALARI, Kambiz y KNUPP, Patrick. Code Verification by the Method of Manufactured Solutions. Sandia National Labs., Albuquerque, NM (US); Sandia National Labs., Livermore, CA (US). 2000.

SEPÚLVEDA VILLARROEL, Víctor. Simulación de la cinética del secado a baja temperatura de Eucalyptus nitens. Universidad del Bío-Bío. Tesis presentada en el Departamento de Ingeniería en Maderas. Departamento de Ingeniería en Maderas. Santiago de Chile, 2014.

THEODORE HANEIN, Marcus N. 1D thermal model of rotary kilns used in cement production. School of Engineering, University of Aberdeen (United Kingdom), 2016.

UNIVERSIDAD DE SEVILLA. Calidad de malla y condiciones de contorno periódicas. Anexo 1. [Internet]. s.f. Recuperado de <http://bibing.us.es/proyectos/abreproy/3848/fichero/Volumen+%C3%9Anico%252F07.ANEXO+I.pdf>

VERSTEEG, H. K; MALALASEKERA W. An introduction to computational fluid dynamics the finite volume method. Second edition. Inglaterra. Pearson. 2007

VITENARKIV, Brage. Vitenarkiv i Bragekonsortiet. [Internet]. 2019. Recuperado de <https://www.unit.no/vitenarkiv-i-bragekonsortiet>

YANG, Haiping y CHEN, Hanping. Biomass gasification for synthetic liquid fuel production. Gasification for Synthetic Fuel Production. Fundamentals, Processes and Applications. Woodhead Publishing Series in Energy. 2015, 241-275.

ZILL, Dennis Ecuaciones diferenciales con aplicaciones de modelado. Sexta edición. Mexico: International Thompson Editores. 2003