

Modelo Matemático Unidimensional de la Combustión de una Partícula Cilíndrica de Cascarilla
de Café

Jeifer Albeiro Medina Martínez

Trabajo de Grado para Optar Título de Ingeniero Mecánico

Director

Yesid Javier Rueda Ordoñez

Doctor en Ingeniería Mecánica

Universidad Industrial de Santander

Escuela de Ingeniería Físico Mecánica

Ingeniería Mecánica

Bucaramanga

2021

Dedicatoria

Para Sami, Jenny y mi mamá por nunca perder la fe en mí. Gracias.

Agradecimientos

Quiero agradecer especialmente a los ingenieros y catedráticos Porteiro y Gómez de la Universidad de Vigo por su colaboración, al profesor Yesid por su guía, a Don Carlos por su amabilidad y disposición, y en general a todas las personas que hicieron posible la culminación de esta tesis.

Resumen

Título: Modelo matemático unidimensional de la combustión de una partícula cilíndrica de cascarilla de café.

Autor: Jeifer Albeiro Medina Martínez

Palabras Clave: Briquetas, pellets, biomasa, cascarilla de café, volúmenes de control, ecuaciones de Arrhenius, difusión, transferencia de calor, radiación, análisis próximo, análisis último.

Descripción:

El presente trabajo elabora un modelo matemático para representar el fenómeno de la combustión de una briqueta elaborada con biomasa de cascarilla de café y a partir de este calcular un diseño óptimo para las dimensiones de la briqueta, a través de la optimización de un factor, en este caso el consumo de material contra el tiempo de combustión lo cual permite refinar las dimensiones de la briqueta.

El planteamiento matemático se basa en la premisa de dividir la briqueta en varias capas que se van generando a medida que el fenómeno de combustión va ocurriendo y aplicar el método de los volúmenes de control desde el planteamiento de Patankar, lo que permite discretizar las ecuaciones diferenciales de transferencia de calor, donde el termino fuente para la generación o consumo de calor juega un papel fundamental pues es el término que agrega o resta precisión al modelo, al respecto cada capa tendrá discretizada la ecuación de la transferencia de calor y el termino fuente será propio de dicha capa de acuerdo a las condiciones pertinentes de esta, al realizar esto se tendrá un sistema de ecuaciones discretizadas de tamaño igual al número de capas que se podrán resolver por métodos algebraicos clásicos.

Trabajo de grado.

Facultad de ingenierías físico mecánicas. Escuela de ingeniería mecánica.

Director Yesid Javier Rueda Ordoñez

Abstract

Title: One-dimensional mathematical model of the combustion of a cylindrical coffee husk particle.

Author: Jeifer Albeiro Medina Martínez

Keywords: Briquettes, pellets, biomass, coffee husk, control volumes, Arrhenius equations, diffusion, heat transfer, radiation, mass loss, proximate analysis, final analysis.

Description:

The present work elaborates a mathematical model to represent the phenomenon of the combustion of a briquette made with coffee husk biomass and from this calculate an optimal design for the dimensions of the briquette, through the optimization of a factor, in this case the consumption of material against the burning time which allows to refine the dimensions of the briquette.

The mathematical approach is based on the premise of dividing the briquette into several layers that are generated as the combustion phenomenon occurs and applying the method of control volumes from the Patankar approach, which allows discretizing the differential equations of heat transfer, where the source term for the generation or consumption of heat plays a fundamental role because it is the term that adds or subtracts precision to the model, in this regard each layer will have the heat transfer equation discretized and the source term will be own of said layer according to the pertinent conditions of this, when doing this we will have a system of discretized equations of size equal to the number of capable that can be solved by classical algebraic methods.

Trabajo de grado.

Facultad de ingenierías físico mecánicas. Escuela de ingeniería mecánica.

Director Yesid Javier Rueda Ordoñez

Contenido

Capítulo 1. Marco Teórico 10

1.1. Combustión Heterogénea..... 10

1.2.1. Difusividad Global Del Oxígeno A Través De La Partícula 13

1.2.2. Coeficientes Globales De Transferencia Para Las Reacciones De Dióxido De Carbono Y Vapor De Agua 17

1.2.3. Reacciones Químicas 17

1.3. Balance De Masa 18

1.3.1. Ratio De Consumo De La Capa Húmeda 19

1.3.2. Ratio De Consumo De La Capa Seca 21

1.3.3. Ratio De Generación De Char 23

1.3.4. Ratio De Consumo Del Char 24

Capítulo 2. Condiciones Y Características Del Modelo 27

2.1. Caracterización De La Biomasa..... 27

2.1.1. Caracterización De La Materia Prima..... 28

MODELO MATEMÁTICO UNIDIMENSIONAL DE LA COMBUSTIÓN	2
2.2. Pirólisis	33
2.3. Dimensionamiento Y Forma De La Partícula.....	35
2.4. Propiedades Necesarias Para El Modelo.....	39
Capítulo 3. Modelo Matemático	42
3.1. Introducción E Hipótesis Generales.....	43
3.1.1. La Partícula Se Modela Como Una Esfera Y Las Capas Internas Se Modelan Como Esferas Concéntricas	45
3.1.2. Se Supone Que Los Materiales Que Componen La Esfera Característica Del Modelo Son Isotrópicos.....	46
3.1.3. Se Supone Que El Secado Ocurre A Una Temperatura Constante.....	46
3.1.4. La Pirolisis De La Biomasa Seca Ocurre En Un Mecanismo De Tres Capas	47
3.1.5. No Se Tiene En Cuenta La Capa De Ceniza.....	47
3.1.6. El Comportamiento De Los Gases Es Ideal.....	47
3.1.7. La Partícula Conserva Su Forma Durante Todo El Proceso De Combustión.	48
3.2. Planteamiento Del Modelo	48
3.2.1. La Ecuación De Conducción De Calor En Régimen Transitorio Aplicada A Una Esfera .	48

MODELO MATEMÁTICO UNIDIMENSIONAL DE LA COMBUSTIÓN	3
3.2.2. El Termino Fuente En La Ecuación De Energía.....	53
3.2.2.1. <i>Sreaccion</i>	53
3.2.2.2 <i>Savance</i>	56
3.2.2.3. <i>Sinflacion</i>	56
3.2.2.4. <i>Sintercambio</i>	58
3.3. Ensamble Del Sistema De Ecuaciones	60
3.4. Modelado Del Proceso De Secado.....	62
3.4.1. Termino Fuente De Evaporación	64
3.4.1.1. Capa Húmeda.....	65
3.4.1.2. Capa Seca.....	66
3.5. Variación De Los Volúmenes Durante El Proceso De Combustión.....	68
3.5.1. Termino Fuente Para La Generación De Volumen.....	69
3.5.2. Termino Fuente Para El Consumo Del Volumen	70
3.5.3. Resolución Del Sistema De Ecuaciones Para Los Cambios De Volúmenes	71
Capítulo 4. Simulación y Análisis	73

MODELO MATEMÁTICO UNIDIMENSIONAL DE LA COMBUSTIÓN	4
4.1. Calibración Del Modelo.....	73
Capítulo 5. Optimización	82
5.1. Materia Prima.....	82
5.2. Procesos De Producción	83
5.3. Mano De Obra y Maquinaria Necesaria	84
5.4. Costo Energía Eléctrica.....	85
Capítulo 6. Conclusiones	92
Referencias Bibliográficas	94
Anexos	102
Anexo A	102
A.1. El Método De Los Volúmenes De Control.....	102
A.1.1. Discretización de Ecuaciones Diferenciales.	102
A.1.2. El Coeficiente De Conducción En La Frontera.	106
A.1.3. Linealización Del Término Fuente.	108
A.1.4. Condiciones De Frontera.	110
A.1.5. Conducción Unidimensional Transitoria.	112

MODELO MATEMÁTICO UNIDIMENSIONAL DE LA COMBUSTIÓN	5
A.1.6. Solución Del Sistema De Ecuaciones.....	115
A.1.7. Factores Sobre Y Baja Relajación Para La Convergencia Del Modelo.....	116

Lista de Tablas

Tabla 1. Cinéticas de la pirolisis para la cascarilla de café.....	23
Tabla 2. Análisis Ultimo para la cascarilla de café.....	29
Tabla 3. Análisis Próximo para la cascarilla de café.	30
Tabla 4. Poder calorífico para la cascarilla de café.	31
Tabla 5. Coeficientes de las ecuaciones lineales para la solución de la temperatura de cada capa de la partícula.....	61
Tabla 6. Reescritura de los coeficientes de las ecuaciones lineales para la solución de la temperatura de cada capa de la partícula teniendo en cuenta el efecto de la evaporación.	67
Tabla 7. Coeficientes de las ecuaciones lineales para la solución de los cambios de volúmenes de cada capa de la partícula.	71
Tabla 8. Parámetros generales ejecución del modelo en el caso de pellets.	77
Tabla 9. Parámetros generales recopilados por Suarez et al. (2003).	78

Tabla 10. Costos en materia prima y mano de obra elaboración de briquetas a base de cascarilla de café. 84

Tabla 11. Costos en mantenimiento maquinaria empleada en la elaboración de briquetas a base de cascarilla de café. 85

Tabla 12. Costo total de producción de briquetas a base de cascarilla de café..... 86

Tabla 13. Tabla de optimización para optimización de briquetas de diferentes dimensiones 88

Lista de Figuras

Figura 1. Pastes del fruto del café..... 28

Figura 2. Unidimensionalización de la partícula cilíndrica from Mathematical modelling of
combustión of a single Wood particle 38

Figura 3. Unidimensionalización de una partícula cilíndrica a esférica 39

Figura 4. Bosquejo del modelo de partícula 43

Figura 5. Discretización de la partícula 45

Figura 6. Representación de la notación de elementos finitos en la malla. 52

Figura 7. Delimitación del frente de secado dentro del modelo de capaz. 64

Figura 8. Representación del frente de secado dentro del modelo de capas..... 68

Figura 9. Pérdida de masa vs temperatura, comparativa entre datos generados por el modelo vs
datos experimentales..... 75

Figura 10. Evolución de la Temperatura contra el tiempo para un pellet de cascarilla de café ... 76

Figura 11. Evolución de la pérdida de masa contra el tiempo y la temperatura basado en los
parámetros de Suarez et al (2003)..... 80

Figura 12. Representación del incremento marginal en el costo contra el incremento en el tiempo de combustión para la serie de iteraciones realizadas..... 90

Lista de Anexos

Anexo 1. Malla de discretización para el método de volúmenes finitos.	104
Anexo 2. Casos simples de funciones de interpolación de la variable de integración dentro del volumen de control. (a) Stepwise; (b) piecewise linear.	106
Anexo 3. Distancias asociadas con la interfase e.....	108
Anexo 4. Representación de las condiciones de frontera.	110

Capítulo 1. Marco Teórico

1.1. Combustión Heterogénea

“El *char* en general está formado por carbono en más de un 90% siendo habitual en el modelado de su combustión que se considere como carbono puro” Bruch et al. (2003), en el presente trabajo se utilizara esta consideración, ya que se ajusta a la bibliografía consultada. Hagge & Bryden (2002) concluyen que de forma general la reacción heterogénea del *char* con los gases que le rodean puede dividirse en las siguientes fases:

1. Transporte de los reactivos hasta la superficie de la partícula.
2. Adsorción de los reactivos en los lugares activos.
3. Reacción química.
4. Desorción de los productos.
5. Transporte de los productos hacia el exterior.

La velocidad a la que se realiza toda la secuencia suele estar determinada por la más lenta de todas las etapas, las cuales llegan a depender de condiciones como el material, el tamaño de partícula, entre otras. Los modelos de reacción del *char* de biomasa empleados en la combustión de partículas más comunes son el de reactividad global, el control cinético, el control difusional, y el control cinético difusional. En el presente trabajo se utilizara una combinación de los modelos de control cinético difusional y control cinético, al respecto Santamaria, J.; Rückert, F. U.; Förtsch, D.; Sprich, J.; Staiger, B.; Berger, n.d. reafirman la naturaleza completa del modelo al combinar el control de la etapa de transporte de los reactivos y la cinética química para formar un factor de

reacción global. Un claro ejemplo de su utilización es el realizado por Fatehi & Kaviany (1994) en el cual logran un adecuado modelo que se ajusta a los datos experimentales utilizando un modelo cinético difusional, definido por la constante global:

$$(1.1) \quad K_{glob}^i = \frac{1}{\frac{1}{K^i} + \frac{1}{K_m^i}}$$

Donde:

K_{glob}^i : Constante global para la reacción i

K^i : Constante cinetica de la reacción i

K_m^i : Coeficiente de transferencia de masa de la reacción i

De la ecuación anterior cabe resaltar que la constante cinética se obtiene a partir de la ecuación de Arrhenius pertinente, mientras que la constante de transferencia de masa se obtiene a partir del siguiente planteamiento.

Collier et al. (2004) afirman que para que se genere el proceso de oxidación en la superficie de la partícula, esta necesita ser alcanzada por los reactivos gaseosos, el mecanismo de transporte de estos reactivos gaseosos la partícula puede obtenerse mediante una serie de números adimensionales que permiten caracterizar el flujo alrededor de la partícula. Generalmente se emplean correlaciones que involucren implícita o explícitamente los números de *Nusselt*, el número de *Sherwood*, el número de *Reynolds*, el número de *Schmidt* y el número de *Prandtl*.

Volviendo a Collier et al. (2004) en su artículo el emplea las correlaciones de *Zhukauskas* para calcular el flujo de gas en el exterior de las partículas:

$$(1.2) \quad Nu = 0.51 \cdot Re^{0.5} \cdot Pr^{1/3}$$

$$(1.3) \quad Sh = 0.51 \cdot Re^{0.5} \cdot Sc^{1/3}$$

Con base en las ecuaciones 1.1 y 1.2 y utilizando la expresión planteada Palchonok, (1998) se calcula el coeficiente de transferencia de masa de la siguiente forma:

$$(1.4) \quad K_m^i = Sh \cdot \frac{D_g}{d_{in}}$$

Donde:

D_g : *Difusion molecular del gas*

d_{in} : *Diametro de la particula*

Los términos componentes de la ecuación 1.1 se encuentran definidos en el anexo A, aquí se centrará la atención en definir el termino correspondiente a la difusión molecular del gas, el cual será objeto de estudio a continuación.

1.2.1. Difusividad Global Del Oxígeno A Través De La Partícula

Dada la importancia del oxígeno y la naturaleza simplificada del presente trabajo la única especie cuyo transporte por difusión será considerado será el oxígeno (O_2), que debe atravesar la capa límite e introducirse en el interior de la partícula a través de su red de poros donde reaccionará con el *char*. Para el cálculo del valor de la difusividad se utilizara el planteamiento utilizado por Porteiro et al. (2006): Primeramente se utiliza la expresión de Chapam-Enskog:

$$(1.5) \quad D_{AB} = 0.18583 \times 10^{-6} \cdot T^{3/2} \frac{\left(\frac{1}{PM_A} + \frac{1}{PM_B}\right)^{1/2}}{Pt \cdot \sigma_{AB}^2 \cdot \Omega_{AB}}$$

Donde:

D_{AB} : Difusividad de la especie A en B [m^2s^{-1}]

PM : Pesos molares [$g \cdot mol^{-1}$]

Pt : Presion total de la mezcla gaseosa [atm]

σ_{AB} : Diametro de colision [Å]

Ω_{AB} : Integral de colision

La integral de colisión vale 1 para esferas rígidas, σ_{AB} y ϵ_{AB} son las constantes de *Leonnard-Jones* que se pueden representar de la forma:

$$(1.6) \quad \sigma_{AB} = \frac{1}{2}(\sigma_A + \sigma_B)$$

$$(1.7) \quad \varepsilon_{AB} = (\varepsilon_A \varepsilon_B)^{1/2}$$

De esta forma la difusividad del oxígeno en el nitrógeno será:

$$(1.8) \quad D_{O_2, N_2} \left[\frac{m^2}{s} \right] = 0.18583 \times 10^{-6} T^{1/2} \frac{\sqrt{\frac{1}{32} + \frac{1}{28}} \sqrt{91.5 \sqrt{113}}}{\sqrt{\frac{1}{2}(3.681 + 3.433)}} = 2.593 \times 10^{-6} T^{1/2}$$

Ahora hay que tener en cuenta que existen dos posibles mecanismos de transporte implicados en la difusión a través de una materia porosa: la difusión molecular o de *Fick* y la difusión de *Knudsen*. El efecto combinado de ambas se obtiene a través de la expresión de la difusividad efectiva:

$$(1.9) \quad D_e = \frac{1}{\frac{1 - \alpha X_A}{D_{AB}} + \frac{1}{(D_K)_A}}$$

Donde:

D_{AB} : Difusividad gaseosa de A en B [$m^2 s^{-1}$]

D_K : Difusividad de Knudsen [$m^2 s^{-1}$]

X_A : Fracción molar de A

α : Relación estequiométrica de A y B

La relación estequiométrica de A y B se puede definir como:

$$(1.10) \quad \alpha = 1 + \frac{N_A}{N_B}$$

Donde:

N_i : Flujo molar por unidad de superficie [$\text{mol} \cdot \text{s}^{-1} \text{m}^{-2}$]

Si se supone que la relación es del tipo $A \rightarrow B$ entonces resulta que $N_B = -N_A$ siendo por tanto $\alpha = 0$ de modo que la difusividad efectiva resulta:

$$(1.11) \quad D_0 = \frac{1}{\frac{1}{D_{AB}} + \frac{1}{D_K}}$$

La difusividad de *Knudsen* depende de la velocidad molecular media y del radio del poro a [m] y debe ser considerada cuando el diámetro medio del poro es comparable al camino libre medio de las moléculas gaseosas en su movimiento cinético Gómez et al. (2014). A través de la teoría cinética de los gases la difusividad de *Knudsen* puede expresarse como:

$$(1.12) \quad D_K = \frac{4}{3} a \left(\frac{R_u T}{2\pi P M} \right)^{1/2}$$

Donde:

T : Temperatura [K]

R_u : Constante universal [$\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \text{K}^{-1}$]

PM : *Peso molecular* [$kg \cdot mol^{-1}$]

a : *Diametro medio de los poros* [m]

Zanzi et al. (1996) experimentalmente observo que el *char* que se forma durante la pirolisis rápida de partículas para varias biomásas representa dos grandes familias de poros, una muy abundante con un tamaño medio de 100 [μm] y otra, algo menos abundante, de un tamaño medio de poro de 10 [μm], el tamaño de los poros puede variar a medida que la partícula de *char* se consume. Con base en el modelo planteado según el cual las capas exteriores van desapareciendo a medida que se desarrolla la combustión, las capas con la red de poros alteradas van siendo eliminadas dejando las siguientes capas con la red de poros inalterada.

La ecuación 1.5 particularizada para la difusividad del oxígeno a través de los poros del *char* será:

$$(1.13) \quad (D_K)_A \left[\frac{m^2}{S} \right] = 1.715 \times 10^{-5} a \sqrt{T}$$

Retomando el valor obtenido en 1.3 para la difusividad de *Fick* con el valor obtenido para la difusividad de *Knudsen* (Ecuación 1.46) se puede obtener la siguiente expresión:

$$(1.14) \quad \frac{D_{O_2, N_2}}{(D_K)_{O_2}} = \frac{1.512 \times 10^{-5}}{a}$$

La difusividad de *Knudsen* es entre 10 y 100 veces mayor que la difusividad gaseosa, solo con tamaño de poro del orden de 10^{-5} [m] la difusividad de *Knudsen* llega a ser comparable con

la difusividad de *Fick* Tabarés et al. (2006). Teniendo en cuenta la estructura interna del *char* se puede despreciar el efecto de la difusividad de *Knudsen*. De este modo la difusividad deja de depender del tamaño de los poros y solo dependerá de la temperatura en la capa límite del modelo:

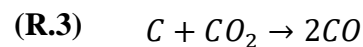
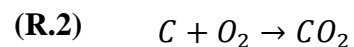
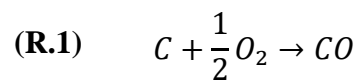
$$(1.15) \quad D_0 \left[\frac{m^2}{s} \right] \approx D_{O_2, N_2} = 2.593 \times 10^{-6} \sqrt{T}$$

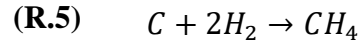
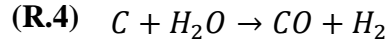
1.2.2. Coeficientes Globales De Transferencia Para Las Reacciones De Dióxido De Carbono Y Vapor De Agua

En la sección anterior se definió el coeficiente global de transferencia para la reacción de oxidación que varios autores consideran la más importante, y por ende la reacción que más cuidadosamente debe ser modelada, para el caso de las dos reacciones restantes, se empleara un modelo centrado en la parte cinética de la reacción dejando de lado el modelamiento del control difusional. Por lo tanto, de (1.1) se eliminará el segundo término en el denominador de la ecuación.

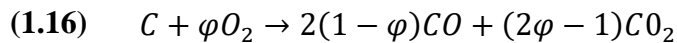
1.2.3. Reacciones Químicas

Thunman et al. (2002) hace una recopilación de las principales reacciones heterogéneas del *char* con los gases:





Las reacciones de oxidación (R.1), la generación de dióxido y monóxido de carbono (R.2) y (R.3) en la superficie del *char* serán tenidas en cuenta además de la reacción del *char* con el vapor del agua (R.4) por considerarse en el modelo que la partícula en primera instancia contiene humedad. Como se espera la reacción del oxígeno con el *char* puede formar *CO* y *CO*₂ por lo que se puede expresar en forma general utilizando la relación empírica planteada por Porteiro et al. (2006):



Donde φ representa las moles de oxígeno consumidos por cada mol de carbono y puede relacionarse con la temperatura de la superficie del *char* a través de la expresión empírica propuesta por Thunman et al. (2002):

$$(1.17) \quad \varphi = \frac{2 + 4.3 \exp(-3390/T)}{2(1 + 4.3 \exp(-3390/T))}$$

1.3. Balance De Masa

La conservación de la masa para las partículas en cualquier momento puede entenderse como la sumatoria de las cantidades de masa para las diferentes capas presentes en un momento determinado t .

$$(1.18) \quad masa_{part} = masa_{moist} + masa_{dry} + masa_{char}$$

A medida que se lleva a cabo los procesos de calentamiento, pirolisis y combustión de la partícula las cantidades de masa dentro de las capas presentan variaciones, dichas variaciones se representarán por medio del termino $\dot{\omega}_i$ y serán analizadas a continuación.

1.3.1. Ratio De Consumo De La Capa Húmeda

Una suposición fundamental del modelo es que inicialmente la briqueta de cascarilla de café contiene cierto grado de humedad, y es a partir de esta cantidad de materia inicial que se generan las siguientes capas del modelo. En este punto se registra la salvedad de que, aunque teóricamente se parte de que solo existe inicialmente en la briqueta la capa de biomasa húmeda, a la hora de aplicar el modelo se hace que existan capas ínfimas tanto de biomasa ceca como de *char* para evitar inconsistencias matemáticas, dichas capas tienen espesores del orden de 1×10^{-15} [m]. Para la nomenclatura del modelo se tratará el ratio de consumo de la capa húmeda con $\dot{\omega}_{moist}$.

$$(1.19) \quad \dot{\omega}_{moist} = \frac{k_2 \frac{8\pi R_1^2}{(R_2 - R_1)} (T_2 - T_{evap}) - k_1 \frac{8\pi R_1^2}{R_1} (T_{evap} - T_1)}{LH_{moist} \cdot V_1} \cdot \frac{\rho_{H2O}}{\rho_{moist}}$$

Donde:

$\dot{\omega}_{moist}$: Ratio de consumo de la capa humeda de la biomasa [$Kg \cdot m^{-3} \cdot s^{-1}$]

k_i : Coeficiente de conduccion termica del volumen de control i [$W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$]

R_i : Radio del volumen de control i [m]

T_i : Temperatura del volumen de control i [K]

T_{evap} : *Temperatura de evaporacion del agua [K]*

ρ_{moist} : *Densidad de la capa humeda [kg · m⁻³]*

ρ_{H_2O} : *Densidad del agua [kg · m⁻³]*

LH_{moist} : *Calor latente de evaporacion [J · Kg⁻¹]*

V_1 : *Volumen del volumen de control i [m⁻³]*

La ecuación (1.1) define la tasa a la cual la capa húmeda se convierte en capa seca. Existen varias formas de analizar el proceso de secado, para el presente trabajo se usara el control térmico, al respecto Minkova et al. (2001) lo define como:

El método de control térmico supone que el frente de secado es un frente fino que actúa como un sumidero de calor. El secado avanza a medida que el interior de la partícula alcanza una temperatura determinada (aprox. 100 °C) avanzando el proceso de secado en función del flujo de calor que fluye hacia su frente.

Centrándonos en la ecuación esta trabaja teniendo en cuenta el intercambio de calor que se realiza entre las capas en su área de contacto y tomando el diferencial de temperatura entre las capas y la temperatura de evaporación del agua, que es mecanismo que desencadena la evaporación del agua. En los términos del denominador se tienen en cuenta el volumen de la capa húmeda la cual está perdiendo masa que se está transformando en capa seca y el calor latente de evaporación, al respecto de este términos autores como Gómez et al.(2014) y Porteiro et al. (2006) sugieren

tenerlo en cuenta y trabajar con el supuesto de que mientras se está presentando evaporación en la capa la temperatura de la misma permanece constante, pues todo el calor se está invirtiendo en la evaporación de la humedad, dada la elevada cantidad de energía que se consume para el proceso de secado (evaporación del agua) incluir este fenómeno en el modelo es esencial para una mejor convergencia.

El último término de la ecuación establece la relación entre las densidades del agua y la capa húmeda.

1.3.2. Ratio De Consumo De La Capa Seca

Este término se utiliza para cuantificar el consumo de materia en la capa seca que se produce como resultado de la pirolisis, lo cual genera la descomposición térmica de la capa seca, liberando volátiles. En general la pirolisis de biomasas con base en celulosa y lignina como la madera o la cascarilla de café, liberan cientos de especies, desde un punto de vista práctico normalmente se manejan 3: *char* (que es el residuo sólido carbonoso), *gas* (que son las especies gaseosas de bajo peso molecular) y *los alquitranes (tar)* especies orgánicas concentradas de alto peso molecular. (Castells & García, 2005).

Prácticamente todos los trabajos disponibles en los que se incluye el modelado de la pirolisis tratan su velocidad de reacción mediante una o varias expresiones simples de Arrhenius, Gronli (1996). Uno de los mecanismos más utilizados para el modelamiento de pirolisis es el de múltiples reacciones donde se establece reacciones simultáneas de pirolisis en las que se forman distintos productos.

La ecuación (1.1) modela la tasa de consumo de la capa seca teniendo en cuenta las ecuaciones de Arrhenius y se multiplica por la densidad de la capa para obtener un ratio de consumo en las unidades adecuadas, en concordancia con el planteamiento de Gómez et al. (2015).

$$(1.20) \quad \dot{\omega}_{dry} = \rho_{dry} \sum_{i=1}^3 A_i \exp\left(-\frac{E_i}{RT_s}\right)$$

Donde:

$\dot{\omega}_{dry}$: *Ratio de consumo de la capa seca* [$Kg \cdot m^{-3} \cdot s^{-1}$]

ρ_{dry} : *Densidad de la capa seca* [$Kg \cdot m^{-3}$]

A_i : *Factor pre – exponencial* [s^{-1}]

E_i : *Energía de activación* [$J \cdot mol^{-1}$]

R : *Constante universal de los gases* [$J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$]

T_s : *Temperatura en la capa límite* [K]

En la tabla 1 se establecen la cinética para las reacciones de pirolisis utilizadas para el modelo. Estos valores se extraen del trabajo realizado por Jeguirim et al. (2014).

Tabla 1.

Cinéticas de la pirolisis para la cascarilla de café.

	Reacción	$A_i [s^{-1}]$	$E_i [J \cdot mol^{-1}]$
(R.6)	<i>Capa Seca</i> → <i>Gas</i>	$1.3 \cdot 10^8$	$140 \cdot 10^3$
(R.7)	<i>Capa Seca</i> → <i>Tar</i>	$2.0 \cdot 10^8$	$133 \cdot 10^3$
(R.8)	<i>Capa Seca</i> → <i>Char</i>	$1.16 \cdot 10^7$	$49.2 \cdot 10^3$

Nota. Adaptado de Jeguirim et al. (2014)

1.3.3. Ratio De Generación De Char

La tasa de generación del char se calcula de igual manera a la descrita anteriormente, partiendo de la capa de biomasa seca se toma las constantes de la ecuación de Arrhenius para la formación de *char* durante la desvolatilización.

$$(1.21) \quad \dot{\omega}_{char,gen} = \rho_{dry} \cdot A_3 \exp\left(-\frac{E_3}{RT_s}\right)$$

1.3.4. Ratio De Consumo Del Char

El último termino de consumo que se tiene que definir para el modelo es el ratio de consumo de char:

$$(1.22) \quad \dot{\omega}_{char,cons} = K_{glob}^{ox} A_v [O_2] M_C + K_{glob}^{g,1} A_v [CO_2] M_C + K_{glob}^{g,2} A_v [HO_2] M_C$$

Donde:

K_{glob}^{ox} : Constante global del char para la reaccion de oxidacion

$K_{glob}^{g,1}$: Constante global para la reaccion de gasificacion 1

K_{glob}^{ox} : Constante global para la reaccion de gasificacion 2

A_v : Relacion area volumen [m^{-1}]

$[O_2]$: Concentracion molar de oxigeno

$[CO_2]$: Concentracion molar de dióxido de carbono

$[HO_2]$: Concentracion molar de agua_(vapor)

M_C : Peso molecular del carbono

Los coeficientes para las constantes globales de las reacciones de oxidación y gasificación fueron definidos en el anexo A, sección A.2 de la misma forma la relación área volumen y el peso

molecular del carbono están definidos previamente, en este apartado por lo tanto se tendría que definir la concentración molar de las diferentes especies químicas.

Para la concentración molar del oxígeno se usará la definición de molaridad por metro cubico de solución, al respecto se tiene que típicamente el aire atmosférico tiene una concentración de 21% de oxígeno, y con base en las suposiciones de los gases en condiciones ideales se tiene que 1 mol de un gas equivale a 22.4 litros, por lo que aplicando un cálculo simple se consigue determinar que un litro de aire contiene 0.009375 moles, por último se aplica una conversión para dejar este valor en términos de metros cúbicos, resultando $9.375 \text{ moles} \cdot \text{m}^3$.

$$(1.23) \quad M = \frac{n}{V}$$

Donde:

M: Molaridad

n: Moles

V: Volumen

Para determinar la concentración molar de agua en la biomasa se utiliza el dato de contenido de humedad en la biomasa obtenido a partir del análisis próximo, y la densidad de la biomasa de $160 \text{ [kg} \cdot \text{m}^3]$ para un volumen inicial se puede determinar la concentración molar de agua en la muestra. Conocido el volumen inicial y la densidad se despeja la masa inicial de la biomasa la cual se multiplica por la concentración de humedad en la partícula para tener la

concentración de agua en términos de kg dentro de la masa inicial, luego se divide dicha masa entre el peso molecular del agua para determinar el número de moles, y aplicando la ecuación (1.23) se tendrá su molaridad.

Por último para determinar la concentración de dióxido de carbono se utilizara el valor empleado en el trabajo de Di Blasi et al., (2003) que determina un valor de $10 \text{ [moles} \cdot \text{m}^3]$ en los procesos de combustión para materiales celulósicos, en una atmosfera enriquecida en nitrógeno.

Capítulo 2. Condiciones Y Características Del Modelo

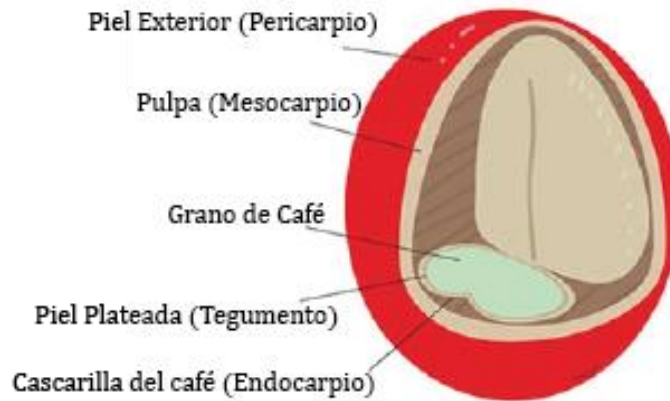
2.1. Caracterización De La Biomasa

La biomasa se caracteriza por presentar un bajo contenido de carbono, un elevado contenido de oxígeno y compuestos volátiles, dichos compuestos volátiles son los que concentran gran parte del poder calorífico de la biomasa; sin embargo el poder calorífico depende mucho del tipo de biomasa considerada y de su humedad (Abaunza & Gacía, 2019).

La cascarilla del café o cisco del café técnicamente corresponde al endocarpio del fruto. Montilla (2006), calcula que “El cisco representa en peso el 4.2% del fruto seco” además Roa, (2003) establece una capacidad calórica de $17.90 [MJ \cdot kg^{-1}]$, un poder calorífico similar al que tiene la madera que oscila entre 12 y 21 $[MJ \cdot kg^{-1}]$, dependiendo de la variedad, por ello este material tiene la potencialidad de convertirse en una fuente de energía adecuada, mediante su combustión.

Figura 1.

Pastes del fruto del café.



En este sentido, cabe destacar que, la utilización de biomásas como fuentes de energía contribuye de manera positiva al medio ambiente, pues este combustible no genera un aumento en las emisiones de CO₂, al ser una biomasa sus emisiones de CO₂ son iguales a la cantidad de dicho gas que capturaron en su etapa como planta, por lo que un balance entre sus emisiones y sus absorciones sería cero.

2.1.1. Caracterización De La Materia Prima

Para la generación del modelo matemático planteado en este trabajo se necesitan datos acerca de las propiedades físico químicas de la cascarilla del café, al tiempo que se requiere establecer el potencial energético de la biomasa. A continuación, se describirán y analizarán los datos recopilados, por varios autores y se promediarán sus valores para tener unos parámetros más objetivos.

Tabla 2.*Análisis Ultimo para la cascarilla de café.*

Análisis Ultimo (%)						
	Fernández (2011)	Suarez (2001)	Manrique et al. (2019)	Saenger et al. (2001)	Fonseca et al. (2013)	Promedio
Carbono	50.3	47.5	44.95	43.9	47.5	46.8
Hidrogeno	5.3	6.4	5.34	4.8	6.4	5.65
Nitrógeno	≤ 1	0	0.60	0.6	0	0.24
Oxigeno	43.8	43.7	39.41	49.6	43.7	44.04

Tabla 3.

Análisis Próximo para la cascarilla de café

Análisis Próximo (%)						
	Fernández (2011)	Suarez (2001)	Manrique et al. (2019)	Saenger et al. (2001)	Fonseca et al. (2013)	Promedio
Humedad	10.1	10	8.88	11.4	13.1	10.7
Materia Volátil	72.7	78.5	75.85	64.6	73.2	72.97
Carbono fijo	16	19.1	14.48	20	23.1	18.54
Ceniza	1.2	2.4	0.79	4.1	3.7	2.44

Tabla 4.

Poder calorífico para la cascarilla de café.

Poder Calorífico [$MJ \cdot kg^{-1}$]	
Poder Calorífico Superior (LHV)	18.7
Poder Calorífico Inferior (HHV)	17.5

Nota. Adaptado de Fernandez (2011), “Obtención de gas combustible a partir de la gasificación de biomasa en un reactor de lecho fijo” (p. 9-12).

Se aprecia que la cascarilla de café presenta un adecuado poder calorífico y bajos valores de contenidos de ceniza lo cual la vuelve una buena candidata como combustible en procesos de combustión. Se analizarán los variables más relevantes para la formulación del modelo matemático que se plasmaron en las anteriores tablas, (Tablas 2 - 4).

Contenido De Cenizas: Se evidencia una aportación muy pequeña dentro de la composición de la biomasa, dentro del modelo se supone que no se tiene en cuenta la formación de una capa de este material basados en su pequeño aporte, “no obstante en otros tipos de combustible solidos como el carbón o los residuos sólidos urbanos su presencia puede llegar a alcanzar el 10%” Porteiro et al. (2006).

Contenido de Humedad: La humedad en la biomasa es un compuesto que no se puede aprovechar energéticamente, al respecto Porteiro (2005), afirma:

La evaporación de la humedad contenida en la partícula incrementa el tiempo necesario para su combustión a través de tres mecanismos que contribuyen a ralentizar el calentamiento de la partícula y por lo tanto el tiempo necesario para que se produzca la pirolisis: Absorción de calor para la evaporación de la humedad. Absorción de calor por el flujo de vapor de agua desde el interior de la partícula hacia el exterior. Oposición a la penetración de los reactivos al generarse una corriente de salida.

Por lo tanto, mientras menor sea el contenido de humedad en la partícula, más eficiente y rápido será el proceso de combustión.

Proporción de Materia Volátil y Carbón Fijo: La calidad de la materia prima para los procesos de combustión dependen en gran medida de la cantidad de materia volátil y el contenido de carbono fijo (en adelante por simplicidad se referirá a este como *char*) que posea el material. Barrera R. et al. (2014) plantea que “La calidad del material es mayor con el aumento del contenido de carbón fijo, y con la disminución de la humedad y del contenido de materia volátil”

Poder Calorífico: B. Cengel (2012), define el poder calorífico de un combustible como: “la cantidad de calor liberado cuando se quema por completo una unidad de combustible y los productos de la combustión se enfrían a la temperatura ambiente” El poder calorífico se expresa cotidianamente de dos formas, poder calorífico superior, y poder calorífico inferior, El poder

calorífico superior es la energía total liberada cuando el combustible es quemado en presencia de aire, incluyendo el calor latente contenido en el vapor de agua y por lo tanto representa la máxima cantidad de energía que se puede obtener de un combustible. El poder calorífico inferior es la energía total liberada cuando el combustible es quemado en presencia de aire, excluyendo el calor latente contenido en el vapor de agua. Por lo tanto, se concluye que es una medida más representativa el poder calorífico inferior ya que la energía que se utiliza en la evaporación del agua es energía no aprovechable.

2.2. Pirólisis

Porteiro (2005) se refiere al proceso de pirólisis como:

la degradación térmica de un combustible en una atmósfera carente de oxígeno a temperaturas moderadas entre 200 a 500 °C. A través de ella el combustible es degradado liberándose cierta cantidad de gases licuables (alquitranes), gases combustibles ligeros (volátiles), quedando como residuo el carbono fijo.

La proporción entre los tres componentes depende del tipo de biomasa, generalmente el char se emplea como combustible en sistemas de combustión de lecho fijo y los volátiles se emplean para la generación de electricidad de motores térmicos, mientras los alquitranes pueden ser convertidos en combustibles líquidos para su empleo en motores o ser empleados directamente en su combustión (Babu & Chaurasia, 2012). Sobre la naturaleza de las reacciones Castillo (2014) afirma:

Las reacciones primarias producen gases como el CO₂, el CO y agua, además de vapores orgánicos y productos líquidos. Las reacciones secundarias toman la mayor cantidad de compuestos de la biomasa y descomponen moléculas con altos pesos moleculares a más sencillas, tanto líquidas como gaseosas.

Castells & García (2005), clasifican la pirolisis desde un punto de vista térmico como un proceso de 4 etapas:

Secado: En esta etapa se elimina la totalidad de la humedad presente en el combustible.

Etapa inicial (100 °C a 300 °C): En esta etapa se produce la deshidratación exotérmica de la biomasa, liberándose el agua retenida y gases de bajo peso molecular como el CO y el CO₂.

Etapa intermedia (200 °C a 600 °C): Se produce una pirolisis inicial, en este proceso se produce la mayor parte del vapor y gases. Durante esta etapa se comienzan a romper las moléculas más grandes, generando un producto sólido de alto contenido de carbón, gases condensables (vapor y precursores del producto líquido) y gases no condensables.

Etapa final (600 °C a 900 °C): La etapa final de la pirolisis conlleva el craqueo secundario de volátiles en productos sólidos y gases no condensables. Si el tiempo de residencia de la biomasa es suficientemente elevado, se puede producir el craqueo de cadenas de elevado peso molecular en gases condensables, por lo tanto, se incrementa el rendimiento hacia el producto sólido y gases. Por otra parte, si los gases se retiran del lugar de reacción se produce la condensación hacia productos líquidos tales como alquitranes.

Para el presente trabajo se obviará la primera etapa y se entenderá que el proceso de pirólisis inicia cuando la partícula se encuentra totalmente seca. Es de resaltar que prácticamente todos los trabajos que incluyan el modelado de la pirolisis tratan su velocidad de reacción mediante una o varias reacciones de Arrhenius.

2.3. Dimensionamiento Y Forma De La Partícula

Las partículas cilíndricas (pellets y briquetas) tienen generalmente forma cilíndrica con longitud típica entre 1,5 y 3.5 veces su diámetro. Existen generalmente en la literatura dos formas generales de abordar el unidimensionalización para reducir la complejidad de los modelos matemáticos. Un camino es trabajar tratando la partícula cilíndrica mediante la introducción de un factor de forma en las ecuaciones diferenciales unidimensionales en coordenadas cilíndricas. Para este caso la conservación de cierta magnitud escalar ϕ en el interior de la partícula puede expresarse de forma general como:

$$(2.1) \quad \frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) = \frac{1}{r^n} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^n \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial r} - r^n \rho \mu \phi \right) + S_\phi$$

Donde:

ρ : Densidad [$\text{Kg} \cdot \text{m}^{-3}$]

ϕ : Magnitud general

r : Coordenada posición en la partícula [m]

n : Exponente función de forma

Γ : *Difusividad*

μ : *Velocidad de transporte* [$m \cdot s^{-1}$]

S_ϕ : *Velocidad de generacion*

Donde se toma n igual a cero (0) para partículas planas infinitas, 1 para cilindros infinitos y 2 para esferas, esta formulación genera el desprecio de la variación axial de las propiedades y genera errores en las variables del modelo pues considera que el valor de cualquier parámetro solo depende de su distancia al eje de la partícula, Porteiro et al. (2006). Algunos autores utilizan correcciones y replanteamientos de la ecuación (2.1) para disminuir la gravedad de este enfoque, Thunman et al., (2002) fue el autor de la generalización geométrica más utilizada para el tratamiento unidimensional de la partícula, el cual se menciona a continuación:

Sea una partícula cilíndrica de radio r y longitud L como la que se muestra en la figura 2.2, si se considera que la partícula es puramente isotrópica y considerando que los procesos que tienen lugar durante la combustión tienen origen en la superficie de la partícula, los procesos penetrarán desde la superficie hacia el interior con la misma velocidad axial que radial. Por lo tanto, a cierta distancia r del eje de la partícula se define un volumen de control de la siguiente forma: un cilindro hueco de radio interior $r - \Delta r/2$ y radio exterior $r + r/2$ y de longitud $l(r) = L - 2R + 2r$, cumpliendo por lo tanto que la distancia axial y radial a la superficie de la partícula es la misma.

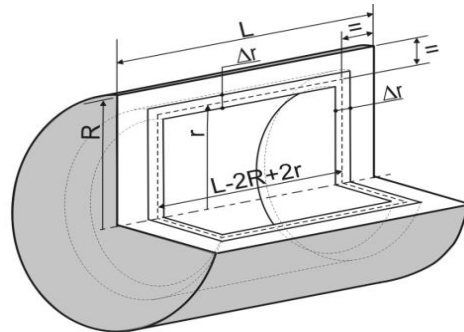
La segunda manera para simplificar formas complejas y hacerlas unidimensionales consiste en la conversión desde figuras que tienen varias dimensiones a esferas que manejan un diámetro equivalente, al respecto Haseli et al., (2011) dice:

En la práctica, la forma de la partícula es usualmente cilíndrica o en forma de losa, pero en algunos casos, puede ser cubica, un modelo unidimensional todavía puede ser usado para simular la característica de combustión de este tipo de partículas. Lo que se necesita para lograrlo es definir una forma de partícula que se asemeje a su forma real, valiéndonos de un diámetro equivalente. (Traducción propia).

Este método ha sido ampliamente utilizado, al respecto la mayoría de los investigadores usa un parámetro geométrico para asumir una forma esférica, Trubetskaya et al., (2017), sin embargo dicho procedimiento tiene algunos inconvenientes pues varios investigadores argumentan que se obtienen mejores resultados para partículas complejas utilizando al menos dos parámetros (largo y ancho) para describir el tamaño de la partícula. Estudios comparativos como los realizados por Ismail et al., (2016), Lu et al., (2010) o Yin et al., (2004) no al logrado esclarecer el camino más óptimo para el modelaje de partículas en procesos de combustión, por lo cual no existe un consenso general.

Figura 2.

Unidimensionalización de la partícula cilíndrica from Mathematical modelling of combustion of a single Wood particle



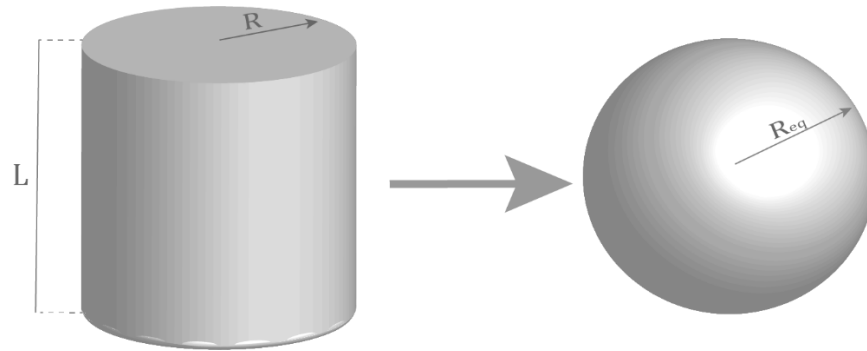
En términos de los inconvenientes que presenta cada método para el primero el más grande es la necesidad de conocer la magnitud escalar ϕ que se debe conservar, para establecer dicha magnitud los investigadores emplean el método propuesto por *Rosin y Rammler* para generar un análisis granulométrico que permita a partir de una distribución de tamaños generar una clasificación y poder definir esta magnitud escalar a conservar, realizar una clasificación de esta naturaleza excede los alcances del presente trabajo, al tiempo que ha sido imposible encontrar la bibliografía necesaria para adoptar este método.

Por lo tanto el método que se utiliza aquí es partir de una partícula cilíndrica y realizar una conversión a una partícula esférica representativa con base en un diámetro equivalente que se calcula con la ecuación utilizada por Gómez et al., (2014)

$$(2.2) \quad d_{eq} = D_{cil} \left(\frac{3L_{cil}}{2D_{cil}} \right)^{1/3}$$

Figura 3.

Unidimensionalización de una partícula cilíndrica a esférica



Esta ecuación y en general el método utilizado tiene sus limitaciones como cabría esperar, primero sobre la ecuación se establece un limitante con respecto al tamaño de las partículas estudiadas, el cilindro no puede tener una altura mayor que 3 veces el diámetro del mismo, además sobre las estimaciones obtenidas por medio de este modelo serán entre un 5% y un 10% subestimadas con respecto al comportamiento cilíndrico original Trubetskaya et al., (2017).

2.4. Propiedades Necesarias Para El Modelo

En este apartado se recopilarán de forma detallada las correlaciones, propiedades y propiedades físicas o químicas que serán necesarias para la ejecución del modelo.

Para obtener información sobre la densidad se recurrió a la investigación realizada por Suarez & Beaton, (2003) donde se determinó la densidad aparente en concordancia con la norma ASTM *Estándar Method for bulk density of particulate biomass fuels*, E-873-82 (ASTM 1983), para una muestra de café *Coffea Arabica*, una variedad que también es muy típica y se encuentra

muy extendida alrededor de Colombia. Después de promediar los resultados obtenidos se encontró que la densidad aparente del café fue de $160 [Kg \cdot m^{-3}]$. De esta misma investigación se tomó el dato sobre la humedad contenida en la cascarilla de café, de acuerdo a la aplicación de la norma ASTM *Estándar Method for moisture of particulate Wood fuels*, E-871-82 (ASTM, 1987) los investigadores obtuvieron un valor promedio de 10.1% de humedad contenida en la cascarilla de café. Con los datos mencionados anteriormente se puede definir la densidad de la primera capa del modelo. Para definir la densidad de la cascarilla seca (La cual representaría la segunda capa del modelo) se trabajó con los datos que se obtuvieron del estudio realizado por Do Vale et al. (2007) en el cual cuantifica la densidad aparente de la cascarilla con un contenido de humedad del cero por ciento en un valor de $144.41 [Kg \cdot m^{-3}]$. La densidad del *char* se obtuvo a partir de los datos suministrados por Nordon & Bainbridge, (1979) en su estudio de las propiedades del carbón para combustión donde cuantifican la densidad aparente de este en $600 [Kg \cdot m^{-3}]$, la cuales serán utilizadas para caracterizar la capa de *char* y la capa limite dentro del modelo.

Para el caso de los calores específicos de los diferentes componentes de las capas, otra propiedad necesaria para ejecutar el modelo, los valores se obtuvieron de la siguiente manera: En el caso del *char* esta información también se extrajo de Nordon & Bainbridge, (1979) quien calculo el calor específico del *char* en $802 [J \cdot Kg^{-1} \cdot K]$. El calor específico de la cascarilla de café sin contenido de humedad se obtuvo por medio de la correlación empírica Castillo, (2014) para una temperatura de 300 K, la correlación mostrada a continuación genera un valor de $1261.1 [J \cdot Kg^{-1} \cdot K^{-1}]$.

$$(2.2) \quad C_{p_{dry}} = 3.86 T[K] + 103.1$$

Para el cálculo del calor específico de la cascarilla de café teniendo en cuenta la humedad contenida, se utiliza el planteamiento Basu, (2010):

$$(2.3) \quad C_{p_{moist}} = M_{wet}C_w + (1 - M_{wet})C_{p_{dry}}$$

Donde:

$C_{p_{moist}}$: *Calor específico de la capa con contenido de humedad*

M_{wet} : *Contenido de humedad*

C_w : *Calor específico del agua*

El calor específico del agua tendrá un valor de $4180 [J \cdot Kg^{-1} \cdot K]$ y se obtiene del planteamiento de Tinaut et al., (2008). Resolviendo la ecuación (2.3) se obtiene un calor específico de la cascarilla con contenido de humedad de $1547.1522 [J \cdot Kg^{-1} \cdot K]$.

Capítulo 3. Modelo Matemático

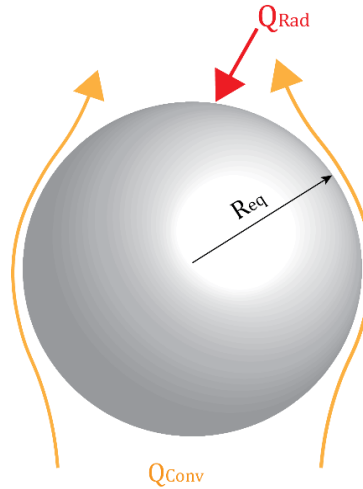
La modelización matemática de fenómenos físicos ha pasado a ser parte fundamental de los campos de acción de la ingeniería en los últimos años a medida que el poder computacional y de cálculo de las herramientas a disposición avanzan y se tornan de más fácil acceso para los usuarios finales; lo cual permite modelos cada vez más refinados que puedan cumplir de mejor manera con su objetivo último: describir, explicar y predecir el fenómeno estudiado a partir de las relaciones matemáticas establecidas entre las variables del modelo.

En el presente capítulo se describe el tipo de modelo utilizado, basado en los planteamientos de Patankar, plasmados en su libro *Numerical Heat transfer and fluid Flow*, donde su principal característica es la linealización de las ecuaciones diferenciales que típicamente describen los fenómenos de transferencia de calor y la generación así de un modelo matemático de ecuaciones lineales discretizadas que conforman un sistema de ecuaciones que se pueden resolver por métodos algebraicos simples sin perder exactitud al aplicar esta transformación.

En este capítulo también se describe y analiza la concepción del modelo, las variables empleadas, las relaciones establecidas y el método de solución que se empleara para dar una adecuada descripción del fenómeno.

Figura 4.

Bosquejo del modelo de partícula



3.1. Introducción E Hipótesis Generales

El modelo matemático para la combustión que se presenta a continuación se parte de la idea de que la partícula se encuentra aislada y en un ambiente adecuado para su combustión. Dicha partícula por conveniencia será considerada de forma esférica con diámetros ajustables a los requisitos de la investigación.

Se considera por tanto una partícula de dimensiones iniciales dependientes de R [m], la cual se encuentra expuesta a unas condiciones ambientales controladas, con un flujo de aire a su alrededor para el cual se conocen su temperatura [K] y teniendo una concentración de oxígeno en abundancia propicia para favorecer la combustión. La partícula además recibirá una cantidad de

radiación [$W \cdot m^{-2}$] que incide sobre su superficie, una representación de lo anterior se muestra en la figura 1.

El modelo matemático utiliza el método de volúmenes finitos para generar una simplificación de la estructura interna de la briqueta de cascarilla de café, tomando como referencia el modelo establecido por Thunman et al. (2002) y aplicándolo con algunas simplificaciones al caso de interés. Se establecen entonces 4 capas principales, la capa central e inicial del modelo será un volumen de control donde la biomasa conserva su humedad, la segunda capa será un volumen de control con la biomasa libre de humedad, mientras que en la tercera se encontrará el volumen de control correspondiente al *char*, la última capa está conformada igual que la tercera por *char* y se generará para obtener una mejor predicción de la temperatura de la superficie de la partícula, zona que es fundamental para los procesos de intercambio de calor y reacción, lo anterior se establece en concordancia con los datos de Gómez et al. (2015), y también se utiliza su relación para esta última capa, se establece una relación de diámetro de capa límite de 0.25 en relación con la capa de *char*.

Una vez establecidas las condiciones iniciales del modelo se definirán las hipótesis que regirán el mismo:

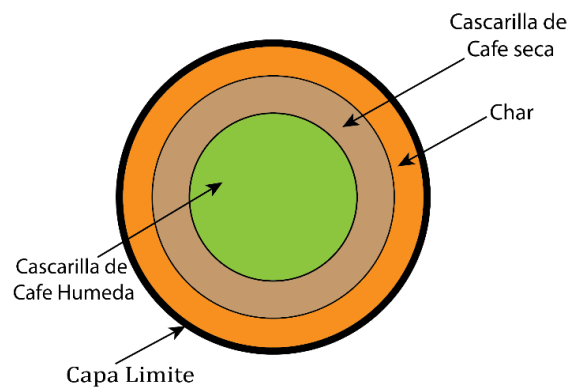
3.1.1. La Partícula Se Modela Como Una Esfera Y Las Capas Internas Se Modelan Como Esferas Concéntricas

El núcleo del modelo utilizado se basa en la técnica de los volúmenes de control o volúmenes finitos, un método alternativo a los de diferencias finitas y elementos finitos, al respecto Niño, (2002) define el método de la siguiente manera:

Es un método que establece una malla que discretiza un espacio fluido. “En torno a cada punto de esta malla se construye un volumen de control que no se traslapa con lo de los puntos vecinos. De esta forma el volumen total de fluido resulta ser igual a la suma de los volúmenes de control considerados (p.2).

Figura 5.

Discretización de la partícula



3.1.2. Se Supone Que Los Materiales Que Componen La Esfera Característica Del Modelo

Son Isotrópicos

Esta suposición se acepta normalmente en los análisis de transferencia de calor, al respecto Cengel (2007), menciona que la regla está presente cuando un material tiene propiedades uniformes en todas direcciones. Esta propiedad es en realidad cierta en la mayoría de los casos de estudio cotidianos de transferencia de calor, excepto para aquellos que exhiben estructuras diferentes en direcciones diferentes como algunos materiales biológicos o materiales compuestos laminados.

3.1.3. Se Supone Que El Secado Ocurre A Una Temperatura Constante

En otras palabras, se asume que mientras se esté llevando a cabo un cambio de fase en un material, por ejemplo, el paso del agua líquida contenida en los poros y las fibras de la biomasa húmeda a vapor de agua, todo el flujo de calor que entre en su volumen de control será utilizado para realizar este cambio de fase y por tanto no representa un aumento en la temperatura del material. Esta suposición se ajusta a los lineamientos de trabajo que emplean Porteiro (2005), Gómez et al., (2015) “Durante este proceso la temperatura de la región se mantiene sensiblemente constante de forma que la práctica totalidad del calor absorbido que recibe la zona es empleado en el proceso de evaporación del agua”.

3.1.4. La Pirolisis De La Biomasa Seca Ocurre En Un Mecanismo De Tres Capas

Dado la forma en capas en la que se modela la partícula y la interacción entre ellas se requiere describir la pirolisis en una medida razonable y simplificada, ya que la pirolisis es un proceso sumamente complejo que puede involucrar cientos de especies, Tabarés et al. (2006).). Un enfoque práctico para abordar este fenómeno es descrito por Jacobo (2005). “Desde un punto de vista práctico normalmente se manejan tres especies: *char* (que es el residuo solido carbonoso), *gas* (que son las especies gaseosas de bajo peso molecular) y los alquitranes (*tar*) (especies orgánicas condensadas de alto peso molecular)”. En el presente modelo se utilizará este enfoque.

3.1.5. No Se Tiene En Cuenta La Capa De Ceniza

Autores como Bruch et al., (2003), Thunman et al., (2002) y Gómez et al., (2014) sostienen que al terminarse los procesos de secado y pirolisis el material que queda es una partícula de dimensiones semejantes formada mayoritariamente por carbón, (llamado *char* en este trabajo,) y una capa superficial de ceniza cuyo modelaje sumaria complejidad al modelo sin mejorar en gran medida la precisión de los datos obtenidos, por lo que se opta por descartar su consideración.

3.1.6. El Comportamiento De Los Gases Es Ideal

La hipótesis del comportamiento de gas ideal por parte de los gases involucrados dentro del modelo es una suposición simplificadora pero no alejada de la realidad, como sostiene Levine I. N. (1991), “El modelo de gas ideal tiende a fallar a temperaturas bajas o a presiones elevadas,

cuando las fuerzas intermoleculares y el tamaño intermolecular es importante”, así pues el caso de estudio se plantea a altas temperaturas y presión constante, por lo que la suposición es aplicable.

3.1.7. La Partícula Conserva Su Forma Durante Todo El Proceso De Combustión.

Ouedraogo et al. (1998), establece este supuesto para asegurar que la partícula no se fisure o se fragmente, lo que modificaría los volúmenes de control dentro de los puntos de la malla, lo cual es un requisito indispensable en el modelo matemático.

3.2. Planteamiento Del Modelo

3.2.1. La Ecuación De Conducción De Calor En Régimen Transitorio Aplicada A Una Esfera

Las ecuaciones diferenciales según Molero, Salvador, Menarguez y Garmendia (2007) tienen como finalidad básica analizar el proceso de cambio en el mundo físico, al respecto el proceso de combustión es un perfecto ejemplo de ello Cengel y Boles (2012) afirman “La combustión es una reacción química durante la cual se oxida un combustible y se libera una gran cantidad de energía” (p. 773), en referencia a los conceptos anteriores entonces deben existir una serie de ecuaciones diferenciales que representen de manera adecuada los procesos de combustión, de transferencia de calor y los intercambios de masa con el ambiente en un periodo de tiempo establecido.

Siguiendo el planteamiento de Cengel (2007) para la conducción de calor en una esfera en un estado transitorio se tiene la siguiente ecuación:

$$(3.1) \quad \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 k \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \dot{e}_{gen} = \rho c \frac{\partial T}{\partial t}$$

Donde:

ρ : Densidad

c : Calor específico

r : Radio exterior

\dot{e}_{gen} : Tasa volumetrica de generación de calor

k : Conductividad termica del material

La cual se puede interpretar como la razón de la conducción de calor en la ubicación r más la velocidad de la generación de calor dentro del elemento va ser igual a la razón de cambio en la temperatura del elemento con respecto al tiempo.

Ahora valiéndonos de la definición que el mismo Cengel (2007), da de entalpia:

$$(3.2) \quad \frac{\partial h}{\partial t} = c_{prom} \frac{\partial T}{\partial t}$$

Donde:

h : Entalpia

c_{prom} : Calor específico promedio

T : *Temperatura* [K]

Si por ajustarse a la notación usada por Patankar, (1980) además representamos la tasa volumétrica de generación de calor por medio de S_h la ecuación 2.1 puede ser reescrita de la siguiente forma:

$$(3.3) \quad \rho \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 k \frac{\partial T}{\partial r} \right) + S_h$$

Hay que mencionar que en la ecuación (3.1) se considera a ρ como constante, un supuesto valido para el modelo, para cualquier etapa se considera que la densidad y el calor especifico se mantienen constante, las reacciones químicas, intercambios de calor y perdidas de masa en las diferentes capas siempre se llevaran a cabo en las capas más superficiales lo cual generara, que las propiedades físicas se mantengan constante en la mayoría de los volúmenes de control, por ello el supuesto anterior es válido. Si se integra la ecuación (3.3) sobre el volumen de control en la posición (P), de acuerdo a la figura (3.3) y sobre el tiempo en el intervalo t hasta $t + \Delta t$, para luego aplicar una discretización de la forma en la que se describió en el capítulo 1 se obtiene:

$$(3.4) \quad \frac{(\rho C_p)_P T_P - (\rho C_p)_P T_P^0}{\Delta t} V_P = 8\pi k_{P,E} R_E^2 \cdot \frac{T_E - T_P}{R_E^2 - R_I^2} - 8\pi k_{I,P} R_I^2 \cdot \frac{T_P - T_I}{R_P^2 - R_I^2} + S_{h,P} V_P$$

Donde:

ρ : *Densidad* [Kg · m⁻³]

C_p : *Calor especifico* [J · Kg⁻¹ · K⁻¹]

V_p : *Volumen de la capa actual* [m^3]

Δt : *tasa de tiempo discretizado* [s]

$k_{P,E}$: *Conductividad termica en la interfaz P – E* [$W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$]

$k_{I,P}$: *Conductividad termica en la interfaz I – P* [$W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$]

R_E : *Radio en la capa Externa* [m]

R_I : *Radio en la capa Interna* [m]

R_p : *Radio en la capa actual* [m]

$S_{h,p}$: *Termino fuente en la capa actual* [$W \cdot m^{-3}$]

De la ecuación (3.4) cabe hacer algunas aclaraciones, para el lado izquierdo de la ecuación, se aprecia cómo se mencionó en el párrafo anterior que el calor específico y la densidad de la capa se mantienen constantes, el volumen de la capa se genera de acuerdo a la ecuación (3.5), donde los radios R_E y R_W delimitan el volumen de control para la capa estudiada; el término $4\pi R_i^2$ se refiere al área superficial de la capa, mientras que el 8 aparece al realizar un promedio en la distancia entre los radios, buscando mantener el nodo de la malla para una capa del volumen de control en el centro de la misma. Las conductividades térmicas en las interfaces se calculan siguiendo el planteamiento que se hizo en el marco teórico.

$$(3.5) \quad V = \frac{4}{3}\pi(R_E^3 - R_W^3)$$

Donde:

V : Volumen [m^3]

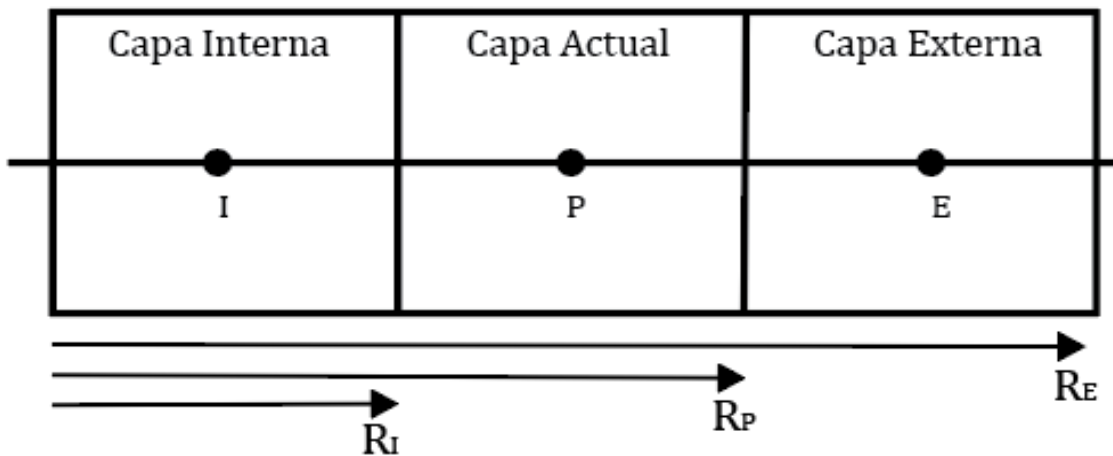
R_E : Radio del limite derecho del volumen de control [m]

R_W : Radio del limite izquierdo del volumen de control [m]

El último término del lado derecho de (3.4), llamado termino fuente siguiendo con la notación utilizada en el presente trabajo, $S_{h,p}V_P$ representa todas las generaciones o consumos de calor volumétrico e interacciones de la partícula con el exterior para la presente capa.

Figura 6.

Representación de la notación de elementos finitos en la malla.



3.2.2. El Termino Fuente En La Ecuación De Energía

Como se mencionó anteriormente el termino fuente recoge todas las fuentes de generación o consumo de calor volumétrico del modelo, para este caso se siguen los planteamientos de Gómez et al. (2015); Ström & Thunman (2013) y se define el termino fuente de la siguiente manera:

$$(3.4) \quad S_h = S_{reaccion} + S_{avance} + S_{inflacion} + S_{inrtercambio} + S_{adventivo}$$

En el término fuente radica la capacidad de fidelidad del modelo, dependiendo de las fuentes que se agreguen se mejorara o empeorara la precisión del mismo. Es de destacar que la ecuación (3.4) está escrita en forma general lo que implica que los diferentes términos que la conforman no tienen por qué ser aplicados a la totalidad de las capas del modelo, sino a la capa adecuada en concordancia con la naturaleza del término fuente.

3.2.2.1. $S_{reaccion}$

El primer componente del término fuente es la generación o consumo de calor debido a las reacciones heterogéneas. Estas reacciones consisten en el ratio de generación de biomasa libre de humedad multiplicado por el calor latente de pirolisis y el ratio de las reacciones de carbonización heterogénea que toman en cuenta los procesos de oxidación y difusión, que suceden en la capa limite, donde interactúan las fases sólidas y líquidas, por lo cual se presenta una distribución de energía entre dichas fases, el cual es tenido en cuenta al multiplicar este término por el factor $f_{solido/gas}$.

$$(3.5) \quad S_{reaccion} = \dot{\omega}_{dry} \cdot LH_{dev} + (S_{char}^{OX} + S_{char}^{gas,1} + S_{char}^{gas,2}) f_{solido/gas}$$

Donde:

$\dot{\omega}_{dry}$: *Ratio de generacion/Consumo de la capa seca* [$Kg \cdot m^{-3} \cdot s^{-1}$]

LH_{dev} : *Entalpia de pirolisis*[$J \cdot Kg^{-1}$]

S_{char}^{OX} : *Termino fuente para la reacción heterogenea de oxidacion del char*

$S_{char}^{gas,1}$: *T. fuente para la reacción heterogenea de gasificacion 1 del char*

$S_{char}^{gas,2}$: *T. fuente para la reacción heterogenea de gasificacion 2 del char*

$f_{solido/gas}$: *Coficiente de distribucion* [-]

El ratio de generación / consumo de la capa seca fue abordado en secciones anteriores, en cuanto al término del calor latente de pirolisis el dato se obtuvo de acuerdo a la investigación de Daugaard & Brown (2003), $1.53 \pm 0.26 MJ \cdot kg^{-1}$, los términos fuentes para las reacciones heterogéneas se desarrollaran en el siguiente apartado y con base en la sección 1.2 mientras que el coeficiente $f_{solido/gas}$ se modela como un factor de distribución de la energía entre las fases sólida y gaseosa, utilizando sus entalpias de reacción, de acuerdo a la ecuación (3.6).

$$(3.6) \quad f_{solido/gas} = \frac{H_{CO}^R}{H_{CO2}^R}$$

Para los términos fuente de las reacciones heterogéneas (ecuaciones (3.7) a (3.9)) se trabaja con los ratios de generación consumo y las K globales han sido definidas en secciones anteriores.

El único termino nuevo que aparece para estas fórmulas es la densidad relativa o fracción solida ε cuyo valor se toma como 0.56 de acuerdo a los trabajos de Gómez et al. (2014).

$$(3.7) \quad S_{char}^{ox} = -\varphi \cdot K_{glob}^{ox} A_v [O_2] M_{O_2} \cdot \varepsilon$$

$$(3.8) \quad S_{char}^{g,1} = ((2\varphi - 1) \cdot K_{glob}^{ox} A_v [O_2] M_{O_2} - K_{glob}^{g,1} A_v [CO_2] M_{CO_2}) \cdot \varepsilon$$

$$(3.9) \quad S_{char}^{g,2} = -K_{glob}^{g,2} A_v [HO_2] M_{HO_2} \cdot \varepsilon$$

Donde:

φ : *Relacion de consumo moles de oxigeno y carbono*

K_{glob}^{ox} : *Constante global del char para la reaccion oxidacion*

$K_{glob}^{g,1}$: *Constante global del char para la reaccion de gasificacion 1*

$K_{glob}^{g,2}$: *Constante global del char para la reaccion de gasificacaion 2*

A_v : *Relacion area volumen[m⁻¹]*

$[i]$: *Concentracion molar del elemento i*

M_i : *Masa molar*

ε : *Fraccion solida*

3.2.2.2 S_{avance}

El termino fuente de avance busca representar el movimiento de las distintas capas hacia el centro de la partícula. Suponiendo la misma distribución de volúmenes de control que los representados en la figura 3.3 se puede entender esta ecuación de la siguiente manera, la capa actual (capa P) gana la energía que pierde la parte de la capa interna (Capa I), que se convirtió y pierde la energía de parte de la capa que anteriormente estaba cubierta por P pero que ha sido obtenida por la capa externa (capa E).

$$(3.10) \quad S_{avance} = Cp_P \left[\dot{\omega}_I \frac{\rho_P}{\rho_I - \rho_P} T_I^0 - \dot{\omega}_P T_P^0 \right]$$

Este planteamiento es el mismo que realizaron recientemente Gómez et al. (2015) y en primer lugar Bruch et al. (2003), donde el avance se cuantifica por medio de los ratios de consumo de las capas del modelo, done el primer elemento del término dentro del paréntesis representa el ratio masico a la temperatura de la capa interna y el segundo elemento representa el avance de la capa actual sobre la interna, todo multiplicado por el calor especifico de la capa actual para tener en cuenta capacidad térmica de la capa.

3.2.2.3. $S_{inflacion}$

$$(3.11) \quad S_{Inflacion} = -F_{Inflacion} \sum_j^{Ngases} \dot{\omega}_j \cdot \int_{T_I}^{T_P} Cp_j dT$$

El efecto de inflación *blowing-out effect* como es mencionado en la literatura inglesa, afecta los coeficientes de masa y transferencia de calor en la partícula como resultado de los gases que son expulsados como resultado del secado y la desvolatilización de las materias durante su combustión, que se genera por la salida de los gases que para los procesos térmicos arrastran con ellos parte del calor que de otra forma iría dirigido a la partícula, y en términos de transferencia de masa, dichos gases que abandonan la partícula dificultan el acceso de las especies a la superficie de la partícula. En nuestro caso las tasas de generación de los gases se toman de los Arrhenius, multiplicados por las densidades de cada gas, multiplicado por los calores específicos de cada gas, para los cuales se toman las expresiones generadas por Smith (1981), las cuales se enuncian a continuación.

$$(3.12) \quad C_{p_{CO_2}} = \frac{B \cdot 5.316 + B \cdot 0.014285 \cdot T - B \cdot 0.8362e^{-5} \cdot T^2 + B \cdot 1.784e^{-9} \cdot T^3}{44.01}$$

$$(3.13) \quad C_{p_{CO}} = \frac{B \cdot 9.726 + 0.04001e^{-2} \cdot T + B \cdot 0.1283e^{-5} \cdot T^2 - B \cdot 0.5307e^{-9} \cdot T^3}{28.01}$$

$$(3.14) \quad C_{p_{H_2O(g)}} = \frac{7.7 \cdot B + B \cdot 0.04594e^{-2} \cdot T + B \cdot 0.2521e^{-5} \cdot T^2 - B \cdot 0.8587e^{-9} \cdot T^3}{18.01528}$$

Bulgakov (1983), realizó uno de los primeros trabajos donde estudio este efecto, al respecto sus conclusiones evidenciaban un incremento en el coeficiente de transferencia total como resultado del *blowing-out effect*.

La ecuación 3.11 se formula de tal forma que tiene en cuenta el efecto térmico del calor específico para la tasa de generación de cada gas. Al respecto cabe mencionar que algunas capas del modelo no tendrán en cuenta las mismas tasas de generación de gases que otras.

El termino $F_{Inflacion}$ cuantifica la inercia térmica que presenta la capa con respecto a los gases generados para la misma, donde un valor de 1 define que la capa se comportaría como un intercambiador de calor perfecto, y su valor va de cero hasta siendo variado libremente por el investigador para lograr un mejor ajuste del modelo a los datos experimentales.

3.2.2.4. $S_{intercambio}$

El termino $S_{intermcabio}$ cuantifica las entradas de energía que recibe la partícula en su capa más externa como resultado de los modos de transferencia de calor por convección y radiación.

$$(3.15) \quad S_{intercambio} = S_{conveccion} + S_{radiacion}$$

La convección según Cengel (2007) “es el modo de transferencia de calor entre una superficie sólida y el líquido o gas adyacente que está en movimiento, y comprende los efectos combinados de la convección y del movimiento del fluido”. En el caso de interés el aire dentro de la cámara de combustión estará a una temperatura más baja que la temperatura de la partícula al momento de iniciarse la evaporación y los procesos de pirolisis y combustión, por lo cual la

transferencia de calor ir a la superficie del solido (Para el caso del modelo se supone que el calor entra a la superficie de la capa limite) al fluido, ese es el motivo del signo negativo en la ecuación 3.16.

$$(3.16) \quad -S_{conveccion,solido} = h_c A_v (T_{boundary} - T_{gas})$$

Donde:

$$h_c = \text{Coeficiente de convección } [W \cdot m^{-2} \cdot K^{-1}]$$

$$A_v = \text{Relacion Area volumen } [m^{-1}]$$

$$T_{gas} = \text{Temperatura del fluido } [K]$$

$$T_{boundary} = \text{Temperatura de la capa limite de la particula } [K]$$

Para el caso del $S_{radiacion}$ será el termino fuente que buscará cuantificar la energía por radiación que recibe la partícula. Incropera et al. (2005) define la radiación térmica como “la energía emitida por la materia que se encuentra a una temperatura distinta de cero ... mientras que la transferencia de energía con conducción o convección requiere la presencia de un medio material, la radiación no”. Esta última parte es importante, de hecho en la bibliografía revisada acerca de modelos de combustión generalmente se dedica una parte del modelo al estudio de los efectos producidos por la radiación, autores como Fatehi & Kaviany, (1994) centran una especial atención y describen de forma detallada este evento. En el caso del presente modelo se utilizará la

formulación propuesta por Frank Incropera, et al. (2005) para cuantificar la energía radiante que ingresa al sólido.

$$(3.17) \quad S_{radiacion} = \sigma \alpha A_v (T_F^4 - T_{boundary}^4)$$

Donde:

σ : Constante de Stefan Blotzman [$W \cdot m^{-2} \cdot K^4$]

α : absortividad [-]

T_F : Temperatura de la flama [K]

$T_{Boundary}$: Temperatura de la capa externa [K]

3.3. Ensamble Del Sistema De Ecuaciones

Como último requisito para tener el punto de partida para el modelo como se mencionó en la sección 1.1.3. se linealizarán los términos fuente. Obteniendo por tanto la ecuación:

$$(3.18) \quad S_{hp} = \frac{dS_{hp}}{dT} \cdot T_p + S_{hp}^u$$

Con base en el sistema de ecuaciones anterior se tendrá unos términos fuentes acordes al comportamiento de cada capa que serán calculados de acuerdo a una temperatura inicial y luego por medio de un método iterativo serán ajustados para llegar al equilibrio. El desarrollo será el siguiente, la ecuación (3.4) puede reescribirse con base en la sección (1.1) de la siguiente manera:

$$(3.19) \quad a_p T_p = a_p^0 T_p^0 + a_I T_I + a_E T_E + b$$

Aplicando la ecuación anterior a cada capa del modelo se obtendrá un sistema de ecuaciones que puede ser planteado de forma matricial como se muestra:

$$(3.20) \quad \begin{pmatrix} a_{p,1} & -a_{E,1} & 0 & 0 \\ -a_{I,2} & a_{p,2} & -a_{E,2} & 0 \\ 0 & -a_{I,3} & a_{p,3} & -a_{E,3} \\ 0 & 0 & -a_{I,4} & a_{p,4} \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{p,1}^0 T_1^0 + b_1 \\ a_{p,2}^0 T_2^0 + b_2 \\ a_{p,3}^0 T_3^0 + b_3 \\ a_{p,4}^0 T_4^0 + b_4 \end{pmatrix}$$

En la tabla 5 se define cada uno de los coeficientes reunidos en la ecuación 3.20 siguiendo el método planteado por Patankar, (1980).

Tabla 5.

Coefficientes de las ecuaciones lineales para la solución de la temperatura de cada capa de la partícula

Capa(i)	$a_{p,i}^0$	$a_{I,i}$	$a_{E,i}$	$a_{p,i}$	b_i
C. húmeda	$\frac{\rho_1 C p_1}{\Delta t}$	0	$k_{1,2} \frac{8\pi R_1^2}{R_2}$	$\frac{\rho_1 C p_1}{\Delta t} V_1 + a_I + a_E$ $-\frac{dS_{h,1}}{dT} V_1$	$S_{h,1}^u V_1$

C. seca	$\frac{\rho_2 C p_2}{\Delta t}$	$k_{1,2} \frac{8\pi R_1^2}{R_2}$	$k_{2,3} \frac{8\pi R_2^2}{R_3 - R_2}$	$\frac{\rho_2 C p_2}{\Delta t} V_2 + a_I + a_E$	$S_{h,2}^u V_2$
				$-\frac{dS_{h,2}}{dT} V_2$	

Char	$\frac{\rho_3 C p_3}{\Delta t}$	$k_{2,3} \frac{8\pi R_2^2}{R_3 - R_2}$	$k_{3,4} \frac{8\pi R_3^2}{R_4 - R_3}$	$\frac{\rho_3 C p_3}{\Delta t} V_3 + a_I + a_E$	$S_{h,3}^u V_3$
				$-\frac{dS_{h,3}}{dT} V_3$	

C. Limite	$\frac{\rho_4 C p_4}{\Delta t}$	$k_{3,4} \frac{8\pi R_3^2}{R_4 - R_3}$	0	$\frac{\rho_4 C p_4}{\Delta t} V_4 + a_I + a_E$	$S_{h,4}^u V_4$
				$-\frac{dS_{h,4}}{dT} V_4$	

3.4. Modelado Del Proceso De Secado

El proceso de secado de la partícula es un importante paso durante la conversión del combustible sólido, que ocurre simultáneamente o antes de la pirolisis. Una humedad inicial alta puede reducir la velocidad de calentamiento de las partículas en un factor de 3 a 5 Di Blasi et al. (2003). El agua dentro de las partículas se puede encontrar en tres formas: agua libre, agua unida, y agua capilar. El agua capilar o libre existe en forma líquida en huecos y células, mientras el agua unida existe como moléculas de agua unidas física o químicamente a la superficie de los poros de la partícula o especie hidratada. H. Fatehi & Bai (2014). En términos del modelo las altas

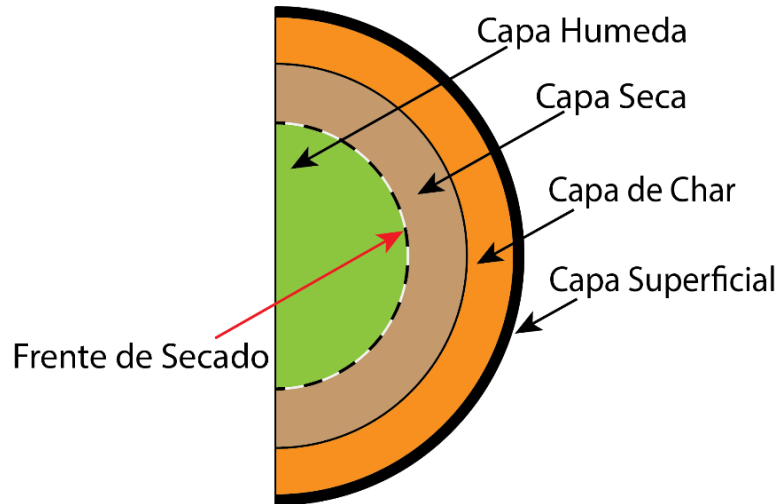
velocidades de calentamiento junto con la naturaleza endotérmica de la evaporación del agua pueden generar inestabilidades numéricas en su modelado, en el planteamiento de la tabla 4, no se ha tenido en cuenta el efecto de la evaporación del agua, pero como se remarca es un efecto que no se puede obviar.

Como se mencionó anteriormente para este trabajo se supondrá que el secado ocurre a temperatura constante y que, una vez alcanzada la temperatura de secado en una región de la partícula, todo el calor entrante hacia esta región se emplea en el secado hasta que se halla evaporado toda la humedad. Gómez et al. (2015) propone este modelamiento a partir de un frente de avance isotérmico, que es matemáticamente estable dentro del modelo.

Este frente de secado será la interfaz entre la capa de biomasa húmeda y la capa de biomasa seca, dicha condición se representa en la figura 3.4. Ante estos planteamientos se hace necesario establecer algunos cambios en los coeficientes planteados en la tabla 4.

Figura 7.

Delimitación del frente de secado dentro del modelo de capaz.



El intercambio de calor entre la capa húmeda y la capa seca será considerado como cero, es decir $a_{E,1} = a_{w,2} = 0$, y la transferencia de calor entre las dos capas y la interface será modelada agregando un término fuente en cada capa, dichos términos fuentes se linealizan de la misma forma hasta ahora planteada.

3.4.1. Término Fuente De Evaporación

Para tener en cuenta el efecto de la evaporación se introduce un término fuente adicional para las capas del modelo con contenido de humedad y sin contenido de humedad, teniendo en cuenta el planteamiento el planteamiento del frente de avance isotérmico, se describirá a continuación la variación de cada uno de los términos fuentes para las capas mencionadas

3.4.1.1. Capa Húmeda.

Teniendo en cuenta la ubicación de esta capa dentro del modelo (siendo la más central) y la entrada de calor supuesta, del exterior hacia el centro, la primera conclusión es que los coeficientes $a_{W,1}$ y $a_{E,1}$ serán cero, es decir la capa no recibe calor desde su interior y todo el calor que le llega desde el exterior será utilizado en el frente de secado, y hasta que no se evapore la totalidad de la humedad en este el calor no será utilizado para otro fin. Cabe mencionar además que como se considera el frente de secado no se estará tomando la interfaz de fronteras entre los volúmenes de control, por lo tanto, no se utilizará para este término fuente S_{evap} el coeficiente de conducción en la interfaz sino el coeficiente de conducción para el material húmedo, promediado y ubicado a la distancia radial del centro del volumen de control a la temperatura del volumen de control. Como el termino fuente de evaporación será dependiente de la temperatura de evaporación se escribe de la forma mostrada en la ecuación 1.24, para poder ser ordenado sus coeficientes los términos dependientes tanto de la temperatura de la capa actual como de la temperatura de evaporación.

$$(3.18) \quad S_{evap} = S_{evap}T_p + S_{evap}T_{evap}$$

$$(3.19) \quad S_{evap,T_p} = k_1 8\pi R_1 T_p$$

$$(3.20) \quad S_{evap,T_{evap}} = k_1 8\pi R_1 T_{evap} V_1$$

3.4.1.2. Capa Seca.

En el caso de la capa seca se tendrá que esta recibirá el calor de su capa este por medio de la interfaz entre capas, por lo que en este caso si es viable la utilización del coeficiente de conductividad en el interfaz calculado de la forma expuesta anteriormente. Por el mismo planteamiento del frente de secado se supone que hasta que no se evapore la totalidad de la humedad el calor que entra en el frente de secado no será empleado en otra función. Por lo tanto, el planteamiento para el termino fuente de evaporación para esta segunda capa puede plantearse de forma analógica a la anterior.

$$(3.21) \quad S_{evap} = S_{evap}T_p + S_{evap}T_{evap}$$

$$(3.22) \quad S_{evap,Tp} = k_2 \frac{8\pi R_1^2}{R_2 - R_1} T_p$$

$$(3.23) \quad S_{evap,Tevap} = k_2 \frac{8\pi R_1^2}{R_2 - R_1} V_2 T_{evap}$$

Una vez que se hace el replanteamiento de los coeficientes antes mencionados la tabla 5 se puede reescribir para incluir los cambios por el termino fuente de evaporación de la siguiente manera:

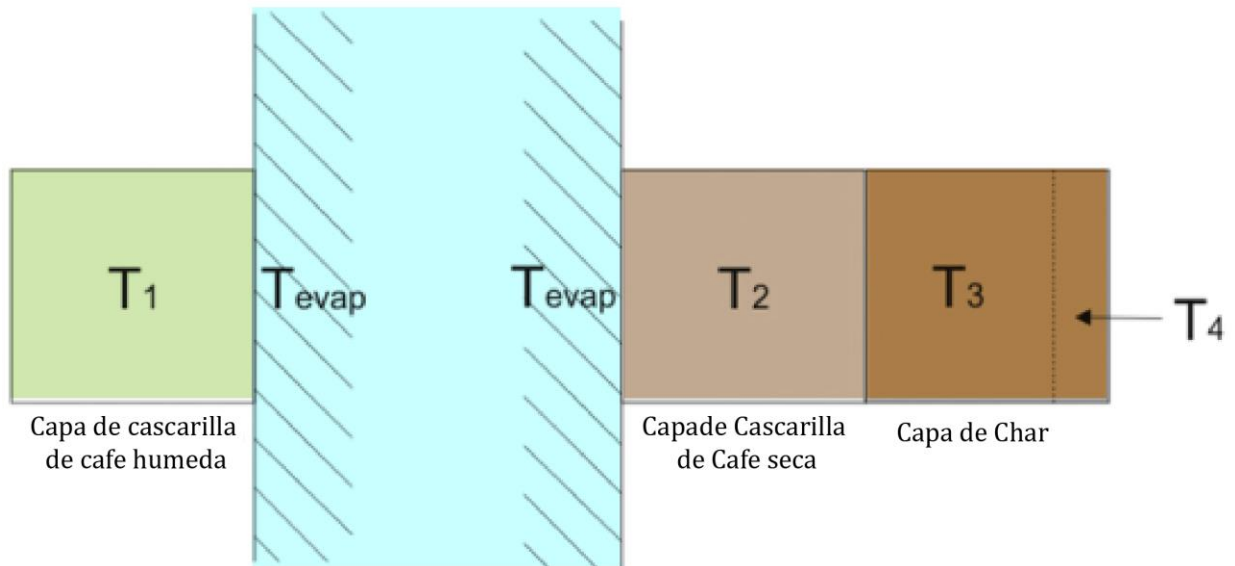
Tabla 6.

Reescritura de los coeficientes de las ecuaciones lineales para la solución de la temperatura de cada capa de la partícula teniendo en cuenta el efecto de la evaporación.

Capa(i)	$a_{p,i}^0$	$a_{l,i}$	$a_{E,i}$	$a_{p,i}$	b_i
C. húmeda	$\frac{\rho_1 C p_1}{\Delta t}$	0	0	$\frac{\rho_1 C p_1}{\Delta t} V_1 - \frac{dS_{h,1}}{dT} V_1 - k_1 8\pi R_1$	$[S_{h,1}^u - k_1 8\pi R_1 T_{evap}] V_1$
C. seca	$\frac{\rho_2 C p_2}{\Delta t}$	0	$k_{2,3} \frac{8\pi R_2^2}{R_3 - R_2}$	$\frac{\rho_2 C p_2}{\Delta t} V_2 + k_{2,3} \frac{8\pi R_2^2}{R_3 - R_2} - \frac{dS_{h,2}}{dT} V_2 - k_2 \frac{8\pi R_2^2}{R_2 - R_1}$	$\left[S_{h,2}^u - k_2 \frac{8\pi R_2^2}{R_2 - R_1} T_{evap} \right] V_1$

Figura 8.

Representación del frente de secado dentro del modelo de capas.



3.5. Variación De Los Volúmenes Durante El Proceso De Combustión

Dado que el método utilizado para la creación del modelo propuesto utiliza una cuadrícula con puntos a partir de los cuales se establecen volúmenes de control que no se solapan entre sí, y por el proceso de la combustión se genera el consumo de las capas en el modelo, se necesita establecer un algoritmo que representa la posición de las capas a medida que transcurre la combustión.

$$(3.24) \quad sv_p = \frac{V_p - V_p^0}{\Delta t}$$

La ecuación 3.24 representara la evolución del tamaño de la capa a medida que transcurre el tiempo. Al respecto el termino fuente Sv_p representara la sumatoria de los términos de generación y consumo del volumen para cada capa.

$$(3.25) \quad Sv_p = Sv_{consumo} + Sv_{generacion}$$

A continuación, se desarrolla cada uno de los componentes de este término fuente.

3.5.1. Termino Fuente Para La Generación De Volumen

$$(3.26) \quad Sv_{p,generacion} = R_{encogimiento} \frac{\dot{\omega}_I}{\rho_I} V_I$$

A partir de las condiciones de partida del modelo, donde inicialmente la partícula está compuesta solo por la biomasa la cual posee algo de humedad (aunque matemáticamente no se supone inicialmente las otras capas como cero, sino que se les da un valor mínimo) se generaran las demás capas, la generación de estas capas estará controlado por la cinética de Arrhenius para cada capa. Para la capa de biomasa húmeda, se plantea en función del calor latente del agua y de la cantidad de calor que está recibiendo la capa cuánta agua se está liberando y este término se divide por la densidad, con base en la ecuación 1.19, para la capa de biomasa seca se aplica el mismo concepto utilizando como base la ecuación 1.21, en el caso de la capa de char se utiliza la ecuación 1.22.

$$(3.27) \quad R_{encogimiento} = \frac{\rho_{dry}}{\rho_{char}} \frac{\dot{\omega}_{char_gen}}{\dot{\omega}_{dry}}$$

Dada la naturaleza propia del fenómeno de la combustión y la forma en que se planteó el modelo, el material sólido es consumido solo en la capa más externa, haciendo que la partícula vaya progresivamente disminuyendo su tamaño, lo que se conoce como el régimen de reacción *Shrinking Core*, en nuestro caso este planteamiento es revalidado al utilizar el módulo de *Thiele*, y obtener un valor elevado. Otro motivo por el cual se decide tener en cuenta la reacción de *Shrinking Core*, está basado en el artículo de Babu & Chaurasia (2004), donde se plantea de forma irrefutable que no tener en cuenta este efecto genera sub estimaciones indeseables en los resultados finales de tamaño de la partícula, tiempo de pirolisis, temperaturas, capacidad de calor específico y número de Biot, en el modelo este efecto será modelado de acuerdo a la ecuación 3.27, la cual se extrajo de Gómez et al. (2015).

3.5.2. Término Fuente Para El Consumo Del Volumen

$$(3.28) \quad Sv_{p,consumo} = -\frac{\dot{\omega}_p}{\rho_p} V_p$$

El término fuente para el consumo de cada una de las capas se calculó de forma similar a la forma en que se calculó el término fuente para la generación por medio de las ecuaciones 3.26 y 3.27, presentándose como su cambio más característico que el término de consumo se calcula con base en los valores de la capa actual y no la capa inmediatamente anterior como en el caso del término fuente de generación.

3.5.3. Resolución Del Sistema De Ecuaciones Para Los Cambios De Volúmenes

Siguiendo nuevamente el planteamiento de Patankar (1980), utilizado durante todo el modelo se puede plantear un sistema equivalente de ecuaciones para cada capa con base en la ecuación 3.29 y generar un sistema de ecuaciones como el que se aprecia en 3.30 cuyos coeficientes se muestran en la tabla 7.

$$(3.29) \quad a_p V_p = a_V^0 V_p^0 + a_I V_I$$

$$(3.30) \quad \begin{pmatrix} a_{P,1} & 0 & 0 \\ -a_{I,2} & a_{P,2} & 0 \\ 0 & -a_{I,3} & a_{P,3} \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \\ V_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{P,1}^0 V_1^0 \\ a_{P,2}^0 V_2^0 \\ a_{P,3}^0 V_3^0 \end{pmatrix}$$

Tabla 7. Coeficientes de las ecuaciones lineales para la solución de los cambios de volúmenes de cada capa de la partícula.

Capa(i)	$a_{p,i}^0$	$a_{I,i}$	$a_{p,i}$
C. húmeda	$\frac{1}{\Delta t}$	0	$\frac{1}{\Delta t} + \frac{\dot{\omega}_{moist}}{\rho_1}$
C. seca	$\frac{1}{\Delta t}$	$\frac{\dot{\omega}_{moist}}{\rho_1}$	$\frac{1}{\Delta t} + \frac{\dot{\omega}_{dry}}{\rho_2}$

$$Char \quad \frac{1}{\Delta t} \quad R_{encogimiento} * \frac{\dot{\omega}_{dry}}{\rho_2} \quad \frac{1}{\Delta t} + \frac{\dot{\omega}_{char_cons}}{\rho_3}$$

Con la ecuación 3.30 se culmina el planteamiento de un modelo de ecuaciones que se soluciona de forma simultánea tanto para las temperaturas de las capas como para los volúmenes de la misma.

Capítulo 4. Simulación y Análisis

Una vez se ejecute el modelo se hace necesario hacer una comparación de los resultados obtenidos con resultados experimentales para realizar la validación y evaluar la confiabilidad del modelo propuesto. Para dar cumplimiento a este objetivo se utilizarán como base los artículos “*Combustion of coffee husk*” de M. Saenger; “*Coffee Husk Briquettes: A New Renewable Energy Source*” de J. Suarez, y el capítulo 11 del libro de Lionel Limousy :*Energy applications of coffee procesing by-products*”.

4.1. Calibración Del Modelo

En esta primer apartado se quiso comparar los resultados obtenidos por el modelo con los resultados experimentales consignados en los artículos antes mencionados, al respecto se hace necesario hacer algunas aclaraciones, en primera instancia los datos experimentales con los que se cuentan fueron recopilados utilizando pellets y lechos fluidizados, no fue posible encontrar datos experimentales precisos para briquetas de cascarillas de café, por lo cual se decidió calibrar el modelo con base en los datos disponibles y luego extrapolar los cálculos a briquetas, que en esencia son pellets de mayor tamaño.

Cabe mencionar la importancia de los factores de sobre y baja relajación para lograr la convergencia del modelo. Sin la utilización de dichos factores no es posible llegar a la convergencia en la mayoría de los casos y en los casos donde el sistema de ecuaciones converge los tiempos de cálculo son ampliamente superiores a los que se logran con la utilización de dichos

factores. La implementación de los factores de sobre y baja relajación se implementan de la siguiente forma:

$$(4.1) \quad \frac{a_p}{\alpha} \theta_p = a_p^0 \theta_p^0 + a_w \theta_w + a_E \theta_E + b + (1 - \alpha) \frac{a_p}{\alpha} \theta_p$$

$$(4.2) \quad \alpha = 1 - \left(1 - \frac{V_p}{V_{particula}}\right)$$

Las ecuaciones 4.1 y 4.2 agregan constantes a la ecuación básica para la solución de cada capa buscando una solución más rápida del sistema de ecuaciones y a la vez ayudan a converger el sistema, en el caso del presente modelo por experimentación se llegó a al siguiente valor de teta: $\theta = 1/9000$.

Otra herramienta que ayudo a la calibración del modelo fue el valor dado a $f_{inflacion}$ en nuestro caso su valor fue de 0.89 y se utiliza para suavizar las curvas y darles un mejor acercamiento a los datos generados por el modelo en relación con los datos experimentales.

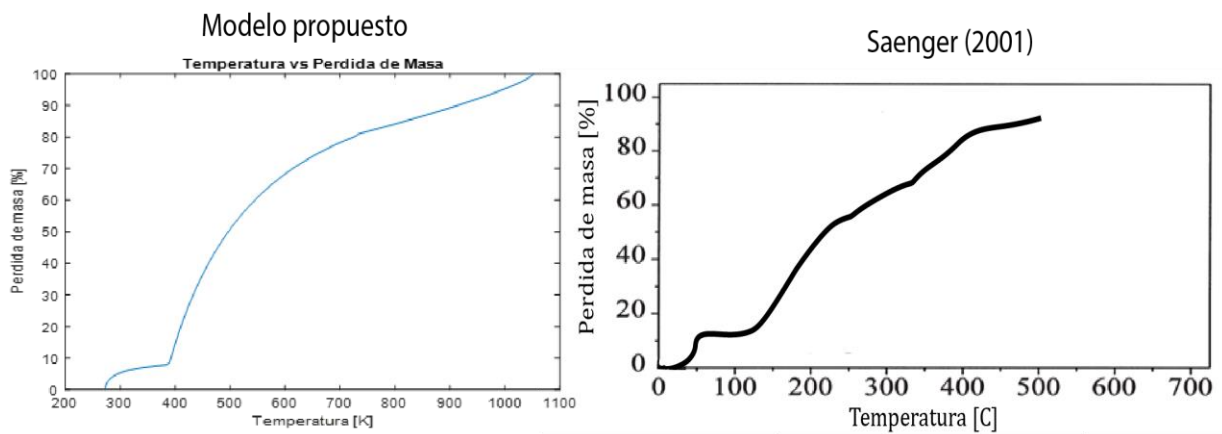
Basado en el artículo de Saenger et al. (2001) el modelo se calibra con base en las siguientes dimensiones para el pellet de cascarilla de café, una longitud de 10 [mm] y un diámetro de 10 [mm] con una humedad de 10%.

La figura 13 muestra la comparación entre los datos recopilados experimentalmente y los datos obtenidos por el modelo para un pellet de las mismas dimensiones. Se aprecia una buena aproximación por parte del modelo a los datos experimentales, en primera instancia la forma general de ambas curvas es similar, con una pérdida inicial de la masa de alrededor del 10%

generada por la pérdida de la humedad contenida en la biomasa, para posteriormente, en específico luego de superar los 200 grados centígrados se aprecia un aumento acelerado en la pérdida de masa, esta pérdida se entiende por la iniciación de la pirolisis en la cascarilla de café, lo cual genera una liberación de los gases livianos, al tiempo que se inicia el proceso de combustión el cual se representa en el modelo al transformarse el *char* generado de la pirolisis en cenizas que se eliminan de la masa de la briqueta.

Figura 9.

Pérdida de masa vs temperatura, comparativa entre datos generados por el modelo vs datos experimentales.



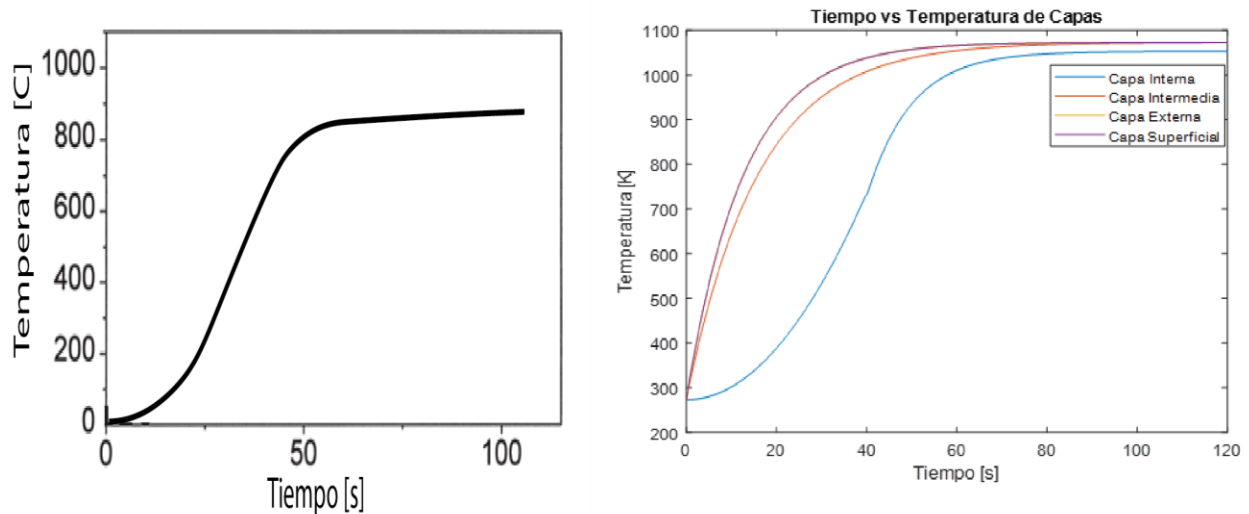
Nota. Adaptado de Saenger et al. (2001)

Sin embargo cabe mencionar que el modelo presenta algunas discrepancias con los datos experimentales, como se aprecia en la figura 9 la concavidad de los datos obtenidos por el modelo es más pronunciada que en los datos experimentales donde se aprecia una pendiente más lineal,

una de las causas puede ser poca cantidad en los fenómenos que conforman el termino fuente, baja cantidad en las reacciones químicas contempladas en los procesos de difusión y liberación de livianos durante la pirolisis y en igual medida se tiene que contemplar el error del investigador a la hora de compilar el modelo.

Figura 10.

Evolución de la Temperatura contra el tiempo para un pellet de cascarilla de café



Nota. Adaptado de Saenger et al. (2001)

La figura 10 representa la evolución de la temperatura del pellet con respecto al tiempo, en el lado de las gráficas generadas por el modelo se aprecia que existen 4 líneas porque cada una de ellas representa una de las capas consideradas en el modelo, sin embargo la temperatura de la capa interna que es la que representa al pellet al inicio en su estado inicial presenta una evolución que se ajusta en gran medida a los datos experimentales, sus formas son similares presentando

inicialmente un crecimiento lento hasta llegar a los 25 segundos donde la pendiente de la curva se incrementa fuertemente y luego alcanzando una forma casi plana en el intervalo de 55 a 60 segundos.

Contrastando los datos generados por el modelo con los datos experimentales se puede concluir que el modelo realiza una adecuada representación para la combustión de pellets de cascarilla de café; los datos que se utilizaron para modelar el pellet, se encuentran registrados en la tabla 8.

Tabla 8.

Parámetros generales ejecución del modelo en el caso de pellets

Parámetro	Valor
Humedad	10 [%]
Delta de tiempo	0.5 [s]
Temperatura del gas	1073.15 [K]
Diámetro	10 [mm]
Longitud	10 [mm]

Tiempo de análisis	100 [s]
--------------------	---------

Nota. Adaptado de Saenger et al. (2001)

Un segundo conjunto de datos experimentales contra los que se contrastará el modelo matemático planteado será los recopilados por Suarez et al. (2003), en este caso el artículo recopila información importante sobre el tiempo de duración de la combustión y la evolución de la pérdida de masa de la briqueta en el tiempo, al respecto la figura 15 muestra los datos generados por el modelo propuesto, con base en los parámetros consignados en la tabla 9, que fueron los que Suarez registro en sus datos experimentales.

Tabla 9.

Parámetros generales recopilados por Suarez et al. (2003).

Parámetro	Valor
Humedad	10 [%]
Delta de tiempo	5 [s]
Temperatura del gas	1073.15 [K]
Diámetro	80 [mm]

Longitud	140 [mm]
----------	----------

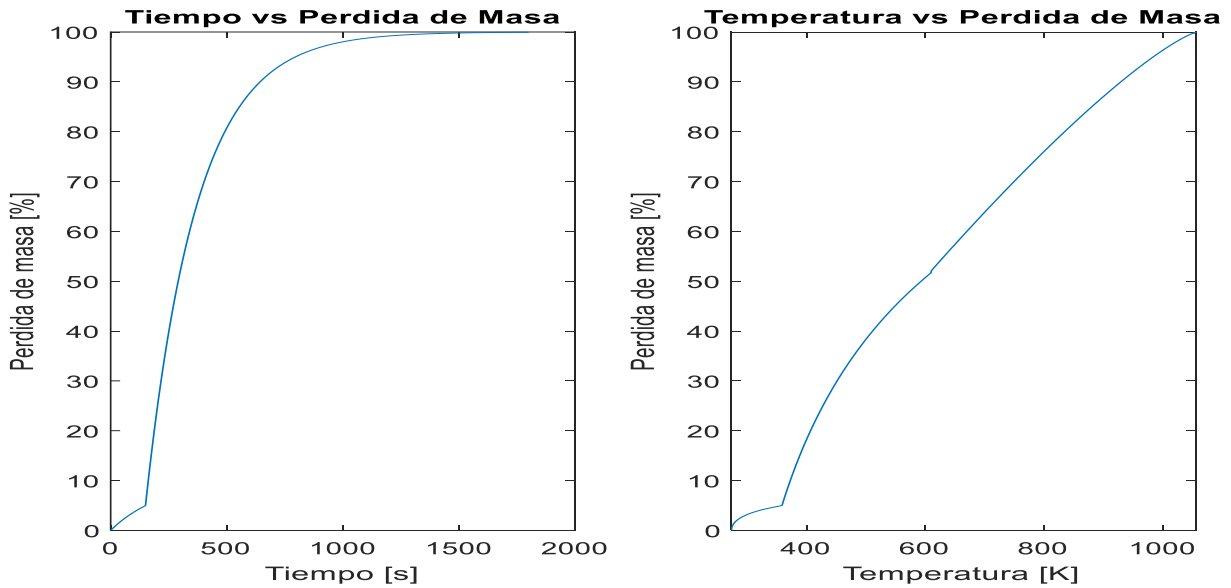
Tiempo de análisis	1800 [s]
--------------------	----------

Nota. Adaptado de Suarez et al (2003).

La figura 11 se adapta a los datos registrados por Suarez, se resalta en este apartado la capacidad que tiene el modelo de acertar el tiempo en el cual se llegara a la pérdida del cien por ciento de la masa de la briqueta, ajustándose a los datos experimentales, al respecto se genera también la gráfica de la temperatura de la partícula contra la pérdida de tiempo, ambas graficas adoptan formas similares a las registradas en la calibración del modelo en la sección anterior, lo cual contribuye a mejorar la confianza en el modelo.

Figura 11.

Evolución de la pérdida de masa contra el tiempo y la temperatura basado en los parámetros de Suarez et al (2003).



Una interpretación para las formas de las gráficas generadas por el modelo que se ajuste al fenómeno de la combustión en biomazas se describe en forma detallada a continuación:

Posterior a la introducción de la briqueta en el ambiente a alta temperatura las capas exteriores alcanzaran una temperatura de secado y se comenzara a liberar la humedad. A medida que el frente de secado va penetrando en la partícula deja a su paso capas de madera secas que siguen aumentando de temperatura.

Cuando la temperatura de las capas exteriores es suficiente, se desencadena la pirolisis liberando gases y formando *char* en la capa externa de la partícula. En ese instante el frente de secado aún no ha alcanzado el centro de la briqueta, por lo cual se genera un solapamiento del secado con los demás procesos. La pirolisis que inicialmente se inició a alta velocidad sufre una desaceleración por efecto de la menor conductividad de las capas de *char* formadas, lo cual también afecta a la velocidad de avance del frente de secado. Instantes después el *char* formado empieza su reacción heterogénea con el oxígeno elevando la temperatura de la superficie de la partícula.

Los gases liberados por la pirolisis arderán en las inmediaciones de la briqueta contribuyendo al aumento de la temperatura de la capa superficial.

Luego se da por terminada la pirolisis de la partícula continuando el *char* con sus reacciones hasta que sea consumido en su totalidad.

Capítulo 5. Optimización

Uno de los objetivos del presente trabajo es generar a partir del modelo matemático planteado un método de optimización para definir las dimensiones de las briquetas de cascarilla de café, para lograr este punto el método será el siguiente: el factor optimado será la cantidad de material empleado en la elaboración de una briketa, se calculará el costo unitario por kilogramo de material, incluyendo costos variables y fijos para tener unos valores más cercanos a la realidad. El factor determinante será el tiempo de combustión de la briketa, el objetivo que se busca con la optimización por tanto es encontrar la mejor relación entre utilización de material en la briketa contra tiempo de combustión.

El estudio del proceso de manufactura para la elaboración de las briquetas a base de cascarilla de café será el realizado por la empresa Agroindustria Gerona.

5.1. Materia Prima

La cascarilla de café se obtiene de someter el café tipo pergamino a un proceso de trillado, lo cual separa el grano seco y la cascarilla, considerándose habitualmente la última como un producto de desecho, además se utiliza comercialmente la colofonia como un aglutinante para favorecer el proceso de adhesión y mantener la forma de la briketa, añadiendo rigidez, pero también tiene un efecto impermeabilizante, impidiendo la penetración de líquidos en las briquetas ya terminadas.

5.2. Procesos De Producción

Para tener en cuenta tanto costos variables como fijos en la producción de una briqueta de cascarilla de café, se analizará el plan de producción de la empresa Agroindustria Gerona, registrado por Nolasco en uno de sus artículos:

Proceso de trillado: El grano de café ingresa a una tolva que alimenta una trilladora que remueve la cascarilla de café mediante fricción, generalmente se obtiene una proporción de 80% - 20% entre café oro y cascarilla de café respectivamente por kilogramo de café sin procesar, Nolasco (2016).

Proceso de obtención y traslado de la cascarilla de café: La cascarilla que queda como residuo del proceso de trillado es transportada por medio de elevadores hasta silos donde será almacenada hasta su utilización en las briquetas.

Briquetado: Un operario se encarga de recolectar el material desde los silos y transportarlo y depositarlo en la maquina briquetadora, antes de ello se agrega la colofonia en una proporción de 90% de cascarilla de café y 10% de colofonia en estado líquido. La máquina una briquetadora modelo GCBA-I que logra producir 100 briquetas por hora de operación.

Proceso de empaque: Un operario realiza el proceso de empaque, depositando 24 briquetas en cajas de cartón, llevando siempre el logotipo y las dimensiones solicitadas por la empresa.

5.3. Mano De Obra y Maquinaria Necesaria

La mano de obra se contrata teniendo en cuenta la producción requerida, en el caso de la empresa estudio Agroindustria Gerona, se plantea una producción anual de 52500 briquetas, lo cual requiere una mano de obra de 5 operarios en jornada de trabajo de ocho horas diarias.

En respecto a la maquinaria necesaria se requiere una maquina trilladora, silos de almacenamiento, y maquinas briquetadoras para la compactación de la cascarilla de café, también se tienen en cuenta los costos de mantenimiento de la maquinaria, los costos de embalaje y los costos variables como el de la energía eléctrica, a continuación, se detallan la totalidad de los costos incurridos para la producción de cascarillas de café.

Tabla 10.

Costos en materia prima y mano de obra elaboración de briquetas a base de cascarilla de café.

Materia Prima	Cantidad anual	Precio Unitario	Costo anual
Cascarilla de café	7940 [Kg]	\$300	\$2.382.000
Colofonia	2382 [Kg]	\$30.000	\$7.146.000
Caja de cartón	2188 [Unidades]	\$2.300	\$5.032.400

Mano de obra	525 [Horas]	\$3.785	\$1.987.125
--------------	-------------	---------	-------------

Nota. Adaptado de Nolasco (2016)

Tabla 11.

Costos en mantenimiento maquinaria empleada en la elaboración de briquetas a base de cascarilla de café

Maquinaria	Tipo de Servicio	Cantidad Anual	Costo	Costo Total Anual
Silo	Limpieza Externa de ciclón	24	\$50.000	\$1.200.000
Briquetadora modelo TFCX-150	Mantenimiento semestral	2	\$920.000	\$1.840.000

Nota. Adaptado de Nolasco (2016).

5.4. Costo Energía Eléctrica

EL consumo de energía eléctrica de la maquinaria necesaria para la producción de las briquetas está cuantificada en 60 [kW/h], el precio del kW/h en febrero de 2021 se fijó en

565.66 [\$/kW] según la información consignada en la página de la comisión de regulación de energía y gas. (CREG).

El costo de la energía eléctrica para la producción de las 52500 briquetas se muestra en la ecuación 5.1.

$$(5.1) \quad \text{Costo electricidad} = \frac{52500[\text{briquetas}]}{100[\frac{\text{briquetas}}{\text{hora}}]} * 60 \left[\frac{\text{kW}}{\text{hora}} \right] * 565.66 \left[\frac{\$}{\text{kW}} \right]$$

$$\text{Costo electricidad} = \$17.818.290$$

A continuación, se presenta entonces un consolidado de los costos de producción anuales en los que se incurre para la producción de las briquetas a base de cascarilla de café.

Tabla 12.

Costo total de producción de briquetas a base de cascarilla de café

Rubro	Costo
Materia prima	\$9.527.000
Material de embalaje	\$5.032.400
Mano de obra directa	\$1.987.125
Mantenimiento	\$3.040.000

Energía Eléctrica	17.818.290
Total	\$37.404.815

Nota. Adaptado de Nolasco (2016).

Tomando el costo total de producción se determina el costo unitario de producción, que será el monto de dinero que le cuesta a la empresa fabricar una briqueta de cascarilla de café.

$$(5.2) \text{ Costo unitario} = \frac{\text{Costo de produccion}}{\text{Briquetas fabricadas}} = \frac{\$37.404.815}{52500 \text{ briquetas}} = 712.47 \left[\frac{\$}{\text{briqueta}} \right]$$

Valiéndonos de la densidad de la cascarilla de café húmeda y del volumen de la briqueta se puede encontrar una relación entre el costo por kilogramo en el que se incurre al producir una briqueta de cascarilla de café.

Como se mencionó inicialmente en la producción de las briquetas de cascarilla de café se usa como aglomerante la colofonia en una proporción de 90-10 en volumen, sin embargo, se hará la suposición de que la briqueta está compuesta en su totalidad por cascarilla de café; también es necesario mencionar que las briquetas son producidas con las siguientes dimensiones: un diámetro de 0.2 [m] y una altura de 0.3 [m], lo que genera un volumen por briqueta de 0.009 [m³].

$$(5.3) \text{ masa Briqueta} = 446.25 \left[\frac{kg}{m^3} \right] * 0.009[m^3] = 4.0163 \left[\frac{kg}{\text{briqueta}} \right]$$

$$(5.4) \text{ Costo cascarilla de cafe} = 712.47 \left[\frac{\$}{\text{briqueta}} \right] \div 4.0163 \left[\frac{kg}{\text{briqueta}} \right]$$

$$\text{Costo cascarilla de cafe} = 177.40 \left[\frac{\$}{kg} \right]$$

Una vez establecido el costo por kilogramo, el siguiente paso es realizar una serie de iteraciones utilizando el modelo propuesto y modificando las dimensiones tanto de diámetro como de longitud de la briqueta, al respecto cabe mencionar que para el diámetro solo se emplearan dos parámetros, porque son de los más utilizados en la industria.

Tabla 13.

Tabla de optimización para optimización de briquetas de diferentes dimensiones

Iter.	diámetro	longitud	volumen [m3]	masa [kg]	Costo [\$/kg]	Tiempo combustión [min]	Costo de la briqueta
1	0.1	0.2	0.00157	0.70097	177.4	66	124.352
2	0.1	0.25	0.00196	0.876212	177.4	73	155.434
3	0.1	0.3	0.00236	1.051454	177.4	79	186.528
4	0.1	0.35	0.00275	1.226697	177.4	82	217.616

5	0.1	0.4	0.00316	1.401939	177.4	91	248.704
6	0.2	0.1	0.00314	1.401939	177.4	104	248.704
7	0.2	0.15	0.00471	2.102909	177.4	147	373.056
8	0.2	0.2	0.00630	2.803878	177.4	168	497.408
9	0.2	0.25	0.00784	3.504848	177.4	209	621.760
10	0.2	0.3	0.00943	4.205817	177.4	237	746.112

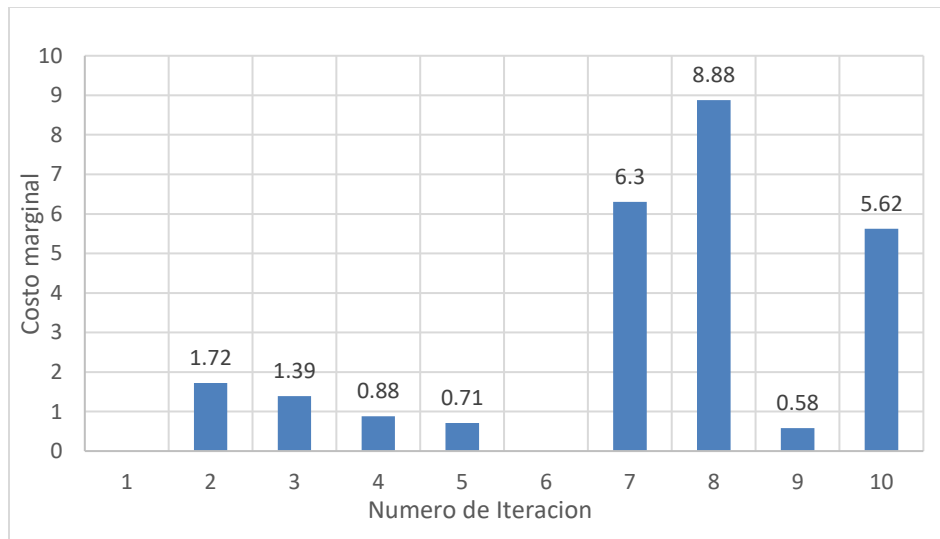
Al analizar los datos registrados en la tabla 13 se aprecia en primera medida que aumentar el diámetro de la briqueta es más beneficioso que aumentar la altura para extender el tiempo de combustión, las iteraciones 1 a 5 no difieren entre si en mas de 15 minutos a pesar de que la altura entre briquetas se duplica, sin embargo cuando el diámetro su efecto en los tiempos de combustión es más notorio, además se aprecia que un incremento de masa constante entre iteraciones, no genera una variación igualmente constante en los tiempos de combustión.

Una posible explicación al incremento mas notorio de los tiempos incrementando diámetros en lugar de densidades se debe a que al aumentar longitudes se está creando área

superficial adicional que recibirá mayores radiaciones por parte del ambiente de combustión, permitirá la generación de mayores cantidades de fenómenos de intercambio en su superficie, al ser esta mayor; sin embargo al incrementarse el diámetro se esta modificando el ancho de la pared por la cual debe atravesar el calor en su recorrido, se dificulta para los gases ligeros y el vapor del agua escapar desde el interior de la briqueta como resultado de la evaporación y pirolisis, al tiempo que la superficie para los fenómenos como la difusión y la oxidación del *char* no se incrementan.

Figura 12.

Representación del incremento marginal en el costo contra el incremento en el tiempo de combustión para la serie de iteraciones realizadas.



Para la optimización como cabría esperar la solución tampoco se encuentra en incrementar indiscriminadamente el diámetro de a briqueta, porque pasado un diámetro establecido se aprecia que un incremento del diámetro acarrea un mayor consumo de material sin generar un tiempo de

combustión significativamente mayor. Si se aplica el concepto del incremento marginal al caso de estudio se podrá calcular el costo que tiene incrementar la masa de la briqueta con respecto al incremento en el tiempo de combustión, el procedimiento será calcular el costo monetario por minuto de combustión, calcular el incremento del cálculo entre iteraciones para obtener un delta de incremento monetario por minuto y por ultimo multiplicar por el número de minutos, lo cual nos daría información el costo monetario que tiene incrementar el tiempo de combustión en 1 minuto para las diferentes geometrías de las iteraciones estudiadas.

Capítulo 6. Conclusiones

Las características físico químicas de la cascarilla de café registradas en el análisis próximo y ultimo muestran que la biomasa presenta características adecuadas para ser utilizado como combustible, teniendo un poder calorífico similar al de ciertas maderas de densidad baja.

El modelo matemático planteado se ajusta adecuadamente a los datos experimentales recopilados por lo cual se puede apreciar como una buena herramienta para la predicción de este tipo de fenómenos, al tiempo que sus resultados acordes con la data experimental validan los supuestos escogidos para plantear el modelo.

El modelo tiene en forma general muy buen acople con los datos experimentales, sin embargo existe cierta diferencia en algunas zonas específicas de las gráficas generadas en comparación con las experimentales esto se puede entender por la simplificación de las reacciones heterogéneas con las que se modelo el fenómeno, al tiempo que los ratios de consumo y generación dependen en gran medida de las constantes de Arrhenius, una mayor precisión en este apartado deberían generar también una mejor precisión en el modelamiento del fenómeno.

La pirolisis de biomosas con base celulósica se puede modelar de acuerdo a un sistema de etapas donde inicialmente se libera la humedad, luego los gases ligeros y por ultimo las breas, en este aspecto el modelo propuesto puede ser ajustado para modelar la combustión de otro tipo de materiales que también tengan base celulósica.

La cascarilla de café como recurso energético se encuentra en nuestro país en gran abundancia al tiempo que es económicamente barato de obtener, de igual forma la producción de briquetas de cascarilla de café desde la recolección de la materia prima hasta llegar al producto final no requiere de grandes costos por lo cual esta opción de combustión es una gran candidata a sustituir combustibles típicamente usados en este ámbito como por ejemplo la madera.

La composición de los costos en los que se incurre al producir briquetas de cascarilla de café están marcadamente inclinados hacia los costos de energía eléctrica, y al aglutinante empleado, la cascarilla de café como materia prima supone un de los costos mas bajos, por lo tanto un cambio de aglutinante mas barato o el empleo de otra tecnología con menos consumo eléctrico puede significar un proceso de producción mas barato.

Referencias Bibliográficas

- Abaunza, A., & Gacía, K. (2019). Modelamiento matemático de un gasificador de cisco de café de lecho fijo downdraft. In *Nanotechnology*.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.cej.2014.10.020><http://dx.doi.org/10.1016/j.apcatb.2013.08.019><http://dx.doi.org/10.1016/j.tsf.2016.12.015>
- Babu, B. V., & Chaurasia, A. S. (2004). Heat transfer and kinetics in the pyrolysis of shrinking biomass particle. *Chemical Engineering Science*, 59(10), 1999–2012.
<https://doi.org/10.1016/j.ces.2004.01.050>
- Babu, B. V., & Chaurasia, A. S. (2012). *Transferencia de calor y cinética en la pirólisis de partículas de biomasa que se contraen*. 59(2004), 1999–2012.
- Barrera Zapata, R., Pérez Bayer, J. F., & Salazar Jiménez, C. (2014). Colombian coals: classification and thermochemical characterization for energy applications. *Revista ION*, 27(2), 43–54.
http://apps.webofknowledge.com.etechnology.com.etc.conicyt.idm.oclc.org/full_record.do?product=SCIELO&search_mode=GeneralSearch&qid=44&SID=4Bsd1xY6XMQ7quQiYfU&page=1&do

c=22&cacheurlFromRightClick=no

Basu, P. (2010). *Biomass Gasification and Pyrolysis Practical Design* (First Edit). Elsevier.

<http://library1.nida.ac.th/termpaper6/sd/2554/19755.pdf>

Bruch, C., Peters, B., & Nussbaumer, T. (2003). Modelling wood combustion under fixed bed

conditions. *Fuel*, 82(6), 729–738. [https://doi.org/10.1016/S0016-2361\(02\)00296-X](https://doi.org/10.1016/S0016-2361(02)00296-X)

Castells, X. E., & García, E. V. (2005). *La pirólisis: Tratamiento y valorización de residuos* (1st

ed., Vol. 1, Issue 1). Editorial Ediciones Díaz de Santos.

Castillo, J. (2014). Determinación de parámetros fisicoquímicos y cinéticos de la degradación

térmica de broza y cascarilla de café para ser utilizados en simulaciones computacionales

del proceso de gasificación Informe. In *Journal of Chemical Information and Modeling*.

Cengel, B. (2012). *Termodinamica* (Septima). Mc Graw Hill.

Cengel, Y. A. (2007). *Transferencia de Calor y Masa, un enfoque practico*.

Collier, A. R., Hayhurst, A. N., Richardson, J. L., & Scott, S. A. (2004). The heat transfer

coefficient between a particle and a bed (packed or fluidised) of much larger particles.

Chemical Engineering Science, 59(21), 4613–4620.

<https://doi.org/10.1016/j.ces.2004.07.029>

Daugaard, D. E., & Brown, R. C. (2003). Enthalpy for pyrolysis for several types of biomass.

Energy and Fuels, 17(4), 934–939. <https://doi.org/10.1021/ef020260x>

- Di Blasi, C., Branca, C., Sparano, S., & La Mantia, B. (2003). Drying characteristics of wood cylinders for conditions pertinent to fixed-bed countercurrent gasification. *Biomass and Bioenergy*, 25(1), 45–58. [https://doi.org/10.1016/S0961-9534\(02\)00180-0](https://doi.org/10.1016/S0961-9534(02)00180-0)
- Do Vale, A. T., Gentil, L. V., Gonzalez, J. C., & Da Costa, A. F. (2007). Caracterização energética e rendimento da carbonização de resíduos de grãos de café (*Coffea arabica*, L) e de madeira (*Cedrelinga catenaeformis*), Duke. *Cerne*, 13(4), 416–420.
- Fatehi, H., & Bai, X. S. (2014). A comprehensive mathematical model for biomass combustion. *Combustion Science and Technology*, 186(4–5), 574–593. <https://doi.org/10.1080/00102202.2014.883255>
- Fatehi, M., & Kaviany, M. (1994). Adiabatic reverse combustion in a packed bed. *Combustion and Flame*, 99(1), 1–17. [https://doi.org/10.1016/0010-2180\(94\)90078-7](https://doi.org/10.1016/0010-2180(94)90078-7)
- Fernandez, L. E. G. (2011). Obtención de gas combustible a partir de la gasificación de biomasa en un reactor de lecho fijo. *Universidad Nacional de Colombia*, 112.
- Frank Incropera, David P. Dewitt, Theodore L. Bergman, A. S. L. (2005). *Fundamentals of Heat and Mass Transfer* (Sixth Edit).
- Gómez, M. A., Porteiro, J., Patiño, D., & Míguez, J. L. (2014). CFD modelling of thermal conversion and packed bed compaction in biomass combustion. *Fuel*, 117(PART A), 716–732. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2013.08.078>

- Gómez, M. A., Porteiro, J., Patiño, D., & Míguez, J. L. (2015). Fast-solving thermally thick model of biomass particles embedded in a CFD code for the simulation of fixed-bed burners. *Energy Conversion and Management*, *105*, 30–44.
<https://doi.org/10.1016/j.enconman.2015.07.059>
- Gronli, M. (1996). *A Theoretical and Experimental Study of the Thermal Degradation of Biomass*. Norwegian University of Science and Technology.
- Hagge, M. J., & Bryden, K. M. (2002). Modeling the impact of shrinkage on the pyrolysis of dry biomass. *Chemical Engineering Science*, *57*(14), 2811–2823.
[https://doi.org/10.1016/S0009-2509\(02\)00167-7](https://doi.org/10.1016/S0009-2509(02)00167-7)
- Haseli, Y., van Oijen, J. A., & de Goey, L. P. H. (2011). A detailed one-dimensional model of combustion of a woody biomass particle. *Bioresource Technology*, *102*(20), 9772–9782.
<https://doi.org/10.1016/j.biortech.2011.07.075>
- Ismail, T. M., Abd El-Salam, M., Monteiro, E., & Rouboa, A. (2016). Eulerian - Eulerian CFD model on fluidized bed gasifier using coffee husks as fuel. In *Applied Thermal Engineering* (Vol. 106). Elsevier Ltd. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2016.06.102>
- Jacobo, P. F. (2005). Desarrollo de un Modelo Estático y Dinámico de Combustión de Partículas de Biomasa en Lecho Fijo y Contraste Experimental. Aplicación a una Caldera de Baja Potencia. In *Universidad De Vigo, Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales*.
- Jeguirim, M., Bikai, J., Elmay, Y., Limousy, L., & Njeugna, E. (2014). Thermal characterization

and pyrolysis kinetics of tropical biomass feedstocks for energy recovery. *Energy for Sustainable Development*, 23, 188–193. <https://doi.org/10.1016/j.esd.2014.09.009>

Levine I. N. (1991). *Fisicoquímica*. Mc Graw Hill.

<https://riunet.upv.es/bitstream/handle/10251/144727/Atarés - Gases ideales y gases reales.pdf?sequence=1>

Lu, H., Ip, E., Scott, J., Foster, P., Vickers, M., & Baxter, L. L. (2010). Effects of particle shape and size on devolatilization of biomass particle. *Fuel*, 89(5), 1156–1168.

<https://doi.org/10.1016/j.fuel.2008.10.023>

Minkova, V., Razvigorova, M., Bjornbom, E., Zanzi, R., Budinova, T., & Petrov, N. (2001).

Effect of water vapour and biomass nature on the yield and quality of the pyrolysis products from biomass. *Fuel Processing Technology*, 70(1), 53–61. [https://doi.org/10.1016/S0378-3820\(00\)00153-3](https://doi.org/10.1016/S0378-3820(00)00153-3)

Niño, Y. (2002). Método de los Volúmenes Finitos. *Revista de Ingeniería, Universidad de Chile*.

Nolasco Chávez, I. A. (2016). Estudio de factibilidad sobre el sometimiento del cascabillo de café por un proceso de briquetado, para su utilización como sustituto del carbón vegetal.

Trabajo de Grado. Universidad de San Carlos de Guatemala. Obtenido de

<http://www.repositorio.usac.edu.gt/3351/>

Nordon, P., & Bainbridge, N. W. (1979). Some properties of char affecting the self-heating

reaction in bulk. *Fuel*, 58(6), 450–455. [https://doi.org/10.1016/0016-2361\(79\)90087-5](https://doi.org/10.1016/0016-2361(79)90087-5)

Ouedraogo, A., Mulligan, J. C., & Cleland, J. G. (1998). A quasi-steady shrinking core analysis of wood combustion. *Combustion and Flame*, 114(1–2), 1–12.
[https://doi.org/10.1016/S0010-2180\(97\)00291-5](https://doi.org/10.1016/S0010-2180(97)00291-5)

Palchonok, G. (1998). *Heat and mass transfer to a single particle in fluidized bed*.
<http://publications.lib.chalmers.se/publication/1246-heat-and-mass-transfer-to-a-single-particle-in-fluidized-bed>

Patankar, S. V. (1980). *Numerical heat transfer and fluid flow*.

Porteiro, J., Míguez, J. L., Granada, E., & Moran, J. C. (2006). Mathematical modelling of the combustion of a single wood particle. *Fuel Processing Technology*, 87(2), 169–175.
<https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2005.08.012>

Roa, M. (2003). *Potencialidad del café y sus residuos rurales como cultivo energético*. (p. 112). Cenicafé.

Saenger, M., Hartge, E. U., Werther, J., Ogada, T., & Siagi, Z. (2001). Combustion of coffee husks. *Renewable Energy*, 23(1), 103–121. [https://doi.org/10.1016/S0960-1481\(00\)00106-3](https://doi.org/10.1016/S0960-1481(00)00106-3)

Santamaria, J.; Rückert, F. U.; Förtsch, D.; Sprich, J.; Staiger, B.; Berger, R. (n.d.). *Numerical Simulation of a Grate Firing System for Biomass*. 1–12.

Smith, J. M. (1981). *Chemical Engineering Kinetics* (McGraw-Hil).

- Ström, H., & Thunman, H. (2013). CFD simulations of biofuel bed conversion: A submodel for the drying and devolatilization of thermally thick wood particles. *Combustion and Flame*, *160*(2), 417–431. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2012.10.005>
- Suarez, J. A., & Beaton, P. A. (2003). Physical properties of Cuban coffee husk for use as an energy source. *Energy Sources*, *25*(10), 953–959.
<https://doi.org/10.1080/00908310390232406>
- Suarez, J. A., Beaton, P. A., Luengo, C. A., & Felfli, F. F. (2003). Coffee husk briquettes: A new renewable energy source. *Energy Sources*, *25*(10), 961–967.
<https://doi.org/10.1080/00908310390232415>
- Tabarés, J. L., Granada, E., Moran, J., Porteiro, J., Murillo, S., & López González, L. M. (2006). Combustion behavior of Spanish lignocellulosic briquettes. *Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization and Environmental Effects*, *28*(6), 501–515.
<https://doi.org/10.1080/009083190913647>
- Thunman, H., Leckner, B., Niklasson, F., & Johnsson, F. (2002). Combustion of wood particles - A particle model for Eulerian calculations. *Combustion and Flame*, *129*(1–2), 30–46.
[https://doi.org/10.1016/S0010-2180\(01\)00371-6](https://doi.org/10.1016/S0010-2180(01)00371-6)
- Tinaut, F. V., Melgar, A., Pérez, J. F., & Horrillo, A. (2008). Effect of biomass particle size and air superficial velocity on the gasification process in a downdraft fixed bed gasifier. An experimental and modelling study. *Fuel Processing Technology*, *89*(11), 1076–1089.

<https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2008.04.010>

Trubetskaya, A., Beckmann, G., Wadenbäck, J., Holm, J. K., Velaga, S. P., & Weber, R. (2017).

One way of representing the size and shape of biomass particles in combustion modeling.

Fuel, 206, 675–683. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2017.06.052>

V. K. Bulgakov, A. M. L. (1983). *Combustion of condensed material with blowing*. 19, 600.

Yin, C., Rosendahl, L., Kær, S. K., & Condra, T. J. (2004). Use of numerical modeling in design

for co-firing biomass in wall-fired burners. *Chemical Engineering Science*, 59(16), 3281–

3292. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2004.04.036>

Zanzi, R., Sjöström, K., & Björnbom, E. (1996). Rapid high-temperature pyrolysis of biomass in

a free-fall reactor. *Fuel*, 75(5), 545–550. [https://doi.org/10.1016/0016-2361\(95\)00304-5](https://doi.org/10.1016/0016-2361(95)00304-5)

Anexos

Anexo A

A.1. El Método De Los Volúmenes De Control

El método de los volúmenes de control finitos permite discretizar y resolver numéricamente ecuaciones diferenciales. Partiendo de la consideración de una malla para discretizar un espacio se crea en torno a cada punto de esta malla un volumen de control que no se solapa con los volúmenes de control vecinos, de esta forma el volumen total resulta ser igual a la suma de los volúmenes de control considerados. La ecuación diferencial a resolver se integra sobre cada volumen de control, lo cual genera como resultado una versión discretizada de dicha ecuación. Para poder realizar la integración se requiere especificar perfiles de variación de la variable dependiente entre los puntos de la malla, y de este modo poder evaluar las integrales resultantes. El efecto es que la ecuación discretizada contiene los valores de la variable dependiente para un grupo de puntos de la rejilla.

A.1.1. Discretización de Ecuaciones Diferenciales.

El presente modelo se basa en la premisa de poder discretizar las ecuaciones diferenciales que describen los fenómenos de la combustión para cada capa planteada de la partícula y a partir de ellas generar un sistema de ecuaciones $N \times N$ que se resolverán mediante métodos algebraicos clásicos. En este punto es válido indicar la forma de discretización que se aplicará al modelo.

Partiendo del caso más simple para un fenómeno de transferencia de calor, un problema de calor unidimensional en estado estable, se tendrá entonces la siguiente ecuación:

$$(A.1) \quad \frac{d}{dx} \left(k \frac{dT}{dx} \right) + S = 0$$

Donde k es el coeficiente de conducción térmica, T es la temperatura y S es un término fuente que en nuestro caso representa la tasa de generación o consumo de calor por unidad de volumen. La figura A.1 muestra una discretización típica para el presente método, el punto P , perteneciente a la malla tiene como vecinos los puntos W y E , respectivamente a la izquierda y derecha, las distancias entre los puntos P y W es $(\delta x)_w$, mientras que la distancia entre P y E es $(\delta x)_e$ entre los puntos W y P está el punto w que corresponde al límite izquierdo del volumen de control que rodea a P , mientras el punto e representa el límite derecho de dicho volumen. La distancia entre las dos fronteras limítrofes del volumen de control en torno a P es Δx . Dadas las condiciones establecidas al inicio, se tendrá entonces que el volumen de control en torno a P será $\Delta x \times 1 \times 1$. Nótese que cada volumen de control representados en la figura por las zonas coloreadas para cada punto de la malla esa establecido de tal forma que el centro dentro del mismo coincida con un punto de la malla.

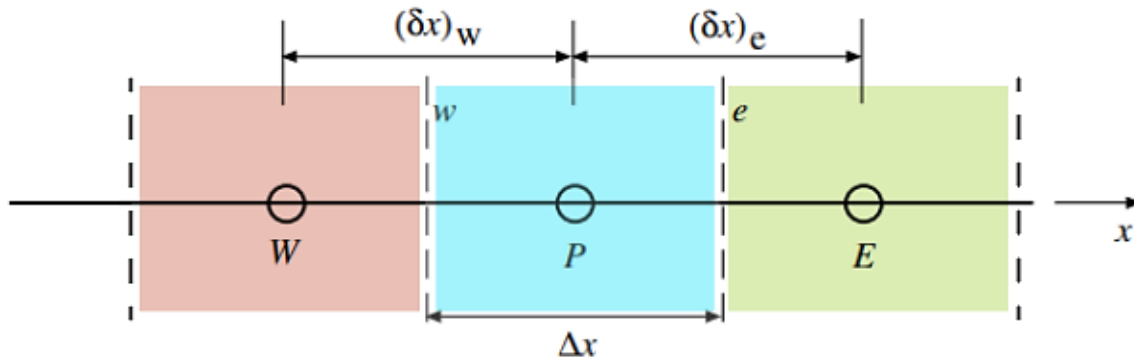
Si se integra la ecuación (A.1) en el volumen de control considerado se tiene que:

$$(A.2) \quad \int_w^e \frac{d}{dx} \left(k \frac{dT}{dx} \right) dx + \int_w^e S = 0$$

$$(A.3) \quad \left(k \frac{dT}{dx}\right)_e - \left(k \frac{dT}{dx}\right)_w + \int_w^e S = 0$$

Anexo 1.

Malla de discretización para el método de volúmenes finitos.



Si se define $\int_w^e S = \bar{S}\Delta x$, la ecuación (A.3) se puede reescribir de la siguiente forma:

$$(A.4) \quad \left(k \frac{dT}{dx}\right)_e - \left(k \frac{dT}{dx}\right)_w + \bar{S}\Delta x = 0$$

Para evaluar las derivadas de T en los puntos w y e se requiere hacer una suposición respecto de la variación de T en el volumen de control. Dos suposiciones sencillas se plantean en la figura A.2. La suposición (a) paso constante, no es adecuada ya que las derivadas en los puntos w y e (las caras del perfil del volumen de control del punto P) no están definidas, por tanto, se escogerá la suposición (b) un paso lineal, para el cual las derivadas valen:

$$(A.5) \quad \left(k \frac{dT}{dx}\right)_w = k_w \frac{T_P - T_W}{(\delta x)_w}$$

$$(A.6) \quad \left(k \frac{dT}{dx}\right)_e = k_e \frac{T_E - T_P}{(\delta x)_e}$$

Insertando las ecuaciones (A.5) y (A.6) en la ecuación (A.4), se obtiene:

$$(A.7) \quad k_e \frac{T_E - T_P}{(\delta x)_e} - k_w \frac{T_P - T_W}{(\delta x)_w} + \bar{S} \Delta x = 0$$

La ecuación (A.7) ya cumple el objetivo deseado, es una discretización de la ecuación diferencial de calor unidimensional en estado estable (A.1) desde la que se partió. Para finalizar se puede transformar la ecuación discretizada de la siguiente forma:

$$(A.8) \quad a_p T_p = a_E T_E + a_W T_W + b$$

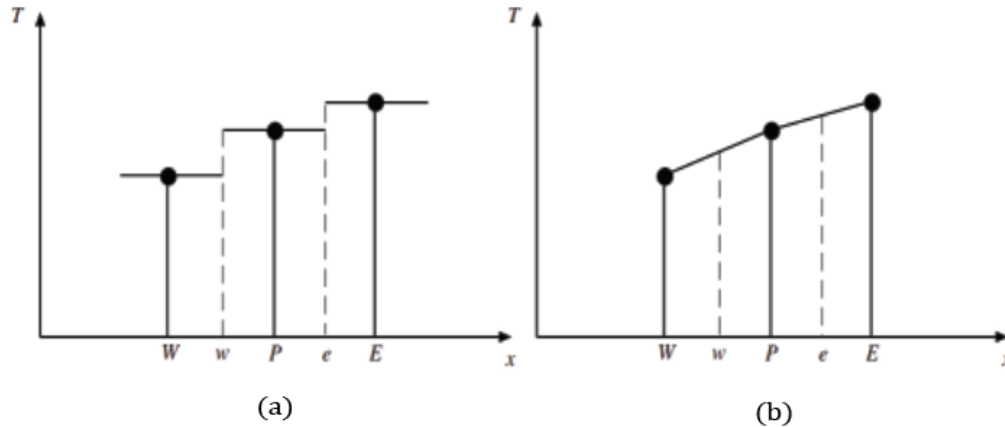
donde:

$$a_E = \frac{k_e}{(\delta x)_e}; a_W = \frac{k_w}{(\delta x)_w}; a_p = a_E + a_W; b = \bar{S} \Delta x$$

Esta ecuación indica que la temperatura en P puede expresarse en función de la temperatura en los puntos W y E.

Anexo 2.

Casos simples de funciones de interpolación de la variable de integración dentro del volumen de control. (a) Stepwise; (b) piecewise linear.



A.1.2. El Coeficiente De Conducción En La Frontera.

Para el planteamiento del modelo matemático se considerará un sólido compuesto por varios volúmenes de control, cada uno compuesto por un único material, pero diferentes entre capas, por lo tanto, cada volumen de control tendrá un único coeficiente de conductividad k . Ahora surge la pregunta de que k utilizar en la frontera (llamada a partir de ahora interfase) entre dos volúmenes de control. Patankar (1980) plantea que este valor se consigue por medio de una interpolación, donde retomando lo mostrado en la figura A.2, el caso más simple sería considerar la interpolación como lineal. Si se suponen conocidos k_E y k_P , aplicando una interpolación lineal se tiene que:

$$(A.9) \quad k_e = f_e k_P + (1 - f_e) k_E$$

Donde:

$$(A.10) \quad f_e = \frac{(\delta x)_{e+}}{(\delta x)_e}$$

Si se supone que la interfaz e esta a igual distancia de los puntos P y E $f_e = 0.5$ y la ecuación (A.9) será el promedio aritmético, sin embargo Patankar (1980), advierte de que este resultado genera graves errores en algunos sistemas, y matemáticamente impide la convergencia de los modelos, razón por la cual sugiere una mejor linealización que parte de dos premisas, suponer en primera instancia que el valor k se mantiene constante en todo el volumen de control (premisa que se mencionó al inicio de la sección) y por otra parte se supone la no existencia de S en el problema. En dicho caso la ecuación (A.1) tiene solución analítica:

$$(A.11) \quad \left(k \frac{dT}{dx} \right) = C_1$$

Donde C_1 representa una constante. El objetivo último de realizar la interpolación para la interfaz entre dos volúmenes de control es evaluar el flujo en e de forma adecuada, lo que matemáticamente se puede representar como:

$$(A.12) \quad \left(k \frac{dT}{dx} \right) = k_e \frac{T_E - T_P}{(\delta x)_e}$$

Integrando (A.10) entre P y e y luego entre e y E y aplicando algo de aritmética básica se logra despejar la constante C_1 . Igualando este resultado a la ecuación (A.11) se logra establecer una expresión para el cálculo de k_e .

$$(A.13) \quad k_e = \left(\frac{(1 - f_e)}{k_p} + \frac{f_e}{K_E} \right)^{-1}$$

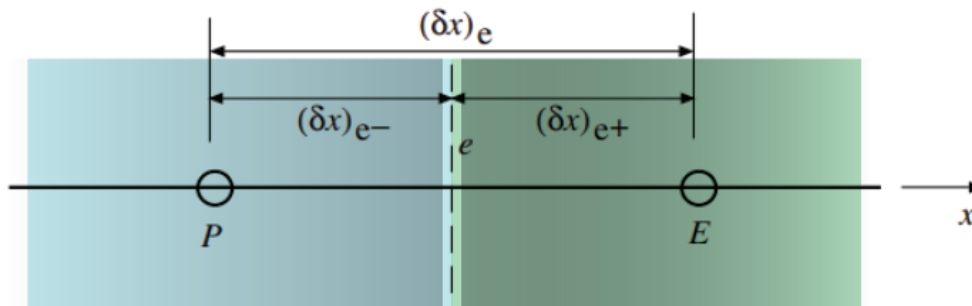
Aplicando nuevamente la consideración de que $f_e = 0.5$, se obtiene que k_e es igual a:

$$(A.14) \quad k_e = 2 \frac{k_p k_E}{k_p + k_E}$$

La ecuación anterior representa un promedio armónico en lugar de un promedio aritmético como inicialmente se había planteado en (A.9). Para el presente modelo (A.12) será la expresión que se utilizará para el modelamiento del coeficiente de conducción en la interfase.

Anexo 3.

Distancias asociadas con la interfase e.



A.1.3. Linealización Del Término Fuente.

El termino fuente se puede asumir de la siguiente forma:

$$(A.15) \quad \bar{S} = S_0 + S_1 T_p$$

Donde se resalta la importancia de linealizar el termino fuente si este llegara a no serlo, lo cual requiere determinar los coeficientes S_0 y S_1 , con la condición adicional que $S_1 < 0$ para generar una convergencia rápida y suave del modelo, Patankar (1980). En el caso del modelo de combustión muchos de los componentes del término fuente dependen de un valor T , por lo tanto, se puede considerar la función $S(T)$, aplicando series de Taylor y truncando el termino de primer orden se logra la relación lineal mostrada a continuación:

$$(A.16) \quad S = S^* + \left(\frac{dS}{dx}\right)^* (T - T^*)$$

Donde $S^* = S(T^*)$ y $(dS/dx)^*$ es el gradiente de S evaluado en T^* , para T_p se tiene que (A.15) se convierte en:

$$(A.17) \quad S_p = S^* + \left(\frac{dS}{dx}\right)^* (T_p - T^*)$$

Si se comparan (A.14) y (A.16) se llega a que:

$$(A.18) \quad S_0 = S^* - \left(\frac{dS}{dx}\right)^* (T_p - T^*)$$

$$(A.19) \quad S_1 = \left(\frac{dS}{dx}\right)^*$$

Con (A.17) y (A.18) se pueden calcular S_0 y S_1 para un volumen de control dado si se conoce el valor de T^* , que representa, el valor de T_p en la iteración previa.

el cual corresponde a “medio volumen de control”, dado que existe solo entre B y la frontera i del volumen de control construido en torno al primer punto interior de la malla.

Integrando (A.1) entre B e i se obtiene:

$$(A.20) \quad \int_B^i \frac{d}{dx} \left(k \frac{dT}{dx} \right) dx + \int_B^i S dx = 0$$

De donde resulta:

$$(A.21) \quad \left(k \frac{dT}{dx} \right)_i - \left(k \frac{dT}{dx} \right)_B + \bar{S} \Delta x = 0$$

El flujo de T en la dirección x está dado por:

$$(A.22) \quad q = k \frac{dT}{dx}$$

Por lo tanto, la ecuación (A.20) se puede reescribir como:

$$(A.23) \quad q_i = -q_B + (S_0 + S_1 T_B) \Delta x = 0$$

Donde q_B denota el flujo en B, que es conocido dado que esta es la condición de borde en análisis, q_i corresponde al flujo a través de i y se ha linealizado el termino fuente de modo de expresar: $\bar{S} = S_0 + S_1 T_B$. El flujo q_i puede estimarse tal como se ha hecho antes, suponiendo una función de interpolación de paso lineal.

$$(A.24) \quad q_i = - \left(k \frac{dT}{dx} \right)_i = k \frac{T_B - T_i}{(\delta x)_i}$$

Insertando (A.23) en (A.22) y con algo de manipulación algebraica se llega a una ecuación para estimar T_B :

$$(A.25) \quad a_B T_B = a_I T_I + b$$

donde:

$$a_I = \frac{k_i}{(\delta x)_i}; \quad a_B = a_I - S_1 \Delta x; \quad b = S_0 \Delta x + q_B$$

A.1.5. Conducción Unidimensional Transitoria.

Como primer paso para el análisis en flujo transitorio se eliminará el termino fuente por simplicidad, ya que su incorporación posterior en las ecuaciones discretizadas es directa. La ecuación considera será:

$$(A.26) \quad \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right)$$

Donde ρ denota densidad y C_p calor específico, los cuales se suponen constantes. Para el presente trabajo esta suposición se fundamenta en la forma en la que fue planteado el modelo, al trabajar el modelo como un sistema con volúmenes de control donde el calor penetra desde el exterior hasta el centro y al tiempo que se realiza una transferencia de calor también se va generando una transferencia de masa de la partícula con el ambiente se puede entender que la capa más externa para un volumen de control dado experimenta un aumento de temperatura que puede generar un cambio en sus propiedades, pero dicha capa al tiempo está siendo transformada o

eliminada del modelo, por lo cual en términos globales las propiedades como el calor específico o la densidad permanecen constantes.

Para (A.25) la solución procederá en el tiempo a partir de una distribución inicial de temperatura. Por lo tanto, para un paso de tiempo dado se debe lograr que dados los valores de T en los puntos de la malla en un tiempo t , determinar los valores de T en el tiempo $t + \Delta t$. Si se llama T_W^0, T_P^0 y T_E^0 , a los valores “antiguos” (en el tiempo t) de T en los puntos W, P y E , respectivamente, y T_W^1, T_P^1 y T_E^1 a los valores “nuevos” (en el tiempo $t + \Delta t$) de T en los mismos puntos.

La ecuación discretizada se determina integrando (A.25) en el volumen de control de la figura A.1 sobre el intervalo de tiempo que va desde t hasta $t + \Delta t$:

$$(A.27) \quad \rho C_p \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial T}{\partial t} dt dx = \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) dt dx$$

Para integrar el lado izquierdo de (A.26) se supone que el valor de T_P prevalece en todo el volumen de control, de modo que:

$$(A.28) \quad \rho C_p \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial T}{\partial t} dt dx = \rho C_p \Delta x (T_P^1 - T_P^0)$$

La integración espacial se realiza como se realizó en (1.7):

$$(A.29) \quad \rho C_p \Delta x (T_P^1 - T_P^0) = \int_t^{t+\Delta t} \left[\frac{k_e (T_E - T_P)}{(\delta x)_e} - \frac{k_w (T_P - T_W)}{(\delta x)_w} \right] dt$$

Para realizar la integración en el intervalo de t hasta $t + \Delta t$ se tiene que hacer una suposición acerca de cómo varían T_W , T_P y T_E . En el trabajo se toma la suposición que Patankar (1980), utiliza en sus planteamientos.

$$(A.30) \quad \int_t^{t+\Delta t} T_p dt = [f T_p^1 + (1-f)T_p^0]\Delta t$$

Donde f denota un factor de peso ponderado que varia entre 0 y 1.

Realizando un tratamiento similar para las integrales de T_W y T_E , se obtiene que:

$$(A.31) \quad \rho C_p \frac{\Delta x}{\Delta t} (T_P^1 - T_P^0) = f \left[\frac{k_e (T_E^1 - T_P^1)}{(\delta x)_e} - \frac{k_w (T_P^1 - T_W^1)}{(\delta x)_w} \right] +$$

$$(1-f) \left[\frac{k_e (T_E^0 - T_P^0)}{(\delta x)_e} - \frac{k_w (T_P^0 - T_W^0)}{(\delta x)_w} \right]$$

Con manipulación algebraica se obtiene:

$$(A.32) \quad a_p T_P^1 = a_E [f T_E^1 + (1-f)T_E^0] + a_w [f T_W^1 + (1-f)T_W^0]$$

$$+ [a_p^0 - (1-f)a_E - (1-f)a_w] T_P^0$$

Donde:

$$a_E = \frac{k_e}{(\delta x)_e}; \quad a_w = \frac{k_w}{(\delta x)_w}; \quad a_p^0 = \frac{\rho C_p \Delta x}{\Delta t}; \quad a_p = f a_E + f a_w + a_p^0$$

Dependiendo de los valores escogidos para f , la discretización anterior se reduce a alguno de los siguientes esquemas de discretización: para $f = 0$, se obtiene el esquema explícito, para $f = 1$, se obtiene el esquema implícito y para $f = 0.5$, se obtiene el esquema Crank-Nicolson. En el presente trabajo se usará el esquema implícito, ya que el esquema explícito presenta problemas de convergencia y suposiciones poco realistas que se evidencian al realizar el desarrollo matemático suponiendo $f = 0$, al tiempo que el esquema Crank-Nicolson no genera resultados físicamente realistas, por ejemplo si se considerara un intervalo Δt grande, la variación lineal de T_p en el intervalo de tiempo sería poco realista, pues el comportamiento físico se asemejaría más a un incremento exponencial.

A.1.6. Solución Del Sistema De Ecuaciones.

El método utilizado para la solución del conjunto de ecuaciones, particularmente adecuado cuando este conjunto de ecuaciones se resuelve mediante iteraciones, particularmente efectivo cuando el problema es no lineal, es el método de Gauss-Seidel punto a punto. Si se considera una ecuación general tal que:

$$(A.33) \quad a_p T_p = \sum a_i T_i + b$$

Esta se resuelve de la siguiente forma:

$$(A.34) \quad T_p = \frac{\sum a_i T_i^* + b}{a_p}$$

Donde T_i^* representa el valor de T_i en la iteración anterior o bien el actualizado si este ya está disponible.

A.1.7. Factores Sobre Y Baja Relajación Para La Convergencia Del Modelo.

En el proceso de solución iterativa se utilizan los factores de sobre y baja relajación para acelerar o desacelerar los cambios en la variable dependiente iteración a iteración. Con Gauss-Seidel punto a punto se suele usar la sobre relajación para acelerar el proceso de convergencia; por el contrario, es usual usar baja relación para evitar divergencia en la solución de problemas no lineales complejos.

Sea:

$$(A.35) \quad T_p = \frac{\sum a_i T_i + b}{a_p}$$

y sea T_p^* el valor de T_p de la iteración anterior. Sumando y restando T_p^* se tiene:

$$(A.36) \quad T_p = T_p^* + \left(\frac{\sum a_i T_i + b}{a_p} - T_p^* \right)$$

Donde el termino entre paréntesis corresponde al cambio de T_p con respecto a la iteración previa. Introduciendo un coeficiente α para acelerar o desacelerar la convergencia se tiene:

$$(A.37) \quad T_p = T_p^* + \alpha \left(\frac{\sum a_i T_i + b}{a_p} - T_p^* \right)$$

Mientras más cerca este T_p^* de la solución exacta el termino entre paréntesis estará más cerca de cero. Si $0 < \alpha < 1$ se tiene un caso de baja relajación, por el contrario, cuando $\alpha > 1$ se tiene sobre relajación.

Patankar (1980) afirma al respecto que la correcta definición del valor α depende de la experiencia del investigador y de un caso de repetición por prueba y error dependiendo del caso de estudio y los fines perseguidos.