

**ANÁLISIS DEL COMPORTAMIENTO FLUIDODINÁMICO DE LA
SUSPENSIÓN BAGAZO DE CAÑA DE AZÚCAR-AGUA EN
TUBOS CON MEZCLADORES ESTÁTICOS**

NATALIA PRIETO JIMÉNEZ

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FISCOQUÍMICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BUCARAMANGA**

2008

**ANÁLISIS DEL COMPORTAMIENTO FLUIDODINÁMICO DE LA
SUSPENSIÓN BAGAZO DE CAÑA DE AZÚCAR-AGUA EN
TUBOS CON MEZCLADORES ESTÁTICOS**

NATALIA PRIETO JIMÉNEZ

**Trabajo de grado presentado como requisito para optar al título
de Ingeniera Química**

Director:

Ph.D Rubens Maciel Filho

Universidad Estatal de Campinas

Lector

Ph.D Álvaro Ramírez García

Universidad Industrial de Santander

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FISCOQUÍMICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BUCARAMANGA**

2008

A mis padres Erasmo y María Helena,

A mis hermanos Fernando y Diana,

Por su amor incondicional.

AGRADECIMIENTOS

A Dios por la vida y por colocar al alcance de mi mano todo cuanto necesito.

A mi familia, que siempre estuvieron a mi lado durante todo el proceso de formación profesional y espiritual, ofreciéndome el apoyo y la ayuda necesaria para llevar a cabo mis propósitos y cumplir mis metas a cabalidad. Son ellos el motivo de inspiración.

A la Universidad Industrial de Santander y su cuerpo de maestros por estos años de excelente academia.

A la Universidad Estatal de Campinas por proporcionarme las instalaciones físicas y recursos computacionales indispensables en el desarrollo de este proyecto.

Al Doctor Álvaro Ramírez por su grandiosa colaboración, al Doctor Rubens Maciel por depositar su confianza en mí y al Doctor Ramiro Martínez por su ejercicio de director de la escuela de Ingeniería Química.

A mis amigos Raquel, Jaiver, Germán, Aulus, Arturo, Julie, Laura, Mark, Yurany, Romildo, Davi, Leonardo; así como todas las personas en Colombia y Brasil que aportaron su granito de arena para que mi permanencia en Brasil fuera más agradable.

TABLA DE CONTENIDO

1	INTRODUCCIÓN	1
2	REVISIÓN BIBLIOGRAFICA	3
2.1	BAGAZO DE CAÑA DE AZÚCAR.....	3
2.2	PRODUCCIÓN DE ETANOL A PARTIR DE BIOMASA LIGNOCELULÓSICA	4
2.2.1	Biomasa Lignocelulósica.....	4
2.2.2	Actividad de las Enzimas	5
2.3	SUSPENSIONES FIBROSAS	5
2.4	TUBOS CON MEZCLADORES ESTÁTICOS.....	7
2.4.1	Tipos de mezclador estático.....	7
2.5	SIMULACIÓN UTILIZANDO FLUIDODINÁMICA COMPUTACIONAL (CFD).....	8
2.5.1	Discretización de las ecuaciones de Navier – Stokes	10
2.6	MODELOS DE TURBULENCIA	13
2.6.1	Modelos de Turbulencia de Dos Ecuaciones	14
2.6.2	Formulación matemática del modelo κ - ϵ	15
3	METODOLOGÍA	16
3.1	FORMULACIÓN DE LOS CASOS DE ESTUDIO.....	16
3.2	SIMULACIÓN NUMÉRICA (CFD): ESPECIFICACIÓN DEL PROBLEMA Y CONDICIONES INICIALES	17
3.2.1	Caudal de operación y velocidad de la suspensión.....	17
4	RESULTADOS Y DISCUSIÓN	19
4.1	GENERACIÓN Y REFINAMIENTO DE LA MALLA.....	19
4.2	PERFIL DE VELOCIDAD	19
4.3	ESFUERZO DE CORTE	22
4.4	ENERGÍA CINÉTICA TURBULENDA (κ) Y TASA DE DISIPACIÓN TURBULENDA (ϵ) ..	24
4.5	CAÍDA DE PRESIÓN POR UNIDAD DE LONGITUD EN LA TUBERÍA.....	25
5	CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES	27
5.1	CONCLUSIONES	27

5.2	RECOMENDACIONES	28
6	BIBLIOGRAFIA	29
7	ANEXOS	35
7.1	ANEXO A	35
7.2	ANEXO B	41
7.3	ANEXO C	47
7.4	ANEXO D	50

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1: Diagrama de flujo de la producción de etanol a partir de biomasa lignocelulósica (Wyman <i>et al.</i> , 1993).	4
Figura 2.2: Esquema de las fibras de celulosa dentro de la matriz de biomasa Lignocelulósica. Fuente modificada: Hopkins, 1998	5
Figura 2.3: Mezcladores estáticos. a) Mezclador estático tipo Kenics. b) Mezclador estático tipo Sulzer SMX. c) Mezclador estático tipo Sulzer SMV.....	8
Figura 2.4: Algoritmo general para la solución de un problema de CFD en ANSYS-CFX®. Fuente: Dasari, 2004.	11
Figura 3.1: Metodología para la realización del proyecto.....	16
Figura 3.2: Plano de corte superior del tubo con deflectores. a) tubería completa. b) Detalle de los deflectores.	16
Figura 4.1: Configuración de la malla. a) Detalle de la malla a la entrada del tubo. b) Vista longitudinal.	19
Figura 4.2: Perfil de velocidad a) Tubo liso b) $\theta = 120^\circ$	19
Figura 4.3: Perfil de velocidad a) $\theta = 90^\circ$ b) $\theta = 0^\circ$	20
Figura 4.4: Distribución de la velocidad en el centro del tubo.	21
Figura 4.5: Cambio de La actividad de la enzima hemicelulasa a diferentes tasas de corte. Fuente modificada: Kaya <i>et al.</i> , 1996.....	23
Figura 4.6: Distribución del esfuerzo de corte radial en el vértice de uno de los deflectores del tubo.	23
Figura 4.7: Perfiles de energía cinética turbulenta y tasa de disipación turbulenta.....	25
Figura 4.8: Perfil de presión a lo largo de la tubería.	26
Figura A. 1: Especificaciones técnicas del tubo liso ($\theta = 180^\circ$).....	37
Figura A. 2: Especificaciones técnicas para $\theta = 120^\circ$	38
Figura A. 3: Especificaciones técnicas para $\theta = 90^\circ$	39
Figura A. 4: Especificaciones técnicas para $\theta = 0^\circ$	40
Figura D. 1: Energía cinética y tasa de disipación turbulenta para el tubo liso.	51
Figura D. 2: Energía cinética y tasa de disipación turbulenta para $\theta = 120^\circ$	51
Figura D. 3 Energía cinética y tasa de disipación turbulenta para $\theta = 90^\circ$	52

Figura D. 4: Energía cinética y tasa de disipación turbulenta para $\theta = 0^\circ$	52
Figura D. 5: Caída de presión en la tubería. a) Tubo liso $\theta=180^\circ$. b) $\theta=120^\circ$	53
Figura D. 6Caída de presión en la tubería. a) $\theta=90^\circ$ b) $\theta=0^\circ$	53

LISTA DE TABLAS

Tabla 2.1: Composición aproximada del bagazo de caña de azúcar. Fuente: Roca <i>et al.</i> , 2006.....	3
Tabla 2.2: Resumen de los modelos de turbulencia de dos ecuaciones. Fuente: Ranade, 2002.....	14
Tabla 4.1: Factor de presión para las diferentes configuraciones de la tubería.....	26
Tabla B. 1: Resumen de los ensayos realizados para determinar WRV y la densidad de las partículas mojadas.....	44
Tabla B. 2: Resumen de las correlaciones para la caracterización del bagazo de caña de azúcar.....	46
Tabla C. 1: Software utilizado en las simulaciones.....	48
Tabla C. 2: Estadísticas de la malla utilizada en la simulación.....	49

NOMENCLATURA

Ar : Número de Arquímedes.

C_D : Coeficiente de arrastre.

$\overline{d_F}$: Diámetro medio de las partículas (definición de Sauter).

$\overline{D_i}$: Diámetro medio de la abertura del tamiz superior e inferior (mm).

P_κ : Generación de turbulencia debida a las fuerzas viscosas.

$P_{\kappa b}$: Generación de turbulencia debida a la flotabilidad.

Re : Número de Reynolds.

U : Vector velocidad.

V_{0L} : Volumen total del lecho.

V_{0p} : Volumen de las partículas.

V_{0v} : Volumen de los espacios vacíos.

V_t : Velocidad terminal (Velocidad de arrastre).

WRV : Water Retention Volume.

δ : Tensor unitario.

Δx_i : Fracción másica retenida en el tamiz i .

ε : Tasa de disipación turbulenta.

ε' : Porosidad.

θ : Ángulo de separación entre las líneas de los deflectores.

κ : Energía cinética turbulenta.

λ : Calor latente.

μ : Viscosidad.

μ_t : Viscosidad turbulenta o viscosidad de remolino.

ρ : Densidad del fluido.

ρ_a : Densidad aparente del lecho de partículas.

ρ_p : Densidad real de las partículas.

τ : Esfuerzo de corte.

ω : Frecuencia de turbulencia

RESUMEN

TÍTULO: ANÁLISIS DEL COMPORTAMIENTO FLUIDODINÁMICO DE LA SUSPENSIÓN BAGAZO DE CAÑA DE AZÚCAR - AGUA EN TUBOS CON MEZCLADORES ESTÁTICOS*

AUTOR: NATALIA PRIETO JIMÉNEZ**

PALABRAS CLAVE: Hidrólisis Enzimática, Suspensión, Fluidodinámica Computacional, Mezcladores Estáticos, Simulación.

DESCRIPCIÓN: La hidrólisis enzimática de biomasa lignocelulósica es una tecnología promisoría para la obtención de glucosa y otros productos químicos de enorme importancia como el etanol. El diseño adecuado del sistema de reacción de hidrólisis enzimática a escala industrial requiere del conocimiento de la cinética de la reacción y de la fluidodinámica de la suspensión sólido-líquido. Este trabajo se enfoca en el estudio del comportamiento fluidodinámico y las propiedades de transporte de la suspensión bagazo de caña-agua en tubos con mezcladores estáticos internos. El objetivo es evaluar factores como la caída de presión por unidad de longitud, distribución de velocidad y distribución del esfuerzo de corte en el sistema de reacción. Se propone una tubería con deflectores angulares internos en la cual se varía el ángulo de separación ($\theta = 0^\circ, 90^\circ, 120^\circ, 180^\circ$) entre las aristas del deflector. La simulación se realizó con una herramienta de fluidodinámica computacional (CFD) conocida como ANSYS-CFX[®], utilizando el modelo estándar $k-\epsilon$ para describir la turbulencia. Los resultados de la simulación muestran que a menor θ mayor caída de presión ($\theta=0^\circ$: $-\Delta P/L=3,54 \times 10^{-2}$ MPa, $\theta=90^\circ$: $-\Delta P/L=1,76 \times 10^{-2}$ MPa, $\theta=120^\circ$: $-\Delta P/L=2,39 \times 10^{-3}$ MPa, $\theta=180^\circ$: $-\Delta P/L=1,28 \times 10^{-4}$ MPa). El esfuerzo de corte sigue la misma tendencia de la caída de presión, pero se necesitan datos de desactivación mecánica del complejo enzimático celulasa para evaluar su efecto en el sistema de reacción. El perfil de velocidad alrededor de los deflectores indica que para $\theta=0^\circ$ y $\theta=90^\circ$ hay retromezcla. La magnitud de la velocidad de la suspensión está dentro de los rangos recomendados por la literatura ($1,0 < v < 2,5$ m/s).

* Trabajo de Grado

** Facultad de Ingenierías Físicoquímicas. Escuela de Ingeniería Química. Director: Ph.D Rubens Maciel Filho, Universidad Estatal de Campinas. Lector: Ph.D Álvaro Ramírez García, Universidad Industrial de Santander

ABSTRACT

TITLE: ANALYSIS OF WATER - SUGAR-CANE BAGASSE SUSPENSION FLUID DYNAMICS BEHAVIOR IN PIPES WITH STATIC MIXERS*

AUTHOR: NATALIA PRIETO JIMÉNEZ**

KEY WORDS: Enzymatic Hydrolysis, Suspension, Computational Fluid Dynamics, Static Mixers, Simulation.

DESCRIPTION: Enzymatic hydrolysis of lignocellulosic biomass is a promissory technology to obtain glucose and other chemicals products of big importance as ethanol is. The proper design of the enzymatic hydrolysis reaction system at an industrial scale requires kinetics knowledge of reactions and of fluid dynamic from solid-liquid suspension. This work is focused on the study of fluid dynamics behavior and the properties of transport of sugar-cane bagasse suspension in pipes with internal static mixers. The objective is assessing factors such as pressure drop by units of length, velocity distribution and shear stress distribution in the reaction system. A pipe with internal angular deflectors in which the separation's angle varies ($\theta=0^\circ$, 90° , 120° , 180°) it's proposed. The simulation was made with a computational fluid dynamics tool (CFD) known as ANSYS-CFX®, using the standard model κ - ϵ , to describe the turbulence. The simulations results show that the smaller the θ the highest the pressure drop ($\theta=0^\circ$: $-\Delta P/L=3,54 \times 10^{-2}$ MPa, $\theta=90^\circ$: $-\Delta P/L=1,76 \times 10^{-2}$ MPa, $\theta=120^\circ$: $-\Delta P/L=2,39 \times 10^{-3}$ MPa, $\theta=180^\circ$ - $\Delta P/L=1,28 \times 10^{-4}$ MPa). The shear stress follows the same tendency of pressure drop, but the data of the mechanics deactivation of the cellulase enzymatic complex is necessary to assess its effect in the reaction system. The profile of velocity around deflectors indicate that for $\theta=0^\circ$ and $\theta=90^\circ$ there is backmixing. The velocity magnitude of suspension is inside the recommended ranks for the literature ($1,0 < v < 2,5$ m/s).

* Work of Degree

**School of Chemical Engineering. Director: Ph.D Rubens Maciel Filho, Estate University of Campinas. Reader: Ph.D Álvaro Ramírez García, Industrial University of Santander.

1 INTRODUCCIÓN

Una de las preocupaciones del mundo actual es el abastecimiento de energía en las próximas décadas. El petróleo, materia prima fósil no renovable, aún representa el 40% de la energía utilizada en el mundo, y hasta el 2020 el consumo saltará de los actuales 85 millones de barriles/día a 110 millones de barriles/día. Este cálculo se basa en un crecimiento del PIB mundial del orden de 2% al año. Debido a que gran parte del calentamiento global es atribuido a la quema de combustibles de origen fósil; existe una tendencia mundial de ampliar la matriz energética con el uso de combustibles de origen renovable (**Jornal da Unicamp, 2007**).

Actualmente el alcohol se extrae del jugo que sale de la trituración de la caña, pero "ese jugo suministra sólo un tercio de la energía posible de ser extraída, los otros dos tercios están exactamente en la paja y en el bagazo" (**SBPC, 2008**).

Uno de los procedimientos más promisorios para la producción de etanol es mediante hidrólisis enzimática seguida de un proceso de fermentación a partir de biomasa lignocelulósica (proveniente del bagazo de caña de azúcar) previamente pretratada, debido a que las condiciones de operación (Temperatura 50°C, pH 4,8) son más suaves comparadas con la hidrólisis ácida (**Um, 2007**)

El estudio teórico y práctico de sistemas que envuelven una fase dispersa como el caso de la suspensión bagazo de caña-agua es de bastante interés a nivel de ingeniería debido a su complejidad por el comportamiento higroscópico y la heterogeneidad de las partículas sólidas (**Quintana et al., 2006**), así como la interacción que tiene la suspensión (sustrato) y la enzima cuando entran en contacto.

La agitación es un factor importante en el diseño de reactores para hidrólisis donde una enzima líquida actúa sobre un sustrato sólido, por lo tanto, se requiere una mezcla adecuada que permita la transferencia de masa y el contacto suficiente dentro del reactor. Sin embargo, estudios demuestran que la mezcla excesiva puede ocasionar desactivación de la enzima reduciendo la producción de etanol (**Kaya et al., 1996; Gan et al., 2003**).

Los mezcladores estáticos constituyen una valiosa alternativa a los tanques agitados convencionales para la aplicación en procesos continuos debido a que la homogenización se alcanza utilizando la energía de flujo del fluido (**Pahl y Muschelknautz, 1982; Galhego, 2005**) sin recurrir a costos adicionales de energía.

En este trabajo se realiza el análisis de las propiedades fluidodinámicas y de transporte de la suspensión de 5 % (W/V base seca) de bagazo de caña-agua en diferentes configuraciones de tubo con deflectores angulares internos mediante el uso de técnicas de fluidodinámica computacional (CFD) en un software comercial conocido como ANSYS-CFX®.

2 REVISIÓN BIBLIOGRAFICA

2.1 BAGAZO DE CAÑA DE AZÚCAR

La caña de azúcar es una de las fuentes más ricas de carbohidratos de la naturaleza, de 1 Tonelada de caña de azúcar se obtiene 150 Kg de azúcares fermentables y 125 Kg de bagazo seco que alcanza entre un 26 y un 29% del peso de la caña molida. En la tabla 2.1 se muestra la composición aproximada del bagazo de caña.

Tabla 2.1: Composición aproximada del bagazo de caña de azúcar. Fuente: **Roca et al., 2006**

Compuesto	Composición (%)
Celulosa	43
Xílanos	25
Lignina	23
Heteroxílanos	3
Extractos (incluyendo Sacarosa)	4
Cenizas	2

Algunas de sus propiedades son: Humedad: 46-52 %; sólidos particulados: 40-46 %; y sólidos solubles: 6-8 %. Desde el punto de vista físico, se distinguen dos características muy importantes en el bagazo de caña: el alto contenido de humedad debida a su carácter higroscópico y la gran variedad de tamaños de partículas de diferente naturaleza física (**Quintana et al., 2006; Roca et al., 2006**).

2.2 PRODUCCIÓN DE ETANOL A PARTIR DE BIOMASA LIGNOCELULÓSICA

El etanol puede ser producido a partir de Biomasa Lignocelulósica por medio de hidrólisis y fermentación de azúcares (Um, 2002). En este proceso, la biomasa es pretratada para reducir el tamaño de la materia prima y abrir la estructura de la planta, las porciones de celulosa y hemicelulosa son desagregadas (hidrolizadas) por enzimas o ácidos a sacarosa que posteriormente son fermentadas a etanol (Figura 2.1) (Wyman, 1996).

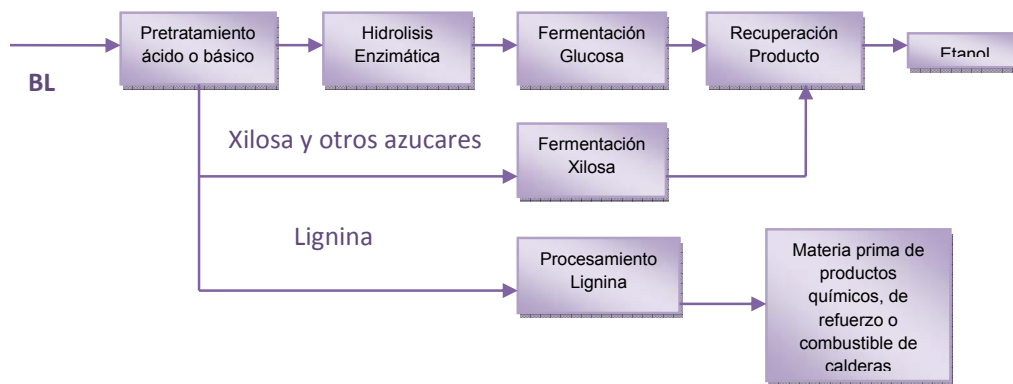
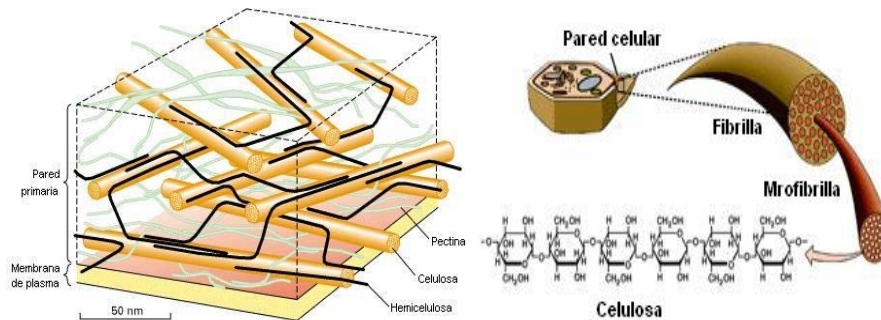


Figura 2.1: Diagrama de flujo de la producción de etanol a partir de biomasa lignocelulósica (Wyman *et al.*, 1993).

2.2.1 Biomasa Lignocelulósica

Los materiales estructurales que producen las plantas para formar las paredes celulares, hojas, tallo, ramas, y porciones de la biomasa del tronco, están compuestos principalmente de celulosa, hemicelulosa y lignina, juntas son llamadas “lignocelulosa”; un material compuesto de fibras rígidas de celulosa alojadas en una matriz de lignina y hemicelulosa (Figura 2.2). Esta biomasa al ser

sumergida en agua se transforma en una *suspensión fibrosa* (Fan et al., 1987).



O

Figura 2.2: Esquema de las fibras de celulosa dentro de la matriz de biomasa Lignocelulósica. Fuente modificada: Hopkins, 1998

2.2.2 Actividad de las Enzimas

Las enzimas son usualmente proteínas de alto peso molecular que actúan como catalizadores. Existen varios factores que afectan la actividad de la enzima durante la reacción de hidrólisis, el más importante es el esfuerzo de corte relacionado con la intensidad de agitación. Otro factor que puede afectar la actividad de la enzima es mediante la exposición a una interfase aire-líquido o la formación de burbujas de aire dentro de la tubería (Kaya et al., 1996).

2.3 SUSPENSIONES FIBROSAS

El estudio del comportamiento de las suspensiones fibrosas, ha sido un tema de vital importancia debido a su complejidad; el tratamiento de los modelos para este tipo de suspensiones se realiza de manera numérica utilizando los métodos de elementos y volúmenes finitos

principalmente (**Sánchez et al., 2002**). **Baloch y Webster, 1995** realizaron un estudio numérico para flujos de suspensiones fibrosas diluidas a través de varias geometrías de contracción y expansión, **Chiba y Nakamura, 1998** desarrollaron simulaciones numéricas acerca de la orientación de las fibras de una suspensión diluida en un canal con expansión brusca, haciendo un análisis de la turbulencia que incluye parámetros como la longitud de vórtice.

Pande et al., 1999 encontraron una expresión empírica para la caída de presión por unidad de longitud en función de la velocidad para tres tipos de suspensiones fibrosas diluidas no maderables en tuberías. **Petrie, 1999**; realizó una revisión detalla sobre la reología de las suspensiones fibrosas, teniendo como base para los modelos la teoría denominada “órbitas de Jeffery” para el movimiento de una elipsoide sencilla en un fluido Newtoniano; esta teoría dice que por fuera del movimiento Browniano, una partícula se mueve en una órbita que es independiente del tiempo y esta órbita particular es determinada por la orientación inicial de la partícula (**Jeffery, 1922**).

En este trabajo, la concentración de la suspensión bagazo de caña-agua sometida a análisis es de 5.0 % (W/V base seca). Por lo tanto se puede clasificar dentro de los modelos de suspensiones diluidas, los cuales emplean las siguientes suposiciones básicas:

- i. La longitud de la fibra es mucho menor que cualquier dimensión de flujo.
- ii. El líquido de la suspensión es incompresible (en este caso agua a 50°C).
- iii. Los efectos de la inercia y del movimiento de rotación Browniana pueden ser ignorados (**Petrie, 1999**).

2.4 TUBOS CON MEZCLADORES ESTÁTICOS

Los tubos con mezcladores estáticos internos se modelan para su utilización como reactores tubulares. Los deflectores se clasifican en transversales y longitudinales; dispuestos de manera simétrica, asimétrica o mixta. Estos deflectores se aplican en la industria de los procesos químicos principalmente para asegurar la mezcla completa de los componentes sin recurrir a gastos adicionales de energía con agitadores mecánicos (**Mendoza, 2004**).

El mezclador estático constituye una valiosa alternativa a los tradicionales tanques agitados (mezclador dinámico). Además, el mezclador estático puede sustituir el proceso batch convencional por un proceso continuo, proporcionando ganancias en la producción (**Godfrey, 1985**). Con los mezcladores dinámicos, las distribuciones longitudinal y transversal de los componentes a ser mezclados se logran por medio de elementos móviles (agitadores); con los mezcladores estáticos, la homogenización se alcanza utilizando la energía de flujo del fluido (**Pahl y Muschelknautz, 1982**).

2.4.1 Tipos de mezclador estático

Armeniades, 1966 elaboró un de mezclador estático con baja generación de pérdida de carga el cual es utilizado actualmente por la empresa Chemineer Inc. con la marca *Kenics* (Figura 2.3a). El desempeño de este mezclador estático ha sido investigado ampliamente (**Arimond y Erwin, 1985b; Dackson y Nauman, 1987; Ling y Zhang, 1995; Kumar et al., 2008**).

Tauscher y Schutz, 1973 desarrollaron un mezclador estático para régimen laminar de canales múltiples con baja generación de pérdida de carga para la empresa Sulzer Bros., denominado *Sulzer SMX* (Figura 2.3b). Diversas versiones de este mezclador fueron creadas, permitiendo su empleo en flujos turbulentos, como es el caso del mezclador estático tipo *Sulzer SMV* (Figura 2.3c).

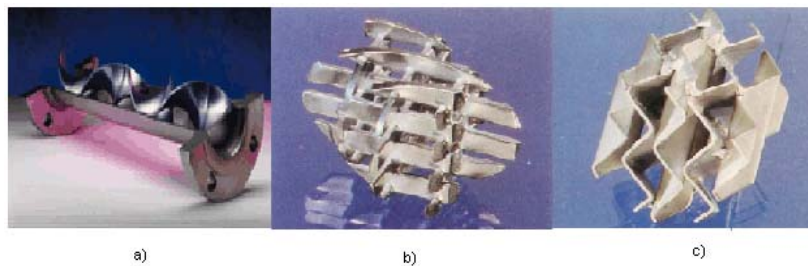


Figura 2.3: Mezcladores estáticos. a) Mezclador estático tipo Kenics. b) Mezclador estático tipo Sulzer SMX. c) Mezclador estático tipo Sulzer SMV.

Soluciones numéricas que involucran flujos en tuberías con mezcladores estáticos han sido objeto de investigación (**Regner et al., 2006; Kumar et al., 2007; Krepper et al., 2008; Lindenberg et al., 2008**) utilizando como herramienta fundamental diferentes tipos de software de fluidodinámica computacional (CFD).

2.5 SIMULACIÓN UTILIZANDO FLUIDODINÁMICA COMPUTACIONAL (CFD)

Existen tres alternativas fundamentales para el análisis de un problema de ingeniería:

- ⌘ Métodos analíticos.
- ⌘ Métodos numéricos (experimentación numérica).
- ⌘ Experimentación en el laboratorio.

Los métodos analíticos y numéricos se consideran métodos teóricos, la diferencia entre ellos radica en la complejidad de las ecuaciones diferenciales del modelo matemático que cada uno puede desenvolver. La gran ventaja de la experimentación en el laboratorio es el hecho de trabajar con la configuración real. Sin embargo, involucra un altísimo costo y muchas veces no puede realizarse por cuestiones de seguridad (transferencia de calor en el núcleo de reactores nucleares), o por la dificultad de reproducir las condiciones reales (flujo supersónico a grandes alturas). La simulación numérica prácticamente no representa restricciones siendo capaz de resolver problemas con geometrías complejas y condiciones generales de frontera, mostrando resultados con extrema rapidez. Por lo tanto, la asociación adecuada entre simulación numérica y experimentación en el laboratorio, da como resultado un proyecto de mejor calidad y más económico (**Maliska, 2004**).

La fluidodinámica computacional (CFD) ha evolucionado desde un pequeño y cerrado grupo de entusiastas a una grande y promisoría empresa. Gracias al desarrollo de computadores de alta velocidad, los avances en la investigación con CFD aumentan rápidamente así como sus campos de aplicación (**Um, 2007**).

La aplicación de la fluidodinámica computacional se encuentra en **ANSYS CFX, Inc., 2006**:

- ⌘ **Procesos industriales:** Tanques de mezcla, reactores químicos.
- ⌘ **Servicios en edificaciones:** Ventilación, distribución de agua.
- ⌘ **Salud y seguridad:** Efectos del fuego y el humo en las personas.
- ⌘ **Industria automovilística:** combustión y aerodinámica del automóvil.
- ⌘ **Electrónica:** Transferencia de calor dentro y alrededor de las placas de circuitos electrónicos.

- ⌘ **Medio ambiente:** Dispersión de contaminantes en el aire o en el agua.
- ⌘ **Potencia y energía:** Optimización de procesos de combustión.
- ⌘ **Ciencias medicas:** Flujo a través de vasos sanguíneos.

Los códigos CFD describen flujos de fluidos basados en las ecuaciones de conservación de masa, energía y momento. Existen dos maneras de solucionarlo: El método *Eureliano-Lagrangiano* y el método *Eureliano-Eureliano*. El primero depende de la solución de las ecuaciones de Navier Stokes para el fluido en fase continua y de la solución de las ecuaciones Lagrangianas para cada una de las partículas consideradas, el segundo supone que el menor de los fluidos está penetrando continuamente al otro (**Krepper et al., 2008**).

El modelo para el transporte de la suspensión bagazo de caña-agua en ANSYS-CFX[®] se puede implementar como un flujo multifase donde las partículas constituyen una fase dispersa en la cual cada partícula interactúa con el fluido y con otras partículas discretamente. El método utilizado por el software para determinar el comportamiento de esta fase es realizar un seguimiento de las partículas individuales en el campo de flujo. Este rastreo se utiliza para describir el comportamiento medio de la fase dispersa. Este método se conoce como *Particle Tracking* (**ANSYS CFX, Inc., 2006**).

2.5.1 Discretización de las ecuaciones de Navier – Stokes

La solución analítica de las ecuaciones de Navier – Stokes solo se aplica para flujos simples en condiciones ideales, por eso para la solución de flujos reales en ingeniería se recurre a reemplazar las ecuaciones por aproximaciones algebraicas de manera que puedan solucionarse por un método numérico (**ANSYS CFX, Inc., 2006**).

Una malla se define como la representación discreta del dominio de solución. Existen dos tipos de mallas; estructuradas y no estructuradas, la ventaja de las mallas no estructuradas radica en la flexibilidad de los volúmenes de control además de la posibilidad de su refinamiento local, permitiendo un mayor control del dominio. Aunque la solución de las ecuaciones algebraicas para este tipo de mallas involucra más tiempo computacional, en la mayoría de los casos la solución del campo de flujo es mucho más precisa que aquel que posea una malla estructurada (**Ranade, 2002**). El algoritmo general utilizado por ANSYS-CFX[®] para solucionar un problema de CFD se muestra en la figura 2.4:

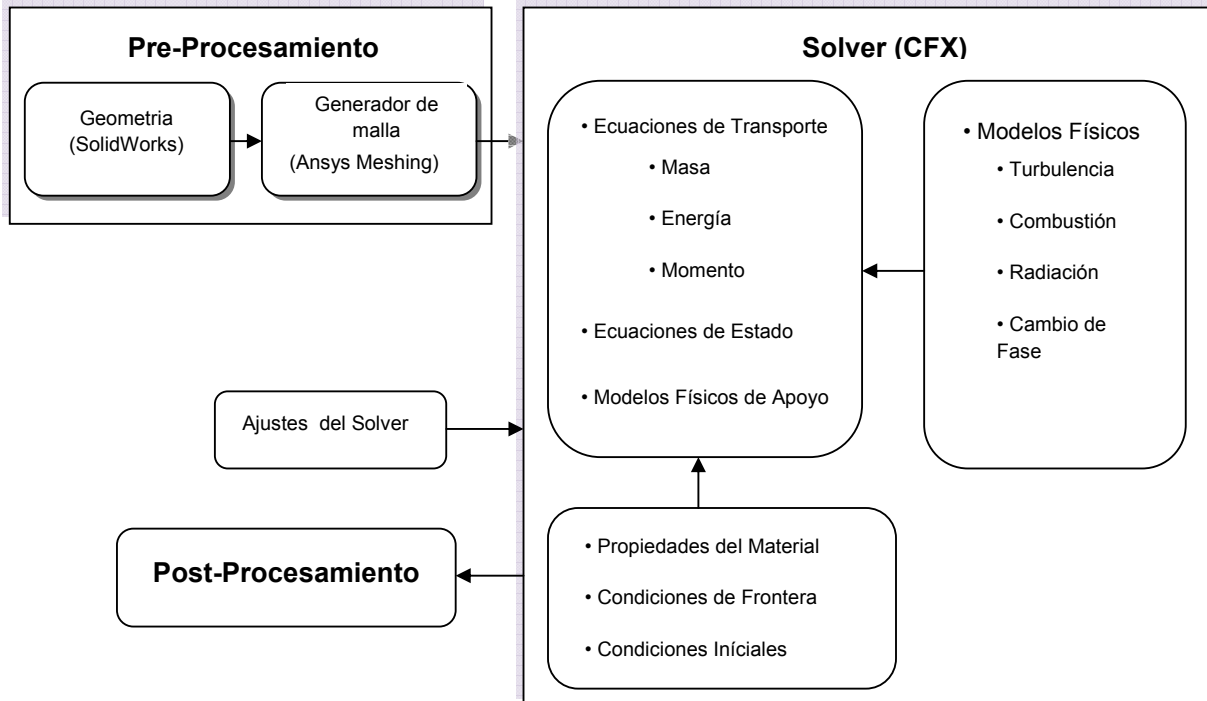


Figura 2.4: Algoritmo general para la solución de un problema de CFD en ANSYS-CFX[®]. Fuente: **Dasari, 2004**.

Las ecuaciones básicas que describen el flujo laminar en un fluido continuo son (ANSYS CFX, Inc., 2006):

Conservación de masa (ecuación de continuidad):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) = 0 \quad (1.1)$$

Conservación de Momento:

$$\frac{\partial(\rho U)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U U) = -\nabla p + \nabla \tau + S_M \quad (1.2)$$

En donde S_M incluye la fuerza gravitacional y las fuerzas de cuerpo externas. El esfuerzo τ se relaciona con la velocidad de deformación así:

$$\tau = \mu \left(\nabla U + (\nabla U)^T - \frac{2}{3} \delta \nabla U \right) \quad (1.3)$$

Donde μ es la viscosidad, y δ es un tensor unitario. Este último término corresponde al fenómeno de dilatación.

Ecuación de Energía Total:

$$\frac{\partial(\rho h_{tot})}{\partial t} - \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla(\rho U h_{tot}) = \nabla(\lambda \nabla T) + \nabla(U \tau) + U S_M + S_E \quad (1.4)$$

Donde h_{tot} es la entalpía total, la cual se relaciona con la entalpía $h(T,P)$ así:

$$h_{tot} = h + \frac{1}{2} U^2 \quad (1.5)$$

El término $\nabla(U \tau)$ representa el trabajo debido a esfuerzos viscosos.

El término $U S_M$ representa el trabajo debido a las fuentes de momento externas y generalmente se desprecia.

2.6 MODELOS DE TURBULENCIA

Los modelos de turbulencia proveen la solución al problema de cierre de las ecuaciones de Navier-Stokes, debido a que hay diez variables desconocidas (presión media, tres componentes de la velocidad y seis componentes del esfuerzo de Reynolds) y solo cuatro ecuaciones (balance de masa y tres ecuaciones de balance de momento, una para cada componente de la velocidad). El problema fundamental del modelamiento de la turbulencia se relaciona con la solución de los seis componentes del esfuerzo de Reynolds (**Um, 2007**).

Han sido propuestos diferentes modelos para representar la turbulencia, específicamente en flujos gas-líquido (**Lahey, 1987; Lane et al., 1999**) y gas-sólido (**Sommerfeld, 1993; Bolio et al., 1995; Peirano, 1998**). La base de la mayoría de estos estudios se relaciona con modelos de dos ecuaciones (**Crowe et al., 1996**).

La turbulencia en la fase dispersa puede comprenderse físicamente como las fluctuaciones de la velocidad de la partícula causadas por las colisiones entre partículas y las interacciones con la fase continua (**Balzer et al., 1995**). El flujo turbulento está también asociado con altos valores de fricción, arrastre y caída de presión. Sin embargo, en la mayoría de las aplicaciones de ingeniería las ventajas obtenidas con el mejoramiento en el transporte son más valiosas que las pérdidas friccionales (**Ranade, 2002**).

2.6.1 Modelos de Turbulencia de Dos Ecuaciones¹

Los modelos de turbulencia de dos ecuaciones son ampliamente utilizados porque ofrecen un equilibrio entre esfuerzo computacional y precisión numérica. En estos modelos, la velocidad de turbulencia se calcula de la energía cinética turbulenta que proviene de la respectiva ecuación de transporte. La escala de longitud turbulenta se estima a partir de la energía cinética turbulenta κ (variación de las fluctuaciones en la velocidad) que tiene dimensiones de m^2/s^2 en el SI.; y de la tasa de disipación turbulenta que tiene dimensiones de κ por unidad de tiempo (para modelos κ - ϵ) o frecuencia de la turbulencia (para modelos κ - ω) (ANSYS CFX, Inc., 2006):

Tabla 2.2: Resumen de los modelos de turbulencia de dos ecuaciones. Fuente: Ranade, 2002.

Modelo	Ventajas	Desventajas
Estándar κ-ϵ	<ul style="list-style-type: none"> ⌘ Ampliamente utilizado por presentar resultados razonables para la mayoría de los flujos industriales. ⌘ Involucra poco tiempo computacional. ⌘ Apropiado para altos números de Reynolds. 	<ul style="list-style-type: none"> ⌘ Asume isotrópica la viscosidad de remolino. ⌘ Poca precisión en: <ul style="list-style-type: none"> -Flujos no confinados. -Ductos no circulares. -Áreas con fuerte separación de flujo.
RNG κ-ϵ	<ul style="list-style-type: none"> ⌘ Presenta mejores resultados que el modelo estándar en: <ul style="list-style-type: none"> -Grandes remolinos -Separación de flujo ⌘ Trabaja con números de Reynolds relativamente bajos. 	<ul style="list-style-type: none"> ⌘ Asume isotrópica la viscosidad de remolino. ⌘ Hasta ahora no está suficientemente validado.
κ-ω	<ul style="list-style-type: none"> ⌘ No envuelve las complejas funciones no lineales de amortiguamiento que requieren el modelo κ-ϵ. 	<ul style="list-style-type: none"> ⌘ Alta sensibilidad a las condiciones de flujo libre.
BSL κ-ω	<ul style="list-style-type: none"> ⌘ Es una combinación del modelo κ-ω cerca a la pared y el modelo κ-ϵ en el interior. 	<ul style="list-style-type: none"> ⌘ No predice adecuadamente el comienzo y la cantidad de separación de flujo en superficies lisas.
SST	<ul style="list-style-type: none"> ⌘ Proporciona predicciones precisas del inicio y cantidad de separación de flujo bajo gradientes de presión adversos. 	<ul style="list-style-type: none"> ⌘ Requiere un alto esfuerzo computacional.

¹ El análisis de turbulencia en este trabajo se realiza con un modelo de dos ecuaciones debido a que aunque los modelos de esfuerzos de Reynolds tienen en cuenta la anisotropía de la turbulencia; la práctica muestra que éstos modelos a menudo no son superiores a los modelos de dos ecuaciones (Ranade, 2002).

2.6.2 Formulación matemática del modelo κ-ε

El modelo κ-ε resuelve dos ecuaciones de transporte, una para la energía cinética turbulenta κ y otra para la disipación de la turbulencia ε (ANSYS CFX, Inc., 2006):

$$\frac{\partial(\rho\kappa)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U_i \kappa) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\kappa} \right) \nabla \kappa \right] + P_\kappa - \rho \varepsilon \quad (1.6)$$

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U_i \varepsilon) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] + \frac{\rho}{\kappa} (C_{\varepsilon 1} P_\kappa - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon) \quad (1.7)$$

Donde $C_{\varepsilon 1}$, $C_{\varepsilon 2}$, σ_κ y σ_ε son constantes empíricas adimensionales. P_κ [Kg/m s³] Corresponde a la generación de turbulencia debida a fuerzas viscosas y de flotabilidad:

$$P_\kappa = \mu_t \nabla U \cdot (\nabla U + \nabla U^T) - \frac{\rho}{2} \nabla U \cdot (3\mu_t \nabla U + \rho \kappa) + P_{kb} \quad (1.8)$$

En esta expresión P_{kb} corresponde al aporte de la flotabilidad sobre la turbulencia.

La viscosidad turbulenta se relaciona con κ y ε por medio de una constante adimensional (C_μ : tiene un valor de 0.09 proveniente de análisis experimental) así:

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{\kappa^2}{\varepsilon} \quad (1.9)$$

3 METODOLOGÍA

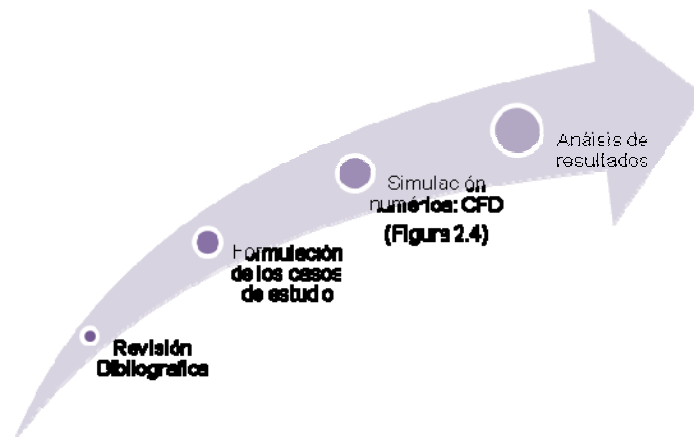


Figura 3.1: Metodología para la realización del proyecto.

3.1 FORMULACIÓN DE LOS CASOS DE ESTUDIO

La propuesta realizada en este proyecto para el análisis del comportamiento fluidodinámico de la suspensión bagazo de caña-agua, corresponde a un tubo con deflectores angulares internos, configurados de manera transversal y simétrica (figura 3.2a):

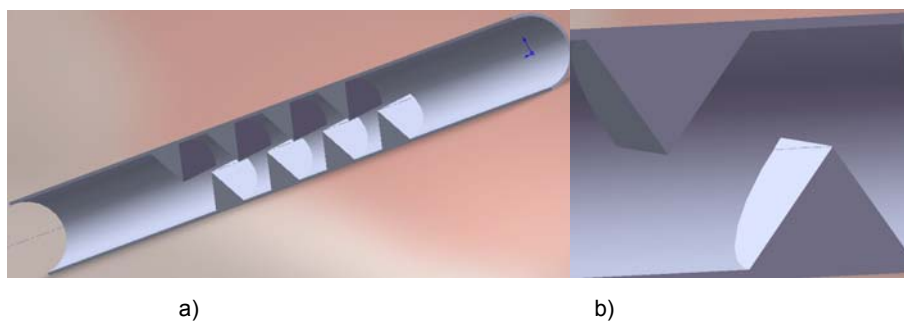


Figura 3.2: Plano de corte superior del tubo con deflectores. a) tubería completa. b) Detalle de los deflectores.

De acuerdo a esto, la variable a analizar es el ángulo θ de separación entre las aristas del deflector (figura 3.2b) con el fin de

encontrar la configuración que se ajuste de manera favorable al flujo de la suspensión dentro del sistema².

Los casos de estudio formulados fueron los siguientes:

- ∞ Tubo liso. Ángulo $\theta = 180^\circ$.
- ∞ Tubo con mezcladores angulares estáticos: Ángulo $\theta = 120^\circ$.
- ∞ Tubo con mezcladores angulares estáticos: Ángulo $\theta = 90^\circ$.
- ∞ Tubo con mezcladores angulares estáticos: Ángulo $\theta = 0^\circ$.

3.2 SIMULACIÓN NUMÉRICA (CFD): ESPECIFICACIÓN DEL PROBLEMA Y CONDICIONES INICIALES³

3.2.1 Caudal de operación y velocidad de la suspensión

Borchert y Buchholz, 1987 diseñaron un reactor tubular para la reacción de hidrólisis enzimática de diferentes materiales celulósicos, en el cual manejaban un caudal alrededor de $80 \text{ m}^3/\text{h}$; mostrando resultados favorables en la producción de glucosa. En este trabajo el caudal de operación es de $67 \text{ m}^3/\text{h}$.

Debido a la necesidad de contacto íntimo e interacción entre el sustrato (bagazo de caña pretratado) y las enzimas en la reacción de hidrólisis enzimática, es necesario que la velocidad dentro del tubo sea baja, de manera que el tiempo de residencia sea considerable. Por lo tanto se escogió una velocidad a la entrada del tubo de 1 m/s como condición inicial.

² Detalles acerca de las especificaciones del tubo para los diferentes casos de estudio se encuentran en el Anexo A

³ Detalles acerca de las condiciones iniciales y de frontera, así como las estadísticas de la malla utilizada se encuentran en los anexos B y C.

La concentración del bagazo de caña de pretratada que entra al sistema es de 5% (W/V) en base seca. La reología de la suspensión fue escogida de acuerdo al análisis experimental realizado por **Um, 2007** el cual mostró que el modelo de ley de potencia $\tau = K\dot{\gamma}^n$ se ajusta de manera físicamente correcta a la suspensión de bagazo de caña, la cual se comporta como un fluido No-Newtoniano de tipo *pseudoplástico*. Los parámetros reológicos son:

K (constante del índice de consistencia) = 0,269 [Pa sⁿ]

n (índice del comportamiento del flujo) = 0,404

R²=0.948.

4 RESULTADOS Y DISCUSIÓN

4.1 GENERACIÓN Y REFINAMIENTO DE LA MALLA

Es importante evaluar la calidad de la malla, debido a que afecta la precisión y robustez de la solución del problema de CFD. Esta malla fue refinada en la región cercana a la pared, de forma que sea posible obtener resultados confiables.

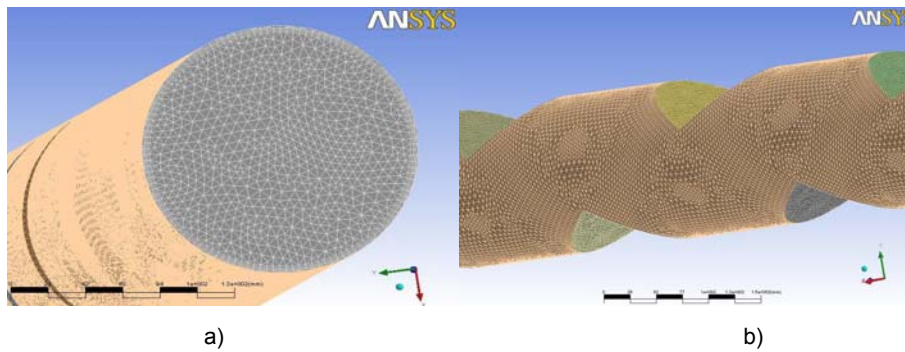


Figura 4.1: Configuración de la malla. a) Detalle de la malla a la entrada del tubo. b) Vista longitudinal.

4.2 PERFIL DE VELOCIDAD

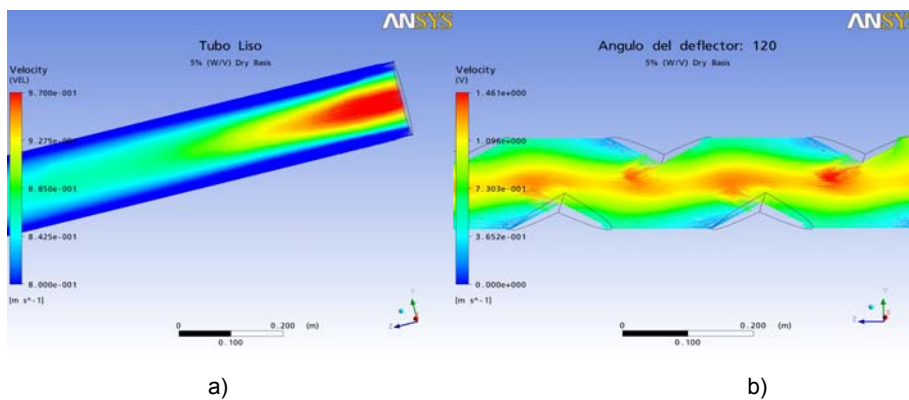


Figura 4.2: Perfil de velocidad a) Tubo liso b) $\theta = 120^\circ$.

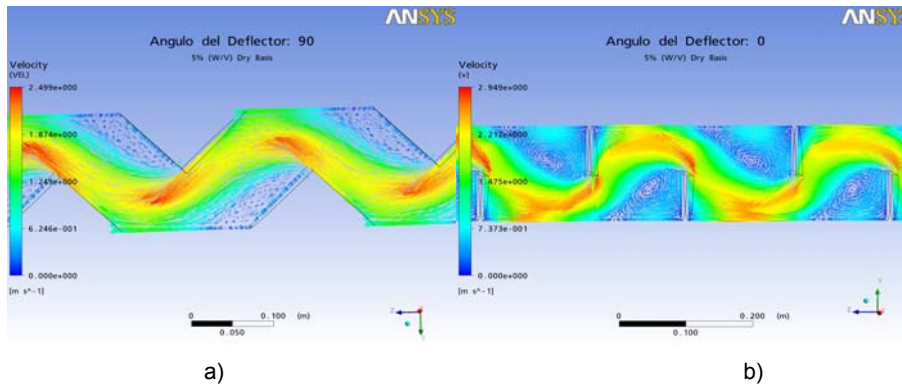


Figura 4.3: Perfil de velocidad a) $\theta = 90^\circ$ b) $\theta = 0^\circ$.

Las figuras 4.2 y 4.3 muestran la distribución de la velocidad de la suspensión a lo largo del tubo para cada geometría. La dirección de flujo va de derecha a izquierda.

Como patrón general, se presenta aumento de la velocidad en el momento que las partículas se encuentran con el vértice de los deflectores. En el tubo liso ($\theta = 180^\circ$) se puede observar que el perfil comienza con una velocidad de 1 m/s a la entrada del tubo, disminuyendo hasta alcanzar un valor constante en el centro. A medida que se reduce el ángulo θ en los tubos con mezcladores estáticos se observa la presencia de remolinos con puntos de velocidad casi nula al final de cada deflector formando retromezcla, lo cual permite el contacto entre el sustrato y la enzima, pero a su vez podría ocasionar estancamiento y acumulación de las partículas dentro de la tubería. Esta hipótesis se basa en el cálculo de la velocidad terminal de las partículas encontrándose un valor de $1,94 \times 10^{-2}$ m/s.

La figura 4.4 muestra la variación de la velocidad en el centro del tubo.

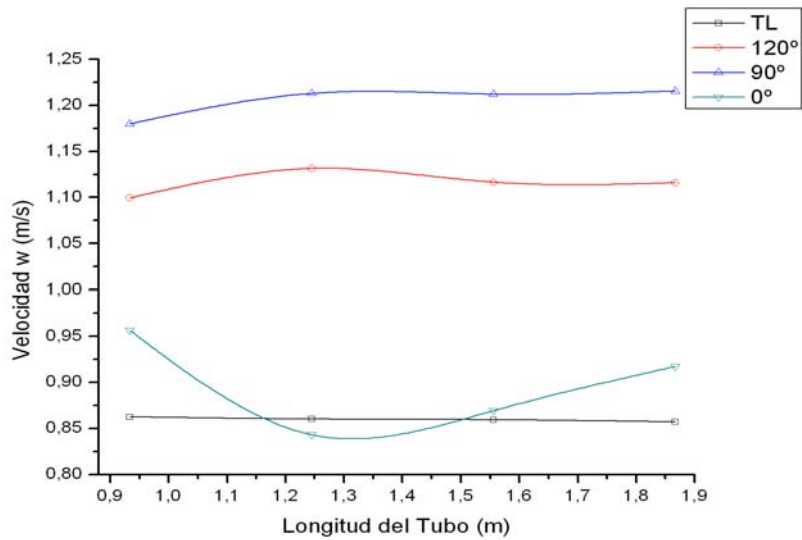


Figura 4.4: Distribución de la velocidad en el centro del tubo.

En la grafica se observa que la velocidad en el centro del tubo para el ángulo $\theta = 0^\circ$ presenta un cambio drástico a una distancia de 1,25 m; lo que aumenta la posibilidad de estancamiento de la partículas, siendo perjudicial para el proceso continuo. Por el contrario, las configuraciones de $\theta = 90^\circ$ y $\theta = 120^\circ$ presentan un perfil suave, alcanzando velocidades máximas de 1,21 y 1,13 m/s respectivamente. La diferencia radica en que a nivel global la velocidad dentro de la tubería con $\theta = 90^\circ$ alcanza un valor máximo de 2,5 m/s (figura 4.3a) lo que posiblemente impediría el contacto suficiente entre el sustrato y la enzima (sin embargo, no se descarta que sea una opción favorable); mientras que el tubo con $\theta = 120^\circ$ alcanza una velocidad máxima de 1,46 m/s, además de ser la configuración con menos zonas susceptibles a estancamiento.

4.3 ESFUERZO DE CORTE

Estudios demuestran que las enzimas que se utilizan comúnmente en la reacción de hidrólisis enzimática (por ejemplo la hemicelulasa) son susceptibles a desactivación cuando se exponen a fluidos con alto esfuerzo de corte, pero que este efecto no es significativo en sistemas de reacción batch (**Gan et al., 2003**). Sin embargo, en sistemas continuos tales como el reactor tubular, ésta es una variable importante a tener en cuenta debido a que valores considerables de esfuerzo de corte podrían aumentar la transferencia de masa, pero a su vez, pueden ocasionar desactivación de la enzima lo que se refleja en una disminución de la producción de glucosa.

La figura 4.5 muestra que el porcentaje de reducción en la actividad de la enzima hemicelulasa es mayor cuando se expone a altas tasas de corte. Por lo tanto, durante el proceso de transporte es necesario buscar tasas de corte que proporcionen un equilibrio entre la transferencia de masa debida a la mezcla y la desactivación mecánica de la enzima. En este trabajo no se tiene en cuenta la desactivación de la enzima por efecto de burbujas de aire dentro del tubo al no presentarse interfase gas-líquido.

El análisis radial del esfuerzo del corte se realizó en el vértice de uno de los deflectores en donde se evidencia que la configuración que presenta el valor más alto corresponde a $\theta = 0^\circ$, se observa además a medida que el ángulo entre las aristas del deflector se torna más suave, el valor del esfuerzo de corte también disminuye (Figura 4.6).

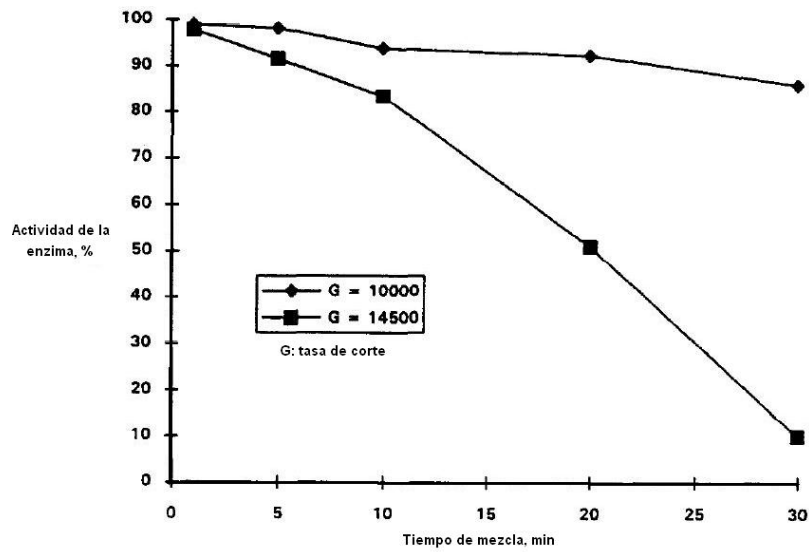


Figura 4.5: Cambio de La actividad de la enzima hemicelulasa a diferentes tasas de corte.
Fuente modificada: *Kaya et al., 1996*

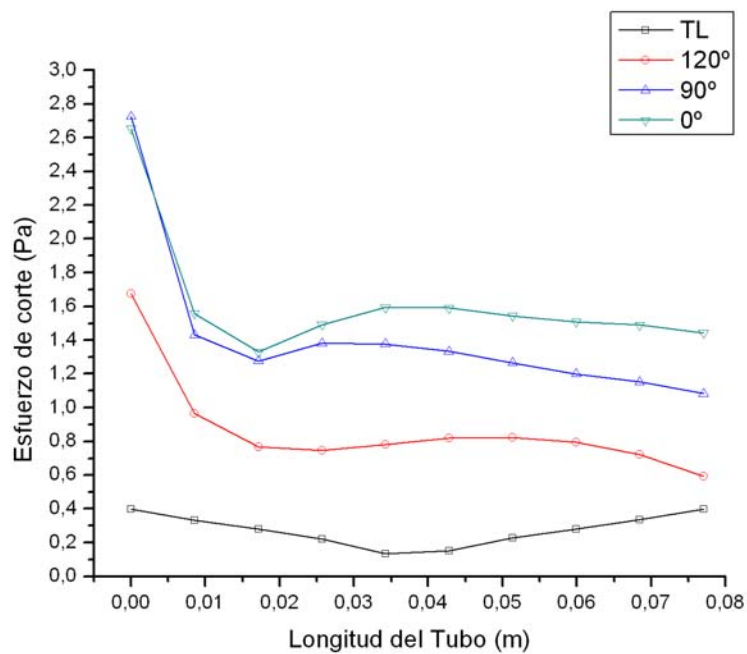


Figura 4.6: Distribución del esfuerzo de corte radial en el vértice de uno de los deflectores del tubo.

4.4 ENERGÍA CINÉTICA TURBULENTO (κ) Y TASA DE DISIPACIÓN TURBULENTO (ϵ)⁴

Teniendo en cuenta que la suspensión se considera como un flujo multifase no Newtoniano en el que las partículas corresponden a la fase dispersa y que las interacciones partícula-partícula y partícula-fluido ocasionan fluctuaciones en la velocidad dentro del campo de flujo, variables como la energía cinética y la tasa de disipación turbulenta deben tenerse en consideración tanto para el transporte como para el sistema de reacción. Por lo tanto, a pesar de que un aumento en los parámetros del modelo de turbulencia (κ y ϵ) favorece la mezcla e interacción entre el sustrato y la enzima, esto a su vez produce esfuerzos de corte altos, lo que podría ocasionar complicaciones.

La figura 4.7 muestra que tanto para la energía cinética turbulenta como para la tasa de disipación turbulenta, el perfil de $\theta = 0^\circ$ y $\theta = 90^\circ$ se encuentra muy cercano, además de tener una diferencia considerable con el perfil de $\theta = 120^\circ$; con base en esto es posible afirmar que a medida que disminuye el ángulo de separación entre las aristas del deflector, las fluctuaciones en la velocidad aumentan debido a los cambios drásticos en el camino de las partículas; observándose que el tubo liso ($\theta = 180^\circ$) presenta valores muy bajos (casi nulos).

⁴ Detalles acerca de los perfiles del modelo de turbulencia y caída de presión mostrados por el software se encuentran en el Anexo D.

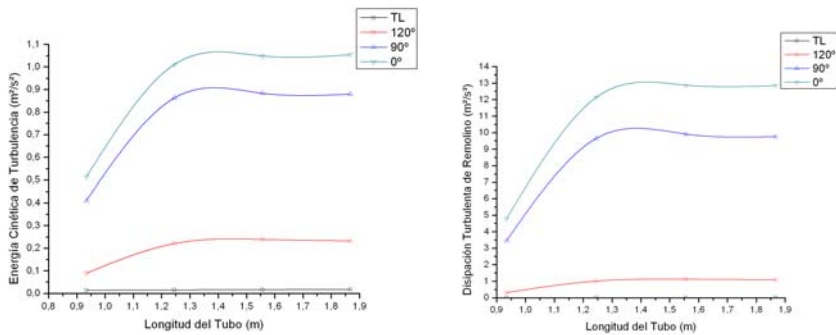


Figura 4.7: Perfiles de energía cinética turbulenta y tasa de disipación turbulenta.

4.5 CAÍDA DE PRESIÓN POR UNIDAD DE LONGITUD EN LA TUBERÍA

Es bien conocido que uno de los problemas a los que se enfrenta un ingeniero químico en el momento de realizar el diseño de cualquier proceso de flujo en tuberías corresponde a la caída de presión a lo largo del tubo que en la mayoría de los casos se debe principalmente a las pérdidas por fricción de acuerdo al balance de energía mecánica (ecuación de Bernoulli) lo que aumentaría considerablemente los gastos de bombeo de la suspensión.

El análisis de la caída de presión realizó en el centro del tubo para cada una de las configuraciones propuestas, de este modo se observa que la caída de presión presenta una proporción inversa con respecto al ángulo de separación entre las aristas del deflector (figura 4.8).

De acuerdo con los resultados encontrados se estableció un término denominado *Factor de Presión (FP)* que corresponde a la pendiente de las líneas de presión a lo largo del tubo; en otras palabras, FP

corresponde a la caída de presión por unidad de longitud de la tubería expresada como $-\Delta P/L$ [MPa/m], mostrados en la tabla 4.2.

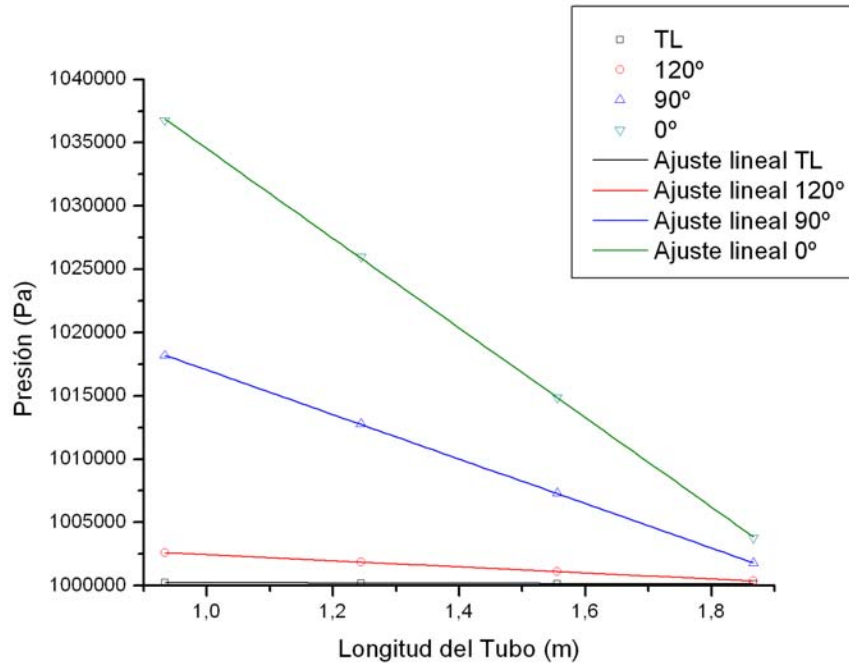


Figura 4.8: Perfil de presión a lo largo de la tubería.

Tabla 4.1: Factor de presión para las diferentes configuraciones de la tubería.

Configuración	Factor de Presión FP	R ²
	$\Delta P/L$ [MPa/m]	
$\theta=180^\circ$	$1,28 \times 10^{-4}$	1
$\theta=120^\circ$	$2,39 \times 10^{-3}$	0,999
$\theta=90^\circ$	$1,76 \times 10^{-2}$	0,999
$\theta=0^\circ$	$3,54 \times 10^{-2}$	0,999

5 CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

5.1 CONCLUSIONES

- ∞ El perfil de velocidad para los tubos con $\theta = 90^\circ$ y $\theta = 120^\circ$ presenta una proporción favorable entre tiempo de residencia y estancamiento de las partículas para las condiciones de operación dadas (caudal $67 \text{ m}^3/\text{h}$ y velocidad 1 m/s), mostrando valores máximos de velocidad en el centro del tubo de $1,21$ y $1,13 \text{ m/s}$ respectivamente.
- ∞ El tubo con deflectores de ángulo $\theta = 120^\circ$ presenta el esfuerzo de corte más bajo de todas las configuraciones de mezclador estático propuestas, lo que permite una mayor resistencia por parte de la enzima a la desactivación mecánica dando como resultado un aumento en la producción de glucosa.
- ∞ El resultado de los parámetros del modelo de turbulencia κ y ϵ fue el esperado: a medida que se reduce el ángulo de separación entre las aristas del deflector las fluctuaciones en la velocidad aumentan debido al cambio en la dirección de flujo de las partículas, lo que valida el uso de una malla no estructurada con refinamiento de los volúmenes de control en la región cercana a la pared para la solución numérica del sistema.
- ∞ El factor de presión es una variable importante no solo para determinar la configuración de tubería con mezcladores estáticos que menos pérdidas por fricción alcance, sino también como base para el posterior diseño del sistema de bombeo en el reactor.

- ⌘ Los mezcladores estáticos así como el proceso continuo son una alternativa favorable para la reacción de hidrólisis enzimática ya que permiten la interacción adecuada entre el sustrato y la enzima, evitando gastos adicionales de energía en agitación mecánica.

- ⌘ Si bien las técnicas de fluidodinámica computacional (CFD) no se comparan con la representación real del fenómeno físico, son una poderosa herramienta que ayuda al desenvolvimiento de la mayoría de los sistemas de flujo con o sin reacción química aplicados a procesos de interés industrial.

5.2 RECOMENDACIONES

- ⌘ Para trabajos futuros se recomienda hacer un análisis que incluya el efecto de la concentración de partículas en la fase dispersa así como la distribución de tamaño de partícula sobre la fluidodinámica y las propiedades de transporte de la suspensión, ya que estos parámetros afectan de manera considerable la producción de glucosa.

- ⌘ Se recomienda realizar un análisis en el cual se incluya estrategias de alimentación de sustrato y enzima así como el efecto que tiene la reducción del tamaño de las partículas a medida que avanzan en el reactor.

6 BIBLIOGRAFIA

Adeodato, M.G., 2003. Análise da Fluidodinâmica de Leito de Jorro Durante o Recobrimento de Partículas. Dissertação de Mestrado, Universidade Estadual de Campinas.

ANSYS CFX, Inc., 2006. ANSYS CFX-Solver, Release 10.0: Multifase and Particle Transport Modeling.

Arimond, J. y Erwin, L., 1985b. A Simulation of a Motionless Mixer, *Chem. Eng. Comm.*, v. 37, pp. 105-126.

Armeniades, C. D., Johnson, W. C. y Raphael, T., 1966. U. S. Patent 3.286.992.

Baloch, A., Webster, M. F., 1995. A Computer Simulation of Complex Flows of Fiber Suspensions, *Computers & Fluids*, v. 24, No. 2, pp. 135-151.

Balzer, G., Boelle, A., Simonin, O., 1995. Eurlian Gas-Solid Flow Modeling of Dense Fluidized Bed, *Fluidization VIII, Int. Symp. of the Eng. Foundation, Tours*, p. 1125.

Bolio, E. J., Yasuna, J. A., Sinclair, J. L., 1995. Dilute Turbulent Gas-Solid Flow in Riser with Particle-Particle Interaction, *AIChE J.*, v. 41, p. 1375.

Borchert, A., Buchholz, K., 1987. Enzymatic Hydrolysis of Cellulosic Materials, *Proc. Biochem.*, v. 22 No 6, pp. 173-180.

Chiba, K., Nakamura, K., 1998. Numerical Solution of Fiber Suspension Flow through a Complex Channel, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, v. 78, pp. 167–185.

Crane, 1987. *Flujo de Fluidos en Válvulas, Accesorios y Tuberías*. Mexico McGrawHill. pp. B-21.

Crowe, C. T., Troutt, T. R., Chung, J. N., 1996. Numerical Models for Two-Phase Turbulent Flows. *Annu. Rev. Fluid. Mech.*, v. 28, pp.11-43.

Dackson, K. y Nauman, E. B., 1987. Fully Developed Flow in Twisted Tapes: A Model For Motionless Mixing, *Chem. Eng. Comm.*, v. 54, pp. 381-395.

Dasari, R. K., 2004. High-Solids Saccharification and Viscosity Studies in a Scraped Surface Bio-Reactor, Doctoral Thesis, University of Louisville.

Donida, M. W. 2004. Análise das Influências das Características do Sólido e da Suspensão no Processo de Recobrimento em Leito de Jorro. Tese de Doutorado, Universidade Estadual de Campinas.

Fan, L. T., Gharpuray, M. M., Lee, Y. H., 1987. *Cellulose Hydrolysis*, Springer-Verlag. Berlin.

Gan, Q., Allen, S. J., Taylor, G., 2003. Kinetic Dynamics in Heterogeneous Enzymatic Hydrolysis of Cellulose: An Overview, an Experimental Study and Mathematical Modelling. *Proc. Biochem.*, v. 38, pp. 1003-1018.

Garzón, L. F., Gómez, S. R., 2007. Optimización del Pretratamiento con Peróxido de Hidrógeno Alcalino del Bagazo de Caña de Azúcar para la Producción de Glucosa. Trabajo de Grado. Universidad Industrial de Santander.

Godfrey, J. C., 1985. Static Mixers, Cap. 13, pp. 226-249.

Hopkins, W. G., 1998. Introduction to Plant Physiology, 2nd edition. John Wiley & Sons, Inc., New York.

Jeffery, G. B., 1922. The Motion of Ellipsoidal Particles Immersed in a Viscous Fluid, Proc. R. Soc. Lond. v. 102 No 715, pp.. 161-179

Jornal da Unicamp, edição 350, 2007.

<http://www.unicamp.br/unicamp/unicamp_hoje/ju/marco2007/ju350pag03.html>

Kaya, F., Heitmann, J. A., Joyce T. W., 1996. Effect of Shear Fields on Hemicellulase Binding to Pulp Fibers, J. of Biotech, v. 45, pp. 23-31.

Krepper, E., Glover, G. C., Grahn, A., Weiss, F. P., Alt, S., Hampel, R., Kästner, W., Kratzsh, A., Seeliger, A., 2008. Numerical and Experimental Investigations for Insulation Particle Transport Phenomena in Water Flow, Ann. of Nuclear Energy.

Kumar, V., Shirke, V., Nigam, K. D. P., 2008. Performance of Kenics Static Mixer over a Wide Range of Reynolds Number, Chem. Eng. J. v. 139, pp. 284-295.

Lahey, R.T., 1987. Turbulence and Phase Distribution Phenomena in Two-Phase Flow. ICHMT International Seminar on Transient Phenomena in Multiphase Flow, Dubrovnik, Yugoslavia, May 24-30.

Lane, G. L., Schwarz, M.P., Evans G. M., 1999. CFD Simulation of Gas Liquid Flow in a Stirred tank, 3rd Int. Symp. On Mixing in Industrial Processes, Japan.

Lee, Y. H., Fan, L. T., 1982. Kinetic Studies of Enzymatic Hydrolysis of Insoluble Cellulose: Analysis of the Initial Eates, *Biotech. and Bioeng.*, v. 24, pp. 2383 – 2406.

Lindenberg, C., Schöll, J., Vicum, L., Mazzotti, M., Brozio, J., 2008. Experimental Characterization and Multi-Scale Modeling of Mixing in Static Mixers, *Chem. Engin. Sci.*, v. 63, pp. 4135 – 4149.

Ling, F. H. y Zhang, X., 1995. A Numerical Study on Mixing in The Kenics Static Mixer, *Chem. Engng. Comm.*, v. 136, pp. 119-141.

Maliska, C. R., 2004. Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional 2^a ed. LTC editora, pp. 1-6.

Mendoza, F. L., 2004. Modelagem, Simulação e Análise de Desempenho de Reatores Tubulares de Polimerização com Deflectores Angulares Internos. Tese de Doutorado. Universidade Estadual de Campinas.

Pahl, M. H., Muschelknautz, E., 1982. Static Mixers and their Applications, *Inter. Chem. Eng.*, v. 22, No 2, pp. 197-205

Pande, H., Rao, N. J., Kapoor, S. K., and Roy, D. N., 1999. Hydrodynamic Behavior of Nonwood Fiber Suspensions. *Tappi Journal*, v. 82 No 6, pp. 140-145.

Peirano, E., 1998. Modeling and Simulation of Turbulent Gas-Solid Flows Applied to Fluidization. Doctoral Thesis. Chalmers University of Technology, Goteborg, Sweden.

Petrie, C. J. S., 1999. The Rheology of Fiber Suspensions, J. Non-Newtonian Fluid Mech. v. 87, pp. 369–402.

Quintana, P. A., Poot, L. E., Martinez, G. M., Castro A. J., 2006. Escalamiento Del Proceso de Bagazo de Caña. Revista Mexicana de Ingeniería Química, v. 5, pp. 57–66.

Ranade, V. V., 2002. Computational Flow Modeling for Chemical Reactor Engineering, v. 5, Proc. Systems. Eng., pp. 35-112.

Regner, M., Östergren, K., Trägårdh, C., 2006. Effects of Geometry and Flow Rate on Secondary Flow and the Mixing Process in Static Mixers—A Numerical Study, Chem. Eng. Sci., v. 61, pp. 6133-6141.

Roca, G. A., Glauco, C., Olivares, E., Barbosa, L. A., 2006. Caracterización del Bagazo de Caña de Azúcar Parte I: Características Físicas. AGRENER GD, Centro de Convenções da UNICAMP, São Paulo, Brasil.

Roca, G. A., Glauco, C., Olivares, E., Barbosa, L. A., 2006. Caracterización del Bagazo de Caña de Azúcar parte II: Características Fluidodinámicas. AGRENER GD, Centro de Convenções da UNICAMP, São Paulo, Brasil.

Sánchez, G. M., Vial, C. R., Moraga, N. B., 2002. Estudio de Fluidos no Newtonianos con los Métodos de Volúmenes y Elementos Finitos. Revista Fac. Ing. U.T.A., v. 10, pp. 23-34.

SBPC, Sociedade Brasileira para o Progresso da Ciência, 60ª Reunião Anual da SBPC 2008, UNICAMP, Brasil.

<http://www.sbpcnet.org.br/eventos/60ra/>

Sommerfeld, M., 1993. Reviews in Numerical Modeling of Dispersed Two Phase Flows, proceeding of 5th Int. Symp. on Refined Flow Modeling and Turbulence Measurements, Paris

Tauscher, W. y Schutz, G., 1973. *Sulzer Technical Review*, 2.

Um, B. H., 2002. Modeling of Acid Pretreatment and Enzymatic Hydrolysis of Corn Stover, Master Thesis, Colorado State University.

Um, B. H., 2007. Optimization of Ethanol Production from Concentrated Substrate. Doctoral Thesis, Auburn University.

Wyman, C. E., 1996. Handbook on Bioethanol: Production and Utilization. Taylor and Francis, Washington, DC.

Wyman, D. K. B., Hinman, N. D., and Stevens, D. J. 1993. Ethanol and Methanol from Cellulosic Biomass, Johannson, T. E., Kelly, H., Reddy, A. K. N., and Williams, R. A. editors. Renewable Energy: Source for Fuels and Electricity, Washington, DC: Island Press. Pp. 865-923.

7 ANEXOS

7.1 ANEXO A

PLANOS Y ESPECIFICACIONES DEL TUBO PARA LOS DIFERENTES CASOS DE ESTUDIO

A.1 Tubo Liso ($\theta = 180^\circ$)

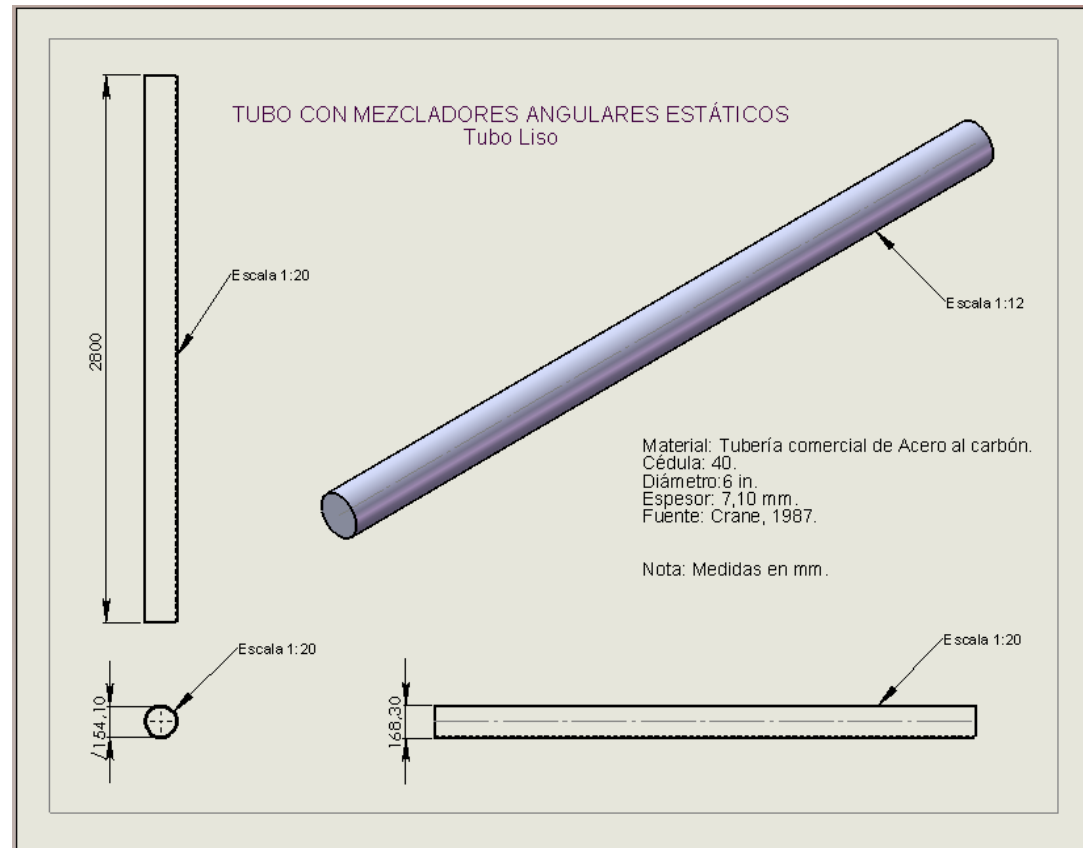


Figura A. 1: Especificaciones técnicas del tubo liso ($\theta = 180^\circ$)

A.2 Angulo del Deflector $\theta = 120^\circ$

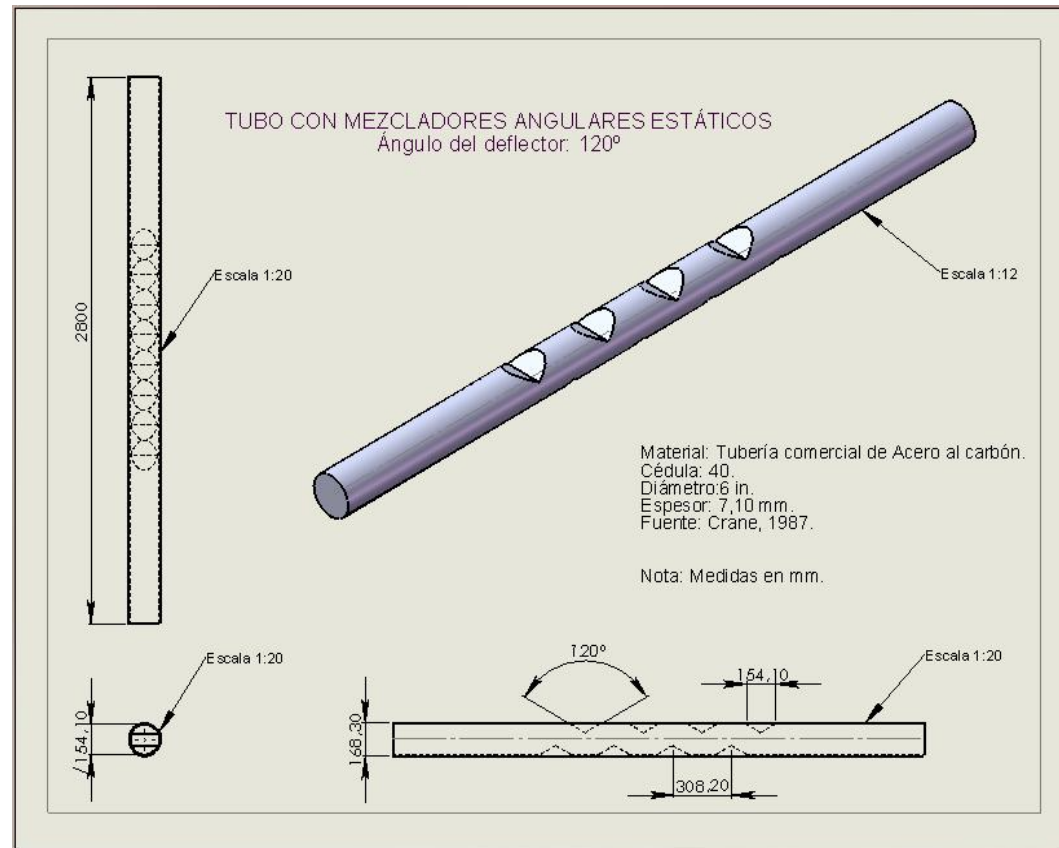


Figura A. 2: Especificaciones técnicas para $\theta = 120^\circ$

A.4 Angulo del Deflector $\theta = 0^\circ$

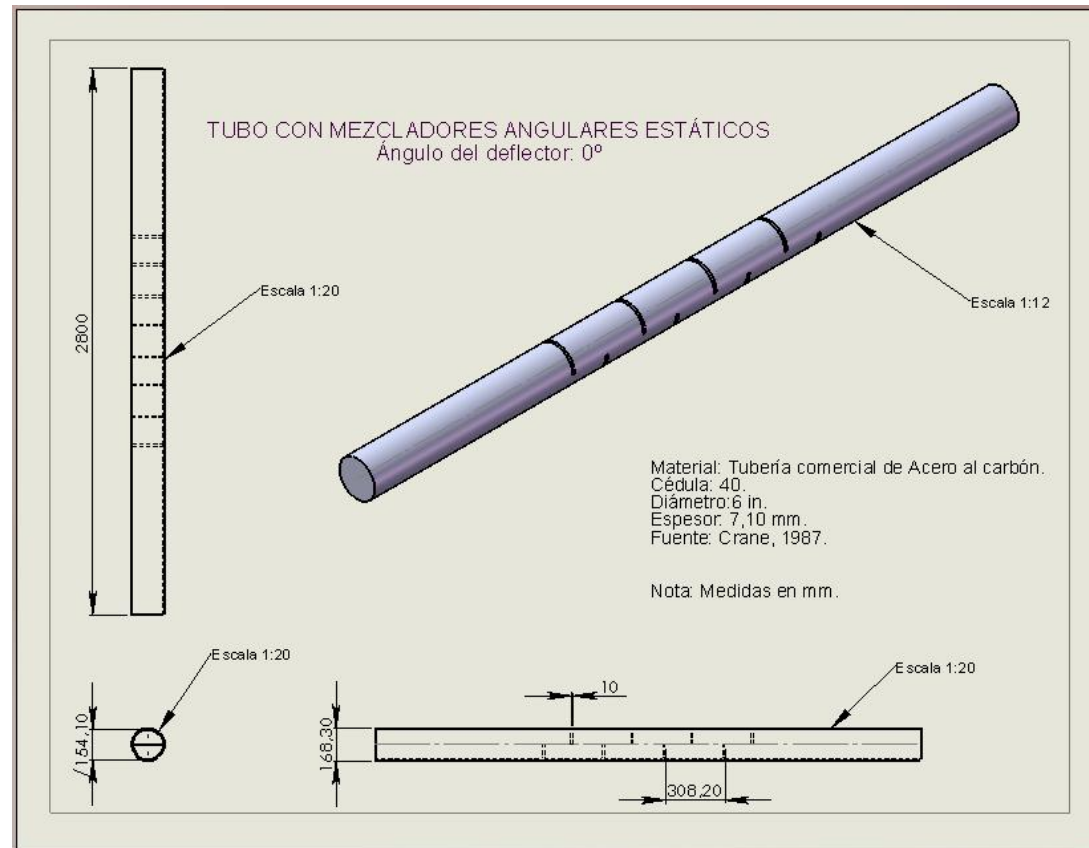


Figura A. 4: Especificaciones técnicas para $\theta = 0^\circ$

7.2 ANEXO B

CORRELACIONES PARA LA CARACTERIZACION DE LAS PARTÍCULAS DE BAGAZO DE CAÑA DE AZÚCAR

B.1 CARACTERIZACIÓN FÍSICA

Diámetro medio de las partículas

El análisis granulométrico se realiza por medio de tamizado, utilizando un tamiz de tipo *Tyler™* estandarizado. El diámetro medio de la partícula se calcula por la definición de Sauter (**Adeodato, 2003; Donida, 2004**):

$$\bar{d}_s = \frac{1}{\sum \frac{\Delta x_i}{D_i}} \quad (B.1)$$

La distribución de tamaño de partícula utilizada en este trabajo tiene los siguientes parámetros principales:

Diámetro máximo: *3 mm*

Diámetro medio: *1,8 mm*

Diámetro mínimo: *0,1 mm*

Desviación estándar: *7%*

Densidad real de las partículas

La determinación experimental de la densidad del bagazo de caña por el método de inmersión en agua es más compleja que en los materiales homogéneos debido a la penetración del líquido en el interior de la partícula. **Roca et al., 2006** realizaron un trabajo experimental basado en las mediciones de la caída de presión

provocada por lechos empacados de las partículas sólidas a diferentes flujos de gas (método de Ergun).

Densidad aparente de las partículas

Roca *et al.*, 2006 determinaron la densidad aparente de las partículas de bagazo de caña dejando caer suavemente cantidades fijas de muestra en probetas graduadas y determinando su volumen.

Porosidad

La porosidad (ε') se define como la relación entre el volumen de los espacios vacíos (V_{ov}) y el volumen total del lecho:

$$\varepsilon' = \frac{V_{ov}}{V_{ot}} = \frac{V_{ot} - V_{os}}{V_{ot}} = 1 - \frac{V_{os}}{V_{ot}} = 1 - \frac{\rho_a}{\rho_p} \quad (E.2)$$

Densidad de la partícula “mojada”

En base a un análisis experimental realizado en el laboratorio de bioprocesos (LBIO) de la Universidad Estatal de Campinas (UNICAMP), se midió el volumen de retención de agua (WRV) de muestras de bagazo de caña en tres condiciones diferentes⁵:

I. Bagazo de caña molida y tamizada de 0,5 mm

⁵ La materia prima para este análisis fue proporcionada por el laboratorio de Bioprocesos de la facultad de ingeniería química de la UNICAMP

- II. Bagazo del literal I. sometido a pretratamiento con Hidróxido de calcio (Ca(OH)₂).
- III. Bagazo del literal I. sometido a pretratamiento con Peróxido de Hidrogeno alcalino (H₂O₂).

Este análisis permite visualizar de manera general una aproximación a la densidad de las partículas de bagazo de caña mojadas, es decir, después de hincharse por el proceso de absorción de agua (**Lee y Fan, 1982**).

$$WRV = \frac{\text{Peso de biomasa mojada}}{\text{Peso de biomasa seca}} \quad (B.3)$$

Los resultados obtenidos se resumen en la tabla B.1:

Tabla B. 1: Resumen de los ensayos realizados para determinar WRV y la densidad de las partículas mojadas.

Muestra de Bagazo	Peso de biomasa seca (g)	Peso de biomasa mojada (g)	Peso de agua (g)	WRV	Densidad de las partículas mojadas (Kg/m ³)
Sin pretratamiento	0,1974	1,7291	1,5317	8,7594	1,1289
Pretratamiento con Ca(OH) ₂	0,1398	1,3857	1,2459	9,912	1,1122
Pretratamiento con H ₂ O ₂	0,129	1,8562	1,7272	14,3891	1,0747

De acuerdo a ensayos experimentales de comparación entre los pretratamientos de la biomasa (**Garzón y Gómez, 2007**) se mostró que el Peróxido de Hidrógeno alcalino presenta mayor remoción de

hemicelulosa, además de menores tiempos de reacción y condiciones más suaves de temperatura para llevarlo a cabo. Por lo tanto, en este trabajo se utilizaron los valores encontrados de WRV y densidad de partícula mojada correspondientes al este pretratamiento.

B.2 CARACTERIZACIÓN FLUIDODINÁMICA

La velocidad de arrastre y el coeficiente de arrastre son características fundamentales en la dinámica del movimiento de las partículas. Debido a la complejidad del movimiento, los datos que existen acerca de geometrías irregulares son limitados. Algunos autores recomiendan el uso de los valores del coeficiente de arrastre hallado con las expresiones para las partículas esféricas como una aproximación adecuada o aplicando algunos factores de corrección recomendados. No obstante, cuando es necesario una evaluación más rigurosa hay que acudir a la experimentación (**Roca *et al.*, 2006**).

Velocidad de Arrastre y Coeficiente de Arrastre

La velocidad de arrastre (V_t) se define como la velocidad mínima necesaria que debe tener el fluido para que arrastre y separe las partículas fuera de la zona donde se encuentran. Cuando el régimen de flujo se encuentra fuera de la zona viscosa, la velocidad terminal está en función del coeficiente de arrastre (C_A), así:

$$V_t = \sqrt{\frac{4d_p(\rho_p - \rho)g}{3\rho C_F}} \quad (B.4)$$

A continuación se presenta el resumen de los ensayos realizados por **Roca et al., 2006** para la caracterización del bagazo de caña de azúcar en función del diámetro de la partícula⁶:

Tabla B. 2: Resumen de las correlaciones para la caracterización del bagazo de caña de azúcar.

Propiedad	Correlación en función de d_p , Re , o Ar	Adicional
Densidad Real	$\rho_p = 140,800 d_p^{0,118}$	$R^2=0,984$
Densidad Aparente	$\rho_a = 60,2 d_p^{-0,218}$	$R^2=0,995$
Esfericidad	$\phi_s = 0,1248 d_p^{0,033}$	$R^2=0,805$
Superficie Específica	$S_s = 49,8 d_p^{-0,079}$	$R^2=0,916$
Coeficiente de Arrastre	$C_D = 26,048 Re^{-0,714}$	$Re < 10$
	$C_D = 18,1804 Re^{-0,7708}$	$10 < Re < 100$
Velocidad de Arrastre	$Re = 0,1884 Ar^{0,6611}$	$R^2=0,97$ $\pm ts=9,63$ y $11,9$

⁶ Los detalles y las tablas con los valores utilizados para la identificación de los modelos y el cálculo de la desviación estándar se encuentran en **Roca et al., 1995**.

7.3 ANEXO C

ESTADÍSTICAS DE LA SIMULACIÓN

C.1 Paquete de simulación y equipo disponible

En la tabla C.1 y C.2 se resumen las estadísticas y las herramientas disponibles para llevar a cabo las simulaciones:

Tabla C. 1: Software utilizado en las simulaciones.

PROCEDIMIENTO Y/O EQUIPO	SOFTWARE	
Geometría	SolidWorks Office Premium 2007 ®	
Malla	Ansys Workbench 2006® by ANSYS inc.	
Simulación CFD	Ansys CFX v 11.0® by ANSYS inc.	
Equipo 1	Procesador	Intel(R) Xeon(R) E5430 @ 2.66 GHz 2.66 GHz
	Memoria (RAM)	8166 MB
	Tipo de sistema	Sistema Operativo de 64 Bits
	Nombre	Vita-PC
Equipo 2	Procesador	AMD Turion(tm) 64 X2 TL-60 797 MHz
	Memoria (RAM)	1930 MB
	Tipo de sistema	Sistema Operativo de 64 Bits
	Nombre	NATALIA-PC

Tabla C. 2: Estadísticas de la malla utilizada en la simulación.

Parámetro	TL(180°)	120°	90°	60°	30°	0°
Número total de nodos	1498559	894710	261537	900961	900365	995149
Número total de tetraedros	6571704	3273130	752646	3299972	3238211	3384011
Número total de pirámides	0	0	0	0	170	200
Número total de prismas	672700	604610	239870	6077730	626058	753134
Número total de elementos	7244404	3877740	992516	3907702	3864439	4137345

7.4 ANEXO D

PERFILES DEL MODELO DE TURBULENCIA Y CAIDA DE PRESION EN LAS TUBERÍAS

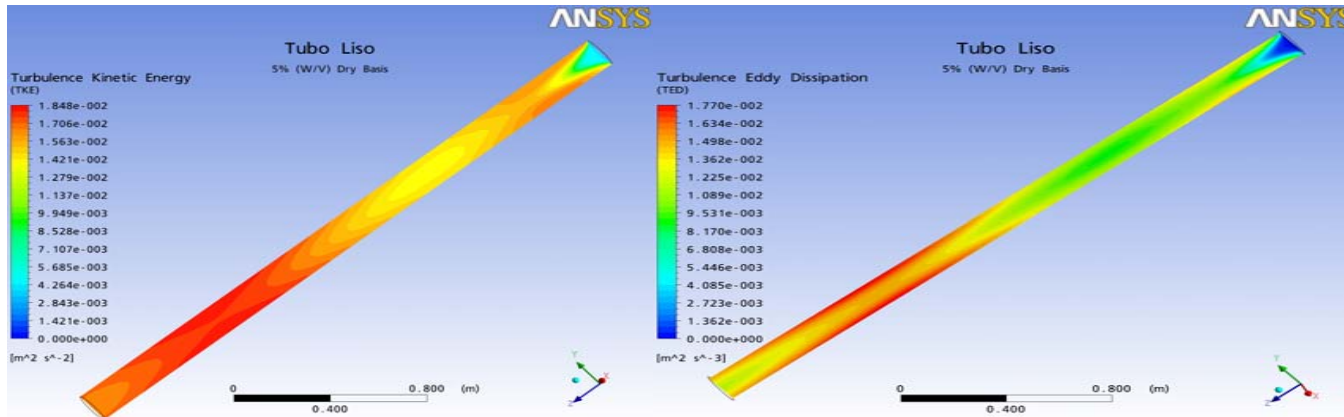


Figura D. 1: Energía cinética y tasa de disipación turbulenta para el tubo liso.

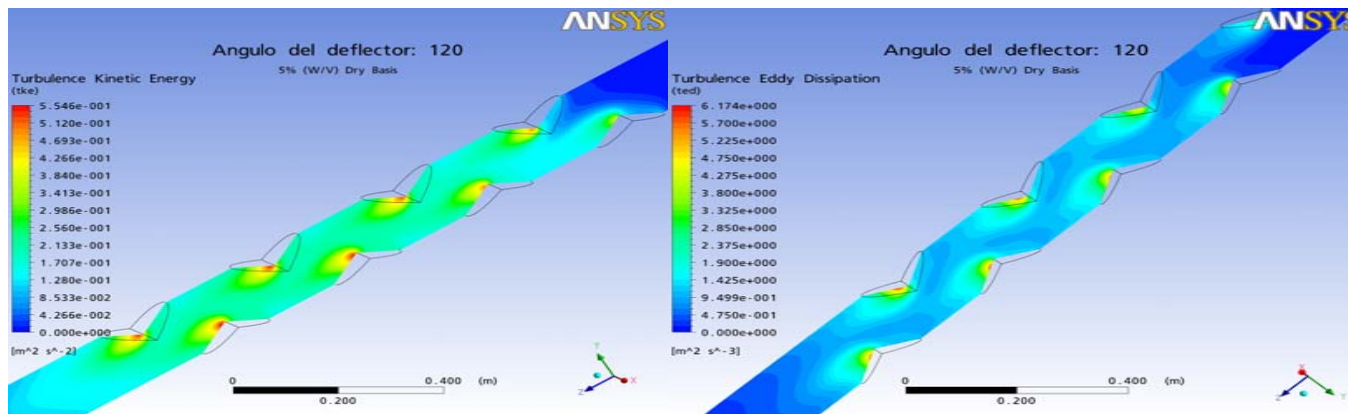


Figura D. 2: Energía cinética y tasa de disipación turbulenta para $\theta = 120^\circ$.

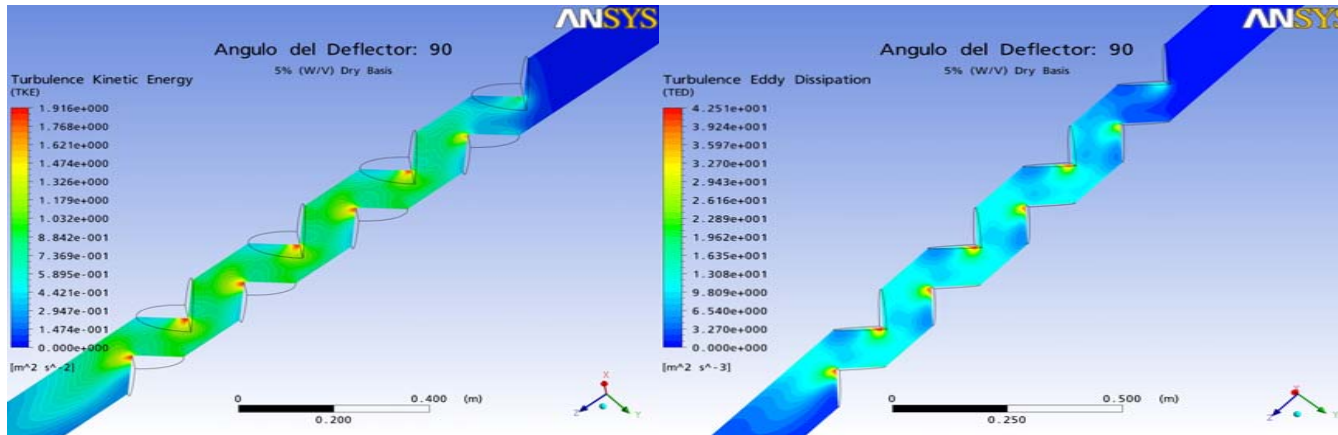


Figura D. 3 Energía cinética y tasa de disipación turbulenta para $\theta = 90^\circ$.

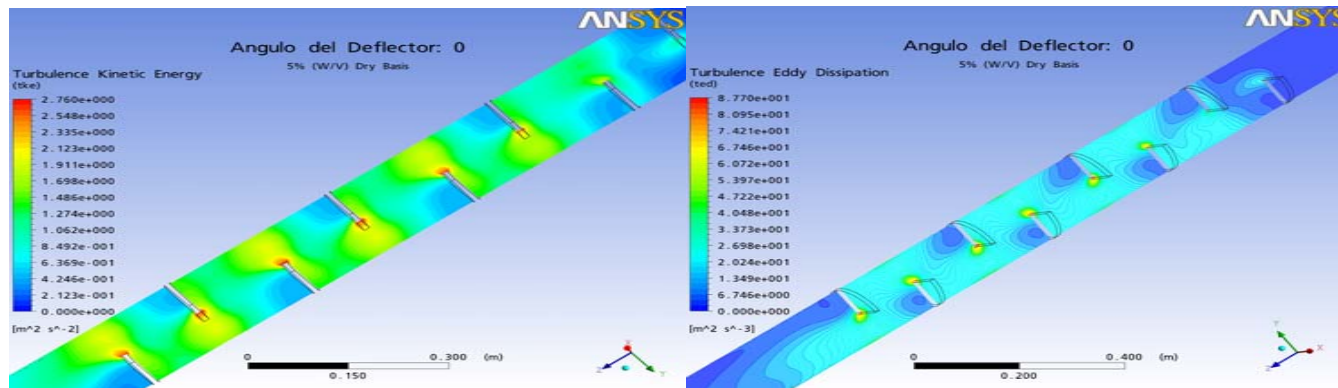


Figura D. 4: Energía cinética y tasa de disipación turbulenta para $\theta = 0^\circ$.

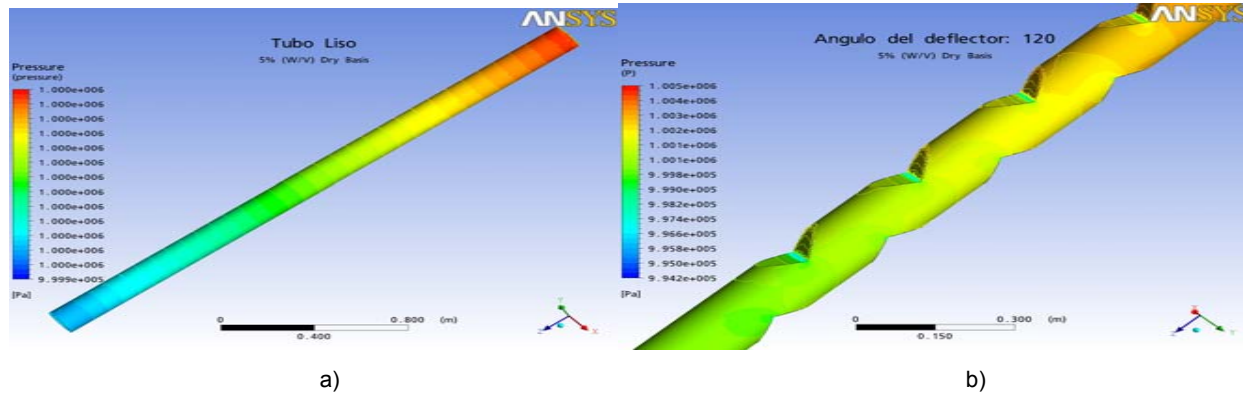


Figura D. 5: Caída de presión en la tubería. a) Tubo liso $\theta=180^\circ$. b) $\theta=120^\circ$

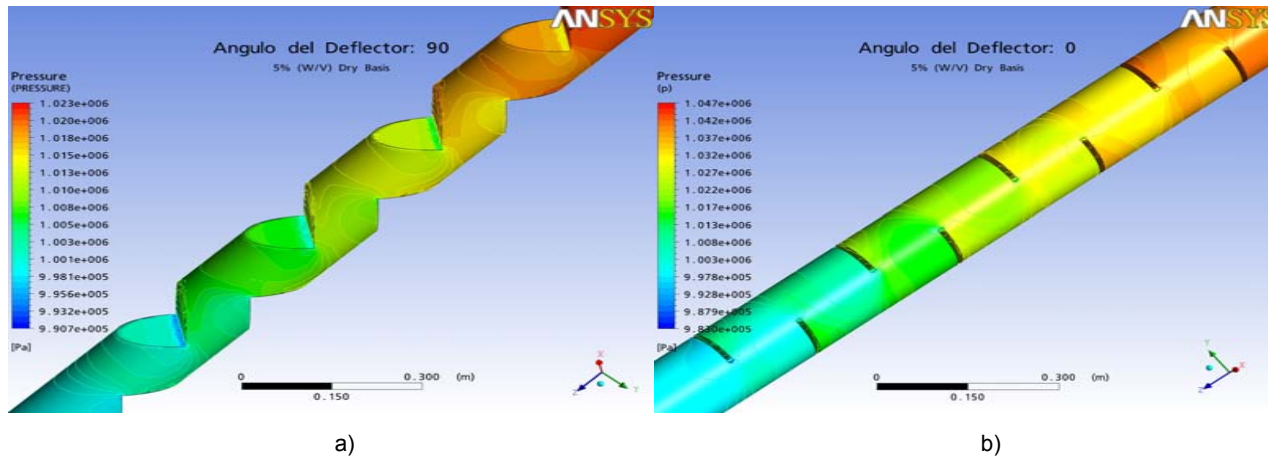


Figura D. 6: Caída de presión en la tubería. a) $\theta=90^\circ$ b) $\theta=0^\circ$

