



ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO
FACULTAD DE CIENCIAS
CARRERA INGENIERÍA QUÍMICA

MODELACIÓN CFD DE UN REACTOR DE PIROLISIS
DESCENDENTE EN FORMA DE V.

Trabajo de integración curricular

Tipo: Proyecto Técnico

Presentado para optar al grado académico de:

INGENIERO QUÍMICO

AUTOR(A) /(ES):

ANGEL ALEJANDRO CASTRO BRAVO

RIOBAMBA - ECUADOR

2024



ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO

FACULTAD DE CIENCIAS

CARRERA INGENIERÍA QUÍMICA

**MODELACIÓN CFD DE UN REACTOR DE PIROLISIS
DESCENDENTE EN FORMA DE V.**

Trabajo de Integración Curricular

Tipo: Proyecto Técnico

Presentado para optar al grado académico de:

INGENIERO QUÍMICO.

AUTOR(A) /(ES): ANGEL ALEJANDRO CASTRO BRAVO

DIRECTOR (A): ING. CARLOS RAMIRO CEPEDA GODOY

RIOBAMBA - ECUADOR

2024

© 2024, Angel Alejandro Castro Bravo

Se autoriza la reproducción total o parcial, con fines académicos, por cualquier medio o procedimiento, incluyendo la cita bibliográfica del documento, siempre y cuando se reconozca el Derecho de Autor.

Yo, Angel Alejandro Castro Bravo, declaro que el presente Trabajo de Integración Curricular es de mi autoría y los resultados del mismo son auténticos. Los textos en el documento que provienen de otras fuentes están debidamente citados y referenciados.

Como autora asumo la responsabilidad legal y académica de los contenidos de este Trabajo de Integración Curricular; el patrimonio intelectual pertenece a la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo.

Riobamba, 03 de junio de 2024



Angel Alejandro Castro Bravo
060493997-5

ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO
FACULTAD DE CIENCIAS
CARRERA INGENIERÍA QUÍMICA

El Tribunal del Trabajo de Integración Curricular certifica que: El Trabajo de Integración Curricular; tipo: Proyecto Técnico, **MODELACIÓN CFD DE UN REACTOR DE PIROLISIS DESCENDENTE EN FORMA DE V**, realizado por el señor: **ANGEL ALEJANDRO CASTRO BRAVO**, ha sido minuciosamente revisado por los Miembros del Tribunal del Trabajo de Integración Curricular, el mismo que cumple con los requisitos científicos, técnicos, legales, en tal virtud el Tribunal Autoriza su presentación.

	FIRMA	FECHA
Ing. Paúl Gustavo Palmay Paredes. PRESIDENTE DEL TRIBUNAL		2024-06-03
Ing. Carlos Ramiro Cepeda Godoy. DIRECTORA DEL TRABAJO DE INTEGRACIÓN CURRICULAR		2024-06-03
Ing. Cristina Gabriela Calderon Tapia. ASESORA DEL TRABAJO DE INTEGRACIÓN CURRICULAR		2024-06-03

DEDICATORIA.

Este logro se lo dedico a mi familia en especial a mi padre a mi madre y a mi hermano los cuales me brindaron su apoyo incondicional quienes gracias a sus consejos hicieron que este sueño se haga realidad, a mi enamorada Karolayn quien estuvo desde el comienzo de este proceso y acompañarme en los días de desvelo.

Angel.

AGRADECIMIENTO.

Agradezco a Dios por su guía y fortaleza a lo largo de este proceso. A mi padre y madre por su amor y apoyo incondicional; a mi hermano, por su compañerismo y estímulo constante y a mi enamorada Karolayn por su paciencia y comprensión gracias por creer en mí y por estar a mi lado en cada paso de este camino. Este logro es también de ustedes.

Angel

ÍNDICE DE CONTENIDO.

ÍNDICE DE TABLAS.....	ix
ÍNDICE DE ILUSTRACIONES.....	x
ÍNDICE DE ANEXOS.....	xi
RESUMEN.....	xii
INTRODUCCIÓN.....	1
CAPÍTULO I.....	2
1. DIAGNÓSTICO DEL PROBLEMA.....	2
1.1. Planteamiento del Problema.....	2
1.2. Justificación.....	3
1.3. Objetivos.....	4
1.3.1. Objetivo General.....	4
1.3.2. Objetivos Específicos.....	4
CAPÍTULO II.....	5
1 MARCO TEÓRICO.....	5
1.1. Antecedentes de investigación.....	5
1.1.1. Biomasa.....	5
1.1.2. Tipos de Reactores usados en la pirolisis de biomasa.....	6
1.2. Referencias Teóricas.....	7
1.2.1. CDF en la Ingeniería Química.....	7
1.2.2. ANSYS® fluent.....	7
1.2.3. Mallado.....	8
1.2.4. Primera ley de la termodinámica.....	10
Balances de energía en sistemas cerrados en estado estacionario.....	11
Balances de energía en sistemas abiertos en estado estacionario.....	12
1.2.5. Transferencia de calor.....	13
1.2.6. Métodos de transferencia de calor.....	13
Conducción.....	13
Convección:.....	14
Radiación:.....	15
1.2.7. Ecuación de continuidad.....	15

1.2.8.	Ecuación de Navier-Stokes.....	16
1.2.9.	Discretización.....	17
1.2.10.	Pirosis.....	18
1.2.11.	Reactor de Pirolisis tipo Batch.....	19
CAPÍTULO III.....		20
2	MARCO METODOLÓGICO.....	20
3.1.	Estructura del desarrollo metodológico del proceso de simulación.....	20
3.2	Materiales.....	21
3.3.	Estudio bibliográfico.....	21
3.3.	Diseño asistido por computador (CAD) y geometría.....	22
3.3.1.	Geometría del reactor en forma de V.....	22
3.3.2.	Acotamiento de la geometría.....	23
3.4.	Mallado de la geometría.....	25
3.4.1.	Generación de malla.....	25
3.5.	Parámetros del sistema.....	27
3.5.1.	Condiciones de frontera.....	27
3.5.2.	Características del sistema.....	28
CAPITULO IV.....		30
3	RESULTADOS.....	30
4.1.	Simulación.....	30
4.2.	Análisis de la velocidad.....	32
4.2.	Análisis de la presión.....	34
CONCLUSIONES.....		40
RECOMENDACIONES.....		42
BIBLIOGRAFÍA.		
ANEXOS.		

ÍNDICE DE TABLAS.

Tabla 3-1: Elementos utilizados para la realización del proyecto.	21
Tabla 3-2: Reseña del artículo revisado.....	22
Tabla 3-3: Características de la simulación CFD.	28
Tabla 4-1. Convergencia y número de iteraciones	30
Tabla 4.2. Validación.....	32

ÍNDICE DE ILUSTRACIONES.

Ilustración 2-1. Mallado estructural y no estructural.	9
Ilustración 2-2. Balance de energía en sistemas cerrados.	11
Ilustración 2-3. Balance de energía en sistemas abiertos.	12
Ilustración 2-4. Volumen de control finito.	15
Ilustración 2-5. Volumen de control en celdas (a) y volumen de control celda-vértice (b).	18
Ilustración 3-1: Metodología del desarrollo del trabajo.	20
Ilustración 3-2: Geometría del reactor de pirolisis en forma de V.	23
Ilustración 3-3: Geometría de la parte superior del reactor.	24
Ilustración 3-4: Geometría del reactor, primera inclinación.	24
Ilustración 3-5: Geometría del reactor, parte final.	25
Ilustración 3-6: Mallado de la geometría.	26
Ilustración 3-7: Discretización del cuerpo de la geometría.	26
Ilustración 3-8: Detalles de la malla.	27
Ilustración 4-1: Remanentes de la simulación.	31
Ilustración 4-2: Contorno de velocidad.	32
Ilustración 4-3: Cambio de velocidad en el codo.	33
Ilustración 4-4: Variación de la Presión.	34
Ilustración 4-5: Gradiente de Presión.	35
Ilustración 4-6: Perfil de Temperatura.	36
Ilustración 4-7: Fracción en masa de H ₂ O.	37
Ilustración 4-8: Fracción en masa de CO ₂	37
Ilustración 4-9: Fracción en masa de N ₂	37
Ilustración 4-10: Fracción en masa de Wood.	38
Ilustración 4-11: Fracción en masa del O ₂	38

ÍNDICE DE ANEXOS.

Anexo A: Geometría acotada del reactor de pirolisis en forma de V	4
Anexo B. Generación de la malla de la geometría.	4
Anexo C. Ajuste y configuración de condiciones de frontera y del sistema.	5

RESUMEN.

El crecimiento de los problemas ambientales debido a las emisiones de gases de efecto invernadero, en consecuencia, del uso excesivo de combustibles fósiles como el carbón y el petróleo, es necesario un cambio en la estructura energética. Es fundamental sustituir estos combustibles por recursos sostenibles y estudiar los equipos responsables de transformar la materia prima, el objetivo del presente trabajo es modelar mediante técnicas de dinámica de fluidos computación un reactor de pirolisis. El diseño CAD, así como toda la simulación, fueron realizados en el software ANSYS fluent. Este software utilizo métodos numéricos para el análisis de características complejas de flujo y transferencia de calor. Posterior, se realizó el mallado de geometría, procurando un nivel de malla fino. Además, se especificaron las condiciones de frontera, así como todas las características del fluido y los flujos de entrada. También se definió el tipo de reacción, y finalmente, se obtuvieron los resultados. A través de la simulación, se analizaron características como la presión, temperatura, las fracciones másicas, la velocidad y los flujos, además se identificaron zonas problemáticas dentro del equipo, lo que permite tomar medidas para mejorar su funcionamiento y rendimiento. Esta información fue crucial para realizar ajustes y optimizaciones en el diseño del equipo, asegurando una operación más eficiente y efectiva. En conclusión, el uso de combustibles como el petróleo tuvo un impacto directo en la contaminación ambiental y daños significativos al planeta, por ello se propuso una nueva fuente de combustible basada en la biomasa, luego de pasar por un reactor de pirolisis se tuvo como resultado la producción de gases de combustión y subproductos como el biochar. Asimismo, se analizó el equipo para identificar áreas de mejora y optimizar su rendimiento y funcionamiento.

Palabras clave: <DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL>, <PIROLIS>, <COMBUSTIÓN>, <REACTOR>, <BIOMASA>.



ABSTRACT

The growth of environmental problems due to greenhouse gas emissions, as a consequence of the excessive use of fossil fuels such as coal and oil, makes it necessary to change the energy structure. It is essential to replace these fuels with sustainable resources and to study the equipment responsible for transforming the raw material. The objective of this work is to model a pyrolysis reactor using computational fluid dynamics techniques. The CAD design, as well as the entire simulation, was carried out in ANSYS fluent software. This software used numerical methods for the analysis of complex flow and heat transfer characteristics. Subsequently, geometry meshing was performed, aiming for a fine mesh level. In addition, the boundary conditions were specified, as well as all the characteristics of the fluid and inlet flows. The type of reaction was also defined, and finally, the results were obtained. Through simulation, characteristics such as pressure, temperature, mass fractions, velocity and flows were analyzed, and problem areas within the equipment were identified, allowing to take measures to improve its operation and performance. This information was crucial to make adjustments and optimizations in the design of the equipment, ensuring a more efficient and effective operation. In conclusion, the use of fuels such as petroleum had a direct impact on environmental pollution and caused significant damage to the plan, so a new fuel source based on biomass was proposed, which after passing through a pyrolysis reactor resulted in the production of combustion gases or by-products such as biochar. Also, the equipment was analyzed to identify areas of improvement and to optimize its performance and operation.

Key words: <COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS>, <PYROLYSIS>, <COMBUSTION>, <REACTOR>, <BIOMASS>.



Abg. Ana Gabriela Reinoso. Mgs.

Ced: 1103696132

INTRODUCCIÓN.

En el campo de la ingeniería química, es esencial tener conocimiento sobre técnicas avanzadas que permitan una comprensión más completa de los fenómenos que ocurren durante los procesos. En este sentido, la dinámica de fluidos computación (CFD) desempeña un papel fundamental al facilitar la optimización, diseño, análisis y mejora del rendimiento de los equipos utilizados. La aplicación de CFD proporciona una visión clara del comportamiento de los fluidos o sólidos involucrados en procesos químicos o físicos, permitiendo la evaluación de una amplia gama de variables como temperatura, entalpía, presiones, velocidad, fracciones de más entre muchas otras.

Esta investigación se centra en el análisis de un reactor de pirólisis en forma de V utilizando técnicas de dinámica de fluidos computación. Uno de los objetivos es realizar un estudio preliminar sobre la optimización del rendimiento del equipo al identificar puntos críticos de que afectan directamente a su eficiencia. Además, se busca comprender el desperdicio energético y la generación de contaminantes durante el proceso, con el fin de implementar medidas para mejorar y reducir la producción de gases de efecto invernadero, los cuales tienen un impacto significativo en el calentamiento global.

CAPÍTULO I

1. DIAGNÓSTICO DEL PROBLEMA.

1.1.Planteamiento del Problema.

Los problemas ecológicos y ambientales van en crecimiento a medida que la población humana aumenta en consecuencia, del uso desmedido de combustibles fósiles tradicionales como el carbón, el petróleo, el gas entre otros. El agotamiento de recursos naturales no renovables es producto principal de una crisis energética y por ende económica, en la actualidad es importante cambiar la estructura energética y desarrollar recursos renovables sostenibles. La energía renovable y verde es la base de la protección del medio ambiente y la reducción de las emisiones de carbono se encuentran como alternativas la energía de las olas, eólica, biomasa, etc., la biomasa tiene características de fácil acceso, universalidad, respeto al medio ambiente, bajas emisiones de CO₂ y bajos costos (Cai et al., 2024).

La energía es un factor importante de estudio en los últimos años por ser uno de los mayores emisores de gases de efecto invernadero, su principal origen proviene del uso de recursos naturales, la pérdida de energía es la consecuencia directa de las altas temperaturas de funcionamiento de los equipos, por lo tanto, los esfuerzos constantes son directos a los análisis termodinámicos para la minimización de pérdidas de energía (Tesio et al., 2019).

Para el análisis del equipo se puede presentar diferentes métodos de estudios como el método empírico el cual consiste en ensayos de prueba y error pero este es un método de largo estudio, tedioso y sobre todo costoso, esto ha llamado la atención de ingenieros e investigadores los cuales se han enfocado en técnicas computacionales avanzadas, eficaces, rápidas y menos costosas involucrando así simulaciones las cuales cada vez juegan un papel más importante y relevantes en el desarrollo de la industria con simulaciones iterativas en la que se puede mejorar la eficiencia y conseguir una optimización del proceso, en el presente proyecto se aplicara la dinámica de fluidos computacional (CFD) para el análisis del reactor de pirolisis.

1.2. Justificación.

El análisis de un equipos abarca métodos antiguos y tradicionales como el experimental, que requiere una gran cantidad de recursos como electricidad, equipos costosos, monitoreo de datos y procesamiento de datos; sin embargo, la dinámica de fluidos computacional (CFD) es una de las tecnologías innovadoras que puede manejar fácilmente geometrías de flujo complejas, CFD es más económico que los métodos experimentales y es capaz de resolver ecuaciones de manera rápida y eficiente, CFD admite el diseño de una amplia gama de equipos (Jamshed, 2015).

La dinámica de fluidos computacional se ocupa de la simulación numérica del flujo de fluidos, la transferencia de calor y fenómenos relacionados tales como reacciones químicas, combustión, etc. Este software utiliza métodos numéricos y algoritmos para resolver y analizar problemas de fluidos, convierte ecuaciones diferenciales parciales de la dinámica de fluidos en ecuaciones algebraicas simples y luego resolverlas numéricamente para obtener un resultado significativo. Para la validación de resultados se comparan con los datos experimentales al no poseer estos datos el estudio de convergencia se enfoca en la malla la cual de refina dos o más veces resolviendo y obteniendo resultados hasta que el resultado no cambie (Roelofs & Shams, 2018).

El papel que juega la simulación es importante en la predicción de varias características complejas de fluido y transporte de calor por ende la CFD se convierte en una práctica atractiva y complementaria utilizada en el proceso, diseño y evaluación de sistemas el software llega a impresionar a las personas ya que es capaz de mostrar el flujo como líneas de ruta, contornos de flujo, gráficos vectoriales además tiene la capacidad de ver múltiples resultados simultáneamente en un sola imagen, por todo lo antes mencionado se puede emplear esta herramienta para la optimización de equipos mediante el estudio del comportamiento del flujo en relación a la concentraciones, presiones, temperaturas y también la geométrica del equipo.

1.3. Objetivos.

1.3.1. Objetivo General.

Modelar un reactor de pirolisis mediante técnicas de mecánica de fluidos computacional (CFD).

1.3.2. Objetivos Específicos.

- Establecer las ecuaciones y condiciones de diseño del Reactor.
- Analizar el perfil de presión, velocidad y temperatura.
- Realizar un estudio preliminar para la optimización del Reactor.
- Validar los resultados obtenidos a través de la simulación numérica garantizando la precisión y confiabilidad.

CAPÍTULO II

1 MARCO TEÓRICO.

1.1. Antecedentes de investigación.

1.1.1. Biomasa.

Consiste en la masa orgánica ya sea de origen vegetal, animal o derivada de otros procesos, y se ha investigado constantemente en su potencial para ser usado en la industria tanto en términos químicos como energéticos. La biomasa procede de forma directa o indirecta de la fotosíntesis, ya que esta permite la síntesis de compuestos orgánicos y se aprovecha para la obtención de energía (Arroyo, 2016).

Las características de la biomasa son específicas dependiendo del tipo, además estas identifican su uso en la gasificación o combustión. Las siguientes características son las más destacables en base a lo mencionado por Toscano (2009):

- Contenido de humedad
- Contenido de ceniza
- Contenido de materia volátil
- Composición elemental
- Poder calorífico
- Densidad aparente

Clasificación de la biomasa.

- Origen natural: Proviene de los ecosistemas naturales
- Residual: Dentro de esta categoría proviene residuos forestales, agrícolas, biodegradables, sólidos urbanos e industriales (Toscano,2009).

1.1.2. Tipos de Reactores usados en la pirolisis de biomasa.

El proceso de pirolisis debe producirse en ausencia de oxígeno para la descomposición de la biomasa, por ello los reactores que se utilizan son capaces de operar en condiciones que favorezcan el proceso de obtención como reducción de temperatura, reducción de oxidación, control de las salidas de gases y líquidos y además controlar la calidad del producto (Klug, 2012).

Reactor de pirolisis flash.

Mediante este tipo de reactor la cinética de la reacción tanto como la transferencia de masa y calor deben ser controlados durante el proceso y permite obtener mejores rendimientos en la salida de líquidos. La biomasa debe ingresar a temperaturas óptimas para la reacción ya que el descenso de temperatura significaría una mayor formación de coque (Klug, 2012).

Reactor de lecho fluidizado.

Es uno de los reactores más comunes para este proceso ya que permiten controlar la inercia térmica para la pirolisis y también la transmisión de calor. Sin embargo, requiere una separación rápida del “char” con el fin de evitar la presencia de catalizadores para la reacción de craqueo de los vapores (Greaves G, 2019).

Reactor ablativo

El aporte de calor se da mediante el contacto con la superficie caliente del reactor, de igual forma la velocidad de la reacción se limita al momento de la transferencia de calor. Esta velocidad incrementa al reducir el tamaño de las partículas, lo cual puede realizarse mediante la aplicación de una fuerza centrífuga o mecánica. La ventaja de estos reactores es que resulta más económico para realizar el proceso de pirolisis (Greaves G, 2019).

1.2. Referencias Teóricas

1.2.1. CDF en la Ingeniería Química.

La ingeniería química es una disciplina altamente versátil que se basa en principios fundamentales, como los balances de energía y materia. Sin embargo, las simulaciones computacionales desempeñan un papel importante al comprender procesos físicos y químicos complejos, permitiendo su optimización y control. En la mayoría de los procesos químicos industriales que involucran el flujo de fluidos o partículas, surge la necesidad de utilizar herramientas como la dinámica de fluidos computacional para modelar estos procesos discretos. La dinámica de fluidos computacional es una herramienta que resuelve ecuaciones fundamentales de flujo de fluidos y ecuaciones de conservación, lo que permite abordar operaciones unitarias comunes, como mezcla, reacción, separación y secado, entre otras. Mediante simulaciones de calidad, estas herramientas ayudan en el diseño de procesos y en la seguridad de estos. Además, permiten estudiar las condiciones de operación y desarrollar estrategias de mitigación en caso de operaciones no planificadas (Fletcher, 2022).

La CFD envuelve el análisis en sistemas como transferencia de calor, transferencia de masa, transferencia de momento y reacciones químicas, algunos ejemplos son:

- Hidrodinámica de barcos.
- Planta de energía: combustión en motores de combustión interna y gas
- Turbomaquinaria: flujos dentro de pasajes giratorios, difusores.
- Refrigeración de equipos
- Ingeniería de procesos químicos: mezcla, separación, moldeo de polímeros
- Ingeniería ambiental: distribución de contaminantes y efluentes
- Hidrología y oceanografía: caudales en ríos, estuarios, océanos (Versteeg & Malalasekera, 2007.).

1.2.2. ANSYS® fluent.

ANSYS® fluent es un software de simulación que permite el análisis detallado de flujo de fluidos y la transferencia de calor. Proporciona una amplia gama de herramientas que

permiten modelar de manera precisa los flujos y otros fenómenos físicos relacionados. Esta capacidad de modelado permite diseñar y optimizar equipos, así como resolver problemas en instalaciones existentes (ANSYS 2022).

El software ANSYS® fluent ofrece una valiosa perspectiva sobre cómo se comportará el flujo en el mundo real antes de la construcción física. Desarrollando productos de mayor calidad, reduciendo el tiempo de comercialización. Al simular y analizar los flujos, se puede identificar y abordar posibles problemas o limitación reduciendo el riesgo asociado a los diseños. Además, al proporcionar información detallada sobre el comportamiento del flujo, ANSYS fluent fomenta la innovación al permitir explorar diferentes escenarios y optimizar el rendimiento en los sistemas (ANSYS 2022).

Ansys Workbench™ se integra con software CAD (Diseño asistido por computador), cuenta con una función de generación automática de mallas controlando esta operación con un conjunto pequeño de parámetros lo que facilita su manejo. El software también ofrece una amplia gama de solucionadores que son capaces de simular con precisión tanto flujos newtonianos como no newtonianos, estos solucionadores proporcionan resultados altamente eficientes, precisos y rápidos. Fluent ofrece capacidades avanzadas para modelar flujos laminares y turbulentos además permite la simulación de fenómenos más complejos como fluidos multifásicos, reacciones químicas, radiación y dinámica de partículas. Posee herramientas de simulación electromagnética o mecánica estructural, que posibilita estudiar como el calor generado por componentes eléctricos afecta la temperatura de fluidos (ANSYS 2022).

1.2.3. Mallado

El método de los volúmenes finitos (MEF) se fundamenta en la subdivisión del dominio de estudio en subdominios más pequeños. En donde la función incógnita se expresa como la suma de las funciones de interpolación simples de esta manera, el problema originalmente tendría un numero infinito de grados de libertad se convierte en un problema finito. Al aplicar un sistema de ecuaciones algebraicas se obtiene la solución del problema (Díaz, 2000).

El mallado es la discretización del modelo de estudio que está formado por nodos y aristas que unidas forman superficies, las cuales se van generando hasta rodear por completo el objeto de estudio, esta malla de superficie está compuesta por triángulos, cuadriláteros o una combinación de ambos. Posteriormente, se construye una malla de volumen, la cual llena el espacio delimitado y está compuesta por tetraedros, hexágonos y pirámides (M. de Vehi, 2016.).

Cada nodo de la malla se calcula para determinar las propiedades físicas del fluido, interpolando el valor de estas en las aristas, cuanto mayor es el número de nodos en la malla más se aproximará el resultado a la realidad. Sin embargo, en algún punto el grado de mejora de resultado se vuelve insignificante, por lo que no es necesario continuar refinándola (Maria de Vehi, 2016.).

Mallado estructural y mallado no estructural.

El mallado de tipo estructural se construye de manera manual a partir de un gran bloque el cual será dividido en bloques más pequeños adaptándose a la superficie del modelo, este método es adecuado para geometrías sencillas. Para estructuras más complejas, se utiliza el mallado de tipo no estructural donde el programa crea automáticamente la malla alrededor del modelo utilizando diferentes métodos(Maria de Vehi, 2016.).

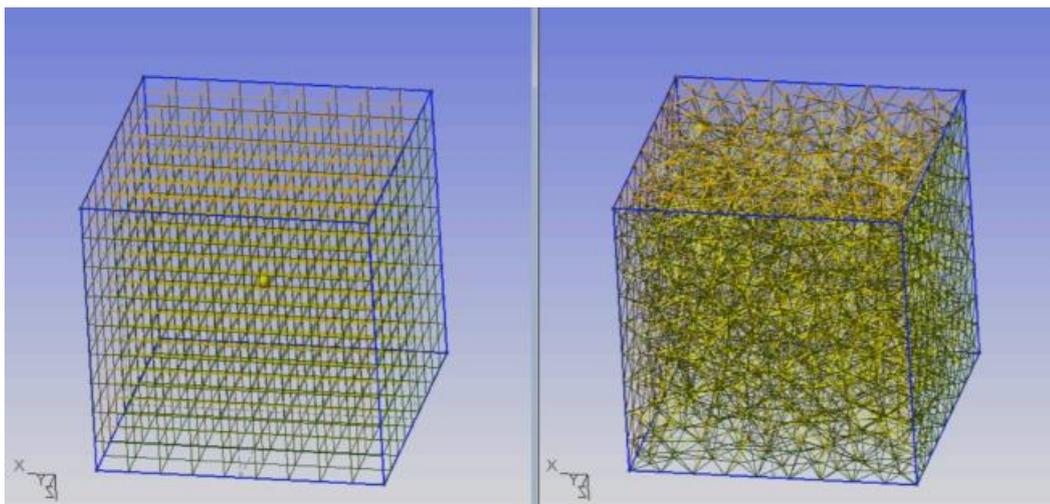


Ilustración 2-1. Mallado estructural y no estructural.

Fuente: Maria de Vehi, 2016.

1.2.4. Primera ley de la termodinámica.

La primera ley de la termodinámica, también conocida como el principio de conservación de la energía, estudia las relaciones entre las distintas formas de interacción de energía. Establece que la energía no se puede crear ni destruir durante un proceso solo se transforma. Este principio se basa en experimentos realizados por Joule, la primera ley se expresa mediante la ecuación (Cengel, Y. A., & Boles, M. A., 2010.).

$$\Delta E_{sistema} = E_{entrada} - E_{salida} \quad (EC.1)$$

Esta ecuación, conocida como balance de energía, se expresa como el cambio neto (aumento o disminución) de la energía total del sistema durante un proceso es igual a la diferencia entre la energía total que entra en el sistema y la energía total que sale del sistema durante el proceso (Cengel, Y. A., & Boles, M. A., 2010.).

Este balance de energía es aplicable a cualquier tipo de sistema que experimente cualquier clase de proceso, siempre en estado estacionario, es decir, aquellos sistemas en los que las variables no cambian con el tiempo. La energía puede transferirse en forma de calor, trabajo y flujo masico, los cambios de energía en los límites o fronteras del sistema representan la energía que gana o pierde un sistema durante el proceso (Cengel, Y. A., & Boles, M. A., 2010.).

Un sistema se refiere a un objeto o conjunto de objetos que se llega un análisis, dicho sistema tiene un límite definido llamado frontera o límite del sistema, que se elige y especifica al comienzo del análisis (Ghasem. N., & Henda, R., 2014.).

Un sistema aislado es un sistema que no intercambia calor, trabajo o material con el entorno. Un sistema cerrado, por su parte, permite el intercambio de calor y trabajo a través de su frontera, pero no de materia. Un sistema abierto puede intercambiar calor, trabajo y materia con sus alrededores (Ghasem. N., & Henda, R., 2014.).

Balances de energía en sistemas cerrados en estado estacionario.

El balance de energía es utilizado para determinar la cantidad de energía que ingresa o sale de unidad de proceso, calcula la energía requerida para el proceso y explora formas de reducir los requisitos de energía con el fin de mejorar la eficiencia y rentabilidad del proceso. En un sistema cerrado, la energía puede cruzar la frontera en forma de calor o trabajo (Ghasem. N., & Henda, R., 2014.).

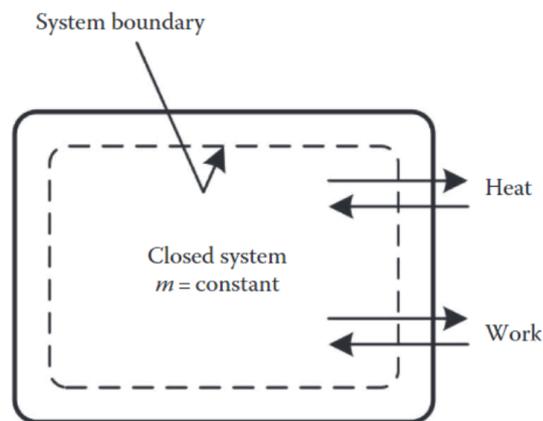


Ilustración 2-2. Balance de energía en sistemas cerrados.

Fuente. Ghasem. N., & Henda, R., 2014.

La ecuación para los balances de energía en sistemas cerrados es la siguiente:

$$Q - W = \Delta U + \Delta KE + \Delta PE \text{ (EC.2)}$$

En donde (Q) representa el calor, (W) el trabajo, (U) la energía interna, (KE) energía cinética, y (PE) energía potencial. El calor se considera positivo si fluye hacia el sistema, es decir, cuando el sistema gana calor. El trabajo es la energía que fluye en respuesta a cualquier fuerza impulsora. La energía interna es la energía asociada con los movimientos e iteraciones moleculares, atómicas y subatómicos. La energía cinética está asociada con el movimiento dirigido al sistema, mientras que la energía potencial está asociada al desplazamiento en dirección del campo gravitatorio (Ghasem. N., & Henda, R., 2014.).

Balances de energía en sistemas abiertos en estado estacionario.

En los sistemas abiertos, la materia cruza las fronteras del sistema. Se debe realizar trabajo para mover las corrientes de flujo de entrada a una presión de entrada hacia el sistema y se realiza trabajo alrededor del sistema para mover el fluido de salida a una presión de salida fuera del sistema, como se muestra en la figura 3 (Ghasem. N., & Henda, R., 2014.).

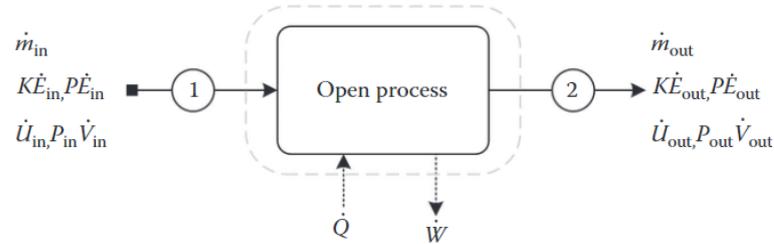


Ilustración 2-3. Balance de energía en sistemas abiertos

Fuente. Ghasem. N., & Henda, R., 2014.

La ecuación de balance de energía para sistemas abiertos en estado estacionario, sin considerar consumo o generación, es la siguiente:

$$\dot{Q} - \dot{W}_s = \Delta\dot{U} + \Delta\dot{K}E + \Delta\dot{P}E + \Delta(\dot{P}V) \text{ (EC.3).}$$

La entalpia (H) se define como la suma de la energía interna más el trabajo del flujo (PV) realizado en el sistema para empujar el flujo hacia adentro o hacia afuera del sistema:

$$H = U + PV \text{ (EC.4).}$$

El cambio en la tasa de transporte de entalpia se expresa como:

$$\Delta\dot{H} = \Delta\dot{U} + \Delta\dot{P}V \text{ (EC.5).}$$

Por lo tanto, la ecuación de balance de energía se puede expresar como:

$$\dot{Q} - \dot{W}_s = \Delta\dot{H} + \Delta\dot{K}E + \Delta\dot{P}E \text{ (EC.6).}$$

1.2.5. Transferencia de calor.

La transferencia de calor es una forma de energía que se puede transmitir de un sistema a otro debido a la diferencia de temperaturas. Esta rama de estudio se enfoca en entender las razones detrás de este fenómeno. Gracias al análisis termodinámico, es posible determinar la cantidad de calor transferida a medida que un sistema experimenta un proceso desde un estado de equilibrio a otro, sin tener en cuenta el tiempo que tomará este proceso. No puede haber una transferencia neta de calor entre dos medios que se encuentran a la misma temperatura (Cengel, Yunus A., 2007.).

La transferencia de calor es de gran importancia en el diseño de numerosos dispositivos, como radiadores de automóviles y diversos componentes en plantas generadoras de electricidad. En ingeniería, equipos como calderas, intercambiadores de calor, hornos, entre otros, son diseñados considerando el análisis de transferencia de calor para lograr un funcionamiento eficiente y seguro (Cengel, Yunus A., 2007.).

1.2.6. Métodos de transferencia de calor.

La transferencia de calor ocurre siempre desde un sistema con mayor temperatura hacia otro con menor temperatura, hasta que ambos alcanzan un equilibrio térmico en otras palabras termina cuando sus temperaturas sean las mismas. El calor se puede transferir de tres formas diferentes: conducción, convección y radiación (Cengel, Yunus A., 2007.).

Conducción.

La transferencia de calor por conducción es un proceso en el cual la energía térmica se transfiere desde partículas más energéticas hacia las adyacentes con menos energía. Este fenómeno ocurre en sólidos, líquidos y gases debido a la interacción de partículas. En caso de gases y líquidos, se produce por las colisiones y difusión de moléculas, mientras que en sólidos se debe a las vibraciones de las moléculas. El calor se propaga en dirección de la temperatura decreciente. La rapidez y la tasa de transferencia de calor depende de factores como la geometría de la materia, su espesor, su conductividad térmica, el material del que esta hecho y la diferencia de temperatura entre las regiones involucradas (Cengel, Yunus A., 2007.).

La ecuación que describe la razón de la conducción de calor está dada por:

$$\dot{Q}_{cond} = kA \frac{T_1 - T_2}{\Delta x} = -kA \frac{\Delta T}{\Delta x} \quad (W) \quad (Ec.7).$$

En donde A representa el área de transferencia de calor siempre es perpendicular, la conductividad térmica dada por (k), x el espesor y \dot{Q}_{cond} es la razón de transferencia de calor por conducción (Cengel, Yunus A., 2007.).

Convección:

La convección es una forma de transferencia de calor que ocurre entre una superficie sólida y un fluido adyacente que se encuentra en movimiento. Esta transferencia de calor combina los efectos de conducción y del movimiento del fluido. Si no hay movimiento significativo del fluido, la transferencia de calor entre la superficie sólida y el fluido ocurre principalmente por conducción. Cuando el fluido es forzado a fluir sobre la superficie, se denomina convección forzada, de lo contrario, se conoce como convección natural. El flujo del fluido aumenta la transferencia de calor, pero también complica el análisis de la razón de transferencia de calor (Cengel, Yunus A., 2007.).

La tasa de transferencia de calor por convección es proporcional a la diferencia de temperatura entre la superficie sólida y el fluido, y puede expresarse mediante la Ley de enfriamiento de Newton (Cengel, Yunus A., 2007.).

$$\dot{Q}_{conv} = hA_s(T_s - T_\infty) \quad (W) \quad (EC.8)$$

En donde h es el coeficiente de transferencia de calor por convección en $W/m^2 \cdot C$, A_s es el área superficial por la cual se produce la transferencia de calor, T_s es la temperatura de la superficie y T_∞ es la temperatura alejada de la superficie (Cengel, Yunus A., 2007.).

El coeficiente de transferencia de calor por convección no es una propiedad del fluido y se calcula de forma experimental. Depende de todas las variables sobre la convección como la geometría de la superficie, la naturaleza del movimiento del fluido (Cengel, Yunus A., 2007.).

Radiación:

Es la energía emitida en forma de ondas electromagnéticas si comparamos con la conducción y la convección esta es más rápida y no requiere la presencia de un medio interventor. Todos los cuerpos a una temperatura mayor al cero absoluto emiten radiación térmica se puede considerar como un fenómeno volumétrico sin embargo se considera para sólidos como un fenómeno superficial ya que las radiaciones emitidas desde el interior nunca pueden llegar a la superficie (Cengel, Yunus A., 2007.).

1.2.7. Ecuación de continuidad.

La ley de conservación de la masa establece que la masa de un sistema cerrado se mantiene constante a lo largo del tiempo, la materia no puede ser creada ni destruida, solo transformada. La ecuación de continuidad, no se considera ningún aporte de flujo difusivo especialmente en un fluido en reposo, donde cualquier cambio en la masa implicaría un desplazamiento del fluido (Blazek, 2015a).

Analizando un volumen de control finito, la cantidad que se conserva es la densidad del fluido. Esto significa que la densidad permanece constante en cada punto (Blazek, 2015a).

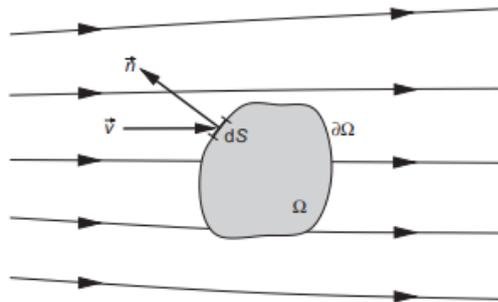


Ilustración 2-4. Volumen de control finito.

Fuente. Blazek 2015

En términos matemáticos expresada en forma integral la ecuación de continuidad: ley de la conservación de la masa es:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho \, d\Omega + \oint_{\partial\Omega} \rho (\vec{v} \cdot \vec{n}) \, dS = 0 \quad (\text{EC.9})$$

Donde:

ρ es la densidad.

n es el vector unitario normal.

dS es el área superficial elemental.

v es la velocidad del flujo.

Ω tasa de cambio de tiempo de la masa total dentro del volumen finito.

1.2.8. Ecuación de Navier-Stokes.

Las ecuaciones de movimiento, que se expresan en forma diferencial, describen el comportamiento de un fluido de supuesta continuidad. En el contexto de la CFD, las soluciones se obtienen de manera numérica en puntos discretos en lugar de considerar cada punto del espacio de forma continua, es esencial tener en cuenta distintos casos de flujo. La ley de conservación de la masa para fluidos a granel y la segunda del movimiento de Newton caracterizan el movimiento del fluido. Estas ecuaciones, conocidas también como las ecuaciones de Navier-Stokes, son válidas tanto para el espacio continuo como para el espacio discretizado (Date, Anil W., 2005.).

Date, Anil W menciona que se deben considerar distintos tipos de fluido, como el hidrostático, no viscoso (que representa el flujo incompresible con densidad constante) y el compresible, donde la densidad varía en función de la temperatura y presión. Dichas ecuaciones de Navier-Stokes son fundamentales para obtener soluciones precisas y confiables en la simulación computacional de fluidos, las cuales deben leerse como:

$$\rho \frac{Du}{Dt} = -\frac{\partial(p-q)}{\partial x} + \frac{\partial\tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial\tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial\tau_{zx}}{\partial z} \quad (\text{EC.10})$$

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = -\frac{\partial(p-q)}{\partial y} + \frac{\partial\tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial\tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial\tau_{zy}}{\partial z} \quad (\text{EC.11})$$

$$\rho \frac{Du}{Dt} = -\frac{\partial(p-q)}{\partial z} + \frac{\partial\tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial\tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial\tau_{zz}}{\partial z} \quad (\text{EC.12})$$

1.2.9. Discretización.

La discretización, es decir la aproximación numérica de las ecuaciones de Navier-Stokes, se manifiesta en muchos métodos diferentes los cuales podemos dividirlos en tres principales: esquemas de diferencias finitas, de volúmenes finitos y de elementos finitos. Estos métodos se basan en cuadrículas estructuradas y no estructuradas para discretizar las ecuaciones gobernantes (Blazek, 2015b).

2.2.9.1. Método de diferencias finitas.

El método de diferencias finitas opera directamente a partir de las ecuaciones gobernantes diferenciales, utilizando la expansión de la serie de Taylor de las derivadas de las variables de flujo. A pesar de su simplicidad, este método puede lograr aproximaciones de alta precisión de órdenes superiores. Sin embargo, su rango de aplicabilidad es limitado, ya que no puede ser directamente aplicado en coordenadas ajustadas al cuerpo. Además, este método solo es adecuado para geometrías simples (Blazek, 2015b).

2.2.9.2. Método de los volúmenes finitos.

El método de volumen minimitos se basa en la formulación integral de las ecuaciones de conservación, específicamente de las ecuaciones de Navier-Stokes. Para discretizar estas ecuaciones, se divide el espacio físico en varios volúmenes de control arbitrarios. Luego se realiza una aproximación al sumar los flujos que cruzan las caras individuales de cada volumen de control. Existen dos enfoques fundamentales relacionados con la cuadrícula: el esquema centrado en las celdas y el esquema celda-vértice. Este método es altamente flexible, aplicable tanto a cuadrículas estructuradas como no estructuradas, y es adecuado para modelar flujos complejos alrededor o dentro de geometrías complejas (Blazek, 2015b).

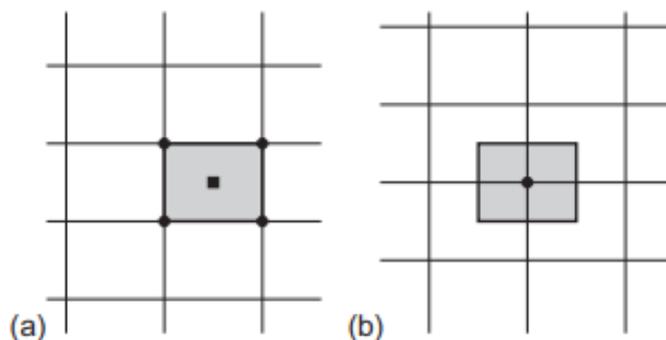


Ilustración 2-5. Volumen de control en celdas (a) y volumen de control celda-vértice (b).

Fuente. Blazek 2015

2.2.9.3. Método de los elementos finitos.

Este método originalmente fue solo para análisis estructural, el método se aplica en general a la solución de las ecuaciones de Navier-Stokes y comienza con una subdivisión del espacio físico en elementos discretos (formas triangulares o cuadriláteras en 2D y en formas tetraédricas o hexaédricas en formas 3D) se debe generar una cuadrícula no estructural luego se especifica ciertos puntos en los límites donde la solución del problema tiene para ser encontrado. Se emplea en elementos lineales o de orden superior es necesario transformar las ecuaciones de la diferencial a una forma integral equivalente, los residuos se consideran como los errores de aproximación de la solución. Además, el método de los elementos finitos se utiliza para fluidos no newtonianos (Blazek, 2015b).

1.2.10. Pirosis

La pirolisis, un proceso endotérmico fundamental, implica la descomposición térmica de materia orgánica o polímeros. Este fenómeno ocurre al elevar las temperaturas entre 300 y 800 °C. Los productos resultantes de la pirolisis abarcan desde gases condensables hasta líquidos hidrocarburos y sólidos, y su composición puede variar según factores como la presión, el flujo y la carga de materia prima (Rodríguez, J., Tunjacipa, M., 2023).

El ciclo de operación inicia con la introducción de la materia prima en el reactor. A medida que se incrementa la temperatura, las fracciones se desplazan hacia la salida, donde la corriente de gas se dirige al condensador. Este dispositivo reduce la temperatura

de la corriente de gas de pirolisis, liberándola y permitiendo que las fracciones condensadas en forma líquida caigan por la salida (Rodríguez, J., Tunjacipa,M., 2023).

Existen tres clasificaciones principales de pirolisis: convencional, rápida y flash. Entre las condiciones que pueden variar se encuentran la tasa de calentamiento, el ambiente de reacción, el uso de catalizadores, el tiempo de retención y la forma de calentamiento (Rodríguez, J., Tunjacipa,M., 2023).

1.2.11. Reactor de Pirolisis tipo Batch

El reactor de pirolisis de tipo batch se distingue por albergar un depósito cerrado con una periferia calefactora para los reactivos. En muchos casos, incorpora un dispositivo de agitación mecánica. A diferencia de otros reactores, este tipo no utiliza flujos inertes para desplazar los volátiles generados durante la reacción. Esta particularidad puede inducir reacciones secundarias, afectando la eficiencia del equipo y dando lugar a productos no deseados. Al diseñar y operar un reactor de pirolisis tipo batch, es crucial considerar estos aspectos para optimizar su rendimiento y obtener resultados deseados (Rodríguez, J., Tunjacipa,M., 2023).

CAPÍTULO III

2 MARCO METODOLÓGICO.

3.1. Estructura del desarrollo metodológico del proceso de simulación.

Este estudio consiste en la simulación CFD de un reactor de pirolisis para el posterior análisis. Para asegurar el cumplimiento de los objetivos propuestos, este trabajo de integración curricular seguirá una serie de pasos detallados posteriormente:

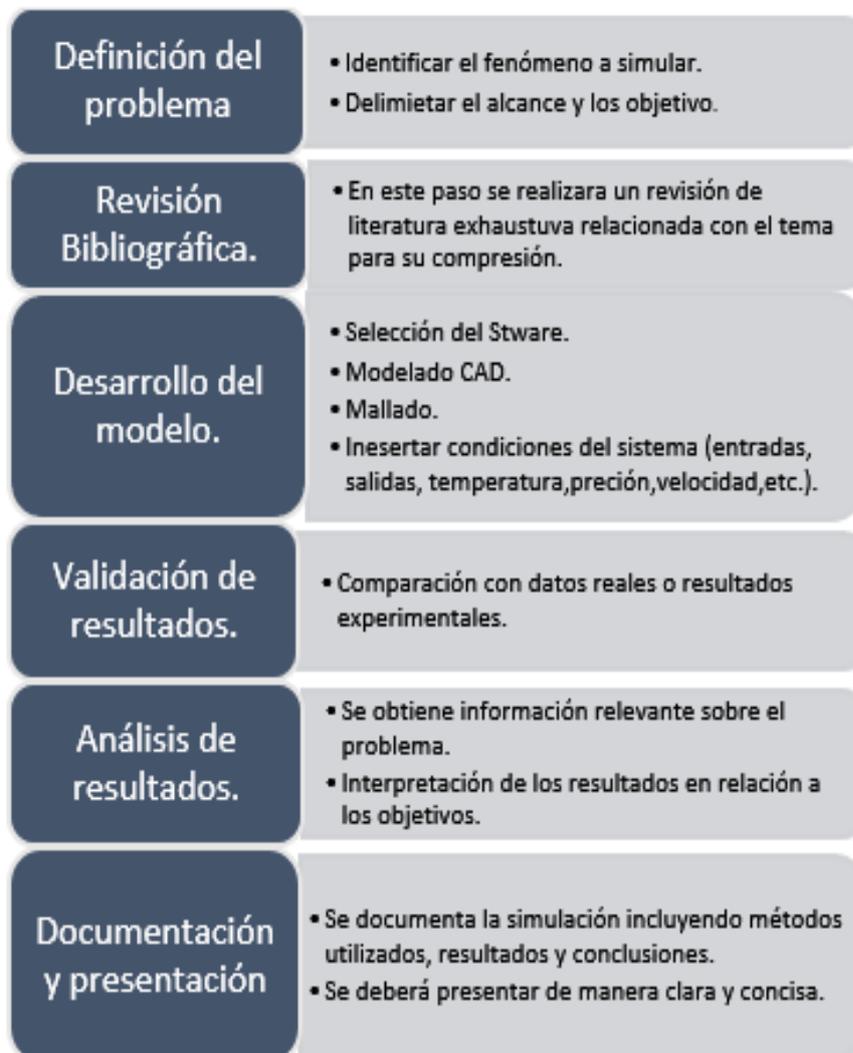


Ilustración 3-1: Metodología del desarrollo del trabajo.

Realizado por: Castro Angel, 2024.

3.2 Materiales.

La utilización de materiales y recursos desempeñan un papel crucial en el desarrollo y ejecución de este trabajo a continuación se muestra una visión detallada de los materiales utilizados en el estudio en cuestión.

Tabla 3-1: Elementos utilizados para la realización del proyecto.

Elementos	Descripción
Bibliografía	<ul style="list-style-type: none">➤ Artículos relacionados a la modelación y simulación de reactores de pirolisis en CFD.➤ Tesis relacionadas a temas de pirolisis o en su defecto a simulaciones de reactores de pirolisis.➤ Videos multimedia usada como herramienta para la utilización correcta de ANSYS ® fluent.
Softwares	<ul style="list-style-type: none">➤ ANSYS ® Student 2023 R1.➤ Paquete Microsoft Office.
Computador	Características del computador: <ul style="list-style-type: none">➤ Microsoft Windows 11-64 Bits.➤ 16 GB de memoria RAM➤ Procesador Ryzen 7 5700U➤ Tarjeta gráfica Radeon Graphics 1.80 GHz

Realizado por: Castro Angel, 2024.

3.3. Estudio bibliográfico.

Se realizó una revisión bibliográfica con la finalidad de encontrar parámetros y condiciones en la que el sistema opera, a su vez se necesitó los datos resultantes de la simulación del artículo el cual nos permitirá comparar y validar los resultados obtenidos. En dicho

artículo se presenta un reactor de pirólisis de biomasa en forma de V. En la tabla 3-2 se muestra el artículo en el cual es basado este proyecto para su realización:

Tabla 3-2: Reseña del artículo revisado.

Autoría	Nombre del artículo.	Instrumento.	Resumen.
(Zhang et al., 2019)	Simulación numérica y experimento sobre la mejora catalítica de vapores de pirólisis de biomasa en reactores descendentes en forma de V	Reactor de pirólisis en forma de V	Trata de una simulación CFD que investiga la mejora catalítica de los vapores de pirólisis de biomasa en un reactor en forma de V, este diseño aumenta la frecuencia de contacto, aumenta la eficiencia catalítica en tiempos cortos de contacto.

Realizado por: Castro Angel, 2024.

3.3. Diseño asistido por computador (CAD) y geometría.

Para el diseño asistido por computador se utilizó la herramienta Ansys DesignModeler el cual nos permitió generar la geometría del reactor en forma de V para la posterior simulación.

3.3.1. Geometría del reactor en forma de V.

En primera instancia después de la revisión bibliográfica se replicó el reactor de pirólisis de biomasa en forma de V a través de la herramienta DesignModeler de ANSYS®, el reactor cuenta con dos entradas en la parte superior, en la entrada superior vertical se encuentra la entrada del catalizador y en la entrada horizontal los vapores de pirólisis. El cual está conectado un tubo recto, al cual se une un tubo con una inclinación de 225 grados en L2 y L3 y extenderse un tramo para conectarse nuevamente con un tubo de 90 grados con respecto a L2 y L3 y se extiende hasta finalmente encontrar la salida del reactor.

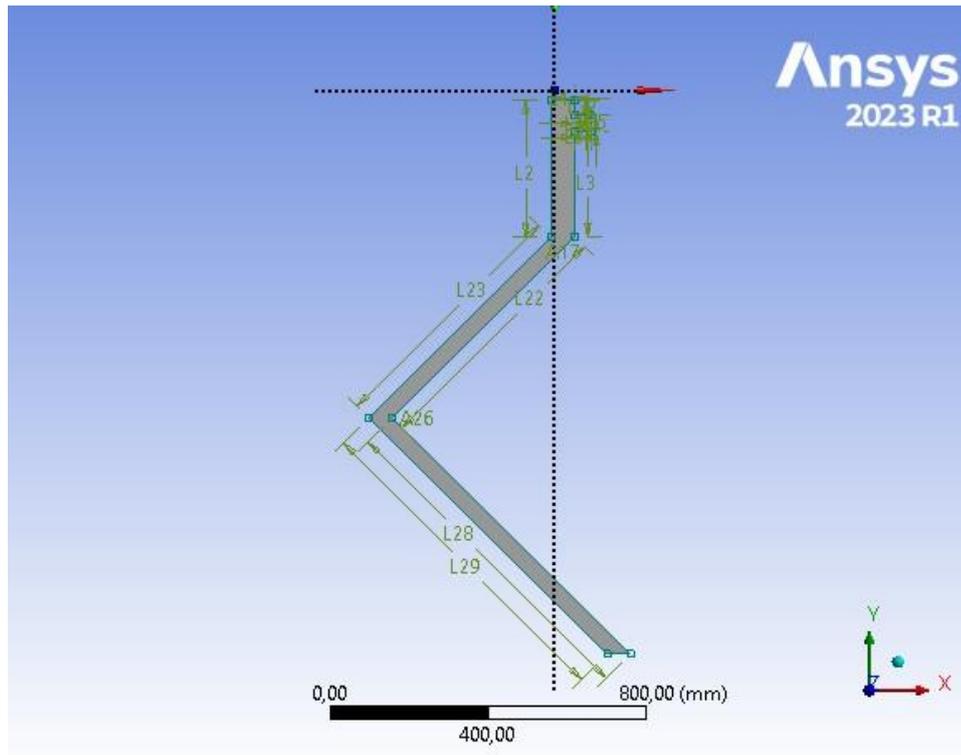


Ilustración 3-2: Geometría del reactor de pirolisis en forma de V.

Realizado por: Castro Angel, 2024.

3.3.2. Acotamiento de la geometría.

En la ilustración 3-2 muestra la parte superior de la geometría comenzando la cota L1 la cual corresponde a la entrada del catalizador, con un diámetro de 60 mm. La entrada horizontal cuenta con un diámetro de 40 mm L35, entre la entrada vertical hasta la horizontal se tiene una longitud de 40 mm L32. Toda la longitud del tubo desde la entrada vertical hasta la primera inclinación es de 350 mm L2.

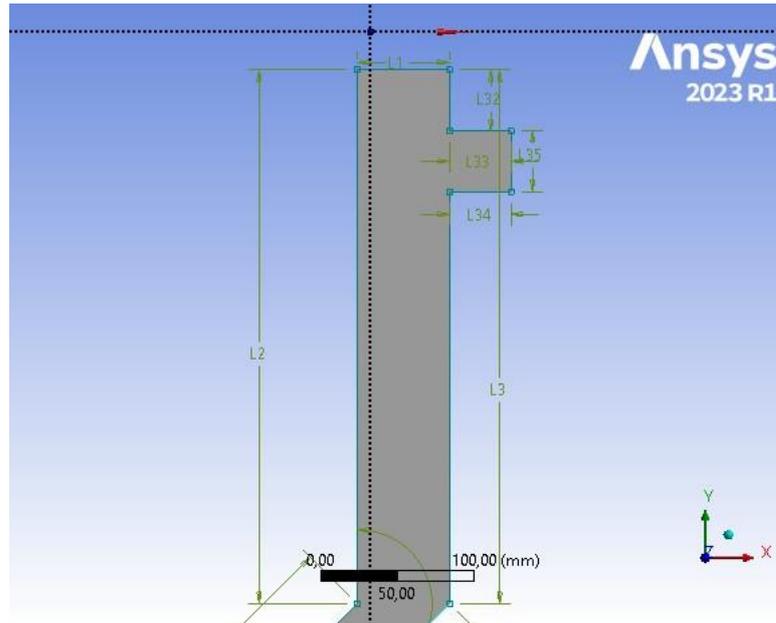


Ilustración 3-3: Geometría de la parte superior del reactor.

Realizado por: Castro Angel, 2024.

La primera inclinación cuenta con un ángulo 225 grados A17, lo forma entre L2 y L23 este último cuenta con una longitud de 650 mm.

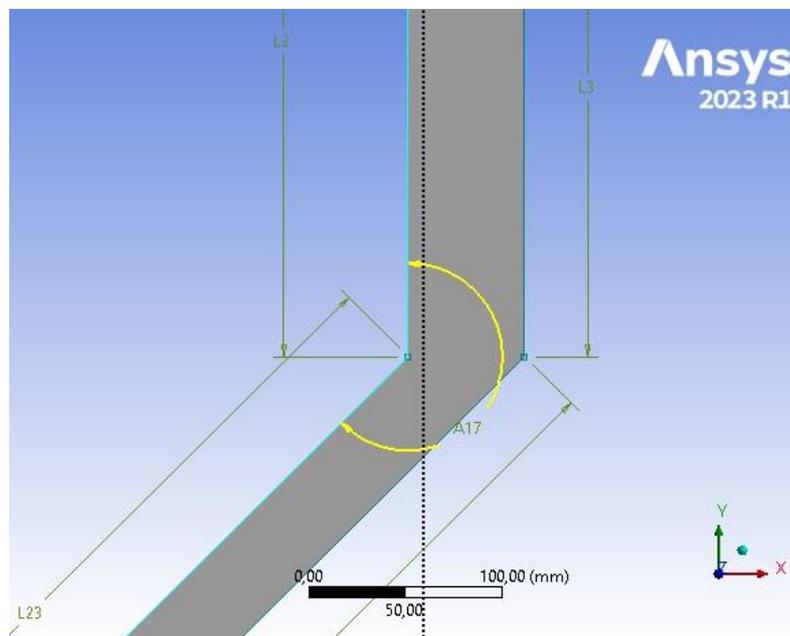


Ilustración 3-4: Geometría del reactor, primera inclinación.

Realizado por: Castro Angel, 2024.

Finalmente, este tubo se conecta con otro dando una inclinación de 90 grados A26 que lo forma entre L22 y L28. L29 cuenta con una longitud de 850 mm.

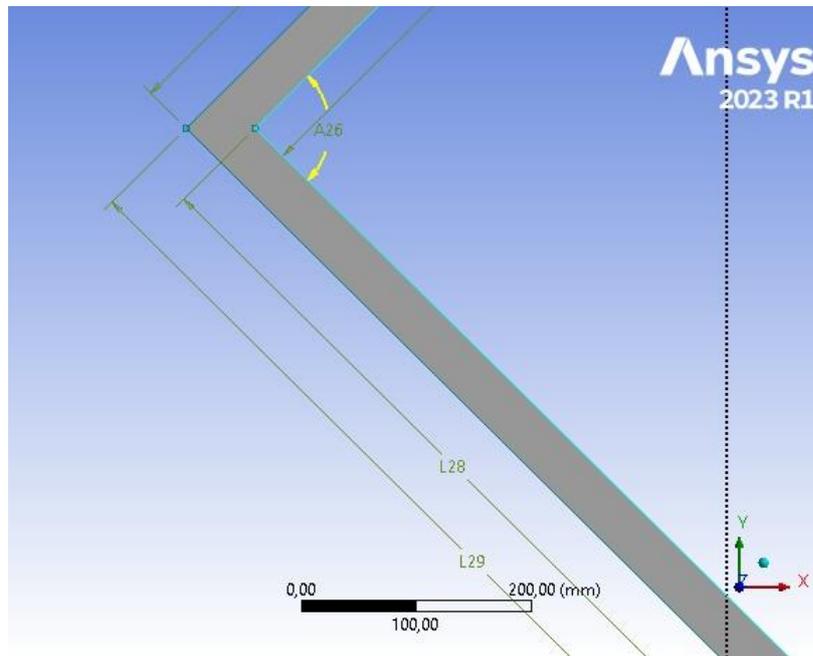


Ilustración 3-5: Geometría del reactor, parte final.

Realizado por: Castro Angel, 2024.

3.4. Mallado de la geometría.

Siguiendo con la secuencia mencionada en la metodología se encuentra el mallado el cual es una etapa fundamental para la simulación, nos permite representar el dominio del flujo, detalles de la parte sólida de la geometría, etc. A través del mallado se permite capturar detalles del flujo además es esencial para la precisión de resultados mientras más fina sea la malla mayor será la calidad de esta en mención.

3.4.1. Generación de malla.

El mallado no estructurado nos ofrece veneficios como flexibilidad al modelar el sistema complejos o geometrías irregulares, este se amolda a cambios de la geometría del sistema, etc., por este motivo fue seleccionado para la simulación de este estudio.

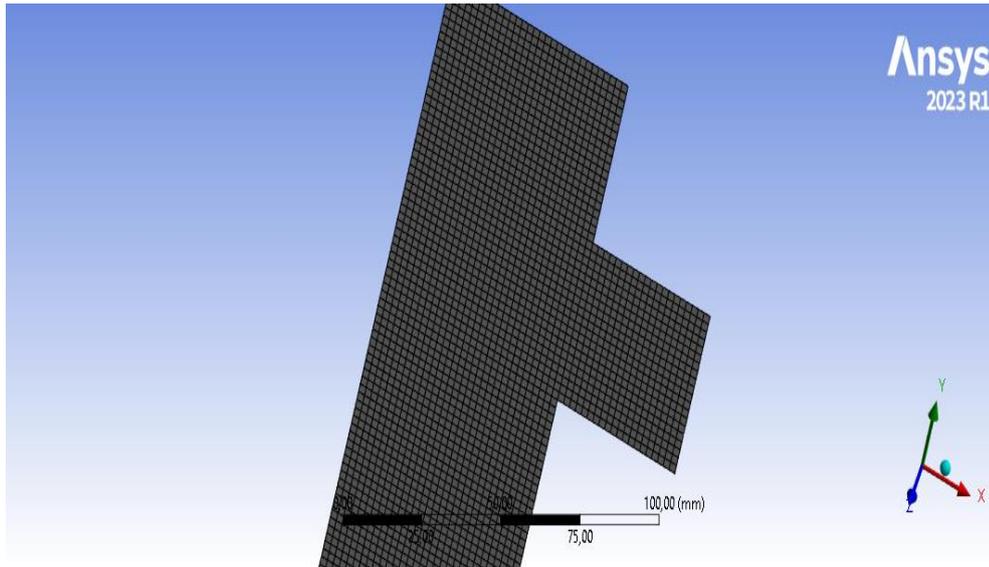


Ilustración 3-6: Mallado de la geometría.

Realizado por: Castro Angel, 2024.

En este punto se realiza la discretización de la geometría en la cual se especifica las entradas, salidas y el cuerpo, también se define la estructura sólida y por la cual pasa el líquido esto servirá más adelante para los parámetros de operación. Se dará nombres a cada uno de la segmentación de la geometría dependiendo a que segmento pertenece en la ilustración 3-7 se muestra cómo se definirá el cuerpo (wall) de la geometría.

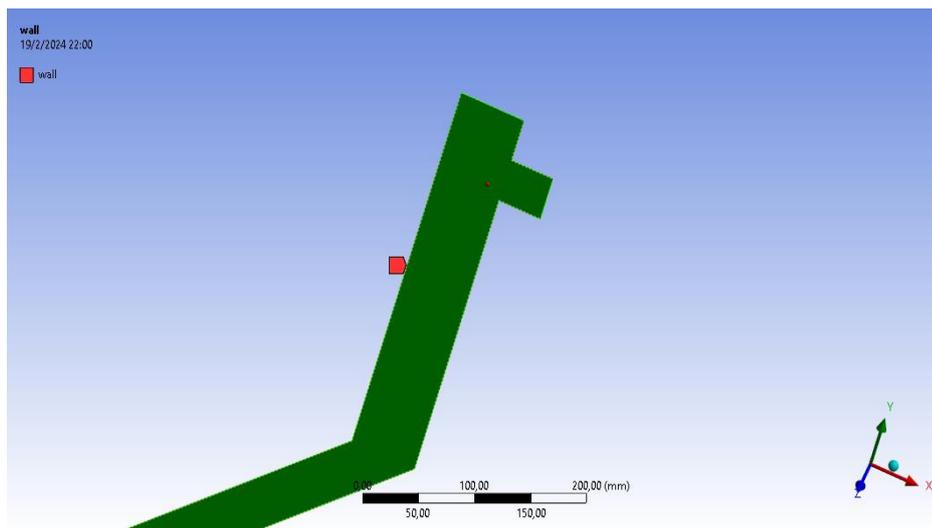
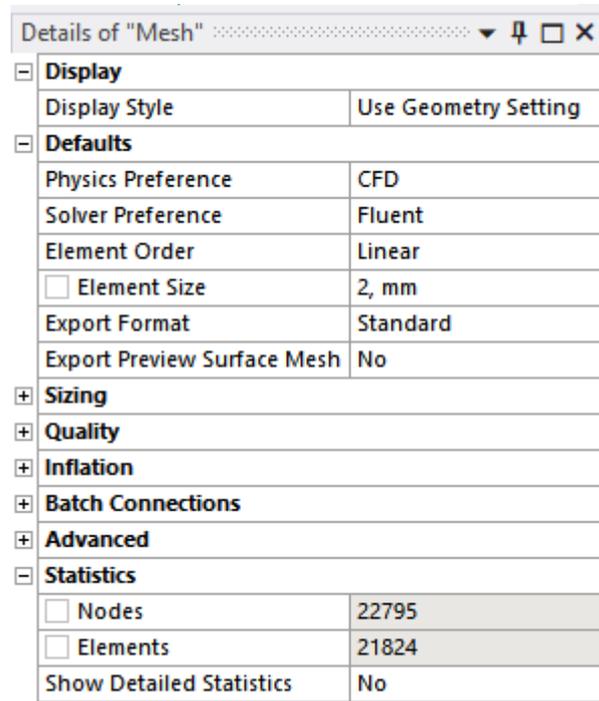


Ilustración 3-7: Discretización del cuerpo de la geometría.

Realizado por: Castro Angel, 2024.

Al mallar la geometría se ocupó un tamaño de elemento de 2 mm, y se obtuvo un total de 22795 nodos y 21824 elementos.



Details of "Mesh"	
<input type="checkbox"/> Display	
Display Style	Use Geometry Setting
<input type="checkbox"/> Defaults	
Physics Preference	CFD
Solver Preference	Fluent
Element Order	Linear
<input type="checkbox"/> Element Size	2, mm
Export Format	Standard
Export Preview Surface Mesh	No
<input type="checkbox"/> Sizing	
<input type="checkbox"/> Quality	
<input type="checkbox"/> Inflation	
<input type="checkbox"/> Batch Connections	
<input type="checkbox"/> Advanced	
<input type="checkbox"/> Statistics	
<input type="checkbox"/> Nodes	22795
<input type="checkbox"/> Elements	21824
Show Detailed Statistics	No

Ilustración 3-8: Detalles de la malla.

Realizado por: Castro Angel, 2024.

3.5. Parámetros del sistema.

Después de la construcción de la geometría, mallado, el siguiente paso en la metodología para la simulación es la caracterización de las condiciones de frontera, esto incluye parámetros como: propiedades del fluido, modelo de turbulencia, materiales utilizados, variables del proceso, condiciones como la combustión.

3.5.1. Condiciones de frontera.

Según las condiciones de entrada que se define en el artículo de Zhang, et al., (2019), entra aire con una velocidad de (1.2 m/s) a una temperatura de 378 kelvin mientras que la biomasa entra a (0.5 m/s) a una temperatura de 780 kelvin.

3.5.2. Características del sistema.

La tabla 3-3 exhibe las directrices, materiales utilizados, modelos, parámetros aplicados en el proceso de simulación CFD, las cuales han sido resumidas y especificadas a continuación:

Tabla 3-3: Características de la simulación CFD.

Criterio.		Descripción.
Materiales.		<ul style="list-style-type: none"> ➤ Wood. ➤ Aire. ➤ Nitrógeno. ➤ Oxígeno. ➤ Dióxido de carbono.
Species Model	Model.	➤ Species transport.
	Mixture properties	➤ Wood-volatiles-aire.
	Turbulence-Chemistry Interaction.	➤ Eddy-Dissipation
	Reactions.	➤ Volumetric.
Viscous Model		➤ K-epsilon (2eqn).
Discrete Phase	Injection Type	➤ Surface
	Injection Surfaces	➤ Biomass-inlet
	Particle Type	➤ Combusting
	Material	➤ Wood

	Diameter Distrubution	➤ Uniform
	Devolatilizing Species	➤ Wood_vol

Realizado por: Castro Angel, 2024.

CAPITULO IV

3 RESULTADOS.

En este punto de la investigación se detallará los resultados obtenidos a través de la simulación del reactor de pirolisis descendente en forma de v, la cual se alimenta de biomasa (madera) arrastrado por aire, en este se produce descomposición térmica del material orgánico generando productos como gases, líquidos y sólidos carbonáceos.

Los resultados muestran la velocidad, presión y temperatura, a través de esta sección se busca proporcionar una visión clara y concisa de los resultados de la investigación, además se presentan los valores de las fracciones de los componentes involucrados en el sistema.

4.1.Simulación.

Una vez una vez de ubicar los parámetros y condiciones de entrada del sistema se estable el número de iteraciones. Estas iteraciones hacen referencia al número de veces que se resuelve las ecuaciones que describen el comportamiento del fluido. La tabla 4-1 resume las iteraciones empleadas y la convergencia aproximada que fue utilizada en la simulación.

Tabla 4-1. Convergencia y numero de iteraciones.

Geometría.	Convergencia.	Numero de iteraciones.
Reactor descendente en forma de V.	527.	1000.

Realizado por: Castro Angel, 2024.

En cuanto a la convergencia se obtuvo aproximadamente en 527 iteraciones, pero cabe mención que se realizaron cambios hasta llegar a una respuesta confiable para validar la simulación. La ilustración 4-1 muestra estos cambios siendo cada pico uno de los cambios antes mencionados, también se observa un criterio de convergencia con una tolerancia de $1 * 10^{-6}$.

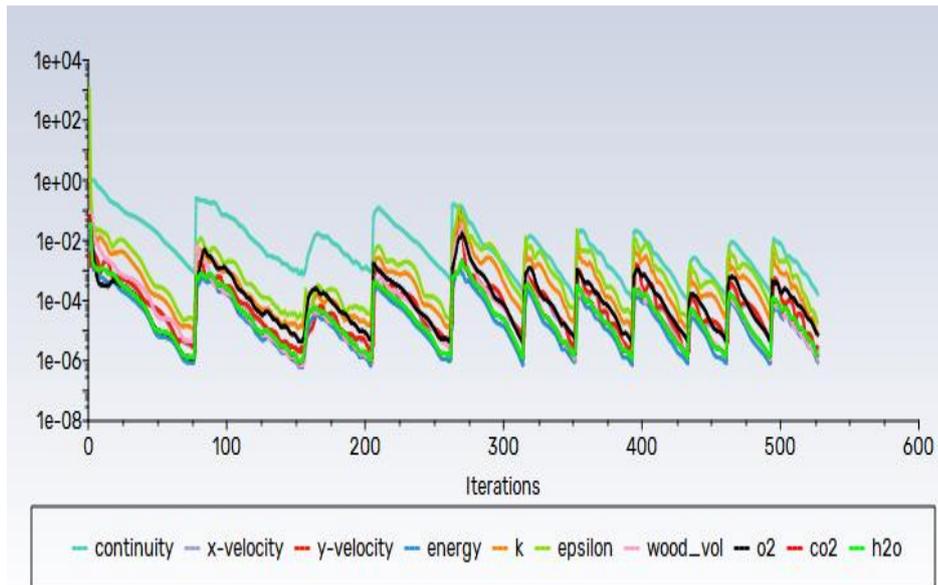


Ilustración 4-1: Remanentes de la simulación.

Realizado por: Castro Angel, 2024.

Para la validación de la simulación de dinámica de fluidos computacional se compararán los resultados obtenidos con los resultados de Zhang et al., 2019, utilizando la ecuación del error porcentual que existe entre los resultados. Esta ecuación nos permitirá cuantificar la discrepancia entre resultados evaluando la precisión de los resultados dando confiabilidad y exactitud de la simulación. 12

$$Error(\%) = \left| \frac{x-x_0}{x_0} \right| * 100 \quad (EC-13)$$

Donde:

x = cálculo aproximado.

x_0 = calculo real.

Tabla 4.2. Validación.

Variables evaluadas.	Resultados de la simulación.	Resultados de Zhang, et al., (2019).	Error (%).
Velocidad. (m/s)	2.7922	2.80	0.27
Fracción mática. (%)	53	50	6
Conversión. (%)	58	65	10.76

Realizado por: Castro Angel, 2024.

4.2. Análisis de la velocidad.

La ilustración 4-2 muestra los contornos de distribución de la velocidad en la que notamos una velocidad máxima de 2.7922 m/s, en el reactor descendente en forma de V se produce un intercambio de impulso en las áreas de giro debió a los cambios en el ángulo del tubo.

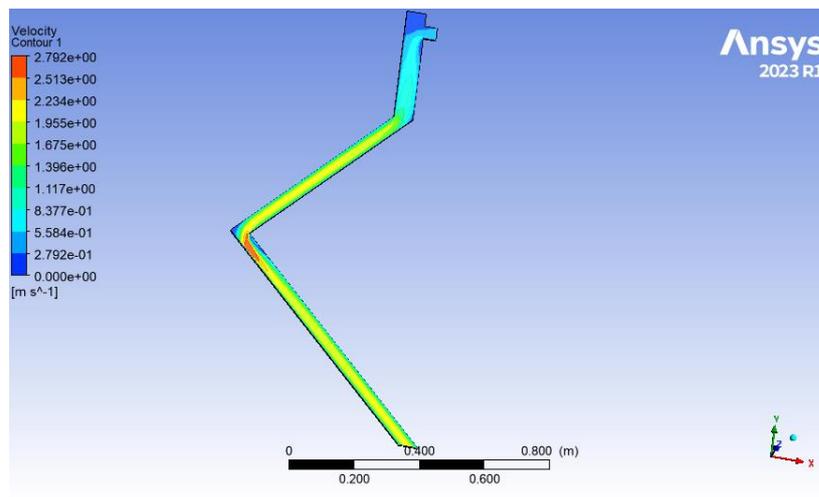


Ilustración 4-2: Contorno de velocidad.

Realizado por: Castro Angel, 2024.

Debido al flujo intenso por el flujo turbulento se produce remolinos e intercambio de impulso entre las dos fases. En la transición de sección que se presenta en forma de codo, se observa un patrón de velocidad particular. En la pared interior del codo, el flujo se reduce prácticamente a cero, mientras que, al producirse un cambio de sección perpendicular al flujo, la velocidad aumenta. En esta región, donde no hay contacto con la pared, por ende, la conversión podría disminuir.

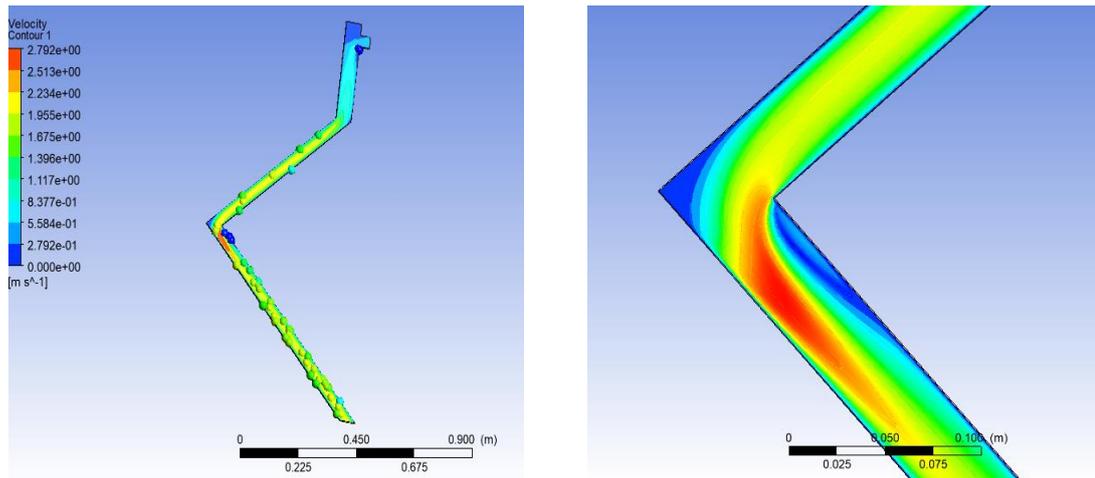


Ilustración 4-3: Cambio de velocidad en el codo.

Realizado por: Castro Angel, 2024.

En la ilustración 4-3, se visualiza la trayectoria que sigue el flujo en el cuerpo del reactor, se detalla una variación de velocidad que parte de un mínimo hasta un máximo a lo largo de todo el sistema. Con una particularidad en la parte denominada codo, la cual se registra una celeridad máxima de 2.792 m/s, siendo este el punto crítico de interés para el análisis.

4.2. Análisis de la presión.

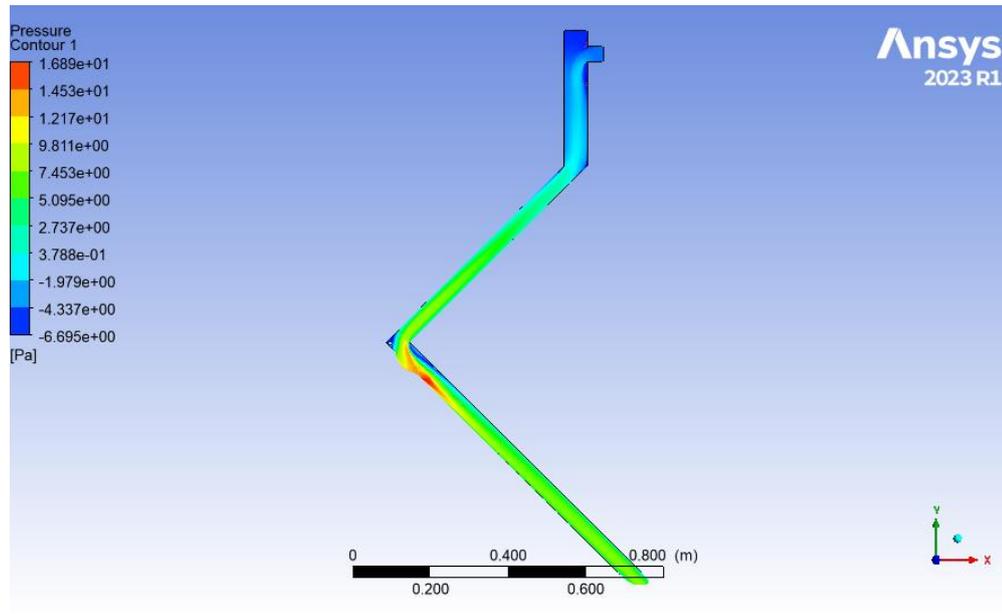


Ilustración 4-4: Variación de la Presión.

Realizado por: Castro Angel, 2024.

A lo largo de la trayectoria existen zonas de alta y baja presión como se describe en la ilustración 4-4, se visualiza una sección de inicio con una presión mínima que cambia a lo largo del perfil, donde se han producido puntos críticos o lugares que ha aumentado considerablemente la presión con respecto a la presión de entrada.

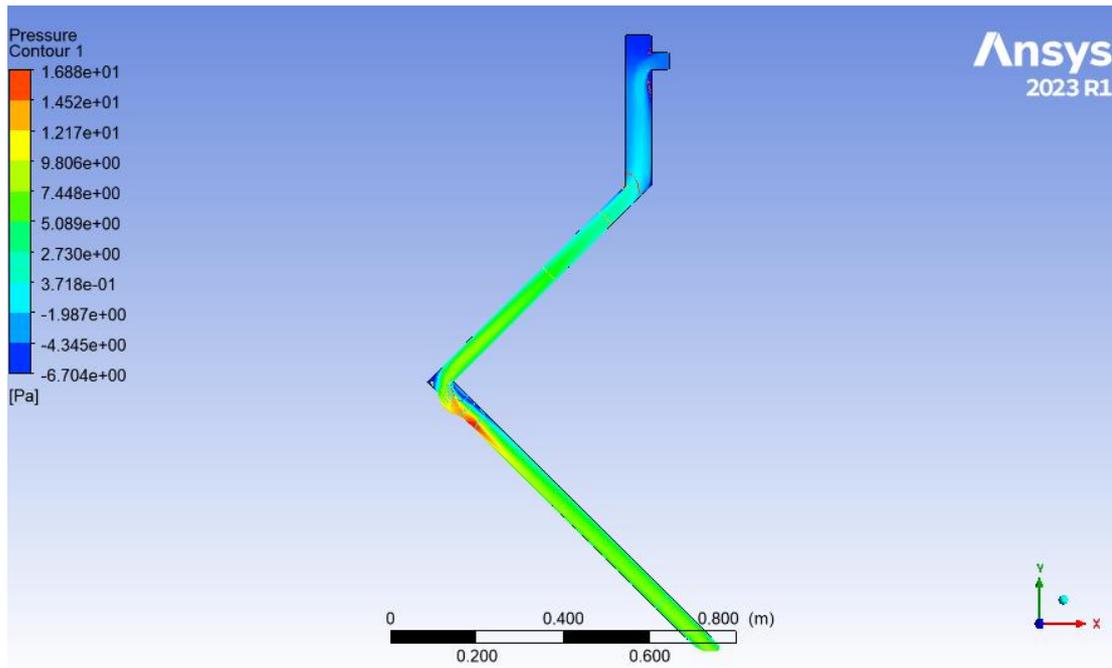


Ilustración 4-5: Gradiente de Presión.

Realizado por: Castro Angel, 2024.

El gradiente de presión que se encuentra presente en el sistema revela varios puntos críticos, al tener en cuenta el resultado obtenido por el software considerando el resultado como una presión manométrica como se muestra en la ilustración 4-5, se examina la parte denominada codo, donde se detecta una pequeña zona con una singularidad. Está área, ligeramente por debajo de la presión atmosférica, es la responsable de formar un vórtice en el cambio de sección, la cual produce daños en el material a lo largo del tiempo, debido al choque de las partículas en ese punto.

4.3. Análisis de la temperatura.

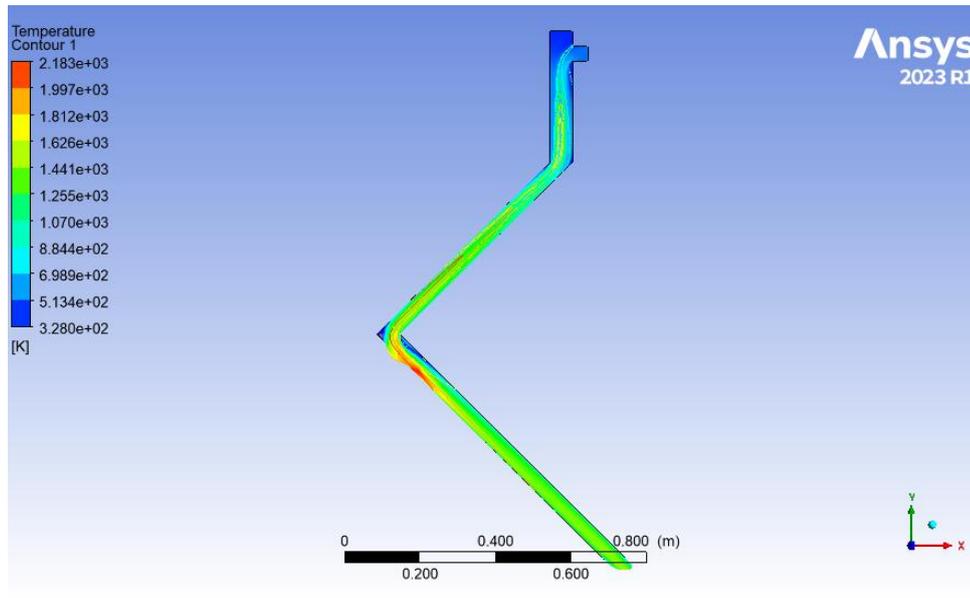


Ilustración 4-6: Perfil de Temperatura.

Realizado por: Castro Angel, 2024.

En el reactor descendente en forma de V, se consideró varias condiciones iniciales de temperatura para las fases como se observa en la ilustración 4-6, se evidencia a lo largo del recorrido una temperatura promedio de 1255 K, además, encontramos de igual manera el punto de interés en el codo, produciéndose un aumento considerable de temperatura aproximadamente 1.7 veces la media presente, las zonas con baja temperatura coinciden con el área limitante del vórtice alcanzando una temperatura entre los de 328 K y 513 k.

4.4. Fracciones másicas de los componentes.

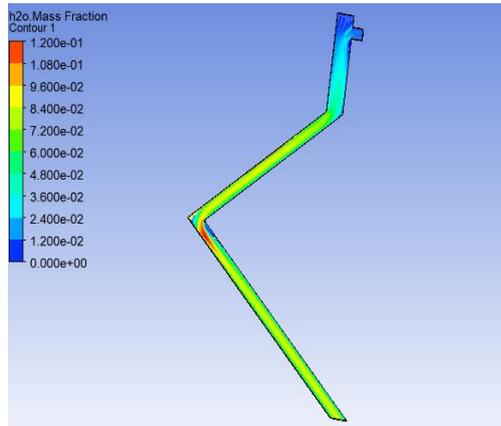


Ilustración 4-7: Fracción en masa de H₂O.

Realizado por: Castro Angel, 2024.

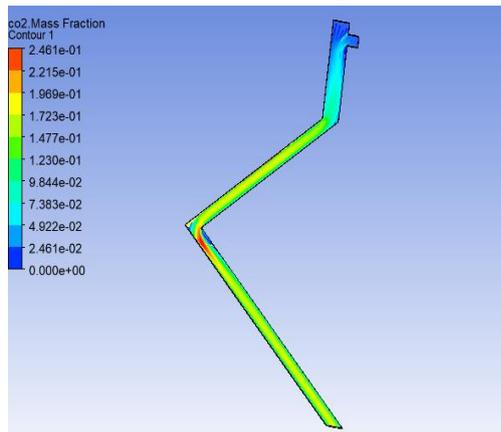


Ilustración 4-8: Fracción en masa de CO₂.

Realizado por: Castro Angel, 2024.

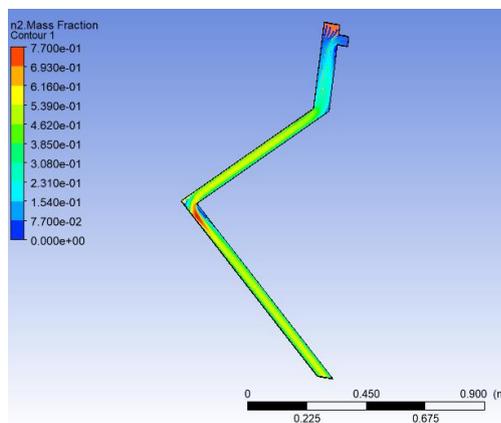


Ilustración 4-9: Fracción en masa de N₂.

Realizado por: Castro Angel, 2024.

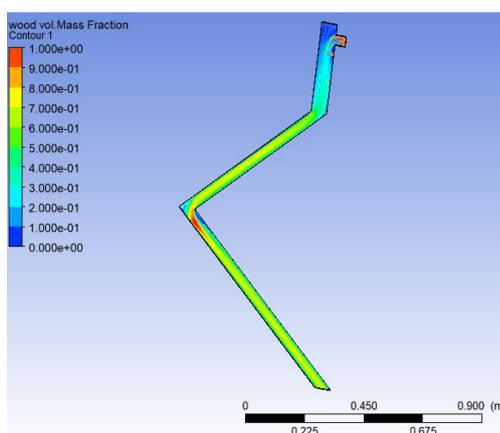


Ilustración 4-10: Fracción en masa de Wood.

Realizado por: Castro Angel, 2024.

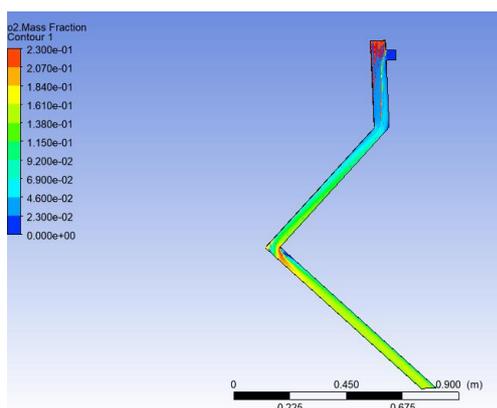


Ilustración 4-11: Fracción en masa del O2.

Realizado por: Castro Angel, 2024.

En la simulación participan componentes, incluyendo el O₂, N₂ y biomasa (wood), a partir de la combustión resulta la formación de residuos como H₂O y CO₂. En las ilustraciones posteriores, se representa las fracciones en masa de todos los componentes, este análisis se enfocará en la biomasa siendo este nuestro producto de interés. Se observa que inicialmente la fracción de masa es 1 en la entrada, pero una vez en contacto con el aire y recorrer el reactor, esta fracción disminuye a valores entre 0.5 y 0.6. Durante su paso por el reactor, se mantiene una uniformidad en la fracción de masa hasta su salida posterior. Dentro del reactor en forma de v, se identifican zonas con concentraciones bajas, casi nulas, lo que sugiere que no hay intercambio entre las fases en estas áreas. Esto

podría explicar por qué la conversión disminuye, ya que la falta de zonas de contacto limita la eficacia del proceso de reacción. En cuando al CO₂ se observa una fracción en masa aproximadamente de 0.123 se puede considerar una fracción en masa pequeña sin embargo este es un gas de efecto invernadero el cual contribuye con el calentamiento global y el cambio climático, se debe considerar estrategias para mitigar estas emisiones como la captura de este.

CONCLUSIONES.

- Este estudio se logró modelar con éxito un reactor de pirolisis descendente en forma de v, utilizando técnicas de dinámica de fluidos computacional (CFD). Esta metodología ha permitido simular de manera precisa y detallada el comportamiento del flujo dentro del reactor, así como la distribución de temperaturas, presiones, velocidades y fracciones en masa en todo el sistema. Esta modelación proporciona una herramienta valiosa para comprender y optimizar el diseño y la operación del reactor lo que contribuye significativamente al avance de la tecnología de pirolisis y su aplicación. Esta simulación contribuye al uso de herramientas de modelado y análisis para el estudio de sistemas físicos, químicos, biológicos, que permite la predicción de resultado y explorar escenarios alternativos para mejorar el funcionamiento del sistema.
- Se estableció las condiciones y ecuaciones de diseño para la simulación del reactor de pirolisis en forma de V, a través de un análisis exhaustivo de los parámetros relevantes como las propiedades del fluido, la geometría del reactor y las condiciones de operación. Además, se destacó las ecuaciones básicas y necesarias para la simulación son los balances de materia, balances de energía, ecuación de Navier-Stokes, ecuación de continuidad, a su vez se necesita conocimientos sobre el mallado, métodos de transferencia de calor, discretización entre otros, puesto que estos son los elementos que ANSYS fluent emplea en su software para obtener una respuesta usando métodos numéricos.
- Se analizó los perfiles de temperatura, presión y velocidad, los resultados muestran que la temperatura se eleva a un máximo de 2183 K debido a la reacción de combustión que se produce dentro del reactor. La presión, por otro lado, disminuye levemente por debajo de la presión atmosférica en ciertas áreas, lo que genera la formación de un vórtice y una falta de contacto adecuado entre las fases. Estas áreas también muestran la mayor velocidad, alcanzando hasta 2.792 m/s, lo que aumenta la probabilidad de que las partículas impacten contra las paredes del reactor y provoquen un desgaste prematuro.

- Se realizó un estudio preliminar que ha permitido identificar los puntos críticos y áreas donde el diseño y el rendimiento del reactor se ven comprometidos. A través de la evaluación y análisis, se han identificado mejoras como ajustar el ángulo en la unión de los tubos, agregar un aislante en el reactor para mejorar la transferencia de calor y evitar las pérdidas de energía, así como considerar la incorporación de un catalizador que aumente la velocidad de reacción y la conversión del proceso. Respecto a las condiciones del sistema, se podría modificar la velocidad en la entrada del reactor.
- Se validó los resultados obtenidos en la simulación CFD con respecto a los resultados obtenidos del artículo de Zhang et al., 2019, confirmando la capacidad del modelo CFD para el comportamiento del reactor de pirólisis, lo que brinda una confianza en los resultados para la toma de decisiones y la optimización del proceso.

RECOMENDACIONES.

- Definir de forma cuidadosa las condiciones de frontera del sistema estas incluye, velocidades de entrada, presiones, concentraciones, especies químicas y variables que puede afectar directamente a la simulación.
- Generar una malla de simulación de alta calidad y suficientemente refinada para capturar los detalles del flujo y características del sistema, es importante generar nombres para la discretización de la malla.
- Colar un numero adecuado de iteraciones para el cálculo de la simulación esto ayudara con la precisión de los resultados y considera el nivel de tolerancia sea bajo esto ayudara a la contabilidad de la simulación.
- Realizar la validación de la simulación con datos experimentales o resultados de simulaciones anteriores para verificar la precisión y confiabilidad.

BIBLIOGRAFÍA.

1. **Arroyo, J.** 2016. *Aprovechamiento Del Recurso Biomasa a Partir De Los Desechos*. 63
2. **ANSYS, Inc**, 2022. Getting Started with Ansys Fluent - Basics . ANSYS Innovation Courses [online]. Retrieved from : <https://courses.ansys.com/index.php/courses/getting-startedwith-ansys-fluent-basics/> [accessed 26 February 2023].
3. **Blazek, J. (2015)**. Governing Equations. In *Computational Fluid Dynamics: Principles and Applications* (pp. 7–27). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-099995-1.00002-6>
4. **Blazek, J. (2015b)**. Principles of Solution of the Governing Equations Contents. In *Computational Fluid Dynamics: Principles and Applications*. <https://doi.org/B978-0-08-099995-1.00003-8>
5. **Cai, J., Lin, N., Li, Y., Xue, J., Li, F., Wei, L., Yu, M., Zha, X., & Li, W. (2024)**. Research on the application of catalytic materials in biomass pyrolysis. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 177, 106321. <https://doi.org/10.1016/j.jaap.2023.106321>
6. **Cengel, Y. A., & Boles, M. A.** 2010. *Thermodynamics (7th ed.)*. McGraw-Hill Education.
7. **Cengel, Yunus A.** 2007. *Heat and Mass Transfer: A Practical Approach. (3rd ed.)*. McGraw-Hill
8. **Date, Anil W.** Introduction to Computational Fluid Dynamics. Cambridge University Press, 2005.

9. **Díaz, M. A.** 2000. *MÉTODOS DE MALLADO Y ALGORITMOS ADAPTATIVOS EN DOS Y TRES DIMENSIONES PARA LA RESOLUCIÓN DE PROBLEMAS ELECTROMAGNÉTICOS CERRADOS MEDIANTE EL MÉTODO DE LOS ELEMENTOS FINITOS*. [Tesis doctoral, Universidad politécnica de valencia]. <https://repositorio.upct.es/bitstream/handle/10317/772/adm.pdf;jsessionid=8004FF531479974EF89BA60BDDEC94DE?sequence=1>
10. **Fletcher, D. F.** 2022. The future of computational fluid dynamics (CFD) simulation in the chemical process industries. *Chemical Engineering Research and Design*, 187, 299–305. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2022.09.021>
11. **Ghasem, N., & Henda, R.** 2014. *Principles of Chemical Engineering Processes; Material and Energy Balances* (2nd ed.). CRC Press.
12. **Greaves G, J.** 2019. Modelado Cinético de la Pirólisis Rápida de Biomasa en Reactor Spouted Bed Cónico.
13. **Jamshed, S.** 2015. Introduction to CFD. In *Using HPC for Computational Fluid Dynamics* (pp. 1–20). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/b978-0-12-801567-4.00001-5>
14. **Klug, M.** 2012. Pirólisis, un proceso para derretir la biomasa. *Revista de Química*, 26, 1–4. <http://revistas.pucp.edu.pe/index.php/quimica/article/view/5547>
15. **Maria, J. de Vahi.** 2016. *MALLADO DE GEOMETRÍAS COMPLEJAS MEDIANTE CFD*.
16. **Roelofs, F., & Shams, A.** 2018. CFD-introduction. In *Thermal Hydraulics Aspects of Liquid Metal Cooled Nuclear Reactors* (pp. 213–218). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-101980-1.00006-5>
17. **Rodríguez, F.** 2015. Simulación de un Proceso de Pirolisis de Plástico empleando ASPEN-HYSYS. Universidad de las Palmas de Gran Canaria

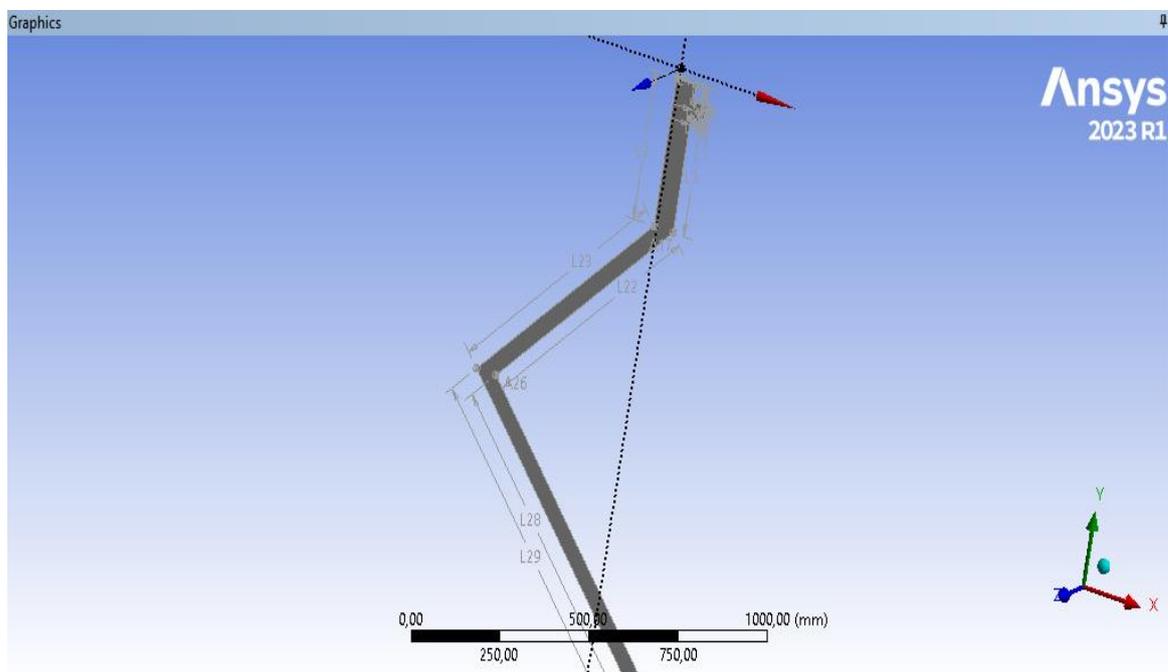
18. **Rodríguez, F., Tunjacipa M.** 2023. DISEÑO Y CONSTRUCCIÓN DE UN REACTOR PILOTO DE PIROLISIS DE NEUMÁTICOS USADOS. Fundacion universidad de América
19. **Tesio, U., Guelpa, E., Ortiz, C., Chacartegui, R., & Verda, V.,** 2019. Optimized synthesis/design of the carbonator side for direct integration of thermochemical energy storage in small size Concentrated Solar Power. *Energy Conversion and Management: X*, 4. <https://doi.org/10.1016/j.ecmx.2019.100025>
20. **Toscano, L.** 2009. “Análisis de los parámetros y Selección de hornos para la combustión de biomasa.” 108. https://d1wqtxts1xzle7.cloudfront.net/85894102/510-Texto_del_articulo-2266-1-10-20210630-libre.pdf?1652380733=&response-content-disposition=inline%3B+filename%3DEfecto_de_la_acetilacion_sobre_propiedad.pdf&Expires=1678770408&Signature=XzOLyTsnGnMncjr3REaG
21. **Versteeg, H. K., & Malalasekera, W.** 2007. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics Second Edition*. www.pearsoned.co.uk/versteeg



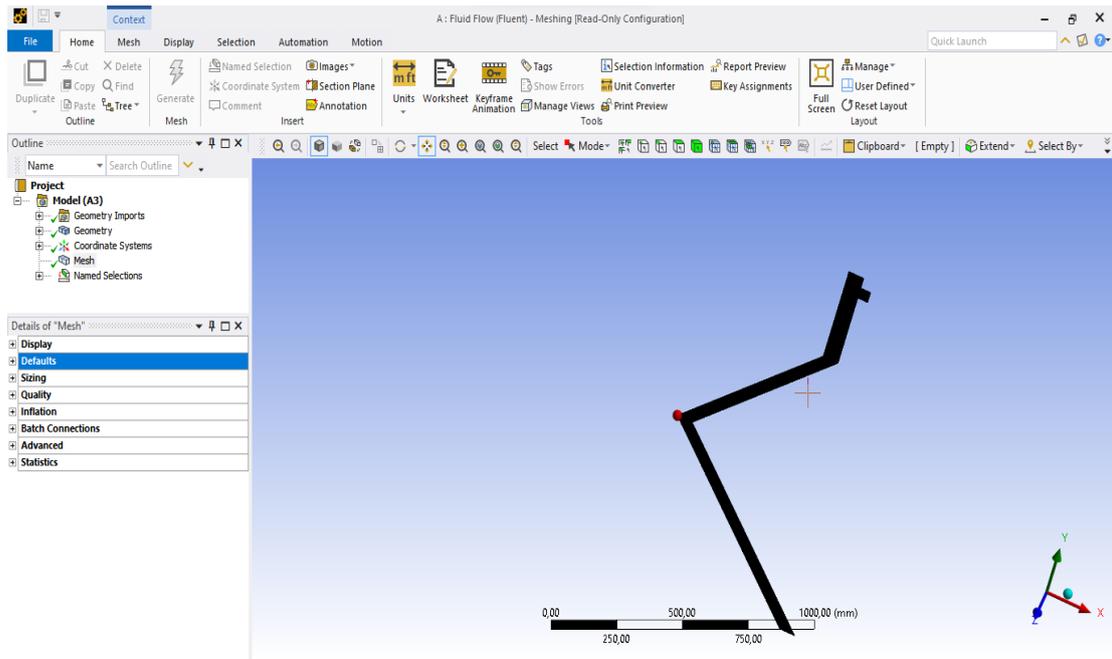
[Handwritten signature in blue ink]

ANEXOS.

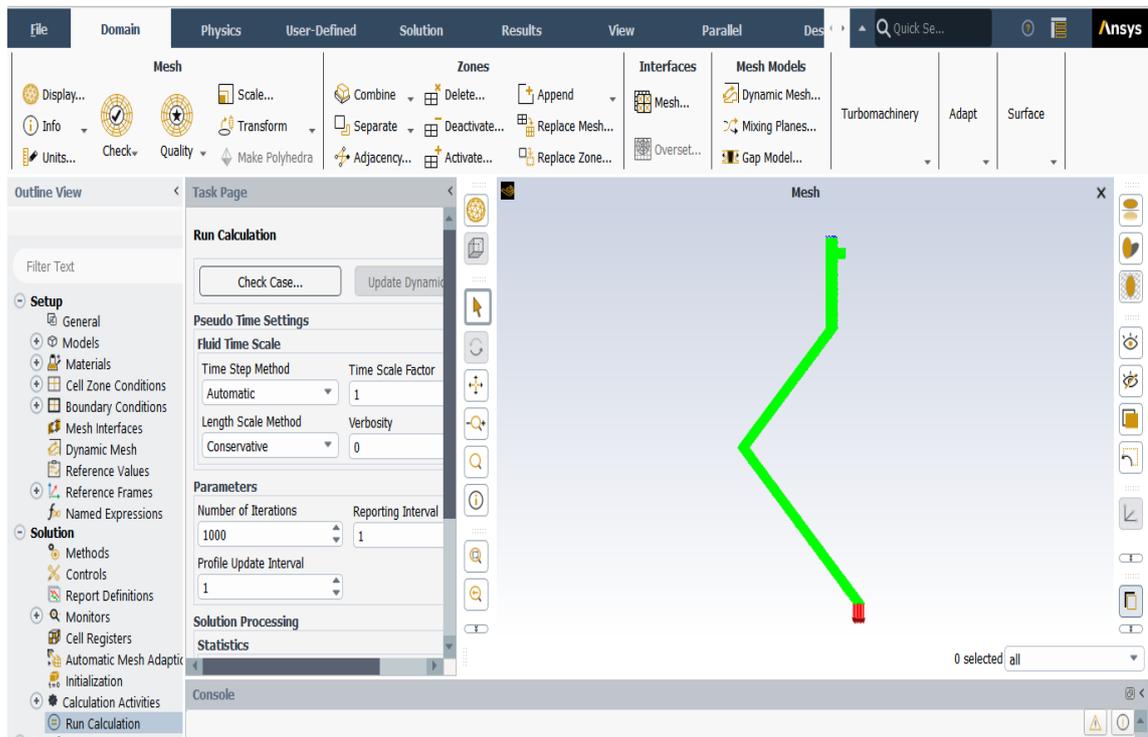
Anexo A: Geometría acotada del reactor de pirolisis en forma de V.



Anexo B. Generación de la malla de la geometría.



Anexo C. Ajuste y configuración de condiciones de frontera y del sistema.





ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO
CERTIFICADO DE CUMPLIMIENTO DE LA GUÍA PARA
NORMALIZACIÓN DE TRABAJOS DE FIN DE GRADO

Fecha de entrega: 19/ 07 / 2024

INFORMACIÓN DEL AUTOR
Nombres – Apellidos: Angel Alejandro Castro Bravo.
INFORMACIÓN INSTITUCIONAL
Facultad: Ciencias
Carrera: Ingeniería Química
Título a optar: Ingeniero Químico
 Ing. Carlos Ramiro Cepeda Godoy. Director del Trabajo de Titulación
 Ing. Cristina Calderón Tapia. Asesor del Trabajo de Titulación