

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE SAN LUIS POTOSÍ

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS

CENTRO DE INVESTIGACIÓN Y ESTUDIOS DE POSGRADO

EVALUACIÓN DE LA CALIDAD DEL MEZCLADO PARA EL ESCALAMIENTO DE LA CARBONIZACIÓN HIDROTÉRMICA

TESIS PARA OBTENER EL GRADO DE

MAESTRO EN CIENCIAS EN INGENIERÍA QUÍMICA

PRESENTA

ALBA RUÍZ MAXIMILIANO

DIRECTOR DE TESIS

Dr. MARIO MOSCOSA SANTILLÁN

CODIRECTOR DE TESIS

Dr. ALAN DANIEL VILLALOBOS LARA



SAN LUIS POTOSÍ, S.L.P.

AGOSTO DE 2023

FACULTAD DE
CIENCIAS QUÍMICAS

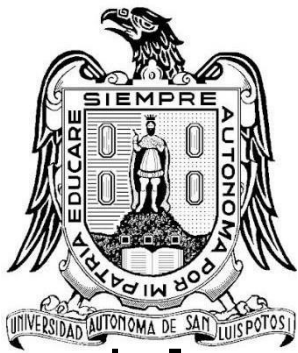
El programa de Maestría en Ciencias en Ingeniería Química de la Universidad Autónoma de San Luis Potosí pertenece al Programa Nacional de Posgrados de Calidad (PNPC) del CONACyT, registro 000896, en el Nivel consolidado.

Número de registro de la beca otorgada por CONACyT: 1143578



Evaluación de la calidad del mezclado para el escalamiento de la carbonización hidrotérmica por Alba Ruíz Maximiliano se distribuye bajo una [Licencia Creative Commons Atribución-NoComercial-SinDerivadas 4.0 Internacional](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/)

Mis documentos		Documentos	Compartir	Parámetros	página 1 de 1
☐	Título	Informe	Autor	Procesados	Acciones
☐	EVALUACIÓN DE LA CALIDAD DEL MEZCLADO PARA EL ESCALAMIENTO DE LA CARBONIZACIÓN HIDROTÉRMICA 1 part - 0 words	23%	Maximiliano Alba Ruiz	8 ago 2023 20:01:05	 



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE SAN LUIS POTOSÍ

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS

CENTRO DE INVESTIGACIÓN Y ESTUDIOS DE POSGRADO

EVALUACIÓN DE LA CALIDAD DEL MEZCLADO PARA EL ESCALAMIENTO DE LA CARBONIZACIÓN HIDROTÉRMICA

TESIS PARA OBTENER EL GRADO DE

MAESTRO EN CIENCIAS EN INGENIERÍA QUÍMICA

PRESENTA

ALBA RUÍZ MAXIMILIANO

SINODALES

Dr. MARIO MOSCOSA SANTILLÁN _____

Dr. ALAN DANIEL VILLALOBOS LARA _____

Dr. RAÚL GONZÁLEZ GARCÍA _____

Dr. JOSÉ ÁNGEL DELGADILLO GÓMEZ _____



FACULTAD DE
CIENCIAS QUÍMICAS

SAN LUIS POTOSÍ, S.L.P.

AGOSTO DE 2023 ii



7 de agosto de 2023.

COMITÉ EVALUADOR TUTELAR
Presente.-

Por este conducto, me permito **APROBAR** y **SOLICITAR** su colaboración para formar parte del **Jurado Calificador del Examen de Grado** que presenta él (la)

IQ. Maximiliano Alba Ruiz

Como requisito para obtener el grado de Maestro en Ciencias en Ingeniería Química. El candidato llevó a cabo el proyecto de investigación titulado:

**“EVALUACIÓN DE LA CALIDAD DEL MEZCLADO PARA EL
ESCALAMIENTO DE LA CARBONIZACIÓN HIDROTÉRMICA”**

Que presentará ante el Comité Tutorial conformado por:

Dr. Mario Moscosa Santillán	(Director) CIEP FCQ/UASLP
Dr. Alan Daniel Villalobos Lara	(Co-director), UT León
Dr. Raúl Gonzalez García	(Sinodal), CIEP FCQ/UASLP
Dr. José Ángel Delgadillo Gómez	(Sinodal), FI/UASLP

Se les hace una atenta **INVITACIÓN** al **Comité Evaluador Tutelar** al examen de Grado que está programado para el 11 de agosto de 2023 a las 12:00 hrs., en la Sala 1 de Exámenes Profesionales del Posgrado de la Facultad de Ciencias Químicas.

Agradeciendo de antemano su participación como miembro del jurado, me despido de usted.

ATENTAMENTE


**FACULTAD DE
CIENCIAS QUÍMICAS**
Dr. Manuel Nava Núm. 6
Zona Universitaria-CP78210
San Luis Potosí, S.L.P.
tel. (444) 826 24 40 al 46
fax (444) 826 2372
www.uaslp.mx


Dr. Erik César Herrera Hernández
Coordinador del Posgrado en Ciencias en
Ingeniería Química

Agradecimientos Académicos

En primer lugar quisiera dar las gracias a mi asesor, el Dr. Mario Moscosa Santillán, por todo su apoyo para llevar a cabo este proyecto, por todos sus aportes, críticas constructivas, paciencia y consejos. Dr. muchas gracias por aceptarme y apoyarme desde el primer día en que decidí regresar a la Facultad de Ciencias Químicas.

Al Dr. Alan Daniel Villalobos Lara, que desde que supo de mí y a pesar de la distancia, me apoyo en mi formación en COMSOL Multiphysics®, para poder realizar este proyecto, la paciencia que tuvo cuando las cosas no salían bien y, sobre todo, el esfuerzo para sacar esta tesis adelante, muchas gracias Dr.

Quisiera agradecer a mis tutores, el Dr. Raúl González y el Dr. José Ángel Delgadillo por sus observaciones y comentarios de este trabajo.

A todos los profesores del Posgrado en Ciencias en Ingeniería Química con los que volví a tener la oportunidad de profundizar en sus cursos en las áreas de la Ingeniería Química.

A los profesores del Posgrado en Ciencias en Bioprocesos, por la oportunidad de llevar cursos que enriquecieron mi formación y me dieron un panorama más amplio.

Finalmente, al Consejo Nacional de Humanidades, Ciencias y Tecnologías (CONAHCYT) por la beca de estudios del posgrado.

Agradecimientos Personales

A mi maravillosa familia, a mi madre Sandra Ruiz y a mi padre Miguel Alba, por seguir confiando en mi al apoyarme en mi decisión de seguir mi formación académica, por todos y cada uno de los momentos buenos y malos que pasamos juntos en estos dos últimos años, de corazón muchas gracias, a mis hermanos Sebastián Alba y Cecilia Alba, espero poder seguir siendo un ejemplo para ustedes como hermano mayor.

A mi tío Jorge Ruiz, por apoyarme de muchas maneras, por creer en mi y estar conmigo a mi lado en cada una de mis decisiones, eres una guía que seguir para mí, te admiro mucho.

A mis amigos de la infancia, Alfredo Escalante y Luis Wada, por estos mas de 20 años de amistad que se transformó en hermandad, ustedes han visto mi camino, sé que en ustedes puedo confiar para seguir adelante y continuar apoyándonos hasta que la vida nos lo permita.

A mis increíbles amigos que volví a ver en el posgrado como Francisco Gallegos, y a mis compañeros que tuve la oportunidad de conocer, Luis Arroyo e Irma Villalpando, sin ustedes esta aventura no hubiera sido la misma, espero de corazón podamos seguir creando recuerdos.

Resumen

La carbonización hidrotérmica es un proceso termoquímico para la producción de hidrocarbón a partir de biomasa. Se realiza en reactores bifásicos sólido-líquido, por lo que la calidad del mezclado es fundamental para su correcto funcionamiento. Por ello, este trabajo propone el uso de técnicas de CFD (*Dinámica de Fluidos Computacional*) para asegurar la calidad de mezclado durante el escalamiento de un reactor agitado. Para el escalamiento se empleó un factor de 1:25, tomando como referencia los resultados obtenidos en un reactor a escala laboratorio de 200 ml. Además, se empleó el criterio de similaridad dinámica, manteniendo la potencia por unidad de volumen constante. Se analizó el efecto de la velocidad de agitación (299 rpm – 474 rpm), el tamaño del agitador ($d_{\text{tanque}}/6 - d_{\text{tanque}}/4$) y la posición del agitador dentro del reactor ($h_{\text{tanque}}/6 - h_{\text{tanque}}/2$). Como etapa preliminar se consideró un sistema monofásico con propiedades similares a los de la suspensión y se implementó un diseño central compuesto, a fin de obtener un modelo predictivo de las variables de respuesta consideradas: tiempo de mezclado y dispersión de velocidad. Para evaluar el tiempo de mezclado, se consideró la inyección de un trazador en las simulaciones, a fin de observar su distribución en función del tiempo. Con los resultados obtenidos a partir de las simulaciones se determinó que la configuración que proporciona la mayor homogeneidad del sistema escalado corresponde a una velocidad de agitación de 386 rpm, diámetro del agitador equivalente a $d_{\text{tanque}}/2.6$ y una posición del agitador de $h_{\text{tanque}}/3$. Con esta configuración se tuvo un tiempo de mezclado de 17.7 s y una dispersión de velocidad del 82.81 %. Esta configuración se empleó posteriormente en la simulación del sistema bifásico. Los resultados de la simulación evidencian el efecto de escalamiento, ya que se obtuvieron tiempos de mezclado a escala laboratorio de 5 s, mientras que para la escala semi-piloto (5 l) se estimó en 6 min. Estos resultados servirán de base para estudiar el efecto de la heterogeneidad del sistema sobre el desarrollo del proceso de carbonización, durante el escalamiento de este.

Palabras clave: CFD, Carbonización hidrotérmica, Escalamiento, mezclado.

Abstract

Hydrothermal carbonization is a thermochemical process to produce hydrochar from biomass. This process is carried out in solid-liquid biphasic reactors, so the quality of the mixing is essential for its correct operation. This work proposes the use of CFD (Computational Fluid Dynamics) techniques to ensure the quality of mixing during the scale-up of a stirred reactor. A scaling factor of 1:25 was used, taking as reference the results obtained in a 200 ml laboratory-scale reactor. The dynamic similarity criterion was used, keeping the power per unit volume constant. The effect of the stirring speed (299 rpm - 474rpm), the size of the stirrer ($d_{\text{tank}}/6 - d_{\text{tank}}/4$) and the position of the stirrer inside the reactor ($h_{\text{tank}}/6 - h_{\text{tank}}/2$) were analyzed. As a preliminary stage, a homogeneous system with properties like those of the suspension was considered, and a central composite design was implemented, to obtain a predictive model of the considered response variables: mixing time and velocity dispersion. To evaluate the mixing time, the injection of a tracer was considered in the simulations, to observe its distribution as a function of time. With the results obtained from the simulations, it was determined that the configuration that provides the greatest homogeneity of the scaled system corresponds to a stirring speed of 386 rpm, agitator diameter equivalent to $d_{\text{tank}}/2.6$ and a stirrer position of $h_{\text{tank}}/3$. With this configuration, a mixing time of 17.7 s and a speed dispersion of 82.81 % were obtained. This configuration was later used in the simulation of the two-phase system. The results of the simulation of the biphasic system show the scaling effect, since mixing times of 5 s were obtained at the laboratory scale, while for the semi-pilot scale (5 l) it was estimated at 3 min. These results will serve as a basis to study the effect of the heterogeneity in the system on the development of the carbonization process, during its scaling.

Keywords: CFD, Hydrothermal carbonization, Scaling, mixing.

ÍNDICE GENERAL

Agradecimientos Académicos	iv
Agradecimientos Personales	v
Resumen	vi
Abstract.....	vii
ÍNDICE DE FIGURAS	x
ÍNDICE DE TABLAS.....	xii
ÍNDICE DE ECUACIONES	xiii
Introducción.....	1
1. Antecedentes	2
1.1 Situación energética.....	2
1.2 Procesos térmicos.....	4
1.2.1 Gasificación	4
1.2.2 Pirólisis.	5
1.2.3 Combustión.....	5
1.2.4 Carbonización Hidrotérmica.....	6
1.3 Procesos de agitación	8
1.3.1 Tipos de agitadores.	9
1.3.2 Agitadores de paleta o tipo pala.....	10
1.3.3 Agitadores tipo turbina	10
1.3.4 Agitadores tipo hélice.....	11
1.3.5 Trazador.	12
1.3.6 Reactor de tanque agitado.....	12
1.3.7 Modelos cinéticos.	13
1.3.8 Escalamiento	13
1.4 Simulación CFD (Dinámica de Fluidos Computacional).....	17
1.4.1 CFD en la carbonización hidrotérmica	21
1.4.2 CFD en el escalamiento de procesos.	23
2. Planteamiento del problema	26
2.1 Justificación.....	26
2.2 Hipótesis.	26
2.3 Objetivo general.	27
2.4 Objetivos específicos	27

3. Metodología.....	28
3.1 Herramientas utilizadas.....	28
3.2 Hidrodinámica.	29
3.3 Criterio de escalamiento	33
3.4 Diseño de experimentos central compuesto	36
3.4.1 Hidrodinámica del sistema escalado.....	39
3.4.2 Dispersión de la velocidad	39
3.4.3 Evaluación del tiempo de mezclado.....	42
3.4.4 Potencia	44
3.5 Sistema bifásico.	44
3.5.1 Sistema a escala laboratorio.....	46
3.5.2 Sistema escalado.....	46
4. Resultados	48
4.1 Hidrodinámica.	48
4.2 Diseño de experimentos	49
4.2.1 Hidrodinámica del sistema escalado.....	49
4.2.2 Dispersión de la velocidad	51
4.2.3 Tiempo de mezclado.....	53
4.2.4 Modelo predictivo.....	55
4.3 Potencia suministrada al sistema.....	64
4.4 Sistema bifásico.	65
4.4.1 Escala laboratorio	65
4.4.2 Sistema escalado.....	66
Conclusiones y discusión	69
Bibliografía.....	71
Anexos	75
Anexo 1 (Condiciones de frontera).....	75
Anexo 2 (Mallado)	76

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1 Tendencias (2010-2019) en energías renovables por región (Rather et al., 2022	3
Figura 2. Campo de velocidad de tipo tangencial (a), de tipo radial (b) y de tipo axial (c).....	9
Figura 3. Agitador tipo de paleta o pala.....	10
Figura 4. Agitador tipo turbina	11
Figura 5. Agitador tipo hélice.....	11
Figura 6. Reactor de tanque agitado	12
Figura 7. Dos sistemas que presentan similitud geométrica (Solorzano., 2020)	16
Figura 8. Representación de un dominio computacional en 2D (a) y 3D (b)....	18
Figura 9. Condiciones de frontera en un dominio computacional	18
Figura 10. Ejemplo de mallado de un dominio computacional.....	19
Figura 11. Ejemplo de malla estructurada (a) y malla no estructurada (b).....	20
Figura 12. Efecto de la velocidad de agitación en un tanque agitado (Sangaré et al., 2020)	21
Figura 13. Perfiles de velocidades de simulación a) axial y b) tangencial, obtenidos por Sangaré et al. (2020) y comparación con los resultados experimentales de Ozcar-Taskin et al. (2003).....	22
Figura 14. Imágenes experimentales con escala creciente (diámetro del impulsor) (Russell et al., 2019)	23
Figura 15. Simulaciones CFD del proceso con escala creciente (diámetro del impulsor) (Russell et al., 2019)	23
Figura 16. Efecto del tamaño del agitador y la velocidad de agitación (Russell et al., 2019)	24
Figura 17. Efecto del tamaño del agitador, la velocidad de agitación y el tamaño del tanque agitado (Russell et al., 2019).....	25
Figura 18. Reactor de tanque agitado a nivel laboratorio.....	29
Figura 19. Variación del número de potencia de un agitador con el número de Reynolds, (Xuereb et al., 2006).....	31
Figura 20. Reactor de tanque agitado escalado.....	35
Figura 21. Puntos de control dentro del sistema a escala laboratorio.....	39
Figura 22. Puntos de control dentro del sistema escalado 1:25 (5L)	40
Figura 23. Inyección del trazador	42
Figura 24. Representación de un pulso gaussiano	42
Figura 25. Sistema bifásico a escala laboratorio biomasa- agua (1/10)	46
Figura 26. Sistema bifásico escalado biomasa- agua (1/10)	46
Figura 27. Diferentes velocidades de agitación dentro del reactor de tanque agitado a escala laboratorio.....	48
Figura 28. Velocidades de las diferentes configuraciones del sistema escalado	50

<i>Figura 29. Perfil de concentración del trazador (cloruro de sodio) en el sistema a escala laboratorio.....</i>	<i>53</i>
<i>Figura 30. Perfil de concentración del trazador (cloruro de sodio) en el sistema escalado (Configuración número 12).....</i>	<i>55</i>
<i>Figura 31. Gráfica de observados vs predichos de y_1.....</i>	<i>59</i>
<i>Figura 32. Gráfica de observados vs predichos de y_2.....</i>	<i>60</i>
<i>Figura 33. Gráficas ANOVA</i>	<i>61</i>
<i>Figura 34. Validación del modelo</i>	<i>61</i>
<i>Figura 35. Gráfica de superficie de respuesta y_1</i>	<i>62</i>
<i>Figura 36. Gráfica de superficie de respuesta y_2</i>	<i>63</i>
<i>Figura 37. Gráfica de superficie de respuesta de potencia suministrada</i>	<i>64</i>
<i>Figura 38. Mezcla bifásica biomasa- agua (1/10) al tiempo 0 segundos</i>	<i>65</i>
<i>Figura 39. Avance de mezclado a través del tiempo.....</i>	<i>65</i>
<i>Figura 40. Avance de la fracción de la fase dispersa a través tiempo</i>	<i>66</i>
<i>Figura 41. Configuración de la simulación 12</i>	<i>67</i>
<i>Figura 42. Sistema escalado en tiempo 0 s, con relación 1:10 (biomasa-agua).....</i>	<i>67</i>
<i>Figura 43. Avance de mezclado del sistema escalado a través del tiempo</i>	<i>68</i>
<i>Figura 44. Avance de la fracción de la fase dispersa en el sistema escalado a través tiempo</i>	<i>68</i>
<i>Figura 45. Condiciones de frontera del sistema a escala laboratorio.....</i>	<i>75</i>
<i>Figura 46. Condiciones de frontera del sistema a escala de 5 L</i>	<i>75</i>
<i>Figura 47. Mallado del sistema a escala laboratorio</i>	<i>76</i>
<i>Figura 48. Mallado del sistema a escala de 5 L</i>	<i>77</i>

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1. Dimensiones del tanque real.....	30
Tabla 2. Dimensiones del reactor de tanque agitado escalado 1:25 (5 L)	36
Tabla 3. Factores del diseño central compuesto.....	37
Tabla 4. Condiciones de las Simulaciones del diseño central compuesto.....	38
Tabla 5. Parámetros experimentales (Sangaré et al., 2021).....	45
Tabla 6. Número de Reynolds a diferentes velocidades de agitación.....	49
Tabla 7. Número de Reynolds de las diferentes configuraciones del sistema escalado	51
Tabla 8. Valores de la dispersión de la velocidad	52
Tabla 9. Valores del tiempo de mezclado	54
Tabla 10. Coeficientes codificados y respuestas	56
Tabla 11. Coeficientes no codificados y respuestas	56
Tabla 12. Significancia de los factores para el tiempo de mezclado y_1	57
Tabla 13. Significancia de los factores para la dispersión de la velocidad y_2	57
Tabla 14. Características de la simulación 12.....	67
Tabla 15. Características de la malla	76

ÍNDICE DE ECUACIONES

<i>Ec. 1 Número de Reynolds para un tanque agitado</i>	<i>30</i>
<i>Ec. 2 Ecuación de Navier-Stokes.....</i>	<i>32</i>
<i>Ec. 3 Ecuación de continuidad.....</i>	<i>32</i>
<i>Ec. 4 Potencia por unidad de volumen</i>	<i>33</i>
<i>Ec. 5 Relación para el escalamiento de la velocidad de agitación... ..</i>	<i>34</i>
<i>Ec. 6 Volumen de un cilindro... ..</i>	<i>34</i>
<i>Ec. 7 Volumen de una esfera.....</i>	<i>34</i>
<i>Ec. 8 Volumen de un tanque con fondo semiesférico.....</i>	<i>34</i>
<i>Ec. 9 Radio de un tanque con fondo semiesférico.....</i>	<i>35</i>
<i>Ec. 10 Integral volumétrica.....</i>	<i>40</i>
<i>Ec. 11 Porcentaje de la dispersión de velocidad</i>	<i>41</i>
<i>Ec. 12 Concentración de un trazador con respecto del tiempo</i>	<i>42</i>
<i>Ec. 13 Variación del tiempo.....</i>	<i>43</i>
<i>Ec. 14 Ley de Fick.....</i>	<i>43</i>
<i>Ec. 15 Potencia.....</i>	<i>44</i>
<i>Ec. 16 Ecuación de Navier-Stokes para el caso de estudio.....</i>	<i>45</i>
<i>Ec. 17 Modelo de la respuesta de tiempo de mezclado y_1.....</i>	<i>58</i>
<i>Ec. 18 Modelo de la respuesta de dispersión de la velocidad y_2.....</i>	<i>58</i>

Introducción

El tema de las energías renovables es el presente y el futuro del mundo. En efecto, cada vez se necesita más energía por el incremento de la población y por el agotamiento de los recursos de fuentes fósiles como el petróleo, el gas natural y el carbón. Los principales debates se articulan en torno al agotamiento de estos generadores de energía, así como a la cantidad de contaminación que producen. Por ello, se han buscado nuevas fuentes de energía, tales como la biomasa. Esta materia tiene una gran disponibilidad, se puede obtener de residuos agroindustriales y de esta manera resolver también el problema de la contaminación, reduciendo desechos y produciendo energía.

Existen procesos para llevar a cabo la producción de la energía a base de biomasa. Entre ellos se encuentran los procesos termoquímicos como la gasificación, la pirólisis y la carbonización hidrotérmica. Esta última, se lleva a cabo en medio acuoso y las variables más importantes son la temperatura, la relación biomasa/agua y la composición inicial de la biomasa.

El proceso de la HTC es complejo y por ende el modelado de este. Algunos modelos desarrollados para representar los fenómenos que ocurren parten de diseños de experimentos. Son modelos empíricos para predecir el comportamiento del proceso. Otro tipo de modelos, que usan un enfoque diferente, son los modelos cinéticos o incluso los modelos de dinámica computacional.

El presente trabajo se enfoca en el estudio de la influencia de la temperatura y la relación de biomasa/agua, en el proceso de carbonización hidrotérmica de biomasa sólida. Se pretende realizar un modelo que permita el escalamiento del proceso. En particular, en lo que se refiere a la homogeneidad de la mezcla bifásica (biomasa/agua). Para ello, se implementarán modelos cinéticos en códigos de tipo CFD, lo que permitirá el estudio de los fenómenos de transporte acoplados con reacciones químicas en el sistema bifásico.

1. Antecedentes

1.1 Situación energética.

Las reservas de combustibles fósiles son no-renovables y finitas. Según estimaciones, las reservas mundiales de petróleo recuperable están disminuyendo a un ritmo de 4,000 millones de toneladas al año. Si se continúa con el ritmo actual, se proyecta que todas estas reservas se agotarán para 2060, aunque es posible que en el futuro inmediato se descubran más reservas (Saleem, 2022). Las economías industriales han tomado conciencia de la fragilidad de su modelo de crecimiento, que se basa en gran medida en recursos naturales finitos, es vital por lo tanto establecer una transición hacia un nuevo modelo de desarrollo en respuesta a los desafíos de la sostenibilidad (Omri et al., 2021).

El uso de combustibles fósiles tiene problemas inherentes relacionados con los impactos ecológicos. La quema de combustibles produce alrededor de 21,300 millones de toneladas de dióxido de carbono (CO₂) por año, junto con otros gases de efecto invernadero. Por lo tanto, hay un aumento global de 10,650 millones de toneladas de CO₂ por año en la atmósfera (Saleem, 2022). En este contexto, la biomasa podría ser una de las fuentes de energía renovable que puede ser transformada en energía, directa o indirectamente. Por ejemplo, en Suecia, Dinamarca y Polonia, la energía renovable está cubriendo más del 50% de la demanda de energética. Polonia produce esta energía renovable desde el año 2020 y la creciente demanda de energía renovable obedece, principalmente a la fuerte aceptación de la biomasa para la producción de biocombustibles para el transporte y la generación de energía eléctrica (Saleem, 2022).

Cada vez hay una mayor preocupación por el acceso a la biomasa, debido a la competencia entre sus diferentes usos y su potencial de desarrollo energético (Figura 1). Así, la mitad del consumo de energía renovable (eólica, hidráulica, solar y otras) es aportada por la bioenergía. De esta forma, el desarrollo de la bioenergía está determinado por su capacidad para extraer grandes cantidades de biomasa (Rather et al., 2022).

La biomasa tiene una variedad de materias primas, incluida la biomasa lignocelulósica, la biomasa agroquímica y los biorresiduos que forman parte de métodos de transformación bioquímicos, químicos y termoquímicos (Rather et al., 2022).

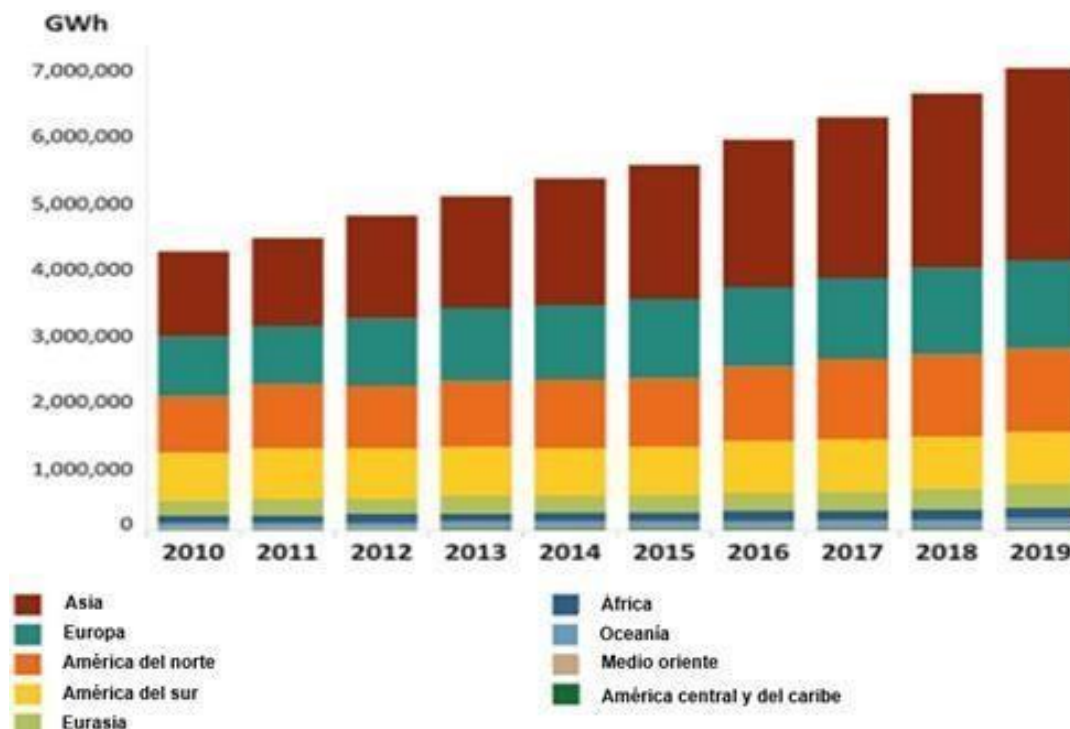


Figura 1 Tendencias (2010-2019) en energías renovables por región (Rather et al., 2022).

La eficiencia depende no sólo de las fuentes de biomasa, sino también de la tecnología involucrada en la conversión de energía. La economía basada en el análisis de ciclo de vida depende de la sostenibilidad de biomasa, siempre que el carbono se mantenga cerca de la neutralidad. Así, los gases de efecto invernadero se pueden generar a partir de biomasa utilizando insumos de baja energía o energía renovable de alta eficiencia (Rather et al., 2022).

Existen diferentes maneras de valorizar la biomasa con fines energéticos. Uno de ellos es el uso de procesos termoquímicos para la densificación de la energía. Estos procesos son discutidos en la sección siguiente en términos de sus características. Sin embargo, cabe mencionar que este proyecto se centra en el uso de la carbonización hidrotérmica.

En este contexto, cabe señalar que existen varios residuos agroindustriales disponibles en México, uno de estos es el hueso de aguacate. De hecho, México es el mayor productor de aguacate del mundo con 2.3 millones de toneladas métricas producidas entre 2019 y 2020. De esta producción, una cantidad significativa (170 000 ton/año) de aguacate se procesa como guacamole, lo que representa más de 25,000 toneladas al año de residuos.

En general, el hueso de aguacate tiene un porcentaje de 65 a 75% de humedad. Este alto porcentaje de humedad lo hace un residuo agroindustrial ideal para la carbonización hidrotérmica (Sangaré et al., 2021). Es por esta razón que se seleccionó esta biomasa para este estudio.

1.2 Procesos térmicos.

1.2.1 Gasificación.

La gasificación de biomasa es un proceso de conversión termoquímica que se lleva a cabo a altas temperaturas. Implica la oxidación parcial de la biomasa y su objetivo principal es maximizar la producción de productos gaseosos y lograr un alto rendimiento de gas de síntesis ($H_2 + CO$). Sin embargo, el rendimiento del proceso de gasificación de biomasa se ve afectado por los parámetros asociados con el gasificador, las materias primas y las rutas de tecnología de gasificación. Además, influyen otras variables como el agente de gasificación, la temperatura y el tipo de biomasa (Luo et al., 2022).

La temperatura de la gasificación es un parámetro importante que, teóricamente, está influenciado por las propiedades del material. Las temperaturas más altas afectan principalmente a las características del gas de síntesis al acelerar las reacciones de pirólisis y gasificación. Li et al. (2021), así como Nguyen et al. (2020) reportan que el rendimiento de H_2 aumenta de 482 a 703 ml/g, incrementando la temperatura de 700 a 800°C y aumenta la concentración de H_2 de 42 a 48 %vol cuando la temperatura se incrementa de 800 a 900°C (Luo et al., 2022).

1.2.2 Pirólisis.

La pirólisis es el craqueo térmico de materia prima de biomasa con o sin suministro de oxígeno. Esto, limita la cantidad de productos volátiles oxidantes que se producen, así como el residuo sólido. Los rangos habituales de temperatura de operación son de 500 a 800°C. La cantidad relativa de cada producto depende de los parámetros de operación, las propiedades de la biomasa y el tipo de pirólisis (Akhtar et al., 2012).

El análisis térmico ha demostrado ser una poderosa herramienta para investigar la pirólisis de la biomasa, muchos de esos análisis se centran en los principales componentes de la biomasa lignocelulósica, como la celulosa, hemicelulosa y lignina. La pirólisis es un proceso extremadamente complejo, donde tienen lugar numerosas reacciones, haciendo prácticamente imposible desarrollar un modelo cinético que tenga en cuenta todas estas reacciones. Generalmente, la cinética de descomposición de la biomasa se divide en tres tipos: modelo de reacción global de un paso, de varios pasos y modelos semiglobales (Sánchez et al., 2012).

1.2.3 Combustión.

La combustión es una reacción de oxidación de los componentes de la biomasa a altas temperaturas y en presencia de una cantidad de oxígeno suficiente, para producir la oxidación total de los componentes de la biomasa. Con este proceso se obtiene energía en forma de calor, así como dióxido de carbono, agua y cenizas, como productos de la reacción (Carrasco 2008).

Hasta ahora, la utilización a gran escala de la combustión directa de la biomasa para producir energía todavía enfrenta muchos problemas, debido a las características intrínsecas de los materiales de la biomasa, como su alta humedad, y a la complejidad de los procesos de conversión termoquímica (Chen et al., 2019).

1.2.4 Carbonización Hidrotérmica.

El procesamiento hidrotérmico es una tecnología atractiva para procesar materias primas, tanto de biomasa como de desechos orgánicos con elevada humedad, ya que no se necesita el pretratamiento de secado. El proceso hidrotérmico es un tratamiento termoquímico que implica la desintegración térmica de la biomasa en agua caliente presurizada. La carbonización hidrotérmica (HTC), convierte la biomasa en un producto sólido con un contenido de carbono similar al lignito y rendimientos másicos que varían del 35% al 80% (Briongos et al., 2021).

El rendimiento y composición de los productos finales están directamente relacionados con el tipo de biomasa y condiciones del proceso, tales como la temperatura de reacción, el tiempo de residencia y la relación agua/biomasa. Los productos de HTC se pueden utilizar directamente como combustible sólido.

El desempeño del proceso HTC, así como de cualquier proceso de transformación química, depende en gran medida de los fenómenos de transporte, es decir, los mecanismos mediante los cuales el calor, la masa y el momento se transfieren dentro de un sistema, además de las reacciones químicas (Sangaré et al., 2021).

Debido a la complejidad del proceso que, según estudios recientes, involucra más de 60 reacciones simultáneas, es difícil estudiarlo y controlarlo (Vallejo et al., 2021). Durante el proceso HTC, la biomasa bruta se convierte en un material sólido similar al lignito, las características de este producto se ven significativamente afectadas por las condiciones del medio.

Generalmente, el proceso HTC ocurre a temperaturas relativamente bajas (entre 180°C y 250°C) y bajo una presión autógena, que disminuye tanto el contenido de oxígeno, como el de hidrógeno de la materia prima, a través de procesos como la deshidratación y la descarboxilación (Wang et al., 2018).

Así, este proceso está regido por parámetros hidrotermales como el tiempo de residencia y la temperatura, que determinan la severidad de la reacción y grado de carbonización de la biomasa bruta.

El residuo sólido derivado del proceso se define como hidrocarbón, el cual es altamente hidrofóbico y friable, por lo que se separa fácilmente de la fase líquida. El hidrocarbón muestra un rendimiento térmico superior con relación a la biomasa cruda, en términos de mayor densidad de masa y energía, mejor hidrofobicidad y mayor rendimiento de combustión que la biomasa inicial (Wang et al., 2018).

La literatura muestra procesos de HTC que se ejecutan en reactores discontinuos, semicontinuos y continuos con tiempos de residencia que van desde unos pocos minutos hasta varias horas. La configuración del reactor juega un papel importante en la cinética de la reacción, y por ende, en el rendimiento y composición del producto, debido a los requisitos operativos de alta temperatura y presión. En estas condiciones de operación, se ha limitado el uso de HTC de manera comercial.

De hecho, la mayoría de los estudios han utilizado recipientes presurizados a escala laboratorio, para llevar a cabo experimentos de HTC por lotes o semicontinuos (Briongos et al., 2021).

El hidrocarbón tiene varios beneficios sobre su biomasa original, incluido un mayor contenido de carbono, más grupos funcionales oxigenados (OFG) en la superficie, mayor densidad de energía, mayor poder calorífico y menor grado de aromatización (Başakçılardan et al., 2019). La carbonización hidrotérmica ofrece algunas ventajas sobre otros métodos de conversión de biomasa como una alta eficiencia de conversión, que permite el uso de biomasa húmeda, así como el uso de temperaturas de reacción bajas y un tiempo de retención más corto. Sin embargo, la baja área superficial y la limitada porosidad del hidrocarbón limitan, en ocasiones, su área de aplicación (Başakçılardan et al., 2019).

En los últimos años, los posibles beneficios y aplicaciones del hidrocarbón han recibido una atención significativa, tanto en términos de producción de materiales de carbono, como en las diversas aplicaciones potenciales del hidrocarbón en el campo del almacenamiento de energía y la protección del medio ambiente (Wang et al., 2018).

Debido a que el proceso se lleva a cabo en un medio bifásico, el grado de interacción entre la fase sólida y la líquida es fundamental para el buen desarrollo del proceso. Por ello, es importante considerar los aspectos de agitación dentro del sistema.

1.3 Procesos de agitación.

El mezclado es una operación unitaria fundamental en casi todos los procesos químicos. Es el proceso en el cual varios componentes se ponen en contacto en forma aleatoria, de tal manera que al final de la operación se obtenga un sistema homogéneo (Proaño, 2011).

En la ingeniería química y de bioprocesos, la mezcla juega un papel clave, ya que controla el desempeño del proceso en lo que se refiere a la suspensión sólida, la homogenización, la dispersión de fases, la transferencia de calor y el desarrollo de las reacciones químicas. Los agitadores crean generalmente un flujo turbulento, lo que conduce a una variedad de diferentes estructuras de mezcla en diferentes escalas temporales y espaciales.

La calidad de la mezcla en tanques agitados se ha investigado experimentalmente desde hace varias décadas, aunque recientemente se han hecho estudios sobre la agitación empleando simulaciones numéricas.

Las simulaciones numéricas tienen la ventaja de que, en general, pueden llevarse a cabo sin los problemas y los recursos implícitos por el método experimental y, por lo tanto, suelen ser mucho más rentables. Además, las simulaciones numéricas brindan una buena visión general del comportamiento de mezcla de los tanques agitados, ya que no sólo se determinan los tiempos de mezcla globales, sino que también se pueden visualizar los perfiles de concentración locales. Sin embargo, esto debe considerarse como la etapa previa del diseño y optimización de los sistemas agitados. Por ello, la validación final a partir de resultados experimentales siempre es necesaria. Si bien los tiempos de mezclado global se miden fácilmente, los efectos de mezcla locales a menudo se comparan mediante variables cualitativas subjetivas. Al contrario, las simulaciones numéricas, en particular, ofrecen la posibilidad de identificar áreas mal mezcladas y analizar el comportamiento detallado dentro del tanque agitado (Fitshena et al., 2021).

1.3.1 Tipos de agitadores.

Los agitadores se dividen en los que generan corrientes paralelas al eje del impulsor, los cuales se denominan impulsores de flujo axial, así como los impulsores de flujo radial, que generan corrientes en dirección radial tangencial. Estos diferentes patrones de flujo se muestran en la Figura 2.

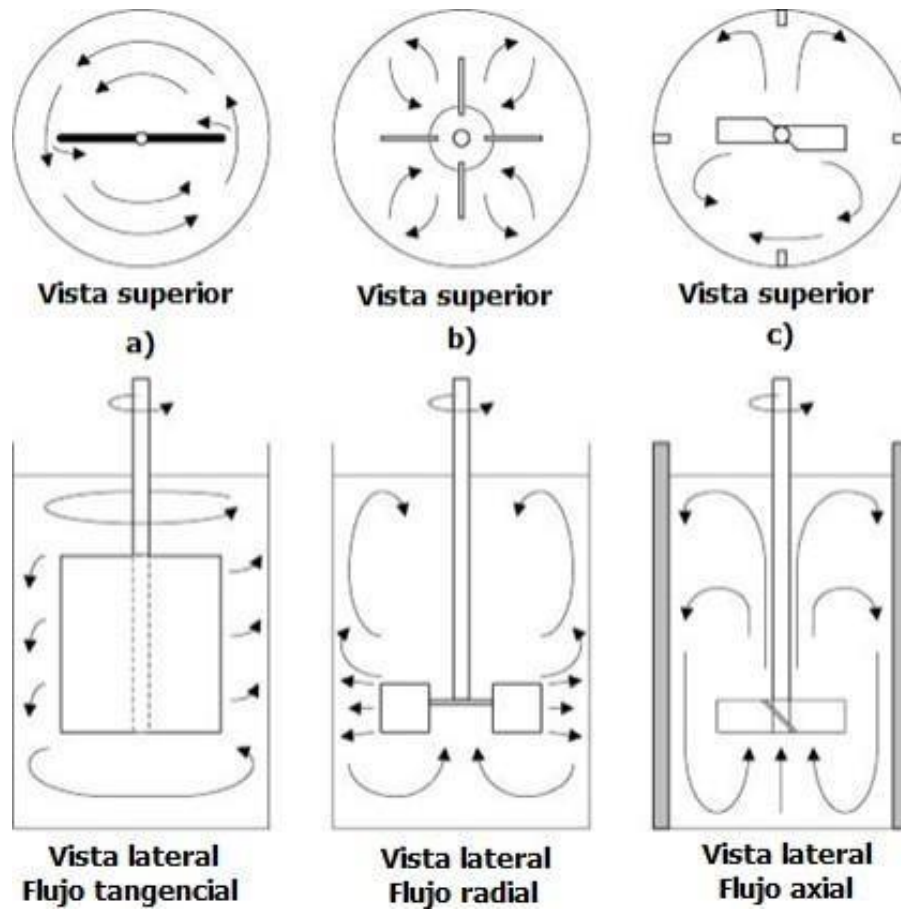


Figura 2. Campo de velocidad de tipo tangencial (a), de tipo radial (b) y de tipo axial (c).

1.3.2 Agitadores de paleta o tipo pala.

Estos consisten en una hoja plana sujeta a un eje rotatorio. El flujo del líquido tiene una componente radial grande en el plano de la pala y también un gran componente rotacional. Los agitadores de pala (Figura 3) son de construcción y operación relativamente sencillas, producen una acción de mezcla suave, que es con frecuencia la conveniente para el trabajo con materiales frágiles.

Son útiles para operaciones de simple mezcla como, por ejemplo, la mezcla de líquidos miscibles o la disolución de productos sólidos.



Figura 3. Agitador tipo de paleta o pala.

1.3.3 Agitadores tipo turbina.

Los agitadores de turbina representados en la Figura 4, están constituidos por un impulsor con cuatro hojas o más, montadas sobre el mismo elemento y fijas a un eje rotatorio. Los agitadores de turbina se pueden utilizar para procesar numerosos materiales. Son eficientes para un amplio intervalo de viscosidades; en líquidos pocos viscosos, producen corrientes intensas, que se extienden por todo el tanque y destruyen las masas de líquido estancado.



Figura 4. Agitador tipo turbina.

1.3.4 Agitadores tipo hélice.

Los agitadores de tipo hélice (Figura 5) poseen elementos impulsores de hojas cortas, generalmente de menos de $\frac{1}{4}$ del diámetro del tanque, giran a gran velocidad (de 500 a varios millares de rpm). Las hélices no son muy efectivas si van montadas sobre ejes verticales situados en el centro del depósito de mezcla.

La velocidad de flujo creada, en un depósito, por un mezclador de hélice tiene tres componentes:

- (a) Una componente radial que actúa en dirección perpendicular al eje.
- (b) Una componente longitudinal que actúa paralelamente al eje.
- (c) Una componente rotatoria que actúa en dirección tangencial al círculo de rotación del eje.

Tanto la componente radial como la longitudinal contribuyen, generalmente, a la mezcla, pero no siempre la componente rotatoria.



Figura 5. Agitador tipo hélice.

1.3.5 Trazador.

Es una sustancia con características físicas y químicas particulares que le permiten movilizarse a la velocidad de un fluido. Un trazador puede evaluar la calidad de una mezcla por lo que es fundamental seleccionar un trazador que no reaccione con otras especies dentro del sistema, ya que esto podría alterar la forma o el estado de la mezcla y por ende la detección del trazador.

1.3.6 Reactor de tanque agitado.

Los reactores de tanque agitado (Figura 6) encuentran una amplia gama de aplicaciones en la industria química, desde planta piloto hasta la producción a gran escala. El análisis detallado y la investigación de flujos multifásicos son de crucial importancia para el diseño, así como el control óptimo y seguro de estos procesos.

El desarrollo de un modelo dinámico de fluidos detallado, describiendo un proceso con el flujo de dos fases en un reactor de tanque agitado, puede proporcionar información útil sobre las distribuciones de masa, impulso y energía. Esto, permite la interacción compleja entre las dos fases, facilitada por la agitación de la mezcla dentro del recipiente (Karadimou et al., 2019).

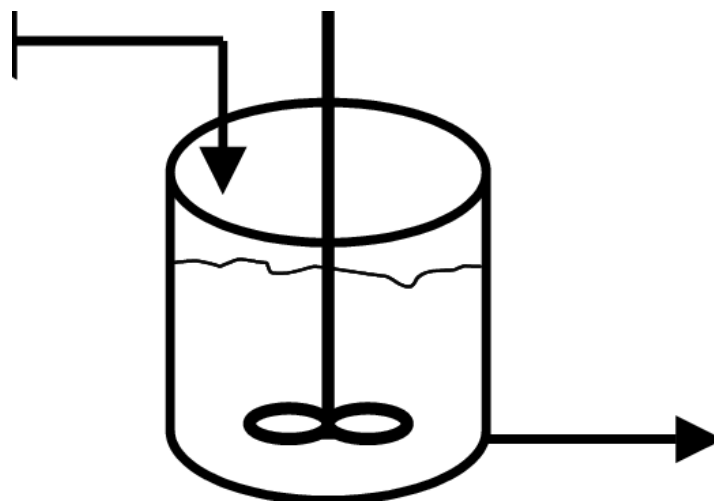


Figura 6. Reactor de tanque agitado.

1.3.7 Modelos cinéticos.

Los modelos cinéticos describen la descomposición de los reactivos en productos en función del tiempo. Estos son fundamentales a la hora de diseñar y escalar los reactores. Una desventaja es que son difíciles de obtener, ya que no existe otra manera de obtenerlos que no sea de forma experimental.

El proceso de conversión de biomasa en la carbonización hidrotérmica ha sido ampliamente investigado. Sin embargo, el principal desafío sigue siendo el diseño del proceso y la optimización de las condiciones de operación. Esto se debe a que el mecanismo de reacción y la cinética aún se desconocen en gran medida.

Aunque actualmente se utilizan diferentes enfoques para proponer modelos cinéticos, estos son demasiados globales y no permiten predecir o cuantificar la formación de compuestos intermediarios y subproductos. La mayoría de los estudios no consideran la formación de estos compuestos. De hecho, sólo unos pocos estudios se han centrado en comprender la ruta de formación del hidrocarbón a partir de componentes intermedios.

Por lo tanto, es importante comprender los mecanismos involucrados en la conversión de diferentes biomasa lignocelulósicas en hidrocarburos, para cuantificar los productos intermedios y explorar sus posibles usos (Sangaré et al., 2021).

1.3.8 Escalamiento.

El escalado de procesos es una de las tareas más importantes, tanto durante el diseño de la planta, como durante su operación normal. En el primer caso, algunos resultados del proceso sólo se conocen a pequeña escala, pero se debe extrapolar el proceso a gran escala para que la producción sea rentable. En el segundo caso, ya la planta está construida, pero se deben escalar las condiciones de operación de un nuevo producto probado con éxito a pequeña escala, que debe producirse en mayores cantidades para que sea rentable.

Tradicionalmente, se ha realizado el escalado de procesos basándose en la perspectiva del análisis dimensional, en la semejanza geométrica, en las relaciones empíricas a partir de un conjunto de datos y, por último, en modelos con apoyo de relaciones empíricas.

Algunos autores han planteado sin desarrollar totalmente, una aproximación fundamental, que involucra el modelado del proceso en consideración. El modelo obtenido debe proporcionar un buen entendimiento del proceso para permitir su escalado de forma confiable. Se resalta que, en este proceso, la validación del modelo a diferentes escalas y regímenes de operación es la tarea crítica.

Comúnmente, el escalado de procesos se ha llevado a cabo a través de procedimientos altamente heurísticos.

Los números adimensionales y los factores controlantes han marcado tendencias repetidas, generalmente sin éxito completo en el escalado final.

Sin embargo, ya desde la década de los 50's del siglo XX se ha escrito sobre la opción de escalar los procesos contando con un modelo lo suficientemente descriptivo para tal fin. El escalado por métodos tradicionales presenta múltiples problemas: cambios en los tiempos de respuesta del proceso, aparición de fenómenos superficiales no considerados en la baja escala, aparición de comportamientos cinéticos no contemplados, poca eficiencia del flujo de fluidos y de los efectos de los cambios en las materias primas sobre el producto.

Estos problemas solamente se detectan cuando la interacción de los fenómenos de transferencia de masa, energía y cantidad de movimiento se altera con el cambio de escala (Ruiz et al., 2011).

El paso fundamental en el escalamiento consiste en pasar los datos obtenidos del proceso que se quiere escalar a un modelo que pueden ser:

- Fenomenológico:

Fundamentado en algunos razonamientos teóricos, pero de tipo microscópico. No involucra consideraciones moleculares y permite hacer predicciones en rangos o intervalos de operación no estudiados experimentalmente.

- Empírico:

El cual se postula sin bases teóricas y se espera solamente que ajuste la interacción entre los datos en el rango o intervalo de experimentación.

- Similaridad:

Obtenido a partir de un análisis de similaridad con respecto a analogías físicas de tipo térmico, mecánico, geométrico, químico, etc. El tipo de modelo de escalamiento depende tanto del proceso en cuestión como de la geometría de los equipos involucrados (Villalobos., 2016).

El principio de similaridad hace referencia a la relación que existe entre sistemas físicos y el tamaño de estos, siendo básico en el escalamiento de procesos.

Los sistemas físicos se caracterizan en general por tres cualidades: tamaño, forma y composición. Las tres variables son independientes; por ejemplo, dos objetos pueden ser diferentes en tamaño, pero tener la misma forma y composición.

En términos más precisos, este principio establece lo siguiente: la configuración espacial y temporal de un sistema no dependen del tamaño, ni de la magnitud dentro del propio sistema; tampoco dependen del tamaño ni de la naturaleza de las unidades en las cuales se miden esas magnitudes (Anaya et al., 2008).

Algunas de las similaridades que pueden aplicarse para realizar un escalamiento son:

- Similaridad geométrica:

Implica de modo estricto que la relación entre dimensiones homólogas del modelo y el prototipo sean iguales. Un modelo y un prototipo son geoméricamente similares si todas las dimensiones del cuerpo en cada una de las direcciones de los ejes coordenados se relacionan mediante la misma escala de longitudes.

Lo anterior significa que el modelo y el prototipo son idénticos en forma y únicamente difieren en el tamaño (Figura 7).

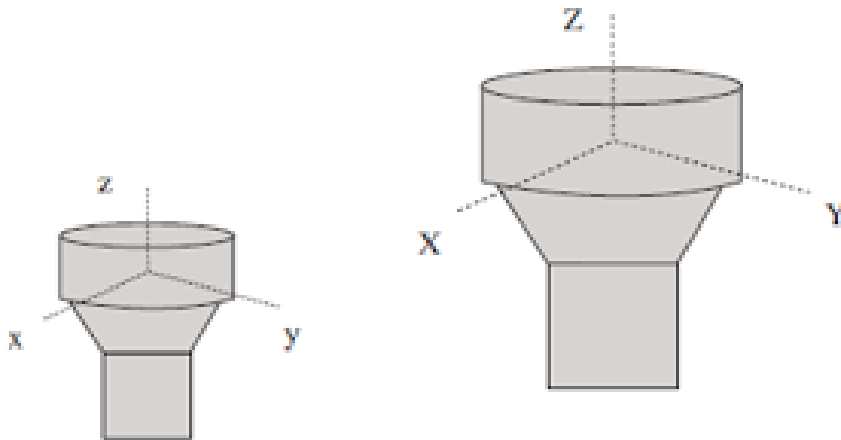


Figura 7. Dos sistemas que presentan similaridad geométrica (Solorzano., 2020).

- Similaridad cinemática:

Los movimientos en el modelo y el prototipo tienen similitud cinemática si partículas homologas llegan a puntos homólogos en tiempos homólogos. Por lo tanto obliga a que el modelo y el prototipo tengan una escala de líneas y también una escala de tiempos, con ello se logra una escala única de velocidades.

- Similaridad dinámica:

Si las fuerzas ejercidas por el fluido en puntos homólogos del modelo y el prototipo se relacionan entre si mediante un valor fijo, en la escala de fuerzas, se dice que se cumple la semejanza dinámica. Las fuerzas que actúan sobre una partícula de fluido pueden ser debido a la gravedad, la presión, la viscosidad y la tensión superficial (Anaya et al., 2008).

Es importante considerar que, en el escalamiento de cualquier tipo de proceso se puede lograr una similaridad cinemática y dinámica, sin mantener forzosamente una similaridad geométrica (Couper et al., 2008).

1.4 Simulación CFD (Dinámica de Fluidos Computacional).

La mecánica de fluidos es la rama de la mecánica encargada del estudio de los fluidos (líquidos y gases) ya sea en reposo o en movimiento. Para los fluidos en reposo, la rama especializada es la estática de fluidos. Para los fluidos en movimiento, la rama especializada en su análisis y comprensión es la dinámica de fluidos.

La dinámica de fluidos computacional o CFD por sus siglas en inglés, es un campo del conocimiento dedicado a obtener soluciones aproximadas a las ecuaciones de flujo de fluidos mediante la implementación de computadoras y algoritmos numéricos. Las simulaciones de dinámica de fluidos computacional (CFD) se utilizan normalmente para describir el comportamiento hidrodinámico de los sistemas, constituyéndose en una poderosa herramienta para el diseño de procesos. Sin embargo, los enfoques de CFD son computacionalmente exigentes y, por lo tanto, a menudo están restringidas a un pequeño conjunto de parámetros de entrada. Se pueden utilizar técnicas de regresión básicas para predecir las propiedades hidrodinámicas de nuevos valores de parámetros de entrada, pero estos modelos sustitutos sólo son capaces de interpolar estadísticas simples, como la media o el máximo de algún parámetro (Kaya et al., 2022).

El estudio en CFD de un reactor a nivel laboratorio puede facilitar su optimización y escalamiento a nivel industrial. En comparación con los datos experimentales, los resultados del modelo CFD pueden predecir información cuantitativa precisa. En ese sentido, muchos investigadores han utilizados CFD para simular y analizar el rendimiento de equipos de conversión termoquímica, como lechos fijos, calderas de combustión, etc. (Sangaré et al., 2021).

Las etapas para llevar a cabo un análisis mediante dinámica de fluidos computacional son:

- Se elige un dominio computacional (Figura 9).

Un dominio computacional es la región en el espacio en la cual las ecuaciones de movimiento se resuelven mediante CFD. Una celda es un subconjunto pequeño del dominio computacional. Los límites de un dominio bidimensional se denominan lados y los límites de un dominio tridimensional se llaman caras.

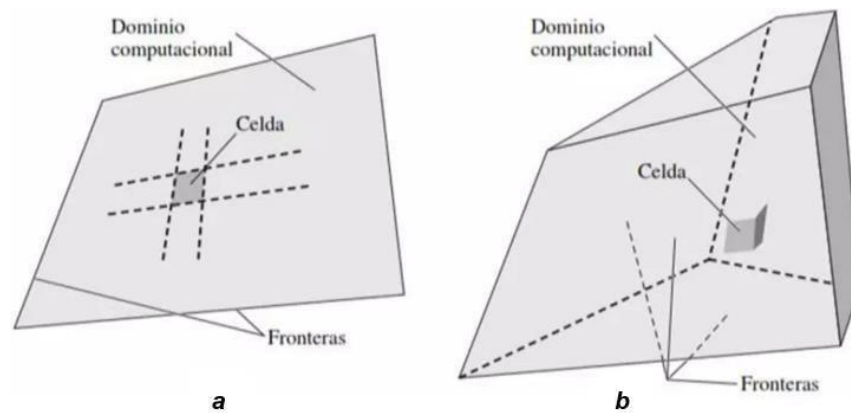


Figura 8. Representación de un dominio computacional en 2D (a) y 3D (b).

- Las condiciones de frontera (Figura 9).

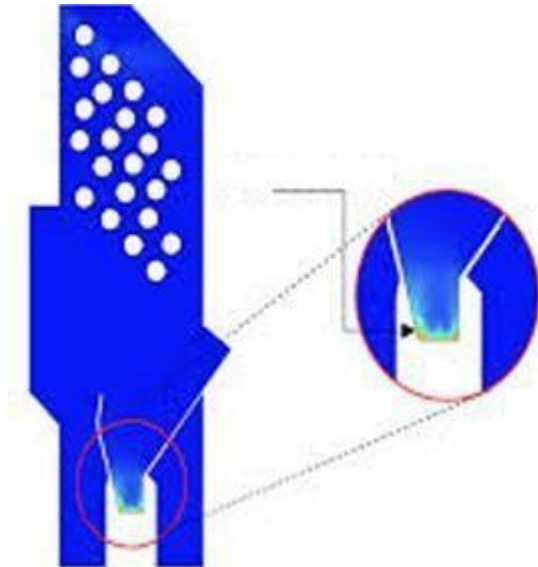


Figura 9. Condiciones de frontera en un dominio computacional.

- Se especifica el tipo de fluido, junto con las propiedades del fluido. La mayoría de los paquetes de CFD tienen integrada la base de datos de propiedades de los fluidos más comunes.
- Se seleccionan los parámetros numéricos y algoritmo de solución.
- Se establecen las condiciones iniciales. Podrán ser exactas o aproximaciones, pero son necesarias para un punto de partida.
- Las ecuaciones se resuelven por iteración, por lo general en cada celda. A veces se necesitan cientos, o inclusive miles, de iteraciones para que converja la solución.
- Cuando converge la solución, las variables de campo de flujo como la velocidad y la presión se analizan de manera gráfica.
- Uno de los pasos mas importantes es generar una malla que define las celdas en las que se calcula las variables de flujo en todo el dominio computacional (Figura 10).

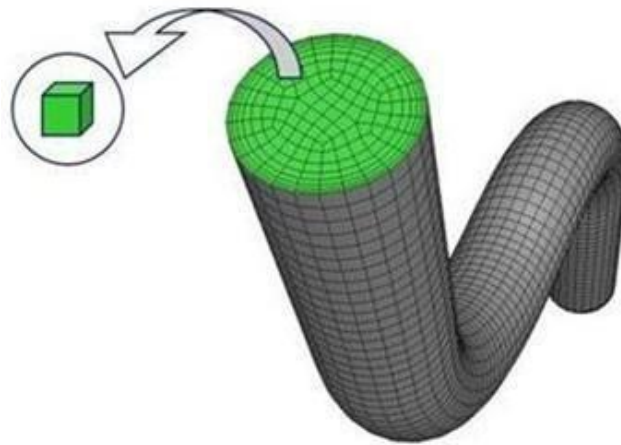


Figura 10. Ejemplo de mallado de un dominio computacional.

Una malla estructurada consta de celdas planas con cuatro lados (2D) o celdas volumétricas con seis caras (3D). Una malla no estructurada consta de celdas de varias formas, pero por lo común se emplean triángulos o cuadriláteros (Figura 11).

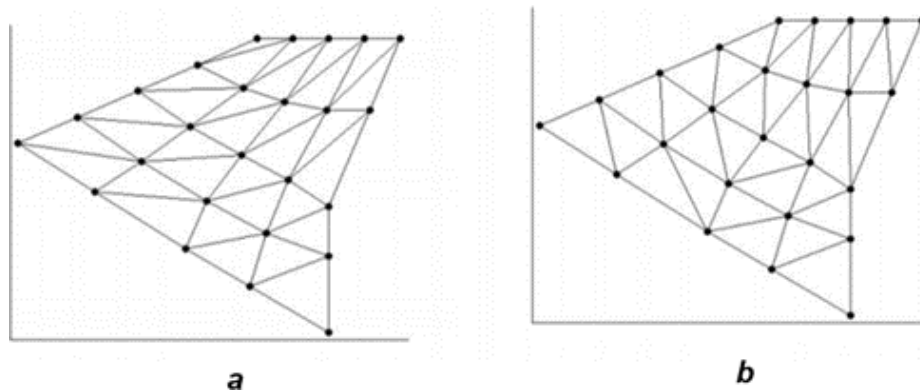


Figura 11. Ejemplo de malla estructurada (a) y malla no estructurada (b).

Por último, es necesario mencionar que una solución de CFD para flujo laminar se aproxima a una solución “exacta” limitada sólo por la precisión del esquema de discretización que se emplea para las ecuaciones de movimiento, el nivel de convergencia y el grado al que se resuelve la malla.

Lo mismo sería cierto para una simulación de flujo turbulento si la malla pudiera ser lo suficientemente fina para resolver todos los remolinos turbulentos tridimensionales no estacionarios.

Por desgracia, esta clase de simulación directa de flujo turbulento, por lo general, no es posible para las aplicaciones prácticas de ingeniería debido a las limitaciones de las computadoras.

En cambio, se hacen aproximaciones adicionales que modelan el proceso de mezclado y la difusión de turbulencia; estas ecuaciones de transporte adicionales deben resolverse junto con las ecuaciones de transferencia de masa y de cantidad de movimiento (Çengel et al., 2021).

1.4.1 CFD en la carbonización hidrotérmica.

Sangaré et al., 2020 utilizaron CFD para estudiar la carbonización hidrotérmica en un reactor de tanque agitado discontinuo. Las simulaciones se realizaron en COMSOL Multiphysics® 5.2 y se Investigaron diferentes relaciones de biomasa-agua en el sistema bifásico.

El objetivo principal en este estudio fue lograr una mezcla homogénea. En general, esto significa una distribución uniforme de partículas dentro del reactor. El criterio para encontrar la velocidad ideal para que el sistema fuera homogéneo se basó en el número de Reynolds. A partir de simulaciones preliminares determinaron que, si el régimen era turbulento, las partículas de biomasa se distribuían uniformemente dentro del reactor. Así, se encontró que una velocidad adecuada para garantizar que el sistema fuera homogéneo fue de 550 rpm. El estudio se realizó variando velocidades de 100 a 700 rpm. En la Figura 12 se observa el perfil de velocidades de cada una de las velocidades de agitación propuestas.

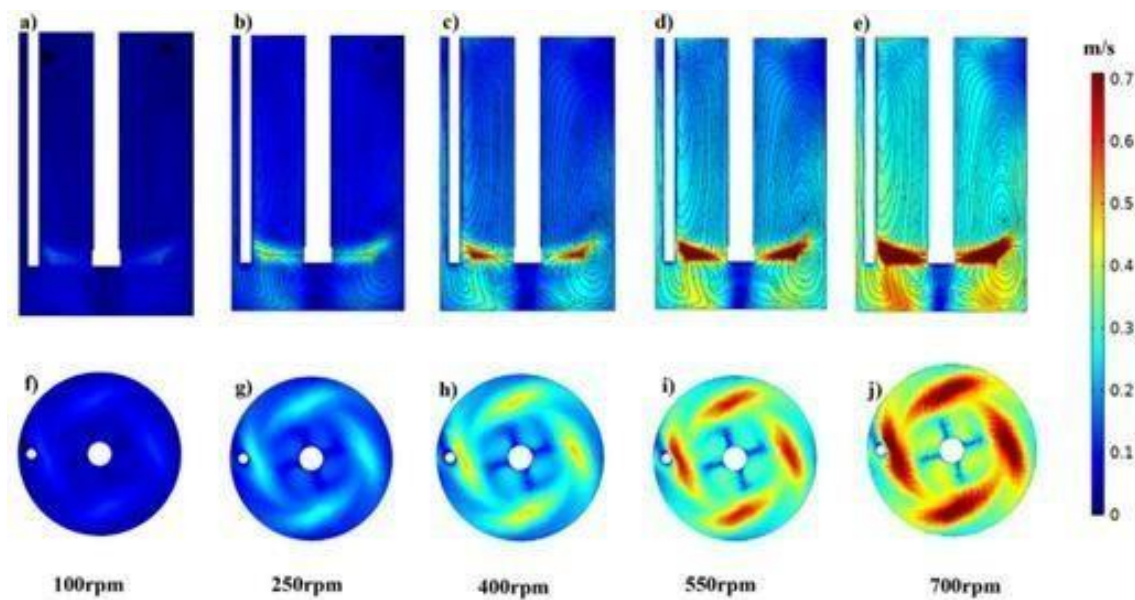


Figura 12. Efecto de la velocidad de agitación en un tanque agitado (Sangaré et al., 2020).

Sangaré et al., mencionan la importancia de validar los resultados de simulación con datos experimentales.

Por ello, a fin de garantizar la fiabilidad de los modelos CFD para la descripción de la hidrodinámica dentro del reactor, se contrastaron los resultados de la simulación con las velocidades axial y tangencial de datos experimentales reportados por Ozcan-Taskin et al. (2003). Estos resultados experimentales se obtuvieron a partir de mediciones de la velocidad del fluido mediante Anemometría Láser Doppler, empleando un agitador de turbina de álabes inclinados (Figura 13).

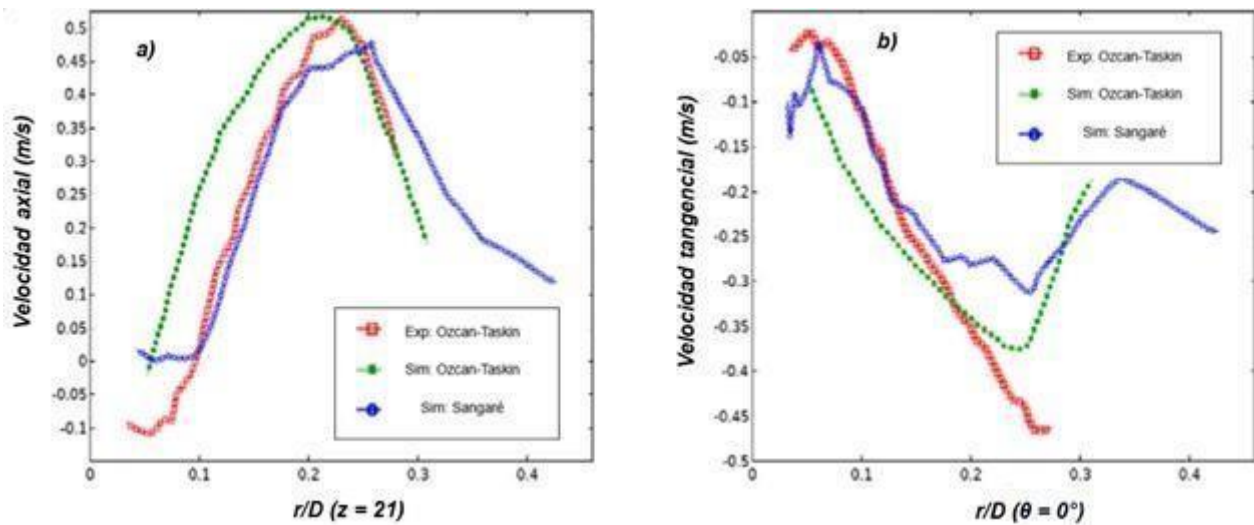


Figura 13. Perfiles de velocidades de simulación a) axial y b) tangencial, obtenidos por Sangaré et al. (2020) y comparación con los resultados experimentales de Ozcar-Taskin et al. (2003).

Los resultados de CFD mostraron la misma tendencia en la distribución de las velocidades axial y tangencial con los datos experimentales, lo que significa que las simulaciones podrían describir de forma congruente los campos de flujo dentro del reactor, durante el proceso de carbonización hidrotérmica. De esta forma, las simulaciones realizadas en este trabajo fueron validadas.

1.4.2 CFD en el escalamiento de procesos.

Russell et al., (2019) usaron la CFD para caracterizar el flujo de soluciones viscoelásticas en sistemas de recipientes agitados en múltiples escalas. En el estudio emplearon turbinas de Rushton (RT) de diferente tamaño, montadas en el centro y geométricamente similares.

En el escalamiento se empleó la ley de potencia modificada, el número de Reynolds de la tensión de fluencia, el índice de comportamiento de flujo y el criterio de la similaridad geométrica.

Se recopilaron datos adicionales utilizando una turbina de paletas inclinadas y se mostró la similitud del flujo a diferentes escalas, empleando el conjunto de datos de ambos impulsores. Los resultados obtenidos son importantes en el contexto de los procesos de mezcla a diferentes escalas, en recipientes agitados que contienen fluidos complejos y se pueden usar para demostrar que se puede lograr una similitud de flujo en estos sistemas, si los procesos se escalan adecuadamente. Las Figuras 14 y 15 muestran los sistemas experimentales y las simulaciones CFD.

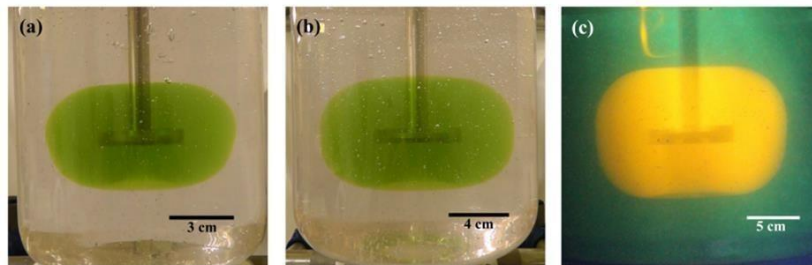


Figura 14. Imágenes experimentales con escala creciente (diámetro del impulsor) (Russell et al., 2019).

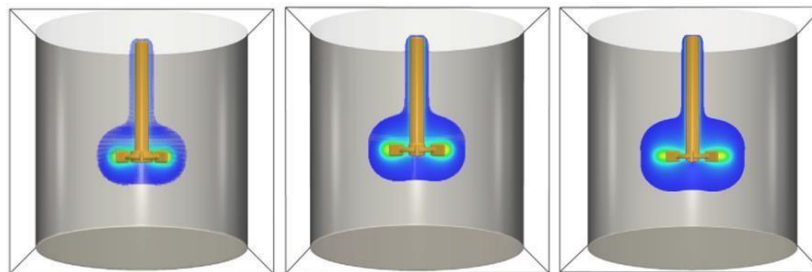


Figura 15. Simulaciones CFD del proceso con escala creciente (diámetro del impulsor) (Russell et al., 2019).

Un dato importante que analizaron fue la influencia del diámetro del agitador y de la velocidad de agitación. Partiendo de esta base, se hicieron experimentos y simulaciones variando el diámetro del agitador.

La Figura 16 muestra el efecto de la variación del tamaño del agitador y la velocidad de agitación sobre el diámetro de caverna, manteniendo el volumen del tanque constante. Cabe señalar que el diámetro de caverna es una zona de mezcla intensiva que ocurre cerca del impulsor, sobre todo cuando se tienen fluidos adelgazantes. La figura presentada muestra que las predicciones del diámetro de caverna obtenidas en la simulación son consistentes con los resultados experimentales para los 3 diámetros utilizados.

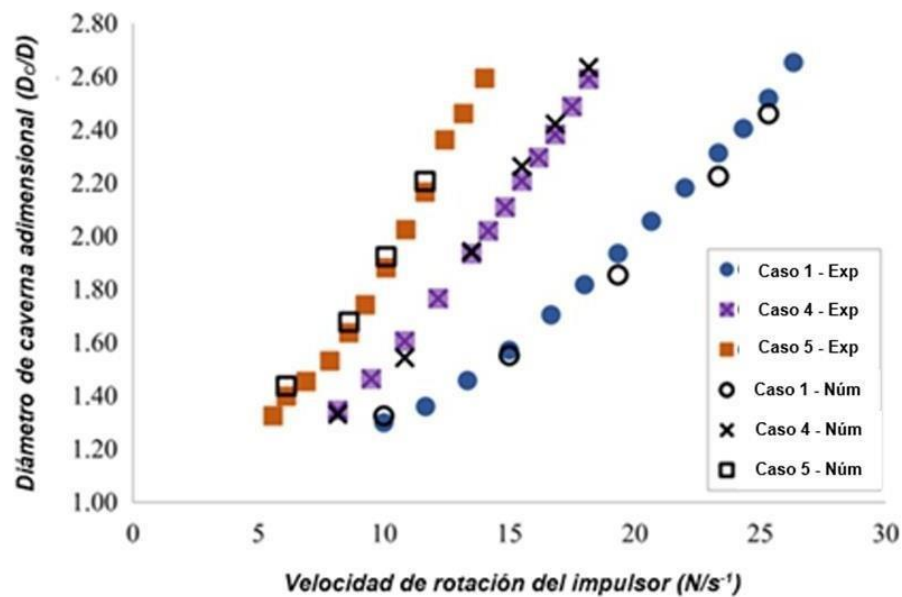


Figura 16. Efecto del tamaño del agitador y la velocidad de agitación (Russell et al., 2019).

Se realizaron también experimentos complementarios escalando el sistema de 1 a 20 L. Los resultados de predicción del diámetro de caverna en función de la velocidad de agitación y para diferentes tamaños de agitador se muestra en la Figura 17. Una vez más se aprecia la consistencia entre los resultados predichos por las simulaciones y los resultados experimentales.

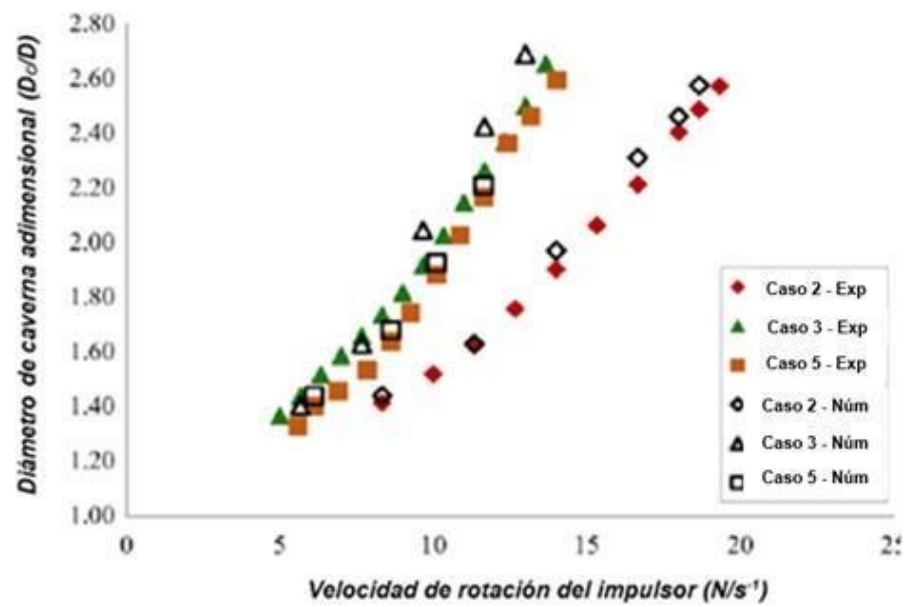


Figura 17. Efecto del tamaño del agitador, la velocidad de agitación y el tamaño del tanque agitado (Russell et al., 2019).

Los resultados anteriormente mostrados muestran la utilidad de la CFD para el estudio de sistemas agitados y es por ello que se decidió utilizar esta herramienta en el presente estudio.

2. Planteamiento del problema

2.1 Justificación.

El creciente consumo de la energía, el agotamiento de los recursos fósiles y los efectos adversos que estos producen al planeta, son motivos que llevan a investigar nuevas fuentes de energías renovables, en este caso la biomasa. En este contexto, la carbonización hidrotérmica es un proceso con alto potencial para procesar estamateria prima. El proceso permite la degradación térmica de los componentes de la biomasa (hemicelulosa, celulosa y lignina) para producir un combustible sólido denominado hidrocarbón. El proceso es muy complejo, ya que involucra una gran cantidad de reacciones químicas en un sistema bifásico sólido-líquido.

Por ello, el empleo de la dinámica de fluidos computacional (CFD) puede ayudar al estudio y comprensión de todos los fenómenos involucrados. Esto con el fin de establecer una estrategia para el escalamiento del proceso. En efecto, en la literatura existen varias investigaciones de este proceso a escala laboratorio, pero muy pocas investigaciones reportadas a nivel industrial. La razón principal es que el escalado de un reactor de tanque agitado, como los que se emplean en la HTC, representa un desafío tecnológico. El principal problema es la determinación del efecto de la heterogeneidad del sistema sobre los gradientes de concentración dentro del reactor, los cuales tendrán un efecto sobre la cinética y finalmente sobre el rendimiento de este. Por ello, este proyecto pretende enfocarse en este problema.

2.2 Hipótesis.

Es posible establecer una estrategia de extrapolación del proceso HTC, a partir del estudio de la calidad del mezclado y del funcionamiento de un reactor de tanque agitado bifásico empleando modelos de tipo CFD.

2.3 Objetivo general.

Desarrollar una estrategia de escalamiento de un reactor de HTC agitado, evaluando la calidad del mezclado, esto usando biomasa lignocelulósica, para predecir la homogeneidad de la mezcla y el desempeño del proceso a diferentes escalas.

2.4 Objetivos específicos.

- Validar la herramienta de CFD a partir de la simulación de un sistema agitado reportado en la literatura, empleando los datos de velocidad.
- Proponer una estrategia de extrapolación (1:25) del sistema agitado a escala laboratorio, empleando similaridad dinámica y proponiendo parámetros de calidad de mezclado.
- Estudiar la hidrodinámica de los parámetros de agitación sobre la calidad de mezclado en un sistema monofásico, empleando un diseño de experimentos.
- Proponer un sistema de agitación escalado en función de los resultados del diseño de experimentos y determinar el tiempo de homogenización del sistema bifásico.

3. Metodología

Dentro de este capítulo, se va a especificar la metodología que se empleó para obtener los resultados e información necesaria para la elaboración de la presente tesis. Se especifican los elementos necesarios para poder llevar a cabo el análisis de la CFD en el escalamiento de la carbonización hidrotérmica.

3.1 Herramientas utilizadas.

Para este trabajo fueron utilizados los programas COMSOL Multiphysics® 5.6 y MODDE® 7.0 de Umetrics.

Para el análisis de las simulaciones se utilizó COMSOL Multiphysics®. Este es un paquete de modelado para la simulación de cualquier proceso físico que se pueda describir mediante ecuaciones en derivadas parciales. Está provisto de la última tecnología y algoritmos de solución que pueden manejar problemas complejos de forma rápida y precisa. Su estructura ésta diseñada para proporcionar facilidad de uso. COMSOL está dividido en tres herramientas principales, llamados módulos:

- Preprocesador (creación de geometría y mallado).
- Procesador
- Postprocesador (análisis de resultados)

Las simulaciones del sistema a nivel laboratorio, como a un nivel escalado se llevaron a cabo en COMSOL Multiphysics®, el cual permite estudiar la hidrodinámica y el mezclado en un sistema rotatorio en estado estacionario y en estado transitorio. Para ello, se selecciona una o varias “físicas”, que es el paquete de ecuaciones a resolver. Para este trabajo se utilizaron 3 “físicas”, las cuales son:

- Flujo turbulento.
- Transporte de especies diluidas.
- Modelo de mezcla.

Dicho esto, para resolver las ecuaciones del software, se deben de especificar las propiedades del fluido y las condiciones de frontera (Anexo 1).

La selección del mallado se describe en el Anexo 2.

Por otra parte, el análisis estadístico se realizó en MODDE® 7.0 de Umetrics, el cual permite hacer un uso adecuado de la información y obtener modelos mediante su apartado de diseño de experimentos.

Las simulaciones se realizaron en una PC Dell Studio XPS 9100 Intel i7CPU con 16 GB de memoria RAM.

3.2 Hidrodinámica.

En una primera etapa se realizó el análisis hidrodinámico y de perfiles de velocidad del sistema a escala laboratorio mediante la reproducción de simulaciones previas, la geometría del sistema fue construida en COMSOL Multiphysics® (Figura 18).

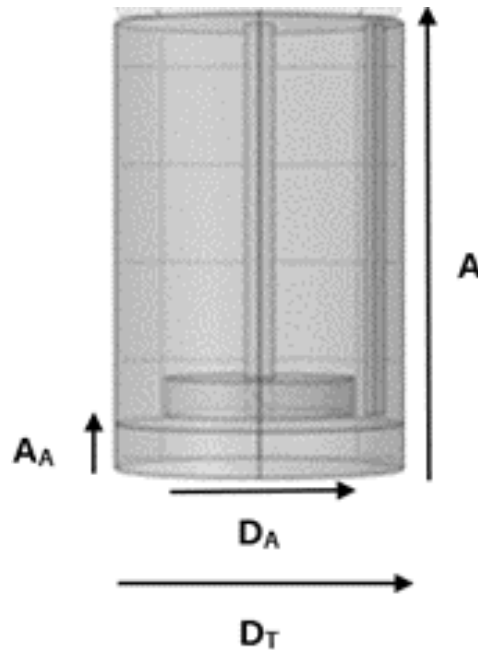


Figura 18. Reactor de tanque agitado a nivel laboratorio.

Esta etapa es fundamental, ya que se deben mantener las dimensiones reales del reactor (Tabla 1). Es importante mencionar que el agitador de tipo pala corresponde a un volumen vacío dentro del dominio, cuyas paredes corresponden a la frontera interna con el fluido.

Tabla 1. Dimensiones del tanque real.

Dimensión	Valor (m)
A	0.086
D _T	0.056
A _A	0.035
D _A	0.021

Se evaluaron diferentes velocidades de agitación (100 a 700 revoluciones por minuto). Esto debido a que en trabajos previos se demostró que, en sistemas agitados, para garantizar la homogeneidad de un sistema se debe estar en régimen turbulento (*Sangaré et al., 2020*). Por ello, es necesario encontrar la velocidad de agitación que garantice estar bajo ese régimen. La Ec. 1 permite obtener el número de Reynolds en el sistema y funciona para tanques agitados.

$$Re = \frac{(N)(D^2)(\rho)}{\mu} \quad (1)$$

Donde:

N : Velocidad de agitación.

D : Diámetro del impulsor.

ρ : Densidad del fluido.

μ : Viscosidad del fluido.

La Figura 19 muestra la evolución del número de potencia en función del número de Reynolds para sistemas agitados. Como se puede observar, el régimen de flujo depende principalmente del número de Reynolds y, como se indica, este régimen se logra para valores de $Re > 10,000$, independientemente de la presencia o no de baffles dentro del sistema. Por ello, este será el valor objetivo que buscaremos en las simulaciones.

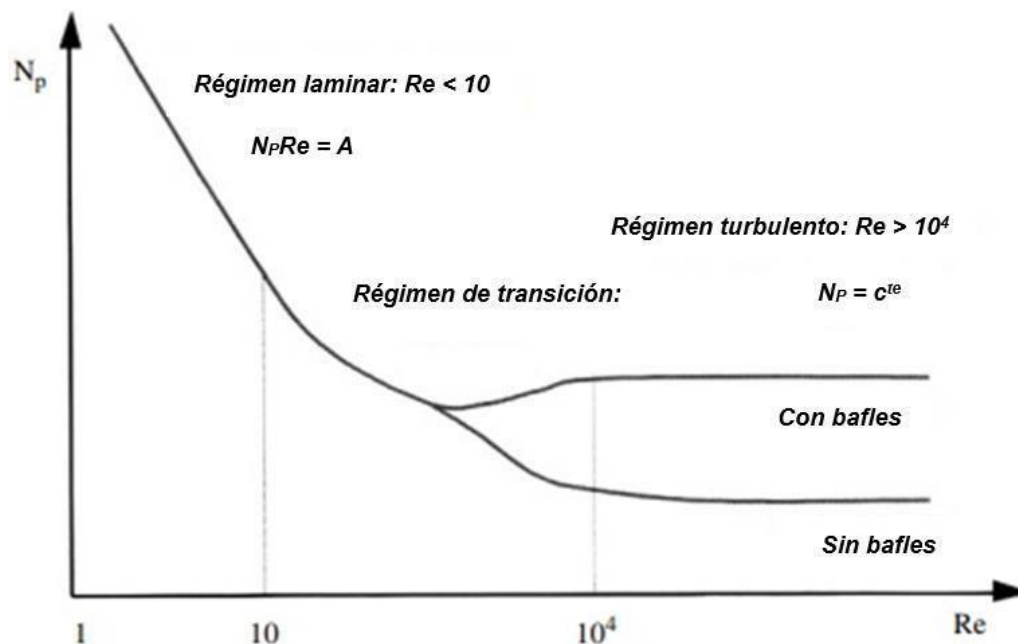


Figura 19. Variación del número de potencia de un agitador con el número de Reynolds, (Xuereb et al., 2006)

Es importante validar las simulaciones hechas, como se mencionó, esto se puede hacer mediante la literatura de trabajos previos, esto se realizó comparando datos de simulación reportados en la literatura (Sangaré et al., 2020) con valores experimentales (Ozcar-Taskin et al., 2003).

Así, a partir de los perfiles de velocidad se verificó la fiabilidad de la herramienta utilizada y, por lo tanto, la significancia y validez de los resultados numéricos obtenidos. Para ello, se reprodujeron las simulaciones realizadas previamente y se compararon con los resultados experimentales.

Los resultados obtenidos deben presentar una similitud con los resultados reportados en la literatura, de ser ese el caso, confirmaremos que la herramienta es válida y que los resultados posteriores tendrán validez. La comparación se hizo con los resultados de Sangaré et al. (2020), que a su vez validó la herramienta utilizada en su trabajo con los resultados de Ozcar-Taskin et al. (2003).

Con la herramienta validada, se establecieron las condiciones en que se llevaron a cabo las simulaciones. Para este trabajo se utilizaron 2 tipos de estudios:

- Rotor congelado

Se utiliza para calcular la velocidad, la presión, la turbulencia, la concentración, la temperatura y otros campos del flujo en maquinaria rotatoria y es un caso especial de un estudio estacionario. Las partes giratorias se mantienen congeladas en su posición y la rotación se explica por la inclusión de las fuerzas centrífugas y de Coriolis. El estudio es especialmente adecuado para flujo en maquinaria rotativa donde la topología de la geometría no cambia con la rotación.

- Temporal

Se utiliza cuando las variables de campo cambian con el tiempo. En el flujo de fluidos, se utiliza para calcular campos de flujo y presión no estacionarios. En el transporte de especies químicas, se utiliza para calcular la composición química a lo largo del tiempo.

Por lo tanto, las ecuaciones por resolver son el balance de cantidad de movimiento, que se rige por la ecuación de Navier-Stokes (Ec. 2.) y la conservación de la masa, que se rige por la ecuación de continuidad (Ec. 3.).

$$\rho(u \cdot \nabla)u = -\nabla \cdot [-pl + K] + \rho g \quad (2)$$

Los términos de estas ecuaciones se describen como:

ρ : Densidad del fluido (Kg/m³).

$(u \cdot \nabla)$: Término de continuidad (m³/s).

u : Campo de velocidad (m/s).

g : Influencia de la gravedad (m/s²)

K : Variable de turbulencia

$$\rho \nabla \cdot u = 0 \quad (3)$$

Los términos de esta ecuación se describen como:

ρ : Densidad del fluido (Kg/m³).

$(u \cdot \nabla)$: Terminio de continuidad (m³/s).

u : Campo de velocidad (m/s).

Las propiedades utilizadas fueron las del agua, ya que fue el fluido empleado para obtener los datos experimentales, con una densidad de 1000 kg/m³ y una viscosidad de 0.001 cP.

3.3 Criterio de escalamiento.

El criterio para el escalamiento del proceso de la carbonización hidrotérmica, de un reactor de 200 mL a un reactor de 5 L (escala 1:25), fue el criterio de similaridad dinámica, manteniendo la potencia por unidad de volumen constante.

Este criterio se basa en mantener el mismo consumo de energía del agitador por unidad de volumen. Este parámetro se calcula a partir de la Ec. 4.

$$\frac{P}{V} = \frac{N_p \cdot N \cdot D \cdot \rho}{V} \quad (4)$$

Donde:

P : Presión (Pa).

V : Volumen (m³).

N_p : Numero de potencia.

N : Velocidad de agitación (rpm).

D : Diámetro del agitador (m).

ρ : Densidad (Kg/m³)

La manera de utilizar esta relación es igualándola en la región ocupada por el agitador en el sistema a nivel laboratorio, con la región ocupada por el agitador en el sistema escalado. Así, mediante la Ec. 5, es posible determinar la velocidad de agitación (N) necesaria para mantener la potencia por unidad de volumen constante.

Siendo $D_{Laboratorio}$ el valor del diámetro del agitador en el sistema a nivel laboratorio y $D_{Escalamiento}$ el valor del diámetro del agitador en el sistema escalado propuesto, se obtiene la Ec. 5.

$$N_E = N_L \left(\frac{D_L}{D_E} \right)^n \quad (5)$$

Donde:

N_E : Velocidad de agitación del sistema escalado (rpm).

N_L : Velocidad de agitación del sistema a escala laboratorio (rpm).

D_L : Diámetro del agitador a escala laboratorio (m).

D_E : Diámetro del agitador escalado (m).

n : Constante bajo el criterio de la similaridad dinámica.

Para mantener la potencia por unidad de volumen constante, el valor de n debe ser $2/3$. Cabe mencionar que no es indispensable que se mantenga la similaridad geométrica. A través de este escalamiento se deben establecer las condiciones de operación, con la finalidad de obtener un comportamiento del proceso similar al original. Estos resultados pueden ser la base para futuros escalamientos con mayores volúmenes de producción.

En el escalamiento se modificó la geometría, proponiendo un fondo semiesférico en el reactor de tanque agitado. El cambio de fondo plano a fondo semiesférico se hizo con base en las reglas heurísticas, donde se menciona que un tanque agitado con fondo semiesférico previene zonas de estancamiento, favoreciendo la agitación del proceso. Una vez planteando el nuevo diseño del tanque, se usó la Ec. 8. para conocer el radio del reactor, la cual es una combinación de las Ec. 6. y 7, que se utilizan para conocer el volumen de un tanque en forma de cilindro y el volumen de una semiesfera, respectivamente.

$$V_c = (\pi \cdot r^3) \quad (6)$$

$$V_e = \left(\frac{4}{6} \cdot \pi \cdot r^3 \right) \quad (7)$$

$$V_T = \left(\frac{4}{6} \cdot \pi \cdot r^3 \right) + (\pi \cdot r^3) \quad (8)$$

Como se debe calcular el radio del tanque escalado, se despeja esta variable de la Ec. 8, obteniendo la Ec. 9.

$$r = \sqrt[3]{\frac{3 \cdot V_T \cdot \pi}{5}} \quad (9)$$

Donde:

r : Radio del tanque (m).

V_T : Volumen total del tanque (m³).

V_c : Volumen de un cilindro (m³).

V_e : Volumen de una semiesfera (m³).

π : PI (m).

Al hacer el cálculo se obtuvo el valor del radio, por ende, se conoce el diámetro del tanque. De nueva cuenta, empleando reglas heurísticas se propone que la altura del tanque sea 3 veces el valor del radio. En la Figura 20 se muestra el tanque escalado con las nuevas dimensiones, reportadas en la Tabla 2 se presentan los valores de estas dimensiones.

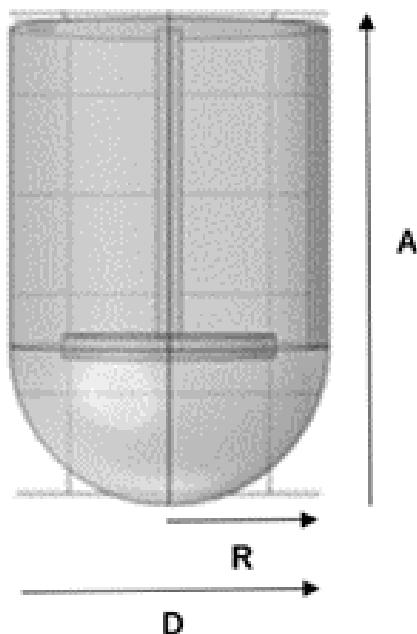


Figura 20. Reactor de tanque agitado escalado.

Tabla 2. Dimensiones del reactor de tanque agitado escalado 1:25 (5 L).

Radio del tanque	7.6 cm
Diámetro del tanque	15.1 cm
Altura del tanque	22.7 m

Con el reactor de tanque agitado escalado, se procedió a evaluar la calidad de mezclado a esta nueva escala, así como analizar la hidrodinámico del proceso en comparación con el sistema a escala laboratorio. Para determinar la calidad del mezclado se propusieron dos parámetros: la dispersión de la velocidad y el tiempo de mezclado. Estos parámetros serán descritos posteriormente.

3.4 Diseño de experimentos central compuesto.

Como punto de partida se plantea desarrollar un modelo estadístico que permita predecir la calidad de mezclado en un sistema en específico.

Un diseño central compuesto (DCC) es un diseño de experimentos de tipo superficie de respuesta que más se utiliza. Los diseños centrales compuestos son diseños

factoriales o factoriales fraccionarios con puntos centrales, ampliando con un grupo de puntos axiales, también denominados puntos de estrella, que permiten estimar una curvatura. Son especialmente útiles en los experimentos secuenciales, porque frecuentemente permiten ampliar experimentos factoriales al agregar puntos axiales y centrales.

Los factores estudiados deben tener una influencia sobre la respuesta, siendo esta última la calidad del mezclado. Así, se propusieron las siguientes variables como posibles factores que determinen el rendimiento del proceso agitado:

- Velocidad de rotación del agitador.
- Diámetro del agitador con respecto a la altura del tanque.
- Posición del agitador con respecto al fondo del tanque.

Las respuestas son:

- Dispersión de la velocidad.
- Tiempo de mezclado

Los valores propuestos para el diámetro del agitador, altura del agitador y velocidad de agitación fueron:

- (1/6) a (1/3) de la altura del tanque
- (1/6) a (1/2) de la altura del tanque
- 299 rpm a 477 rpm

La velocidad de rotación del agitador se obtuvo recordando el criterio del escalamiento de similaridad dinámica, cabe mencionar que la velocidad de agitación depende del diámetro del agitador.

Finalmente, en la Tabla 3 se reportan los factores y sus niveles expresados en unidades estándar donde -1 representa el nivel bajo del factor, +1 representa el nivel alto y 0 los puntos centrales.

Tabla 3. Factores del diseño central compuesto

	Bajo (-1)	Central (0)	Alto (1)
x₁	299	387	475
x₂	(1/6) *A	(1/4) *A	(1/3) *A
x₃	(1/6) *A	(1/3) *A	(1/2) *A

Donde:

x_1 : es la velocidad de agitación en revoluciones por minuto.

x_2 : es el diámetro el agitador en relación con la altura del tanque en metros.

x_3 : es la posición del agitador con respecto al fondo del tanque en metros.

A : es la altura del tanque escalado en metros.

El diseño consiste en:

- Un factorial de 2^3 : Simulaciones 1-8
- Los puntos estrella: Simulaciones 9-14
- Puntos del centro: Simulaciones 15-17

Esto nos da un total de 17 simulaciones por realizar para obtener el modelo estadístico.

El diseño es rotatable y ortogonal, los puntos estrella son colocados en $\alpha = 1.68$, por lo que en la Tabla 4 se muestra el diseño central compuesto completo a realizar.

Tabla 4. Condiciones de las Simulaciones del diseño central compuesto.

Simulación	x_1	x_2	x_3
1	299	$(1/6) * A$	$(1/6) * A$
2	475	$(1/6) * A$	$(1/6) * A$
3	299	$(1/3) * A$	$(1/6) * A$
4	475	$(1/3) * A$	$(1/6) * A$
5	299	$(1/6) * A$	$(1/2) * A$
6	475	$(1/6) * A$	$(1/2) * A$
7	299	$(1/3) * A$	$(1/2) * A$
8	475	$(1/3) * A$	$(1/2) * A$
9	238	$(1/4) * A$	$(1/3) * A$
10	534	$(1/4) * A$	$(1/3) * A$
11	387	$(1/10) * A$	$(1/3) * A$
12	387	$(1/2.5) * A$	$(1/3) * A$
13	387	$(1/4) * A$	$(1/18) * A$
14	387	$(1/4) * A$	$(1/1.5) * A$
15	387	$(1/4) * A$	$(1/3) * A$
16	387	$(1/4) * A$	$(1/3) * A$
17	387	$(1/4) * A$	$(1/3) * A$

Así, a partir de este diseño de experimentos se espera obtener un modelo que pueda predecir el tiempo de mezclado y la dispersión.

3.4.1 Hidrodinámica del sistema escalado.

Para esta etapa, como se mencionó, se mantuvo la potencia por unidad de volumen constante. Por lo que es necesario calcular el número de Reynolds en cada una de las diferentes configuraciones del sistema (Ec. 1.). Esto, para garantizar un régimen turbulento.

En este caso se espera un número Reynolds diferente en cada simulación, y debido a esto puede ser que algunas configuraciones no se encuentren en régimen turbulento por lo que podrían ser descartas desde esta etapa.

Dicho esto, también se puede decir que desde este paso, las variables de la velocidad de agitación y del diámetro del agitador tendrán una gran influencia en los resultados, ya que la Ec. 1. depende de estas variables, lo cual condiciona los resultados.

3.4.2 Dispersión de la velocidad.

Para evaluar la dispersión de la velocidad se colocaron puntos de control en todo el sistema. Una vez establecidos los puntos de control, se determinaron a partir de las simulaciones los valores de la magnitud de velocidad en cada punto a para el reactor de 200 mL (Figura 21) y el reactor de 5 L (Figura 22).

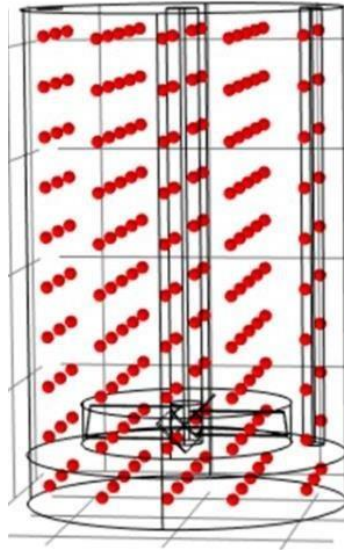


Figura 21. Puntos de control dentro del sistema a escala laboratorio.

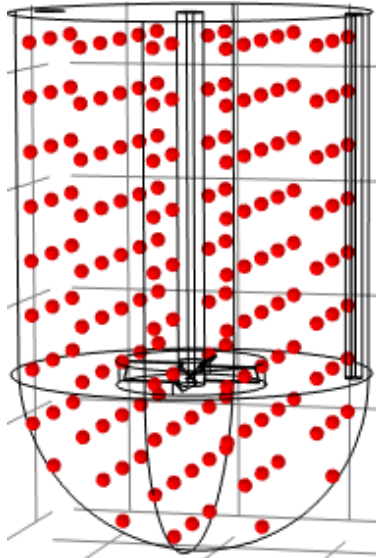


Figura 22. Puntos de control dentro del sistema escalado 1:25 (5L).

Para calcular dispersión de la velocidad, que es definida como el coeficiente de variación entre las velocidades en los puntos de control y la velocidad promedio, es necesario conocer la velocidad promedio del sistema. Esta se calcula a partir de la integral de volumen del dominio de interés (Ec. 10).

$$\bar{v} = \frac{\iiint v dV}{V} \quad (10)$$

Donde:

v : es la magnitud de la velocidad en cada campo del dominio (m/s).

$\bar{v}$: es la velocidad promedio (m/s).

V : Volumen (m³)

dV : Diferencial de volumen (m³)

Una vez calculada la velocidad promedio, es posible determinar la dispersión de la velocidad a partir de la Ec. 11. Esta ecuación expresa realmente un coeficiente de variación de la variable expresada en porcentaje.

$$\sigma = \frac{\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (v_i - \bar{v})^2}{N}}}{\bar{v}} \cdot 100 \quad (11)$$

Donde:

σ : es la dispersión de la velocidad (%).

v_i : es la velocidad en cada punto de control (m/s).

$\bar{v}$: es la velocidad promedio (m/s).

N : es el número de puntos de control.

El valor de la dispersión de la velocidad es una medida de la homogeneidad en los valores de velocidad dentro del sistema. En un sistema perfectamente agitado la velocidad es la misma en cualquier punto, por lo que la dispersión debería ser de cero. Por otro lado, un incremento en el valor de la dispersión implica valores distintos de velocidad dentro del sistema y podemos establecer que mientras más grande es este valor menor será la homogeneidad del sistema agitado.

3.4.3 Evaluación del tiempo de mezclado.

Para la evaluación del tiempo mezclado, se utilizó el concepto de trazador, esto con el fin de evaluar la concentración en función del tiempo hasta encontrar la concentración constante dentro del sistema. Así, cuando la concentración del trazador llegue a ese valor constante de mezclado total.

El trazador es inyectado virtualmente en la simulación en la parte superior del tanque (Figura 23) en forma de pulso gaussiano (Figura 24).

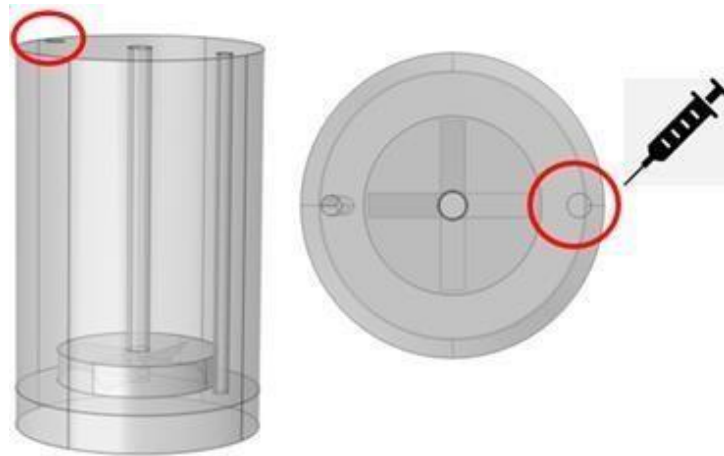


Figura 23. Inyección del trazador.

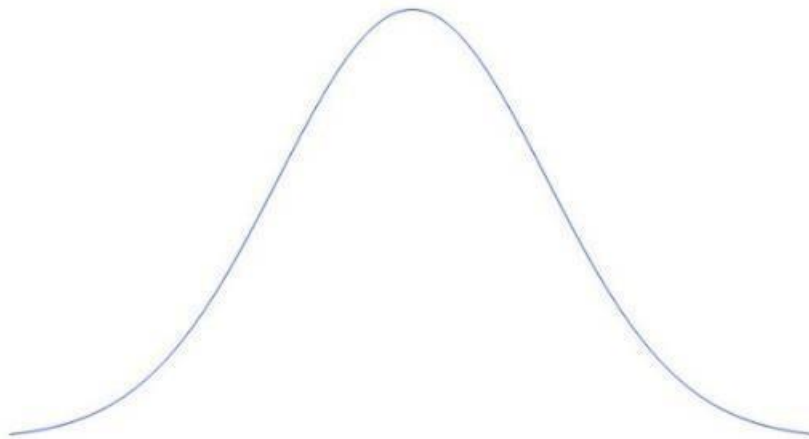


Figura 24. Representación de un pulso gaussiano.

Las ecuaciones que rigen la inyección en el pulso gaussiano se presentan a continuación (Ec. 12. y 13). El tiempo de inyección es muy pequeño comparado con el

tiempo del proceso de mezclado, de tal manera se considera un pulso de inyección cercano a una función de Dirac.

$$C = \frac{C_0(t)}{y(t=0)} \quad (12)$$

Donde:

$C_0(t)$: Concentración inicial (mol/m³)

$y(t=0)$: Valor de y en un tiempo igual a 0 (s).

$$y(t) = \frac{e^{-\frac{(t-t_0)^2}{2\sigma^2}}}{\sigma\sqrt{2\pi}} \quad (13)$$

Con el valor del tiempo de mezclado se obtiene el segundo parámetro para evaluar la calidad de mezclado en el sistema.

Como en la dispersión de la velocidad, el análisis se hizo a ambas escalas con el fin de comparar resultados, en este caso se esperan tiempos de mezclado superiores en los sistemas escalados.

En esta etapa se usó la transferencia de especies diluidas para calcular el campo de concentración de un soluto diluido en un disolvente (Ec.14.).

Se pueden calcular el transporte y las reacciones de las especies disueltas en un gas, líquido o sólido. Las fuerzas impulsoras para el transporte pueden ser la difusión por la ley de Fick y la convección cuando se acopla al flujo de un fluido.

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = (\nabla \cdot J_j) + (u \cdot \nabla c_j) = R_j \quad (14)$$

Los términos de esta ecuación se describen como:

$\frac{\partial c_i}{\partial t}$: variación de la concentración en el tiempo (mol/m³).

$(\nabla \cdot J_j)$: gradiente de flujo difusivo (m²/s).

$(u \cdot \nabla c_j)$: término de continuidad (m^3/s)

3.4.4 Potencia

Uno de los parámetros más importantes en los sistemas agitados es la potencia necesaria para llevar a cabo el proceso. Por ello, se calculó este parámetro para cada configuración del diseño de experimentos con la Ec.15, esta queda expresada en W.

$$P = K_T N^3 D a^5 \quad (15)$$

Donde:

P : Potencia (W/m^3).

K_T : constante empírica para un agitador de tipo pala y que es función del número de palas del agitador.

N : velocidad de agitación (rps).

Da : diámetro del agitador (m).

Posteriormente, la potencia se divide entre el volumen del tanque agitado, que en este caso es de 0.005 m^3 para determinar la potencia por unidad de volumen, ya que es el criterio empleado en el escalamiento empleando similaridad dinámica.

3.5 Sistema bifásico.

Para esta etapa, la física de modelo de mezcla fue usada para modelar un flujo bifásico disperso con número de Reynolds altos en un tanque agitado. En este modelo, la fase dispersa pueden ser burbujas, gotas de líquido o partículas sólidas, que se supone, siempre viajan a una velocidad terminal.

Este modelo se combinó con un dominio giratorio en malla móvil y se resolvió el conjunto de las ecuaciones de Navier-Stokes (Ec. 16) para el momento de la mezcla.

La distribución de presión se calculó a partir de una ecuación de continuidad promediada por mezcla y la velocidad de la fase dispersa se describió mediante un modelo de deslizamiento.

La fracción de volumen de la fase dispersa se rastreó resolviendo una ecuación de transporte para la fracción de volumen. Los efectos de la turbulencia se modelaron utilizando el modelo k-ε estándar de dos ecuaciones con restricciones de realizabilidad.

$$\rho \frac{\partial j}{\partial t} + \rho(j \cdot \nabla)j + (\rho_d - \rho_c)(j_{slip} \cdot \nabla)j = \nabla \cdot [-pl + K] - \nabla \cdot K_m + F_m + \rho g + F \quad (16)$$

Los términos de esta ecuación se describen como:

ρ : Densidad (Kg/m³).

$\frac{\partial j}{\partial t}$: Variación de la difusión en el tiempo (m²/s).

$(j \cdot \nabla)$: Gradiente de flujo difusivo (m²/s).

ρ_d : Densidad de la fase dispersa (Kg/m³).

ρ_c : Densidad de la fase continua (Kg/m³).

$(j_{slip} \cdot \nabla)$: Gradiente de flujo difusivo en el deslizamiento (m²/s).

K y F : Componentes de turbulencia.

K_m y F_m : componentes de turbulencia de la mezcla.

ρg : fuerza de gravedad.

En este sistema la densidad y la viscosidad están reportados en la Tabla 5, las propiedades de la biomasa fueron obtenidas de manera experimental por Sangaré et al. (2021).

Tabla 5. Parámetros experimentales (Sangaré et al., 2021).

Especie	Densidad	Viscosidad
Agua	1000 kg/m ³	0.001 cp
Biomasa	1547 kg/m ³	0.0015 cp

3.5.1 Sistema a escala laboratorio.

En esta etapa es importante establecer la relación biomasa-agua, esto influirá de forma significativa con el tiempo de mezclado, en este caso se usó la relación 1/10, es decir 10% de biomasa y 90% de agua (Figura 25).

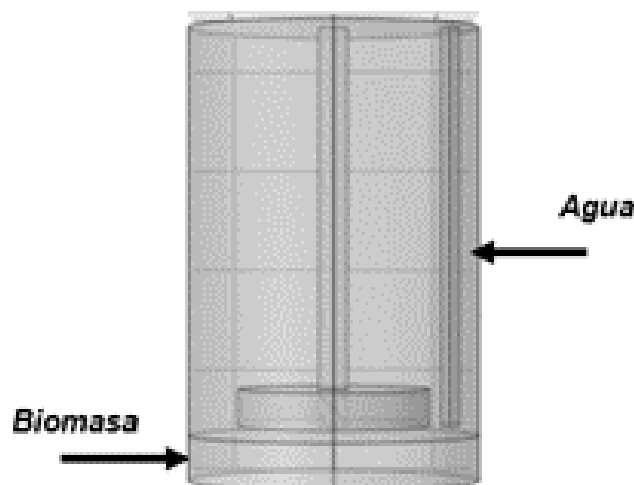


Figura 25. Sistema bifásico a escala laboratorio biomasa- agua (1/10)

Una vez obtenida la simulación del sistema bifásico, se logró determinar el tiempo de mezclado, el cual indica la homogeneización de la composición de la fase dispersa. Cabe recalcar que la simulación a escala laboratorio se hizo para compararla con el sistema escalado y analizar cuantitativamente la variación del tiempo de mezclado.

3.5.2 Sistema escalado.

De igual forma que el sistema a escala laboratorio se usó la relación de biomasa/agua en 1/10, es decir 90% de agua y 10% de biomasa (Figura 26).

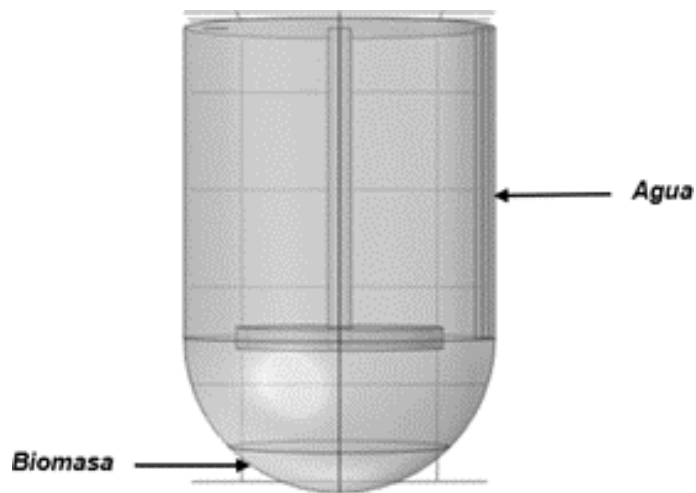


Figura 26. Sistema bifásico escalado biomasa- agua (1/10)

Se espera que el tiempo de mezclado aumente de forma considerable debido al escalamiento, lo importante es saber de cuanto será ese aumento ya que de esto dependerá el rendimiento del proceso.

El régimen debe ser turbulento, y esto se garantizó en la etapa de la hidrodinámica de los sistemas escalados.

4. Resultados

En este capítulo se presentan los resultados y análisis de las simulaciones. Estos resultados mostrarán los datos del escalamiento de la carbonización hidrotérmica. Destacando el análisis estadístico y las variables que influyen en el proceso, así como el comportamiento de un sistema bifásico.

Mediante las simulaciones planteadas en el estudio, se espera obtener los resultados que permitan realizar el escalamiento del proceso.

4.1 Hidrodinámica.

Se llevaron a cabo las simulaciones como se me mencionó en la metodología variando la velocidad de rotación del sistema y así elegir una velocidad adecuada que cumpla con que el sistema este en un régimen turbulento. En la Figura 27 se muestra la hidrodinámica a las diferentes velocidades de rotación (100 a 700 revoluciones por minuto).

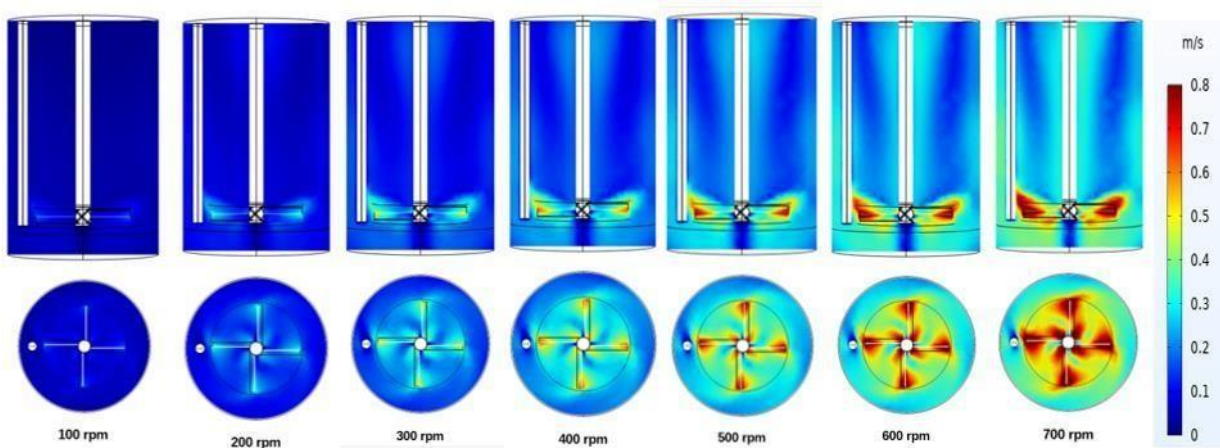


Figura 27. Diferentes velocidades de agitación dentro del reactor de tanque agitado a escala laboratorio.

Para calcular el número de Reynolds en los sistemas de tanque agitado se empleó la Ec. 1. En la Tabla 6 se reporta cada valor de números de Reynolds a las diferentes velocidades. Los resultados se validan con los resultados de Sangaré et al., 2021, el cual valido la herramienta usada para las simulaciones.

Tabla 6. Número de Reynolds a diferentes velocidades de agitación.

Velocidad	Reynolds
100 rpm	2041
200 rpm	4083
300 rpm	6125
400 rpm	8167
500 rpm	10208
600 rpm	12250
700 rpm	14292

Con base en la Figura 18, se pudo clasificar el régimen de cada sistema. En la tabla se observa que a partir de una velocidad de rotación 500 rpm se asegura el régimen turbulento. Por lo tanto, esta velocidad de agitación es aceptable para continuar con el estudio.

4.2 Diseño de experimentos.

4.2.1 Hidrodinámica del sistema escalado.

La metodología empleada para el sistema a escala laboratorio fue utilizada para determinar la hidrodinámica de los sistemas escalados. Así, se realizaron las 17 simulaciones del diseño de experimentos y se calculó el número de Reynolds para cada sistema mediante la Ec. 1.

En la Figura 28 se muestran los perfiles de velocidad de las primeras 17 simulaciones planteadas en el diseño de experimentos. Cabe señalar que las simulaciones 15, 16 y 17 son réplicas de una misma configuración de simulación, las réplicas son de utilidad para verificar la linealidad del modelo del diseño, además no afectaran las estimaciones usuales de los efectos del diseño, estas simulaciones corresponden a puntos centrales, las réplicas muestran resultados diferentes a pesar de tener las mismas especificaciones por lo que sólo se muestra una simulación en la Figura 28. Además, la Tabla 7 muestra el valor del número de Reynolds en cada sistema.

Se observa que las simulaciones que se realizaron con un diámetro de agitador más pequeño muestran los menores valores de velocidad, en las regiones cercanas al agitador, en comparación con las otras simulaciones.

Esto se confirma a partir de los valores de número de Reynolds (Tabla 7), ya que las simulaciones 1, 5 y 11 están en un régimen transitorio.

Entonces, desde esta etapa se establece de manera cualitativa que los sistemas 4, 8 y 12 pueden tener probablemente los mejores parámetros de homogeneidad para el sistema bifásico.

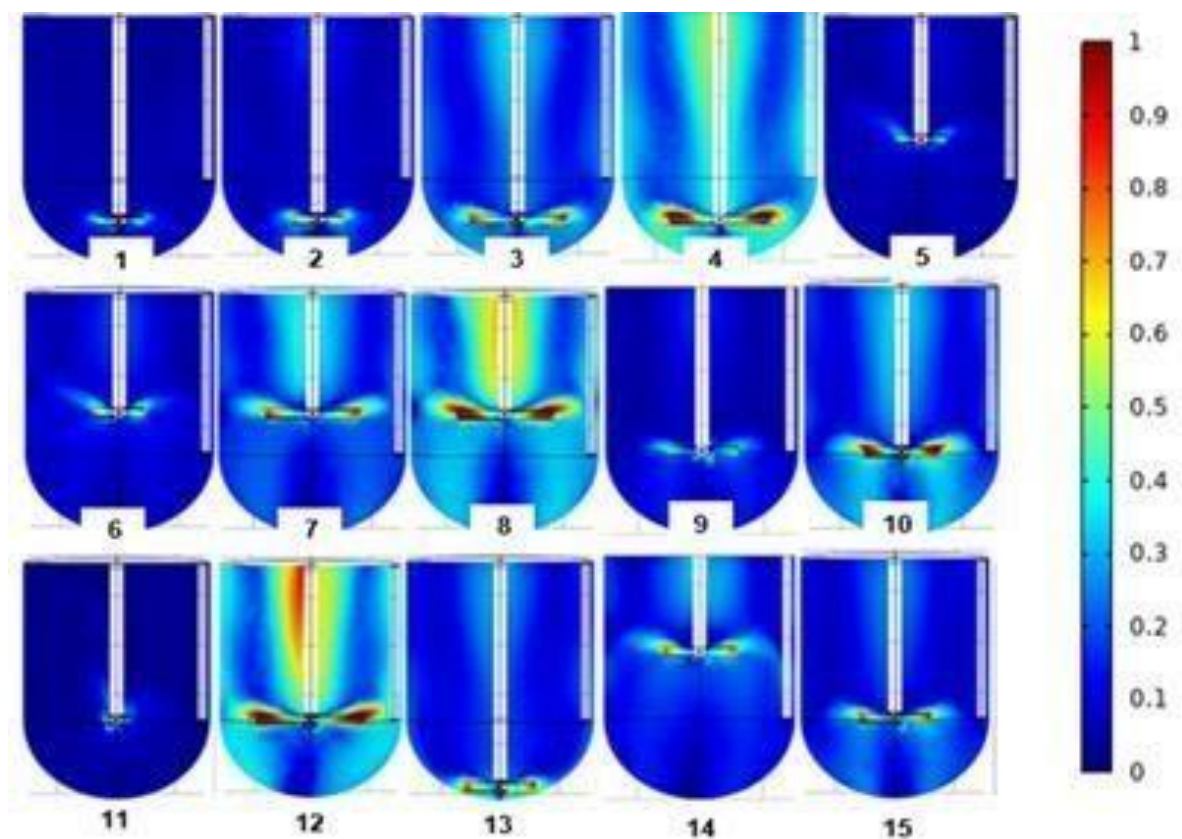


Figura 28. Velocidades de las diferentes configuraciones del sistema escalado.

Tabla 7. Número de Reynolds de las diferentes configuraciones del sistema escalado

Simulación	Reynolds	Régimen
1	7137	Transición
2	11330	Turbulento
3	28550	Turbulento
4	45320	Turbulento
5	7137	Transición
6	11330	Turbulento
7	28550	Turbulento
8	45320	Turbulento
9	12785	Turbulento
10	28689	Turbulento
11	4103	Transición
12	53187	Turbulento
13	20776	Turbulento
14	20776	Turbulento
15	20776	Turbulento
16	20776	Turbulento
17	20776	Turbulento

4.2.2 Dispersión de la velocidad.

Usando las Ec. 6 y 7 se calculó la velocidad promedio dentro del tanque y la dispersión de la velocidad del sistema a escala laboratorio. El valor de la dispersión fue de 34.7%. Como se discutió anteriormente un valor pequeño de dispersión indica una mejor homogeneidad del sistema, este valor debe ser lo más cercano a un 0% pequeño ya que así se asegura una buena homogeneidad de la mezcla

Para evaluar la homogeneidad en cada una de las 17 diferentes configuraciones se usaron las mismas ecuaciones que a escala laboratorio, en la Tabla 8 se reporta cada valor obtenido.

Tabla 8. Valores de la dispersión de la velocidad.

Simulación	Dispersión (%)
1	92.05
2	92.03
3	85.18
4	85.46
5	91.70
6	90.66
7	84.93
8	85.23
9	89.15
10	88.36
11	95.83
12	82.81
13	88.47
14	86.86
15	88.60
16	88.58
17	88.63

Con estos resultados se confirma que las simulaciones con el diámetro de agitador más pequeño y con una velocidad de agitación menor en comparación con otras simulaciones presentan una mayor dispersión.

En las simulaciones 1, 5 y 11 presentan dispersiones mayores en comparación al resto y estas mismas simulaciones presentaron un número de Reynolds en régimen transitorio. Por ello, estos resultados son consistentes. Sin embargo, esto no significa que la mezcla no logrará una buena homogeneidad, si no que la agitación no es la adecuada y no asegura una velocidad constante dentro del dominio. En cambio, las simulaciones con un diámetro de agitador más grande y una velocidad de agitación más grande (simulaciones 4, 8 y 12) presentan una menor dispersión en comparación con las demás. Esto significa que el efecto de la agitación está llegando a zonas más alejadas del agitador, lo que garantiza que haya mezclado en esas zonas del tanque.

4.2.3 Tiempo de mezclado.

Siguiendo la metodología, el tiempo de mezclado se determinó empleando la inyección virtual del trazador. En la Figura 29 se observa de manera gráfica la evolución de la concentración del trazador en función del tiempo para el sistema a escala laboratorio. Como se observa, se llega a una concentración constante en aproximadamente 8 s. A partir de este tiempo, la concentración es constante y se puede considerar que el sistema está completamente mezclado.

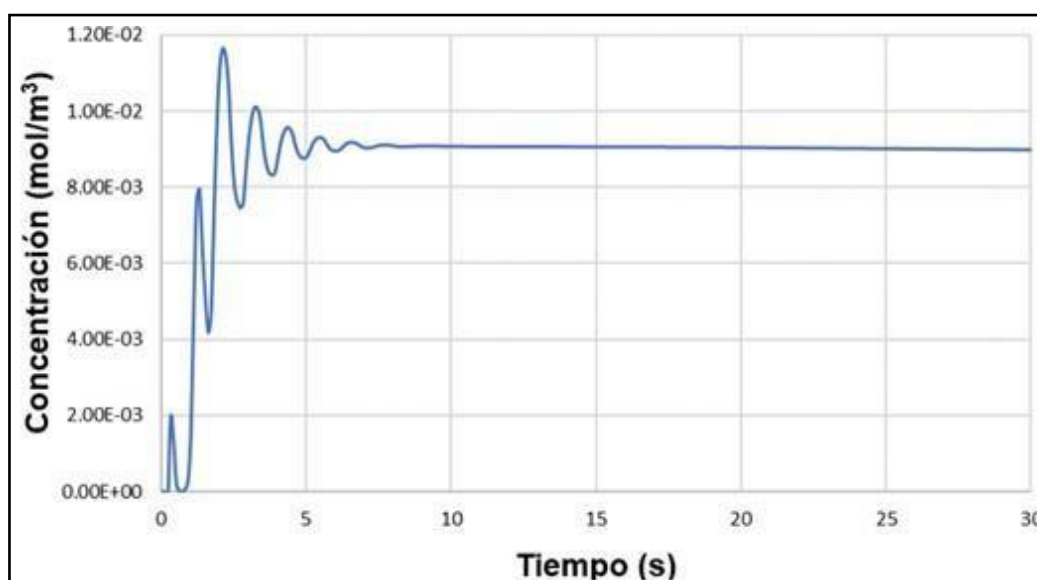


Figura 29. Perfil de concentración del trazador (cloruro de sodio) en el sistema a escala laboratorio.

El tiempo de mezclado se puede determinar de forma aproximada a partir de la observación de la gráfica de evolución de la concentración en el punto de control. Sin embargo, a fin de determinar un parámetro cuantitativo, que sirva para la comparación de los tiempos de mezclado, se propuso un método matemático.

Este consiste en determinar el tiempo en el que desaparecen los cambios de signo en la pendiente de la tangente a la curva. Es decir, el tiempo en que desaparecen las oscilaciones de la curva y se obtiene un valor constante de la concentración.

Así, se determinó que para el reactor de tanque agitado a escala laboratorio el tiempo de mezclado estimado es de 9.2 s.

Siguiendo el mismo análisis que a nivel laboratorio, se determinaron los tiempos de mezclado de cada configuración. En la Tabla 9, se reportan los tiempos de mezclado en cada una de las 17 simulaciones del diseño de experimentos.

Tabla 9. Valores del tiempo de mezclado

Simulación	Tiempo de mezclado (s)
1	56.6
2	68.8
3	24.3
4	18.6
5	69.1
6	42.7
7	24.7
8	16.7
9	54.5
10	30.1
11	76.9
12	17.7
13	38.0
14	23.1
15	37.2
16	37.5
17	37.3

Las simulaciones 1, 4 y 11 presentan tiempos de mezclado por encima de los 55 segundos, que en comparación con las simulaciones 4, 8 y 12, que tienen tiempos menores a los 20 segundos, son considerados tiempos altos, además de tener una dispersión superior al 91%, la cual es considerada elevada en comparación con las simulaciones 4, 8 y 12, donde la dispersión está por debajo del 86%.

Bajo estos parámetros se concluye cuales simulaciones son las más adecuadas para llevar a cabo la agitación del sistema bifásico.

En la Figura 30, se muestra la gráfica del perfil de concentración de la simulación 12, una de las configuraciones que se perfila para ser la más adecuada para realizar el sistema bifásico.

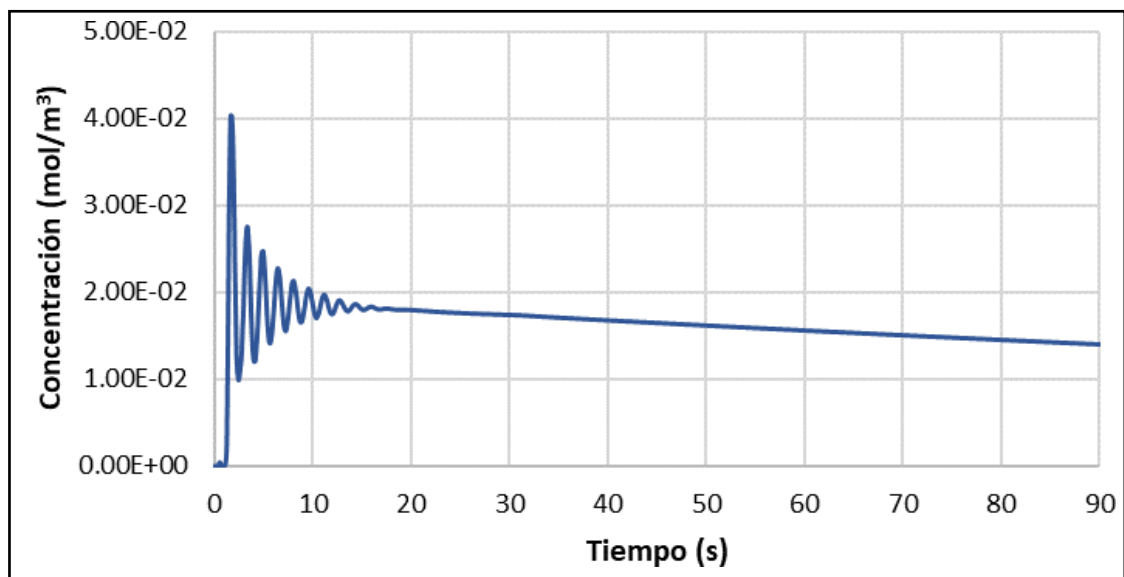


Figura 30. Perfil de concentración del trazador (cloruro de sodio) en el sistema escalado (Configuración número 12).

4.2.4 Modelo predictivo.

Con base en el diseño de experimentos planteado y teniendo los valores de las respuesta, se realizó el análisis estadístico. Este análisis nos permitió establecer un modelo para predecir la dispersión de la velocidad y el tiempo de mezclado. En las Tablas 10 y 11 se reportan los factores en variables reales y codificadas y las respuestas obtenido.

Tabla 10. Coeficientes codificados y respuestas.

Simulaciones	x1	x2	x3	y1	y2
1	-1	-1	-1	56.6	92.05
2	1	-1	-1	68.8	92.03
3	-1	1	-1	24.3	85.18
4	1	1	-1	18.6	85.46
5	-1	-1	1	69.1	91.70
6	1	-1	1	42.7	90.66
7	-1	1	1	24.7	84.93
8	1	1	1	16.7	85.23
9	1.68	0	0	54.5	89.15
10	-1.68	0	0	30.1	88.36
11	0	1.68	0	76.9	95.83
12	0	-1.68	0	17.7	82.81
13	0	0	1.68	38	88.47
14	0	0	-1.68	23.1	86.86
15	0	0	0	37.2	88.60
16	0	0	0	37.5	88.58
17	0	0	0	37.3	88.63

Tabla 11. Coeficientes no codificados y respuestas.

Simulaciones	x1	x2	x3	y1	y2
1	299	(1/6) *A	(1/6) *A	56.6	92.05
2	475	(1/6) *A	(1/6) *A	68.8	92.03
3	299	(1/3) *A	(1/6) *A	24.3	85.18
4	475	(1/3) *A	(1/6) *A	18.6	85.46
5	299	(1/6) *A	(1/2) *A	69.1	91.70
6	475	(1/6) *A	(1/2) *A	42.7	90.66
7	299	(1/3) *A	(1/2) *A	24.7	84.93
8	475	(1/3) *A	(1/2) *A	16.7	85.23
9	238	(1/4) *A	(1/3) *A	54.5	89.15
10	534	(1/4) *A	(1/3) *A	30.1	88.36
11	387	(1/10) *A	(1/3) *A	76.9	95.83
12	387	(1/2.5) *A	(1/3) *A	17.7	82.81
13	387	(1/4) *A	(1/18) *A	38.0	88.47
14	387	(1/4) *A	(1/1.5) *A	23.1	86.86
15	387	(1/4) *A	(1/3) *A	37.2	88.60
16	387	(1/4) *A	(1/3) *A	37.5	88.58
17	387	(1/4) *A	(1/3) *A	37.3	88.63

En las Tabla 12 y 13 se reportan la significancia que tendrán los factores para el modelo obtenido.

Los modelos fueron reducidos eliminando los coeficientes no significativos estadísticamente. Para esto, se estableció una hipótesis nula de que los factores tenían una influencia sobre las respuestas, con los valores de P, que para rechazar la hipótesis nula tiene que ser menor al valor de la significancia establecido en $\alpha = 0.05$, por lo que los factores y las interacciones de los factores con un valor de P serán las variables con significancia en las respuestas.

Tabla 12. Significancia de los factores para el tiempo de mezclado y_1

Tiempo de mezclado				
	Coeficiente	Error estándar	P	Coeficiente Int
Constante	37.51	3.3	2.02×10^{-7}	7.26
x₁	-5.04	2.06	0.03	4.54
x₂	-18.48	2.06	2.24×10^{-6}	4.54
x₃	-2.94	2.06	0.18	4.54
x₂²	3.87	2.17	0.1	4.77
x₃²	-2.04	2.17	0.36	4.77

Tabla 13. Significancia de los factores para la dispersión de la velocidad y_2

Dispersión de la velocidad				
	Coeficiente	Error estándar	P	Coeficiente Int
Constante	88.59	0.23	4.6×10^{-24}	0.5
x₁	-0.13	0.14	0.37	0.31
x₂	-3.4	0.14	7×10^{-11}	0.31
x₃	-0.35	0.14	0.03	0.31
x₂²	0.22	0.15	0.16	0.33
x₃²	-0.35	0.15	0.037	0.33

El diámetro del agitador según los valores de P en ambas respuestas tiene una gran influencia en el proceso, esto era esperado ya que con un diámetro más grande el rendimiento aumentaría, pero no se sabría cuánto, ni tampoco el tamaño del diámetro más adecuado.

En cuestión de otros factores, en el tiempo de mezclado, la velocidad de agitación tiene significancia, pero la posición del agitador y la interacción de la posición del agitador no la tienen, en comparación con la dispersión de velocidad donde la velocidad de agitación no tiene una significancia en la respuesta pero la posición del agitador y su interacción si la tiene.

Esto puede deberse a que la velocidad de agitación en el tiempo de mezclado trabaja con gradientes de concentración, por lo que una velocidad adecuada influye de manera significativa para realizar el mezclado. Para la dispersión de la velocidad, estudia la homogenización de la velocidad por lo que con un posición más cercana al centro o alejada influye en la distribución de la velocidad dentro del reactor, mientras el agitador este cerca del fondo del tanque, en las zonas en la parte superior de este, que serian las más alejadas, los valores de velocidad tendrían más variación que en la parte inferior, afectando a la homogenización del sistema.

Las Ec.17 y 18 presentan los modelos de segundo grado obtenidos a partir del diseño de experimentos. Estas ecuaciones están establecidas en variables codificadas (-1, +1).

$$y_1 = 37.51 - 5.04x_1 - 18.48x_2 \quad (17)$$

$$y_2 = 88.59 - 3.48x_2 - 0.35x_3 - 0.35x_3^2 \quad (18)$$

Donde:

y_1 : tiempo de mezclado (s).

y_2 : dispersión de la velocidad (%).

x_1 : velocidad de agitación (rpm).

x_2 : diámetro del agitador (m).

x_3 : posición del agitador en el tanque (m).

En el caso del modelo y_1 el coeficiente de correlación R^2 es de 0.90 y del modelo y_2 de 0.98, esto permite concluir que el modelo obtenido de y_1 tiene un ajuste adecuado, ya que el coeficiente de correlación se acerca al valor de 0.9, y para el modelo de y_2 tiene un buen ajuste ya que su valor es superior a 0.9.

En cuanto al valor de Q^2 , que indica la predictibilidad del modelo podemos decir que el modelo de y_1 es útil, aunque el valor es inferior a 0.8, pero en general se puede considerar un modelo adecuado. En cambio, para el modelo y_2 el valor es superior a 0.8, por lo que el modelo predice de manera correcta teniendo una reproductibilidad eficiente y al mismo tiempo confirmar la validez del modelo.

En las Figuras 31 y 32, se muestran las gráficas de paridad para las respuesta y_1 y y_2 . Estas gráficas contrastan los valores predichos por el modelo y los valores obtenidos directamente en las simulaciones. Idealmente los puntos deberían encontrarse en una recta de pendiente igual a uno. Como podemos ver, los resultados muestran una adecuada predictibilidad para y_1 y una muy buena predictibilidad para y_2 . Sin embargo, cabe resaltar que en el caso de y_1 la predictibilidad mejora para los valores bajos de y_1 (<40 s). Esto es importante, ya que estos valores corresponden a la región de mayor interés para el estudio, es decir, los valores más pequeños del tiempo de mezclado.

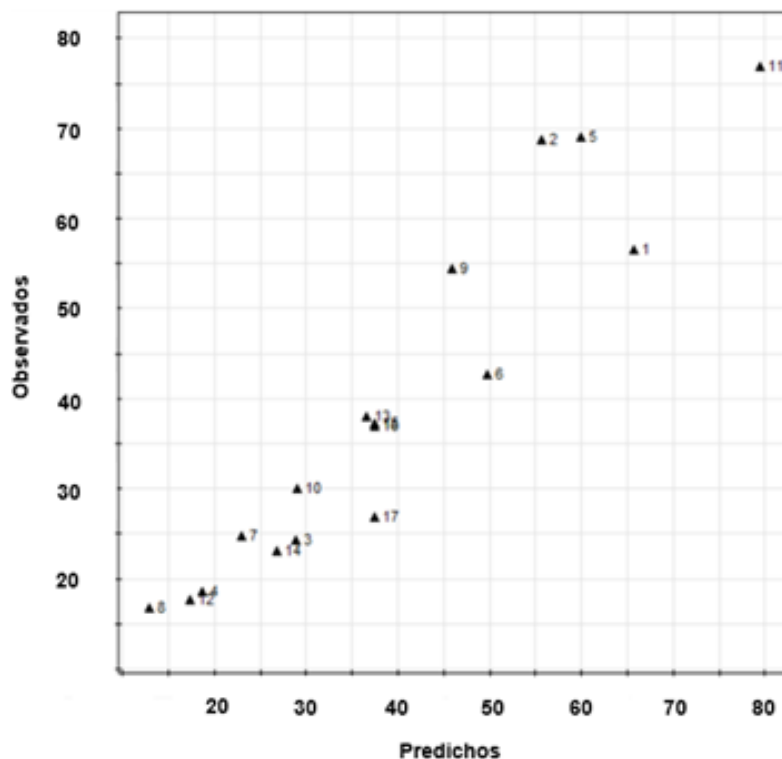


Figura 31. Gráfica de observados vs predichos de y_1

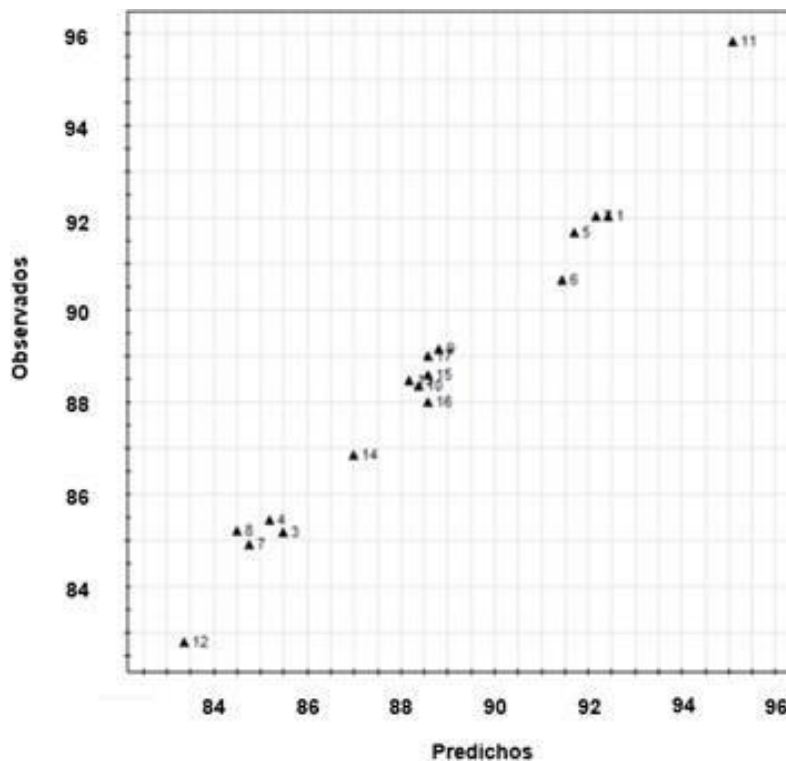


Figura 32. Gráfica de observados vs predichos de y_2

En el modelo de y_1 la desviación se incrementa a medida que se incrementa el valor de la respuesta, pero en respuestas donde el valor es más pequeño la predictibilidad mejora. En el modelo y_2 los datos comprueban los valores de R^2 , R^2 ajustada, no hay una desviación importante conforme avanza la respuesta. Al contrario que en la respuesta del tiempo de mezclado, la respuesta y_2 , el porcentaje de la dispersión de la velocidad, los valores no presentan una variación significativa. En efecto, la variación de esta respuesta va del 82.81% al 95.83%.

En la Figura 33 se reportan las gráficas del análisis ANOVA. En el primer modelo, que corresponde a y_1 , la primera barra de regresión se compara con la desviación estándar de los residuos y con su nivel de confianza, en este caso la primera barra debe ser superior a las barras de la desviación estándar. En este caso, esto se cumple.

Más aún, en el caso del modelo de y_2 esta diferencia es aún más notable. Cabe señalar que el gráfico ANOVA arroja la misma información que el R^2 ajustado, por lo que confirmamos que los modelos obtenidos son modelos buenos con una buena predictibilidad.

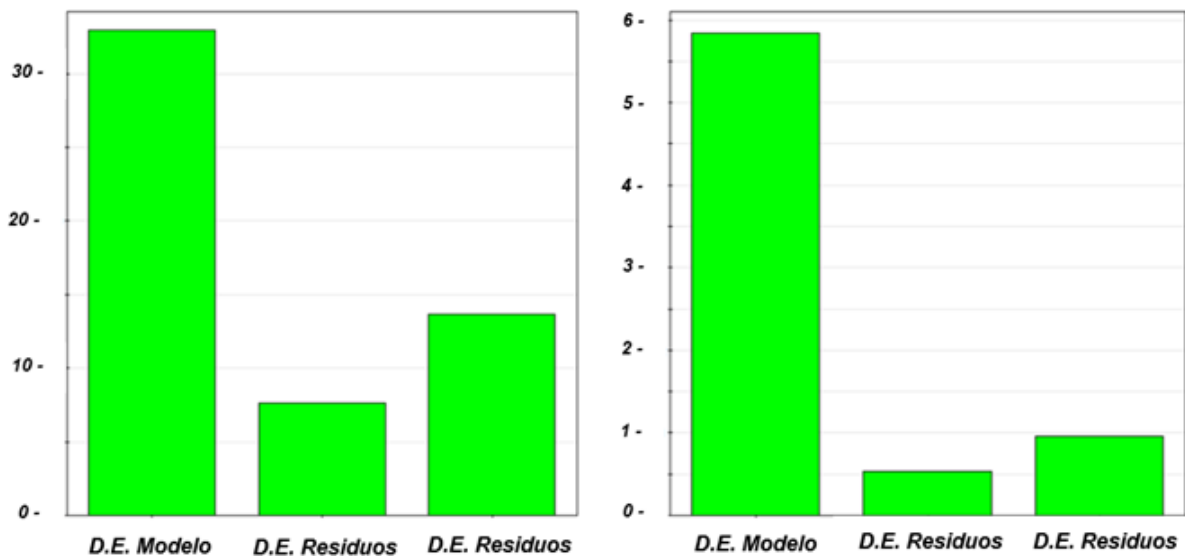


Figura 33. Gráficas ANOVA.

En la Figura 34 se muestra la validación para cada modelo, recordando que si la barra de validez del modelo es superior a 0.25 el modelo es válido.

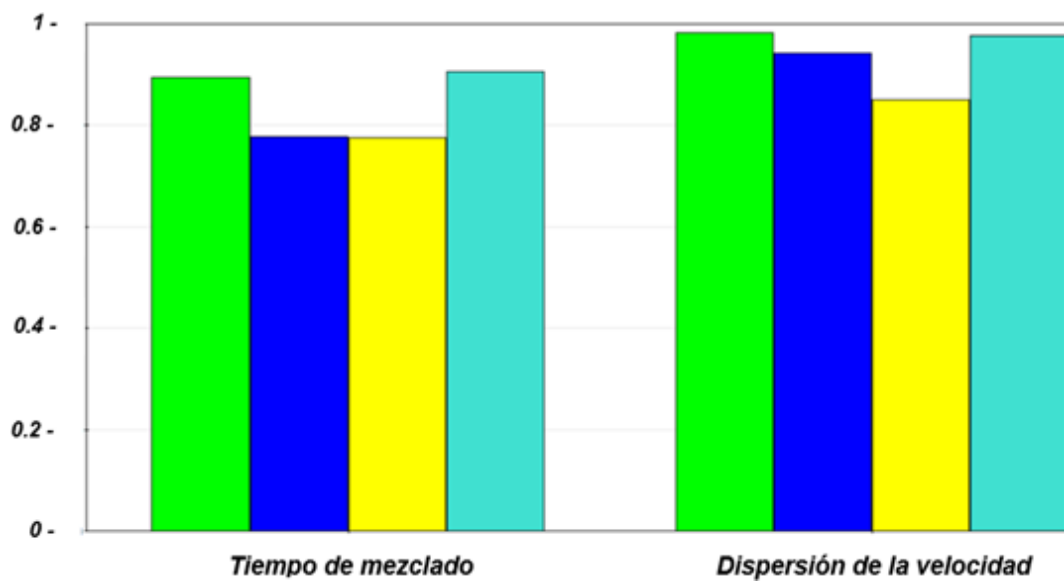


Figura 34. Validación del modelo.

Donde:

Barra verde: R^2

Barra azul: Q^2

Barra amarilla: validez del modelo

Barra gris: reproductibilidad

En ambos modelos la barra amarilla es superior al 0.25, esto nos dice que ambos modelos son válidos.

Por último, con las gráficas de superficie de respuesta (Figuras 35 y 36), podemos ver y/o establecer los valores de respuesta y condiciones operativas deseables.

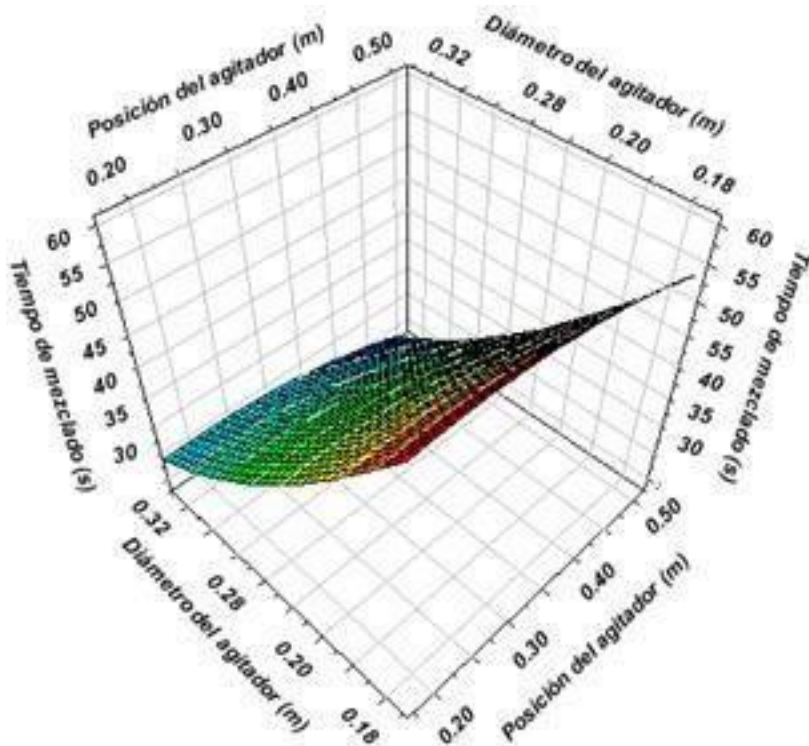


Figura 35. Gráfica de superficie de respuesta y_1

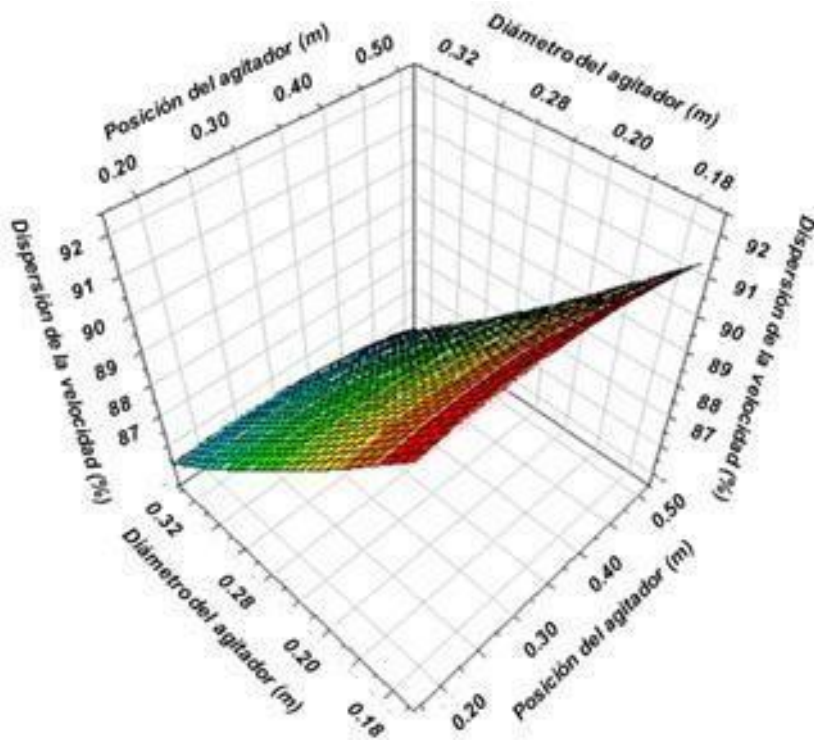


Figura 36. Gráfica de superficie de respuesta y_2

Estas gráficas muestran que tanto el tiempo de mezclado como la dispersión de la velocidad son principalmente influidas por el diámetro del agitador, en la región de estudio. Asimismo, la influencia de la posición del agitador es limitada.

En este sentido podría concluirse que para mejorar el mezclado debe utilizarse el mayor diámetro del agitador sin importar la posición del agitador.

Además, se observa que el sistema no presenta un óptimo matemático en la región estudiada. Cabe señalar que el diámetro del agitador esta en función directa con la potencia consumida y que esta funcionalidad es exponencial. Por ello, un elevado valor del diámetro podría implicar un consumo de energía excesivo. En la siguiente sección se analiza este parámetro en función de las variables estudiadas.

4.3 Potencia suministrada al sistema.

Un parámetro importante de los sistemas agitados es la potencia consumida. Para analizar este parámetro, se graficó en función de la velocidad de agitación y el diámetro del agitador (Figura 37).

Como podemos ver, a mayor velocidad de agitación y mayor diámetro, la potencia por unidad de volumen se incrementa. Más aún, se observa que este incremento es exponencial. De acuerdo con lo reportado en la literatura, una potencia adecuada para dispersiones de gas en líquido, contacto líquido-líquido y cuestiones de transferencia de calor en tanques es del orden de 600 W/m^3 (Coulson et al., 1990). Por ello, la Figura 37 debe utilizarse en conjunto con las superficies de respuesta de las variables y_1 y y_2 para determinar las regiones adecuadas, considerando tanto la calidad del mezclado como la energía consumida por el sistema de agitación.

Estos resultados fueron empleados para establecer las condiciones de simulación del sistema bifásico, que corresponde a la última parte de este estudio.

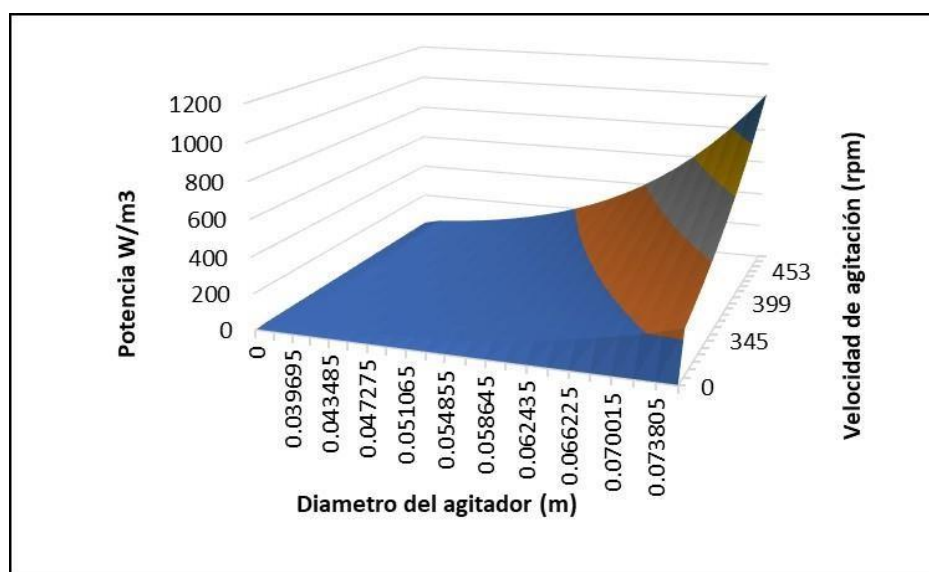


Figura 37. Gráfica de superficie de respuesta de potencia suministrada.

4.4 Sistema bifásico.

4.4.1 Escala laboratorio.

Siguiendo la metodología, se hizo el análisis del sistema bifásico (Figura 38).

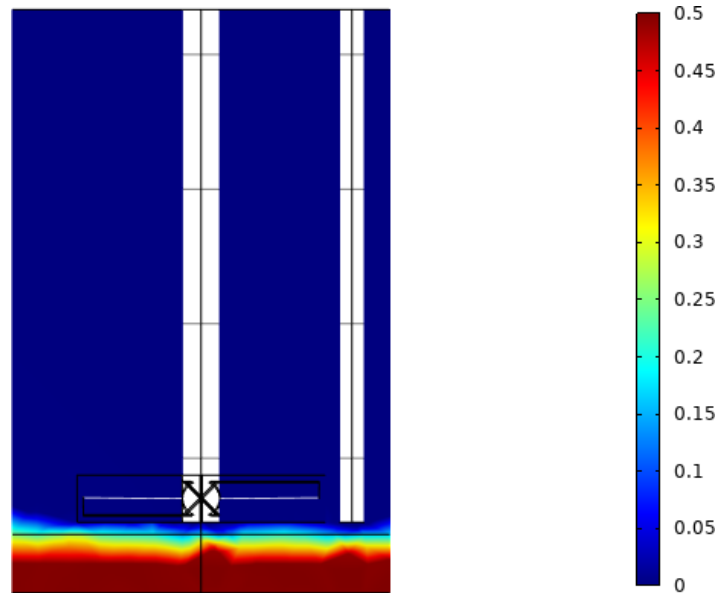


Figura 38. Mezcla bifásica biomasa- agua (1/10) al tiempo 0 segundos.

En la Figura 39, se observa visualmente como se va llevando a cabo el mezclado y en la Figura 40, como la fracción de la fase dispersa (biomasa) va disminuyendo con respecto del tiempo en el punto de control, lo que corresponde a la homogeneización del sistema.

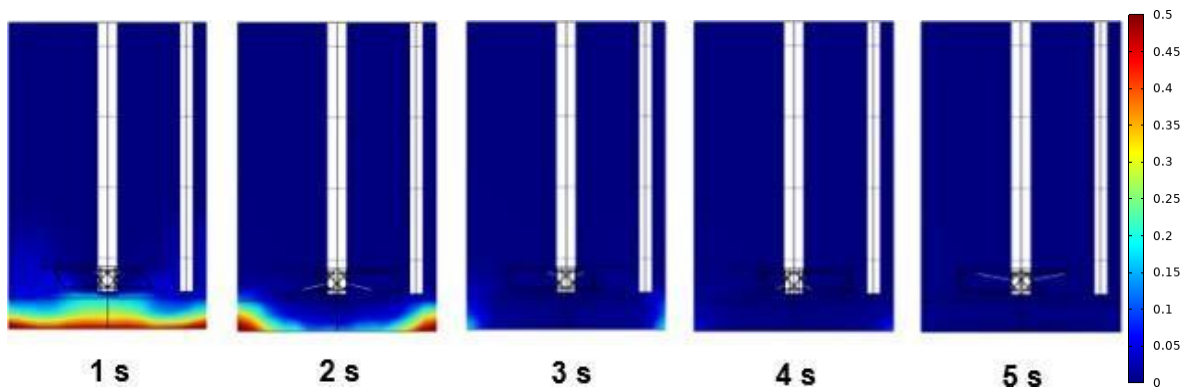


Figura 39. Avance de mezclado a través del tiempo.

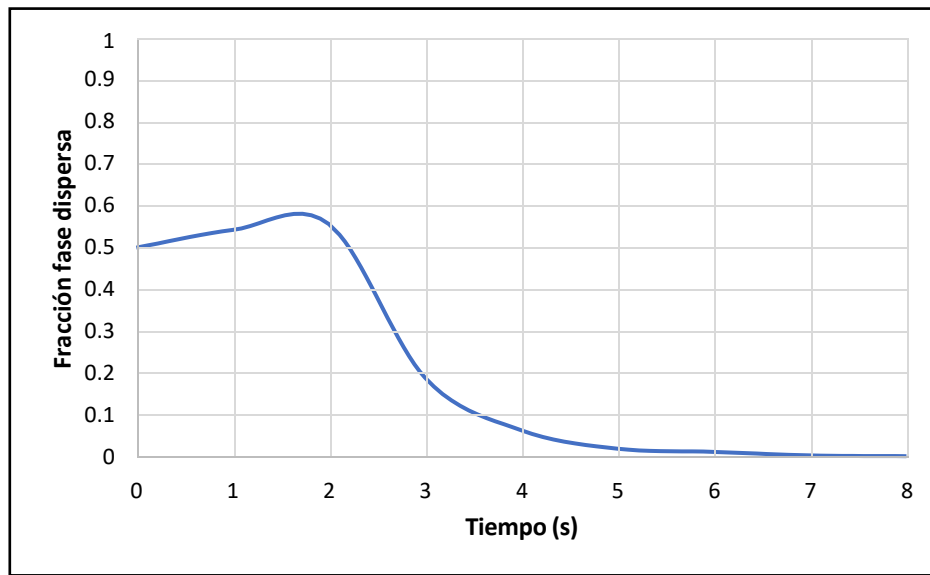


Figura 40. Avance de la fracción de la fase dispersa a través tiempo.

A partir de la Figura 40, se puede determinar el tiempo de mezclado del sistema bifásico. El cual fue establecido mediante inspección gráfica y podemos decir que se encuentra alrededor de los 5 s.

4.4.2 Sistema escalado.

Una vez teniendo desarrollado el modelo del diseño de experimentos, de las diferentes configuraciones y basándose las respuestas de las variables de interés. Se seleccionó la configuración más adecuada para llevar a cabo la mezcla bifásica.

Esta configuración fue la simulación 12 (Figura 41), y en la Tabla 14 se reporta las características del sistema.

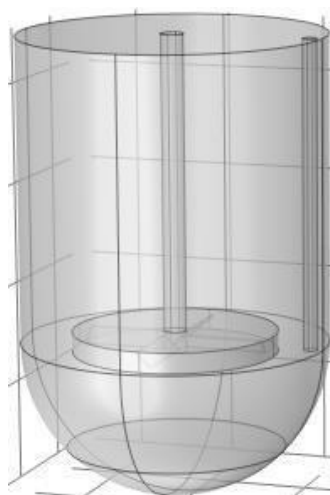


Figura 41. Configuración de la simulación 12.

Tabla 14. Características de la simulación 12.

Velocidad de agitación	386 rpm
Diámetro del agitador	$(1/2.6) * A$
Posición del agitador	$(1/3) * A$

Así como en el análisis a escala laboratorio, usando el modelo de mezcla, se simuló el proceso bifásico. La relación de biomasa-agua fue de 1:10, es decir, se tiene 10% de biomasa y 90% de agua en el volumen del tanque, en la Figura 42 se muestra el estado inicial del sistema.

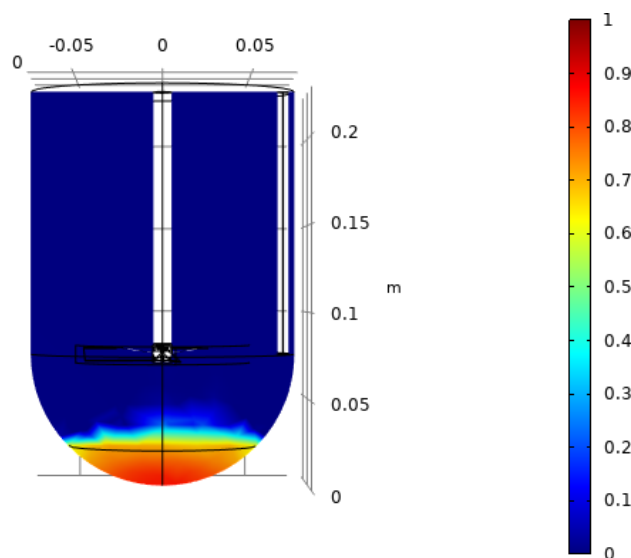


Figura 42. Sistema escalado en tiempo 0 s, con relación 1:10 (biomasa-agua).

En la Figura 43, se observa visualmente como se va llevando a cabo el mezclado y en la Figura 44, como la fracción de la fase dispersa (biomasa) va disminuyendo con respecto del tiempo.

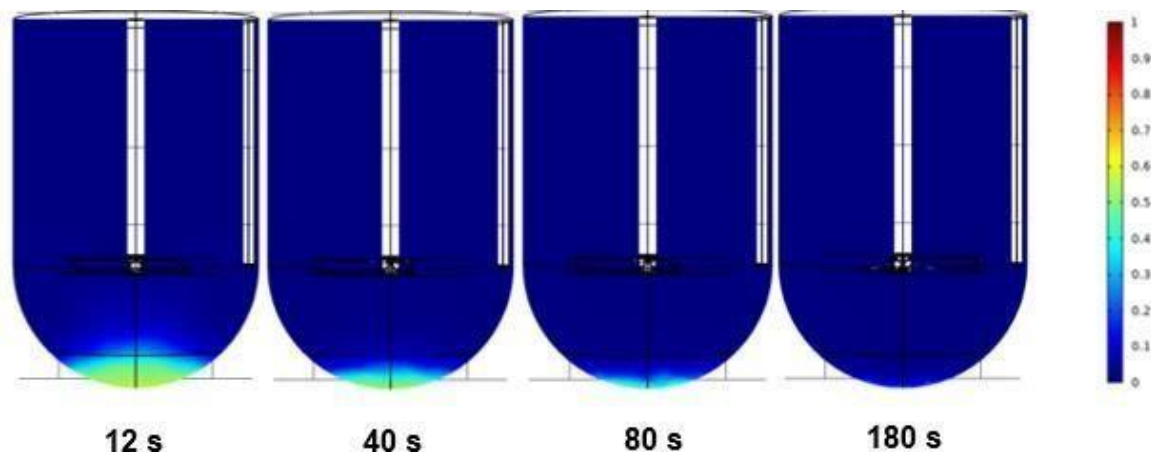


Figura 43. Avance de mezclado del sistema escalado a través del tiempo.

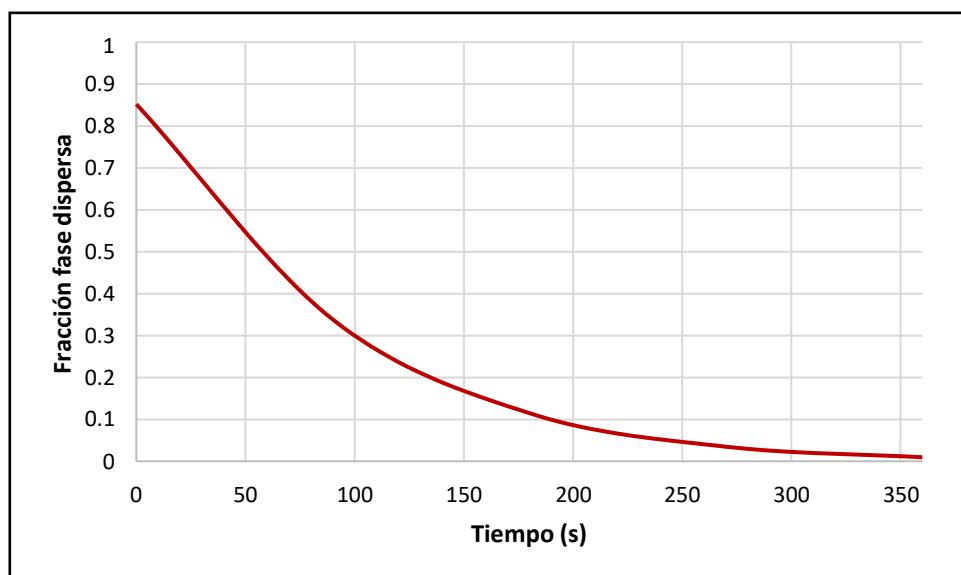


Figura 44. Avance de la fracción de la fase dispersa en el sistema escalado a través tiempo.

Se puede concluir que a esta escala el tiempo de mezclado bifásico en la configuración seleccionada oscila alrededor de los 360 segundos (6 minutos).

Esto nos indica que el escalamiento influye de una manera significativa en el tiempo de mezclado, ya que pasamos de 5 segundos a escala laboratorio de 200 ml a 360 segundos a un sistema escalado de 5 L.

Conclusiones y discusión

En el trabajo presentado se propuso una estrategia de escalamiento para el proceso de carbonización hidrotérmica. En donde, mediante la simulación de dinámica de fluidos computacional fue posible caracterizar el sistema a escala laboratorio y el sistema escalado. El análisis de los resultados obtenidos permitió determinar el valor de la velocidad de agitación que garantiza un flujo en régimen turbulento y así tener una buena calidad de mezclado. Cabe recalcar que la herramienta fue validada previamente y los resultados obtenidos son congruentes.

En el escalamiento del tanque agitado, no fue necesario mantener la misma geometría, variando el fondo del tanque. Empleando como criterio la similaridad dinámica, donde se mantuvo la potencia por unidad de volumen constante. Esto para mantener velocidades promedios similares, así como confirmar que también el sistema escalado se encuentre en régimen turbulento. Cabe mencionar que esta hipótesis es correcta, ya que, debido a la construcción del nuevo sistema, se confirmó que bajo ciertas configuración el número de Reynolds fue mayor en comparación con el sistema a escala laboratorio.

Cabe señalar que simular un sistema bifásico en sistemas rotatorios es una tarea compleja. Por ello, se propuso el uso de un diseño de experimentos en un sistema monofásico para determinar los mejores parámetros de agitación y una vez determinados aplicarlos para la simulación bifásica. Esto, para reducir la exigencia computacional.

En cuestión del diseño de experimentos, se obtuvieron dos modelos predictivos para las respuestas que determinan la calidad del mezclado. El análisis estadístico muestra una buena predictibilidad de los modelos y se obtuvo una influencia importante del diámetro del agitador sobre la calidad del mezclado. Obteniendo los mejores resultados para el mayor diámetro del agitador. Sin embargo, en el caso de la posición, no se tuvo una influencia importante en el rango estudiado. Estos resultados, aunados al cálculo de la potencia por unidad de volumen, permiten determinar las regiones más adecuadas para los parámetros de agitación.

Estos resultados fueron utilizados para establecer las condiciones de agitación para el sistema bifásico, que es el objetivo de interés en la carbonización hidrotérmica.

A partir de las simulaciones bifásicas realizadas se pudo estimar el incremento en el tiempo de mezclado en las dos escalas utilizadas. El incremento de tiempo es muy importante, ya que pasó de 5 s para el reactor de 200 mL a 360 s en el caso del reactor de 5 L. Este resultado muestra que durante el escalamiento es imposible mantener la misma calidad de mezclado, Esto tendrá un efecto muy importante durante el desarrollo de las reacciones. En particular, en se espera una disminución importante del rendimiento de la reacción. Esta es la perspectiva más importante de este trabajo y será abordado en una investigación ulterior.

Bibliografía

Akhtar, J., & Saidina Amin, N. (2012). A review on operating parameters for optimum liquid oil yield in biomass pyrolysis. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 16, 5101–5109.

Anaya, A; Pedroza, H. (2008) Scaling-up, the art of chemical engineering. Pilot plants, the step between the egg and the hen. *Ciencia Ed. IMIQ*, 23,1-31

Başakçılardan Kabakçı, S., & Baran, S. S. (2019). Hydrothermal carbonization of various lignocellulosics: Fuel characteristics of hidrocarbóns and surfacecharacteristics of activated hidrocarbóns. *Waste Management (New York, N.Y.)*, 100, 259–268.

Briongos, J. V., Taramona, S., Gómez-Hernández, J., Mulone, V., & Santana, D. (2021). Solar and biomass hybridization through hydrothermal carbonization. *Renewable Energy*, 177, 268–279.

Carrasco García Juan E. (2008) Combustión directa de la biomasa. *Máster en Energías Renovables y Mercado Energético*, 3-4.

Çengel, Y. A; Cimbala , M. J. (2006). *Mecanica de fluidos fundamentos y aplicaciones*. Mcgraw Hill México. 15, 818-822

Chen, T., Ku, X., Lin, J., & Jin, H. (2019). Modelling the combustion of thermally thick biomass particles. *Powder Technology*, 353, 110–124.

Couper, J.; James, F.; Penney, W. (2010) *Chemical process equipment selection and design*. 2da Ed. Elsevier USA. 10, 273-321.

Fitschen, J., Hofmann, S., Wutz, J., Kameke, A. v., Hoffmann, M., Wucherpfennig, T., & Schlüter, M. (2021). Novel evaluation method to determine the local mixing time distribution in stirred tank reactors. *Chemical Engineering Science: X*, 10(100098), 100098.

Karadimou, D. P., Papadopoulos, P. A., & Markatos, N. C. (2019). Mathematical modelling and numerical simulation of two-phase gas-liquid flows in stirred-tank reactors. *Journal of King Saud University. Science*, 31(1), 33–41.

Kaya, U., Gopireddy, S., Urbanetz, N., Nopens, I., & Verwaeren, J. (2022). Predicting the hydrodynamic properties of a bioreactor: Conditional density estimation as a surrogate model for CFD simulations. *Chemical Engineering Research & Design: Transactions of the Institution of Chemical Engineers*, 182, 342–359.

Li, W., Cao, R., Xu, L., & Qiao, L. (2021). The role of hydrogen in the corrosion and cracking of steels - a review. *Corrosion Communications*, 4, 23–32.

Luo, H., Lu, Z., Jensen, P. A., Glarborg, P., Lin, W., Dam-Johansen, K., & Wu, H. (2021). Effect of gasification reactions on biomass char conversion under pulverized fuel combustion conditions. *Proceedings of the Combustion Institute. International Symposium on Combustion*, 38, 3919–3928.

Nguyen, T. T., Tak, N., Park, J., Nahm, S. H., & Beak, U. B. (2020). Hydrogen embrittlement susceptibility of X70 pipeline steel weld under a low partial hydrogen environment. *International Journal of Hydrogen Energy*, 45(43), 23739–23753.

Omri, A., & Belaïd, F. (2021). Does renewable energy modulate the negative effect of environmental issues on the socio-economic welfare. *Journal of Environmental Management*, 278(Pt 2), 111483.

Özcan-Taşkin, G., & Wei, H. (2003). The effect of impeller-to-tank diameter ratio on draw down of solids. *Chemical Engineering Science*, 58(10), 2011–2022.

Proaño, F. M. C. (2011). Premezclado de sólidos inertes para la producción de dinamita, mediante el diseño y construcción de un mezclador cónico vertical piloto. (Tesis inédita de maestría). Escuela Politécnica Nacional.

Rather, R. A., Wani, A. W., Mumtaz, S., Padder, S. A., Khan, A. H., Almohana, A. I., Almojil, S. F., Alam, S. S., & Baba, T. R. (2022). Bioenergy: a foundation to environmental sustainability in a changing global climate scenario. *Journal of King Saud University. Science*, 34, 101734.

Ruiz, Ángela., Álvarez Hernán. (2011). Escalamiento de procesos químicos y bioquímicos basado en un modelo fenomenológico. (Tesis inédita de maestría). Escuela de procesos y energía, facultad de minas, Universidad Nacional de Colombia-Medellín, Colombia.

Russell, A. W., Kahouadji, L., Mirpuri, K., Quarmby, A., Piccione, P. M., Matar, O. K., Luckham, P. F., & Markides, C. N. (2019). Mixing viscoplastic fluids in stirred vessels over multiple scales: A combined experimental and CFD approach. *Chemical Engineering Science*, 208(115129), 115129.

Saleem, M. (2022). Possibility of utilizing agriculture biomass as a renewable and sustainable future energy source. *Heliyon*, 8, e08905.

Sánchez-Silva, L., López-González, D., Villaseñor, J., Sánchez, P., & Valverde, J. L. (2012). Thermogravimetric-mass spectrometric analysis of lignocellulosic and marine biomass pyrolysis. *Bioresource Technology*, 109, 163–172.

Sangare, D., Bostyn, S., Moscosa-Santillán, M., & Gökalp, I. (2021). Hydrodynamics, heat transfer and kinetics reaction of CFD modeling of a batch stirred reactor under hydrothermal carbonization conditions. *Energy (Oxford, England)*, 219(119635), 119635.

Solorzano, J. M. (2020). Desarrollo de escalamiento de equipos de transferencia de masa por similitud geométrica para elaborar productos en soluciones y suspensiones en la Empresa Procaps S.A. (Tesis inédita de maestría). Universidad de Pamplona.

Wang, T., Zhai, Y., Zhu, Y., Li, C., & Zeng, G. (2018). A review of the hydrothermal carbonization of biomass waste for hidrocarbón formation: Process conditions, fundamentals, and physicochemical properties. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 90, 223–247.

Xuereb. C., Poux. M., Bertrand. J, (2006). Hydrodynamics and Residence Time Distribution: (181). Dunod, Paris.

Vallejo, F., Díaz-Robles, L. A., González, P., & Poblete, J. (2021). Evaluación de la eficiencia energética de un proceso continuo de tratamiento de residuos agroforestales mediante carbonización hidrotérmica. *Maderas Ciencia y Tecnología*, 23.

Villalobos, A. (2016). Escalamiento del proceso de producción de un caramelo prebiótico mediante CFD. (Tesis inédita de maestría). Universidad Autónoma de San Luis Potosí.

Anexos

Anexo 1 (Condiciones de frontera)

Las condiciones de frontera se especifican en las Figuras 45 y 46, para el tanque a escala laboratorio y para el tanque ha escalado de 5 L.

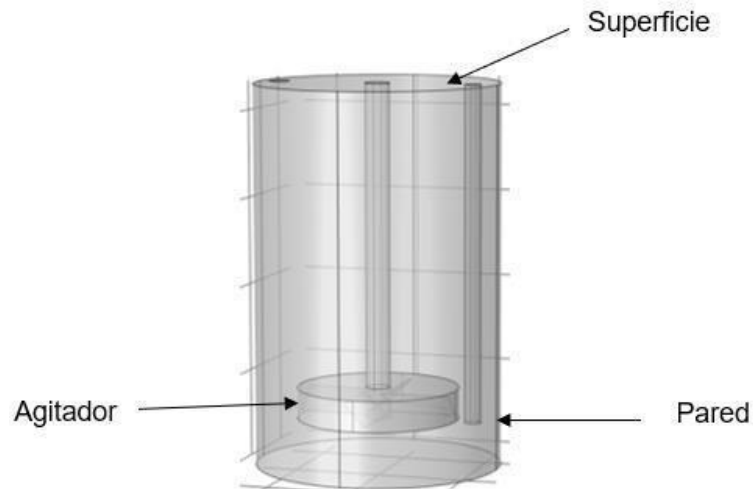


Figura 45. Condiciones de frontera del sistema a escala laboratorio.

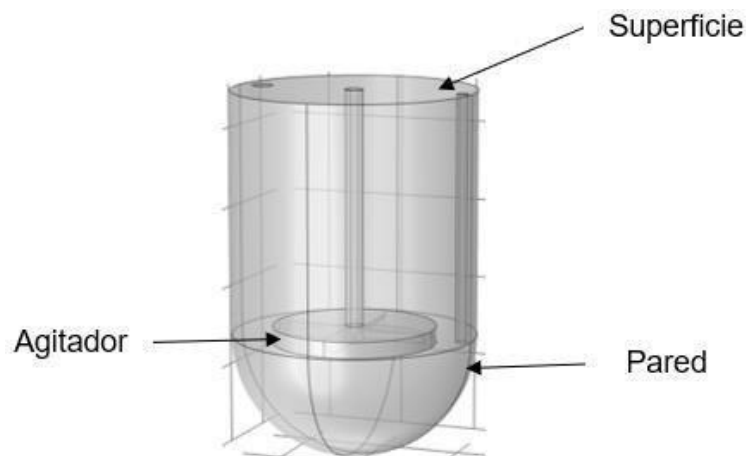


Figura 46. Condiciones de frontera del sistema a escala de 5 L.

- Pared: Representa la frontera entre el fluido y la pared del tanque. Por definición es el punto de esfuerzo de corte máximo y velocidad mínima, por lo que en caso de una simulación en régimen turbulento esto corresponde a ($\mu = 0$).

- Agitador: Representa la interfase entre el agitador y el fluido, siendo el primero considerado como una pared sólida. Para el dominio de estudio (fluido) este corresponde a una velocidad angular general e igual a la velocidad de giro del agitador ($\omega = \text{cte.}$).
- Superficie: Se satisface con la condición de adherencia y si no hay transferencia de masa, también la condición de impermeabilidad. Además las componentes del tensor de esfuerzos cortantes son cero (Villalobos (2021)).

Anexo 2 (Mallado)

El mallado esta reportado en la Tabla 15:

Tabla 15. Características de la malla.

Malla	Calibrar para	Tamaño	Número de elementos
Triangular libre	Dinámica de fluidos	Mas fina	199911
Tetraédrico libre	Dinámica de fluidos	Mas fina	188818

El sistema consiste en 2 dominios.

La representación del mallado se representa en las Figuras 47 y 48, para el tanque a escala laboratorio y para el tanque ha escalado de 5 L.



Figura 47. Mallado del sistema a escala laboratorio.



Figura 48. Mallado del sistema a escala de 5 L.