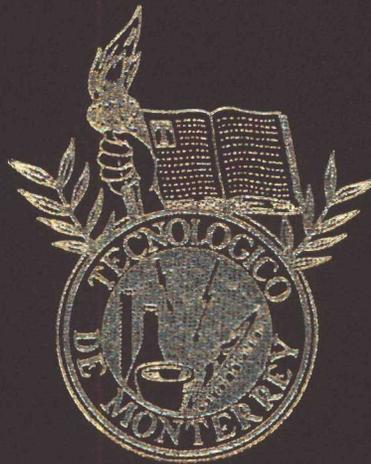


INSTITUTO TECNOLÓGICO Y DE ESTUDIOS
SUPERIORES DE MONTERREY

CAMPUS MONTERREY

DIVISION DE INGENIERIA Y ARQUITECTURA
PROGRAMA DE GRADUADOS EN INGENIERIA



MODELACION Y SIMULACION DE UN HORNO
DE SINTERIZACION DE OXIDO DE MAGNESIO

TESIS

PRESENTADA COMO REQUISITO PARCIAL PARA
OBTENER EL GRADO ACADEMICO DE

MAESTRO EN CIENCIAS EN SISTEMAS
AMBIENTALES CON ESPECIALIDAD
EN INGENIERIA DE PROCESOS

POR

JOSE ANGEL LOREDO MEDRANO

**INSTITUTO TECNOLÓGICO Y DE ESTUDIOS
SUPERIORES DE MONTERREY**

CAMPUS MONTERREY

**DIVISION DE INGENIERIA Y ARQUITECTURA
PROGRAMA DE GRADUADOS EN INGENIERIA**



**MODELACION Y SIMULACION DE UN HORNO
DE SINTERIZACION DE OXIDO DE MAGNESIO**

TESIS

**PRESENTADA COMO REQUISITO PARCIAL PARA
OBTENER EL GRADO ACADEMICO DE**

**MAESTRO EN CIENCIAS EN SISTEMAS
AMBIENTALES CON ESPECIALIDAD
EN INGENIERIA DE PROCESOS**

POR

JOSE ANGEL LOREDO MEDRANO

MONTERREY, N. L.

DICIEMBRE DE 2001

**INSTITUTO TECNOLÓGICO Y DE ESTUDIOS SUPERIORES
DE MONTERREY**

**CAMPUS MONTERREY
DIVISIÓN DE INGENIERIA Y ARQUITECTURA
PROGRAMA DE GRADUADOS EN INGENIERIA**



**MODELACION Y SIMULACION DE UN
HORNO DE SINTERIZACION DE OXIDO DE MAGNESIO**

TESIS

**PRESENTADA COMO REQUISITO PARCIAL PARA OBTENER EL GRADO
ACADEMICO DE**

**MAESTRO EN CIENCIAS EN SISTEMAS AMBIENTALES
CON ESPECIALIDAD EN INGENIERIA DE PROCESOS**

POR

JOSE ANGEL LOREDO MEDRANO

MONTERREY, N. L.

DICIEMBRE DE 2001

Dedicatoria

*A Dios porque siempre ha estado conmigo,
principalmente a través del amor de mis padres,
María del Rosario y Desiderio, quienes han llevado una
vida de esfuerzos con tal de ver realizadas mis metas. En ellos
mi ejemplo del trabajo y de los valores.*

Resumen

En el presente trabajo se presenta la modelación y simulación de un horno vertical de lecho móvil, el cual es utilizado para la sinterización de óxido de magnesio. En este proceso, perteneciente a una empresa de la localidad, la sinterización se efectúa por combustión de gas natural en dos etapas por lo que es un proceso conocido como doble calcinado. La motivación para realizar el presente trabajo surgió de la necesidad de conocer el comportamiento detallado del horno dadas algunas problemáticas en variables de operación como el uso de combustible y los efectos meteorológicos, por lo que un modelo predictivo fue visto como una oportunidad para conocer los efectos en la manipulación o cambios de dichas variables.

El principal fenómeno modelado en este sistema fue la transferencia de calor, ya que la temperatura es una variable con una marcada influencia sobre las transformaciones físicas y químicas de los materiales, y un perfil de la misma para ambas fases puede ser una descripción de la eficiencia del proceso.

La transferencia de calor en lechos empacados es un fenómeno complejo por tratarse de un sistema de dos fases y por involucrar múltiples mecanismos, sin embargo se dispone de amplia información, que aunque obtenida de otros sistemas, pudo ser utilizada exitosamente para el estudio del sistema descrito. Dicho uso de la información no estuvo exento de una selección cuidadosa y de modificaciones en los casos indicados.

Asimismo en el presente trabajo se ha propuesto un modelo que predice el comportamiento tanto del fluido como del sólido, este último un lecho móvil, y se ha agregado una cinética de sinterización, que aunque sólo considera los efectos del tiempo de residencia y de la temperatura permite un conocimiento aproximado de la evolución de la sinterización.

Resumen

El modelo matemático resultó en un sistema de ecuaciones diferenciales parciales para representar el transporte de calor en cada una de las fases, las cuales se relacionan a través de un coeficiente interfásico. Para estimar los parámetros característicos de estas ecuaciones diferenciales parciales y de sus condiciones de frontera se utilizaron correlaciones sobre las que ya se ha discutido brevemente. Este modelo matemático permite obtener perfiles axiales y radiales de temperatura debido a fenómenos de dispersión radial y movimiento axial de ambas fases.

La combustión ha sido representada de una manera simplificada que permite obtener resultados confiables como ya se verá en los respectivos capítulos, es en esta área en la que se encuentran los mayores retos para estudios futuros debido a las características del proceso.

Los principales resultados muestran una magnífica aproximación a los datos de planta, esta comparativa está basada en temperatura interna de pared, el cual es el único dato disponible de operación con utilidad para una comparación del modelo.

Del presente avance han surgido resultados que muestran deficiencias de transferencia de calor hacia el interior del horno, lo que trae como consecuencia bajo o nulo nivel de sinterización en parte de la carga de material.

A través del programa elaborado para la simulación del horno, será posible conocer las tendencias del comportamiento del horno a través de información que le proporcione el usuario como lo es el flujo de combustible, la carga de sólidos, el exceso de aire y de temperatura del producto.

Agradecimiento

Al Dr. Miguel Angel Romero Ogawa, porque durante la realización de este trabajo me ayudó a adquirir una visión muy especial y particular de hacer las cosas y de valorarlas. También un profundo agradecimiento por darme la oportunidad de pertenecer temporalmente al Departamento de Ingeniería Química del ITESM, con lo que logré valiosas amistades e importantes conocimientos. Gracias además, por la confianza y apoyo en momentos trascendentes.

Al Dr. Joaquín Acevedo Mascarúa y al Dr. Eduardo Gómez-Maqueo Aréchiga por sus finas atenciones a mis dudas y por sus aportaciones a este trabajo.

A los tres por ser espléndidas personas.

A José Leboeiro Hernández por su interés de siempre hacia este trabajo y por su ejemplar forma de ser.

Sería magnífico mencionar a todas las personas, compañeros, familiares y amigos, que durante mis estudios de maestría me motivaron y me ayudaron en este y en otros roles personales, sin embargo, su ayuda y su amistad no es poco valorada por no dedicarle algunos renglones.

Contenido

| | |
|---|-----|
| Resumen | i |
| Contenido | iii |
| Indice de Figuras | v |
| Indice de Tablas | vi |
| Nomenclatura | vii |
| | |
| 1. Introducción | 1 |
| 1.1 Descripción del sistema | 3 |
| 1.2 Objetivos | 5 |
| 1.3 Alcance | 5 |
| | |
| 2. Modelación de Transferencia de Calor en Lechos Empacados | 7 |
| 2.1 Hornos industriales de lecho móvil | 8 |
| 2.2 Modelos predictivos | 9 |
| 2.3 El modelo heterogéneo de transferencia de calor. | 11 |
| 2.4 El modelo pseudo - homogéneo de transferencia de calor. | 15 |
| 2.5 Transferencia de calor a través de la pared del horno. | 17 |
| | |
| 3. Sinterización de Óxido de Magnesio | 19 |
| 3.1 Investigaciones sobre la sinterización de óxido de magnesio | 19 |
| 3.2 Mecanismos de sinterización | 21 |
| 3.3 Curvas de encogimiento para la densificación del MgO de alta pureza | 23 |
| | |
| 4. Transferencia de Calor en Lechos Empacados | 27 |
| 4.1 Mecanismos de transferencia de calor en lechos empacados | 27 |
| 4.2 Parámetros característicos del modelo pseudo – homogéneo | 30 |
| 4.2.1 Conductividad térmica efectiva radial | 30 |
| 4.2.2 Coeficiente aparente de transferencia de calor de pared | 36 |
| 4.2.3 Conductividad térmica axial efectiva | 40 |
| 4.3 Parámetros característicos del modelo heterogéneo | 43 |
| 4.3.1 Conductividades térmicas efectivas radial y axial del sólido | 44 |
| 4.3.2 Conductividad térmica radial del fluido | 44 |
| 4.3.3 Conductividad térmica axial del fluido | 45 |
| 4.3.4 Coeficiente de transferencia de calor fluido – sólido | 46 |
| 4.3.5 Coeficiente de transferencia de calor fluido pared | 49 |
| 4.3.6 Coeficiente de transferencia de calor sólido – pared | 50 |
| | |
| 5. Resolución del modelo | 52 |
| 5.1 Estimación de parámetros de transporte | 52 |
| 5.2 Cinética de densificación | 55 |

Contenido

| | |
|---|----|
| 5.3 Zonas de combustión | 55 |
| 5.4 Transformación geométrica de la sección transversal del horno | 58 |
| 5.5 Algoritmo de resolución | 58 |
| 5.6 Estructura del programa | 61 |
| 5.7 Corridas propuestas | 63 |
| 6. Análisis de resultados y conclusiones | 65 |
| 6.1 Resultados | 66 |
| 6.2 Análisis de resultados | 72 |
| 6.3 Recomendaciones para trabajos futuros | 76 |
| 6.3.1 Perfil no plano de temperatura en la región inferior del horno. | 76 |
| 6.3.2 Efectos del medio ambiente | 76 |
| 6.3.3 Impacto de la pulverización de las briquetas | 76 |
| 6.3.4 Cinética de sinterización | 77 |
| 6.3.5 Modelación de la combustión | 77 |
| 6.3.6 Ajuste de parámetros | 77 |
| 6.4 Conclusiones finales | 78 |
| Bibliografía | 80 |

Indice de Figuras

| | | |
|------|--|----|
| 1.1 | Horno vertical para sinterización de MgO | 4 |
| 3.1 | Ajuste de los resultados de Michel (1992) | 25 |
| 3.2 | Curvas de sinterización | 26 |
| 5.1 | Distribución del calor de combustión | 56 |
| 5.2 | Anulo diferencial generador de calor | 57 |
| 6.1 | Corrida 1 | 64 |
| 6.2 | Corrida 2 | 64 |
| 6.3 | Corrida 3 | 65 |
| 6.4 | Corrida 4 | 65 |
| 6.5 | Corrida 5 | 65 |
| 6.6 | Corrida 6 | 66 |
| 6.7 | Perfiles axiales de temperatura del fluido | 66 |
| 6.8 | Perfiles axiales de temperatura del sólido | 67 |
| 6.9 | Perfiles radiales de temperatura del fluido | 68 |
| 6.10 | Perfiles radiales de temperatura del sólido | 68 |
| 6.11 | Perfil axial de densidad del MgO | 69 |
| 6.12 | Análisis de sensibilidad (emisividad) | 69 |
| 6.13 | Análisis de sensibilidad (fracción de huecos) | 70 |
| 6.14 | Análisis de sensibilidad (diámetro de partícula) | 70 |

Indice de Tablas

| | | |
|-----|---|----|
| 3.1 | Impurezas del MgO | 24 |
| 3.2 | Resultados de Michel (1992) | 24 |
| 3.3 | Valores calculados de densidad | 25 |
| 5.1 | Distribución radial del calor de combustión | 56 |
| 5.2 | Datos para las corridas | 63 |
| 5.3 | Variables para análisis de sensibilidad | 64 |

Nomenclatura

| | | |
|-----------|---|--------------------------|
| a_v | Área superficial externa de la briqueta por unidad de volumen del horno. | $m^2 m^{-3}$ |
| Bi_f | Número de Biot para el fluido. | |
| Bi_s | Número de Biot para el sólido. | |
| C_p | Capacidad calorífica de la fase fluida. | $J g^{-1} K^{-1}$ |
| C_{p_s} | Capacidad calorífica de la fase sólida. | $J g^{-1} K^{-1}$ |
| d_p | Diámetro de una esfera con el mismo volumen que la partícula. | m |
| d_p | Diámetro de la briqueta. | m |
| d_t | Diámetro del horno. | m |
| e | Emisividad del sólido. | |
| e_1 | Eje mayor de la sección transversal real del horno. | m |
| e_2 | Eje menor de la sección transversal real del horno. | m |
| G | Velocidad másica. | $kg m^{-2} s^{-1}$ |
| h | Coefficiente aparente de transferencia de calor entre la partícula y el fluido. | $J m^{-2} s^{-1} K^{-1}$ |
| h_a | Coefficiente de transferencia de calor por convección al ambiente. | $J m^{-2} s^{-1} K^{-1}$ |
| h_c | Coefficiente de transferencia de calor por convección a la película que rodea la partícula. | $J m^{-2} s^{-1} K^{-1}$ |
| h_{fs} | Coefficiente interfásico de transferencia de calor. | $J m^{-2} s^{-1} K^{-1}$ |
| h_p | Contribución de la conducción en la película a h_{fs} . | $J m^{-2} s^{-1} K^{-1}$ |
| h_{rad} | Contribución de transferencia de calor por radiación. | $J m^{-2} s^{-1} K^{-1}$ |
| h_{rs} | Coefficiente de transferencia de calor por radiación entre las superficies sólidas. | $J m^{-2} s^{-1} K^{-1}$ |
| h_{rv} | Coefficiente de transferencia de calor por radiación entre los huecos del empacado. | $J m^{-2} s^{-1} K^{-1}$ |
| h_w | Coefficiente de transferencia de calor de pared intrerna. | $J m^{-2} s^{-1} K^{-1}$ |
| h_{wf} | Coefficiente de transferencia de calor pared-fluido. | $J m^{-2} s^{-1} K^{-1}$ |
| h_{ws} | Coefficiente de transferencia de calor pared-sólido. | $J m^{-2} s^{-1} K^{-1}$ |
| k_a | Conductividad térmica axial efectiva. | $J m^{-1} s^{-1} K^{-1}$ |
| k_{af} | Conductividad térmica axial de la fase fluida. | $J m^{-1} s^{-1} K^{-1}$ |
| k_{as} | Conductividad térmica axial de la fase sólida. | $J m^{-1} s^{-1} K^{-1}$ |
| k_f | Conductividad térmica del fluido. | $J m^{-1} s^{-1} K^{-1}$ |
| k_r | Conductividad térmica radial efectiva. | $J m^{-1} s^{-1} K^{-1}$ |
| k_{rad} | Contribución de la radiación a k_r | $J m^{-1} s^{-1} K^{-1}$ |
| k_{ref} | Conductividad térmica de la pared del horno. | $J m^{-1} s^{-1} K^{-1}$ |
| k_{rf} | Conductividad térmica radial de la fase fluida. | $J m^{-1} s^{-1} K^{-1}$ |
| k_{rs} | Conductividad térmica radial de la fase sólida. | $J m^{-1} s^{-1} K^{-1}$ |
| k_s | Conductividad térmica del sólido. | $J m^{-1} s^{-1} K^{-1}$ |
| L | Longitud axial total. | m |
| M_T | Número de Prandtl o Schmidt. | |

Nomenclatura

| | | |
|----------------|---|--------------------------|
| N_f | Grupo de transferencia de calor en la interfase para el fluido. | |
| N_s | Grupo de transferencia de calor en la interfase para el sólido. | |
| N_T | Número de Nusselt o número de Sherwood. | |
| Nu_w | Número de Nusselt aparente de pared. | |
| p | Probabilidad de desplazamiento axial. | |
| Pe_a | Número de Peclet térmico axial efectivo. | |
| $Pe_{a\infty}$ | Valor asintótico del número de Peclet térmico axial. | |
| $Pe_{r\infty}$ | Valor asintótico del número de Peclet térmico radial. | |
| Pe_{rf} | Número de Peclet térmico radial efectivo. | |
| Pr | Número de Prandtl. | |
| q | Flujo de calor a través de la pared. | $J s^{-1} m^{-2}$ |
| Q | Calor de combustión. | $J s^{-1} m^{-3}$ |
| r | Coordenada radial. | m |
| R | Radio del horno (geométrico) | m |
| r_c | Coordenada radial para la transformación. | m |
| Re | Número de Reynolds. | |
| T | Temperatura de la fase fluida. | $^{\circ}C$ |
| t | Tiempo. | s |
| T_a | Temperatura ambiente. | $^{\circ}C$ |
| T_b | Temperatura del modelo pseudo-homogéneo. | $^{\circ}C$ |
| T_E | Temperatura límite final del modelo heterogéneo. | $^{\circ}C$ |
| T_r | Temperatura del refractario. | $^{\circ}C$ |
| T_s | Temperatura del sólido. | $^{\circ}C$ |
| T_w | Temperatura interna de pared. | $^{\circ}C$ |
| U | Coficiente global de transferencia de calor que representa los efectos en serie de la pared del horno y del ambiente. | $J m^{-2} s^{-1} K^{-1}$ |
| u | Velocidad de flujo de la fase fluida en el empacado. | $m s^{-1}$ |
| u_s | Velocidad de flujo de la fase sólida. | $m s^{-1}$ |
| z | Coordenada axial. | m |

Subíndices

| | |
|---------|--|
| 0 | inicial |
| $()_0$ | En ausencia de transferencia de calor por radiación. |

Superíndices

| | |
|-----|------------------------|
| d | Contribución dinámica. |
| o | Contribución estática. |

Literales griegas

| | | |
|---------------|---|--------------------|
| δ | Espesor de la pared del horno. | m |
| ε | Fracción de huecos del empacado. | |
| ϕ | Grosor de la película estancada alrededor de la briqueta. | |
| κ | Razón de conductividades térmicas (k_o/k_f) | |
| μ_f | Viscosidad del fluido. | $kg m^{-1} s^{-1}$ |

Nomenclatura

| | | |
|----------|--|--------------------|
| θ | Coordenada angular del horno. | |
| ρ | Coordenada radial adimensional (r/R). | |
| ρ^* | Densidad de las briquetas (cinética de sinterización) | g cm^{-3} |
| ρ_f | Densidad de la fase fluida. | kg m^{-3} |
| ρ_s | Densidad de la fase sólida. | kg m^{-3} |
| σ | Factor de deformación. | |
| τ | Factor de tortuosidad. | |
| τ^* | Tiempo de residencia de las briquetas (cinética de sinterización). | min |
| ζ | Coordenada axial adimensional (z/L). | |

1. Introducción

La magnesia u óxido de magnesio de alta pureza, es un material cerámico que por su alta refractoriedad y resistencia a la erosión ha tenido amplia aplicación en procesos que involucran altas temperaturas, por ejemplo, en hornos de fusión de acero, en hornos rotatorios para la fabricación de cemento y en regeneradores para hornos de fusión de vidrio (Michel, 1992).

Una de las formas de lograr características refractarias de este material consiste en someter a altas temperaturas los compactados del mineral en hornos verticales durante grandes tiempos de residencia. El calor para lograr las temperaturas adecuadas es obtenido de la combustión de gas natural en dos etapas.

Este tipo de sistemas, conocidos como lechos empacados, han sido estudiados ampliamente durante décadas debido a la importancia de la temperatura en los sistemas reaccionantes, siendo descritos bajo un esquema determinístico haciendo uso de modelos matemáticos conocidos como pseudo-homogéneos, pseudo-heterogéneos y heterogéneos y que permiten describir el fenómeno de transferencia de calor tratando al sistema como una pseudo-fase, una pseudo-fase que incluye la interacción entre las fases o bien haciendo una descripción para cada fase, respectivamente. La selección del modelo matemático depende de la rigurosidad con que el sistema requiera ser modelado y de la influencia que ejerzan las características del sistema en la transferencia de calor.

El modelo heterogéneo es el modelo que describe con mejor detalle el mecanismo de transferencia de calor en esta clase de sistemas, ya que describe tanto la fase sólido como la fase gas a través de los perfiles de temperatura. Este tipo de modelo incluye la transferencia de calor por dispersión axial y por dispersión radial, en estado no estable, y además incluye la contribución a la transferencia de calor por flujo del gas y muy particularmente en el sistema a tratar por movimiento del sólido en dirección axial, además existe un término de transferencia de calor entre fases, término que representa la

Introducción

interacción entre el sólido y el gas. Además los mecanismos de transferencia de calor se encuentran englobados en parámetros efectivos y pueden estimarse a partir de correlaciones generales que cumplan con ciertas especificaciones o bien correlaciones exclusivas para un sistema dado.

El modelo pseudo – homogéneo es una simplificación del modelo heterogéneo, con este modelo se logra representar el sistema como un continuo de una sola fase y proporciona buenas representaciones de los fenómenos sólo en algunas ocasiones.

El modelo pseudo – heterogéneo es un intermedio entre los anteriores dos modelos descritos, el sistema es representado también como una sola fase, pero incluye un término en el que se representa la transferencia de calor entre las fases.

Este sistema tiene la particularidad del movimiento del empacado, lo que implica considerar el movimiento del sólido en la expresión matemática que representa el balance de energía térmica de esta fase, y además por tratarse de dos fases en contracorriente se presentan dificultades a superar en los aspectos de resolución numérica.

Estos modelos han sido estudiados y aplicados exitosamente desde hace varias décadas en sistemas en los que existe reacción química, debido a la fuerte influencia de la temperatura sobre las propiedades de las sustancias involucradas en dichos sistemas. Se han realizado numerosos estudios para obtener correlaciones que predigan adecuadamente los mecanismos de la transferencia de calor y también se ha analizado la implementación adecuada del modelo según el sistema estudiado.

El estudio de un horno industrial de sinterización de briquetas de óxido de magnesio puede ser estudiado a partir del conocimiento generado de las investigaciones mencionadas, sin embargo el uso de las correlaciones ya existentes debe ser rigurosamente observado, ya que las diferencias entre este sistema y los sistemas reaccionantes son acentuadas en algunos aspectos como lo son las dimensiones del sistema, las características del empacado y la influencia de otros fenómenos como el medio ambiente y el calor generado por la combustión, lo que da al proyecto un reto adicional para explorar nuevas aplicaciones de las herramientas predictivas de los mecanismos de la transferencia de calor.

Por otra parte, la combustión debe ser modelada adecuadamente bajo un esquema de chorro turbulento en medios empacados, campo que ha sido escasamente explorado. Los modelos de dinámica de fluidos deben ser combinados con los modelos de conservación de energía térmica y de conservación de materia para las especies involucradas en la combustión. Lo anterior sin pasar por alto la cinética química y el equilibrio para describir el comportamiento de la combustión.

Previo a implementar los esquemas mencionados de la combustión, ésta puede ser descrita exclusivamente por el calor liberado por la combustión, para una primera aproximación en la resolución del modelo. Representando este fenómeno como fuentes discretas de calor en algunos puntos del horno debidamente ubicados en el modelo matemático y en la herramienta numérica de resolución.

1.1 Descripción del sistema

Los hornos verticales pueden ser descritos si se hace una división en tres zonas:

- ◆ Zona inferior: intercambio de calor entre las briquetas sinterizadas y el aire para combustión.
- ◆ Zona intermedia: sinterización por combustión en dos etapas.
- ◆ Zona superior: intercambio de calor entre gases de combustión y briquetas alimentadas.

Las briquetas son introducidas al horno por la parte superior y durante el trayecto hacia la zona de combustión son precalentadas para aprovechar el calor de los gases que provienen de la zona de combustión.

De manera similar en la zona inferior, una parte del aire que será utilizado en la combustión se hace fluir sobre las briquetas que ya han pasado por la zona de combustión, con esto una fracción del aire a utilizar en la combustión llega precalentado a la zona de quemadores. También en esta zona, en la parte inferior del horno las briquetas se obtienen como producto a temperaturas bajas.

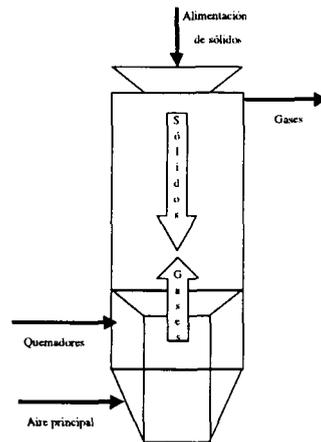


Figura 1.1 Horno vertical para sinterización de MgO

En la zona de combustión se cuenta con dos conjuntos de quemadores, con la finalidad de liberar el calor del combustible por etapas y no provocar daños en el material procesado por sobrecalentamiento, por ejemplo. En esta zona la combustión se efectúa por combinación del aire precalentado en el empacado y del aire y combustible premezclados que se inyectan a través de los quemadores, los quemadores se encuentran distribuidos en el perímetro del horno en dos posiciones axiales distintas.

Este sistema presenta problemáticas en lo referente a alta demanda de gas natural para efectuar la sinterización, la cual ocurre con bajos rendimientos ocasionando pérdidas de combustible, de tiempo de operación y de materia prima. Se ha observado también que la operación es influida fuertemente por las variables meteorológicas cuyos cambios son difíciles de predecir y más aun de controlar su influencia sobre las condiciones de operación. Los efectos en los cambios en las variables de proceso o en las condiciones ambientales pueden ser conocidos varias horas posteriores a dicho cambio, debido a los altos tiempos de residencia y a las dificultades de efectuar mediciones en el interior del empacado, por lo que se hace necesario un modelo que permita predecir los efectos de las variaciones mencionadas en el desempeño del horno, una forma detallada de describir el comportamiento del horno es desarrollar un modelo matemático que incluya los fenómenos de transferencia de calor en lechos empacados, los efectos de una serie de variables tanto de operación, del ambiente y variables muy características de estos

sistemas que pueden ser despreciadas como lo son la fracción de huecos, los distintos efectos por carga del empacado a lo a lo largo del horno, entre otras que serán mencionadas en los capítulos posteriores.

1.2 Objetivos

El presente trabajo está motivado por la necesidad de contar con un programa que permita predecir el comportamiento del horno a partir de las condiciones de operación como lo son las variables de la combustión del gas natural, el flujo de sólidos y conocer la influencia de las condiciones ambientales sobre la operación.

En esta etapa de la investigación, la cual se abarca en este trabajo de tesis, tiene los siguientes objetivos:

- ◆ Obtener un programa que prediga el comportamiento del horno a través de los perfiles de temperatura.
- ◆ Analizar la influencia de las variables de operación en el comportamiento del horno.
- ◆ Analizar la influencia de las condiciones ambientales en la operación del horno.
- ◆ Observar la evolución de la sinterización a través de una cinética en función de la temperatura y del tiempo de residencia.
- ◆ Analizar la influencia de los parámetros que deberán ser ajustados en posteriores avances del estudio de este sistema.

1.3 Alcance

El modelo que surja del presente trabajo resultará útil para analizar el comportamiento del horno a través de las variables de manipulación del proceso. Además se obtendrá un programa en vía de ser mejorado con modelos de combustión y adaptable a rutinas capaces de ajustar los parámetros que resulten en este estudio y de los cuales no se cuenta con información de planta o de la literatura.

Introducción

La información disponible de la planta es mínima pero suficiente para una validación previa de este modelo, por lo que el avance del modelo permitirá sugerencias para diferentes mediciones necesarias en una comparación de los resultados y un proceso posterior de ajuste de parámetros. De manera paralela permitirá explorar nuevas aplicaciones de investigaciones ya realizadas en transferencia de calor en lechos empacados de menor escala, obviamente con las modificaciones a realizar implicadas en las diferencias de sistemas.

2. Modelación de Transferencia de Calor en Lechos Empacados

La formulación de un modelo matemático, en conjunto con la evaluación de sus parámetros termodinámicos, cinéticos y de transporte apropiados para la simulación numérica de la transferencia de calor en lechos empacados a través de los que existe flujo de gases es un problema muy importante desde el punto de vista de la operación de reactores multitubulares con tubos de bajo diámetro enfriados o calentados por la parte exterior. Esta es la razón por la que la transferencia de calor en estos sistemas ha sido ampliamente estudiada desde hace varias décadas.

En las primeras investigaciones, realizadas por Colburn (1931), y más tarde por Hennecke y Schlünder (1973), Ziolkowsky y Legawiec (1987), entre muchos otros, los sistemas han sido considerados como pseudo-homogéneos en los que la transferencia de calor hacia el medio exterior es descrita por un coeficiente global de transferencia de calor. Esta perspectiva de análisis permite predecir únicamente la temperatura promedio del gas en la sección transversal del empacado obteniendo un perfil en la dirección axial (Legawiec y Ziolkowsky, 1995).

Sin embargo, en muchos de los casos ha sido necesario predecir perfiles de temperatura en ambas direcciones, radial y axial, obteniéndose resultados a partir de adecuaciones de las dos fases del sistema a un modelo matemático de dos dimensiones, en los que los efectos de dispersión se han representado por parámetros fenomenológicos que engloban varios mecanismos.

Singer y Wilhelm (1950) fueron los primeros investigadores en formular un modelo en el que se considera que el calor es transferido en forma paralela en el gas y en

el sólido y entre ambas fases, también presentaron soluciones analíticas bajo ciertas simplificaciones. La complejidad matemática del modelo (para una solución analítica) y la necesidad de conocer sus parámetros fenomenológicos han representado la razón, probablemente, por la que en distintos estudios los sistemas han sido considerados como pseudo-homogéneos en los que existe flujo tapón y la conducción debida al gradiente axial de temperatura ha sido soslayada. De acuerdo con este modelo la heterogeneidad de los sistemas estudiados ha sido conglomerada en dos parámetros fenomenológicos, la conductividad térmica efectiva en dirección radial y el coeficiente de pared de transferencia de calor, ambos referidos a las distribuciones radiales de temperatura medidas en la corriente de gas.

El modelo pseudo-homogéneo permite obtener la distribución de temperaturas en sistemas en los que los efectos térmicos sobre algunos parámetros no son muy pronunciados. Para sistemas en los que es imposible evitar las altas temperaturas, Mc Greavy y Cresswell (1969), Carberry y White (1969), Wijngaarden y Westerp (1993) han propuesto, para resolver esta situación, la inclusión de un término que exprese en el modelo matemático la transferencia de calor entre el sólido y el fluido, esta modificación es conocida como modelo pseudo-heterogéneo.

De Wasch y Froment (1971) recurrieron al esquema representado por Singer y Wilhelm (1950), y propusieron un modelo de dos dimensiones y de dos fases en los que la conductividad térmica efectiva y el coeficiente de transferencia de calor de pared son distintos para cada fase y se involucra también un coeficiente de transferencia de calor entre fases. Sin embargo en esta propuesta se omiten las distribuciones radiales de la fracción de huecos del empacado y otros efectos que en ciertos sistemas no deben omitirse.

2.1 Hornos industriales de lecho móvil

En los últimos años se ha estudiado la transferencia de calor en lechos empacados con finalidades distintas a las de las numerosas publicaciones que existen sobre sistemas

con reacción química (Hsu *et al*, 1993; Mohamad *et al*, 1993; Adebisi y Chenevert, 1996; Jalalzadeh-Azar, 1996). Un caso, también diferente, se explora en el presente trabajo, el cual está referido a un horno industrial de sinterización de briquetas de óxido de magnesio. En este sistema se encuentran diferencias respecto de los sistemas tradicionales ya que el lecho es móvil en contracorriente al gas y las dimensiones son mayores respecto a los empacados de catalizadores, entre otras diferencias.

En el modelo heterogéneo que han propuesto los investigadores ya mencionados se puede incluir en la descripción matemática de la fase fluida el término que represente la generación de calor por combustión, proceso por el que se generan las altas temperaturas que promueven la compactación de los sólidos, y en la expresión matemática de la fase sólida deberá incluirse un término que describa la influencia a la transferencia de calor del movimiento del lecho, lo cual es una característica muy particular de este sistema, lo que exigirá especial atención en la resolución numérica y en la estimación de algunos parámetros lo cual se mencionará posteriormente.

De este modelo matemático debe surgir una predicción del perfil de temperaturas del horno y de esa manera predecir la densificación del material a partir de la información de operación que se le comunique, como lo puede ser las condiciones de combustión en lo referente a flujos de gas natural y aire, flujo de sólidos y condiciones ambientales.

2.2 Modelos predictivos

Estos modelos son del tipo predictivo, sin embargo, pueden ser utilizados en la simulación de procesos industriales con fines de (Shinar, 1978):

1. Escalamiento del proceso de planta piloto a planta industrial.
2. La evaluación del desempeño de nuevas materias primas.
3. La predicción de los efectos sobre el comportamiento del horno que resultan de la implementación de diferentes políticas de operación.
4. El análisis de tendencias dinámicas.

5. La optimización de las condiciones de operación.

En los modelos de aprendizaje y predictivos se utiliza la información obtenida de estudios a partir de principios fisicoquímicos y de transporte, con el fin de obtener mejores descripciones de los sistemas reales.

Romero (1990) describe la modelación de lechos empacados como un proceso iterativo, donde un buen modelo se obtiene después de una serie de etapas. El modelo puede ser mejorado debido al progreso continuo que se da en la búsqueda de nuevos mecanismos que describan con mejor aproximación los diferentes fenómenos de transporte, por lo anterior casi nunca se debe asegurar que un modelo matemático con una mejor capacidad descriptiva no sea posible de alcanzar.

Los modelos predictivos se caracterizan por ser tan simples como sea posible y también deben ser propuestos con un mínimo posible de parámetros a ajustar. Las diferentes etapas de su análisis no son necesariamente secuenciales y generalmente existe una integración continua de retroalimentación e información entre las diferentes etapas del desarrollo y las áreas del conocimiento involucradas.

Distintos modelos pueden ser empleados para describir simultáneamente la transferencia de calor en un lecho empacado, sin embargo, para algunos de los modelos utilizados existen limitaciones en lo referente a la estimación de parámetros y de confianza en la información disponible. Otra característica de los modelos predictivos es que soportan un grado importante de incertidumbre de algunos parámetros de transporte por hacer uso del concepto de parámetros efectivos con tal de facilitar la tarea de correlacionar la información de los diferentes mecanismos de transporte.

Wilhelm (1962) sugirió una clasificación para los numerosos fenómenos de transferencia de masa y de calor en un reactor empacado. De esa clasificación se hará referencia como gradiente interparticular al gradiente de temperatura entre el sólido y el fluido. El gradiente que se da en el fluido que rodea de forma inmediata a la partícula se

define como gradiente interfásico, mientras que el gradiente existente dentro de las partículas de sólido es denominado gradiente intrafásico. De lo mencionado se infiere que las características de transporte dentro de la partícula son distintas de las externas y por consiguiente un modelo con el que se busque una buena predicción del comportamiento de un lecho empacado debe considerar el caso de una partícula aislada y construir a partir de ella el modelo general del lecho en el que las ecuaciones que describen la conservación de energía incluyan la transferencia entre las fases en contacto.

2.3 El modelo heterogéneo de transferencia de calor.

De la revisión y discusión anteriores es posible proponer un modelo general de conservación de energía térmica para un lecho empacado en el que se considere únicamente el transporte interfásico, en el que se reconoce la existencia de ambas fases con lo que se da lugar al modelo heterogéneo.

La forma más común para la descripción determinística de estos procesos físicos son los modelos conocidos como fickianos. Para el caso de partículas esféricas en un lecho de estructura cilíndrica el balance de energía entre dos fases al estado inestable y que considera a ambas fases como un continuo, queda establecido como sigue:

Balance de energía para la fase fluida:

$$\epsilon \rho_f C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r k_{rf} \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k_{zf} \frac{\partial T}{\partial z} \right) - \frac{\partial (u \rho_f C_p T)}{\partial z} + a_v h (T_s - T) \quad (2.1)$$

Balance de energía para la fase sólida:

$$\epsilon \rho_s C_p \frac{\partial T_s}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r k_{rs} \frac{\partial T_s}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k_{zs} \frac{\partial T_s}{\partial z} \right) - \frac{\partial (u_s \rho_s C_p T_s)}{\partial z} - a_v h (T_s - T) \quad (2.2)$$

Destacando de una manera muy particular para este sistema el término de la ecuación (2.2) que describe el movimiento del lecho.

Con las siguientes condiciones iniciales y de frontera típicas:

Para $t = 0$, $z \geq 0$ y $r \geq 0$,

$$T(r, z) = T_0(r, z) \quad (2.3)$$

$$T_{s0}(r, z) = T_{s0}(r, z) \quad (2.4)$$

Para $t \geq 0$,

$$\text{en } r = 0 \quad \frac{\partial T}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial T_s}{\partial r} = 0 \quad (2.5)$$

$$\text{en } r = R \quad k_{rf} \frac{\partial T}{\partial r} = h_{wf}(T_w(z) - T) \quad (2.6)$$

$$\text{y} \quad k_{rs} \frac{\partial T_s}{\partial r} = h_{ws}(T_w(z) - T_s) \quad (2.7)$$

$$\text{en } z = 0 \quad T = T(r) \quad (2.8)$$

$$\text{y} \quad T_s = T_s(r) \quad (2.9)$$

$$\text{cuando } z \rightarrow \infty \quad T \rightarrow T_E \quad (2.10)$$

$$\text{para } z \geq L \quad \frac{\partial T_s}{\partial z} = 0 \quad (2.11)$$

Para $0 < z \leq L$ y $t = 0$

$$T(0^+) = T(0^-); \quad T_s(0^+) = T_s(0^-) \quad (2.12)$$

$$\frac{\partial T(0^+)}{\partial z} = \frac{\partial T(0^-)}{\partial z}; \quad \frac{\partial T_s(0^+)}{\partial z} = \frac{\partial T_s(0^-)}{\partial z} \quad (2.13)$$

$$\text{además } T_w(z) \text{ es tal que para } z > L: T_w(z) = T_E \quad (2.14)$$

Froment y Bischoff (1990) propusieron otras condiciones de frontera para la transferencia de calor entre las partículas y la pared del horno. La más simple de éstas es suponer la temperatura del sólido igual a la pared de la misma. Una mejor aproximación consiste en considerar un perfil de temperatura lineal en la fase sólida cerca de la pared (por ejemplo: $\partial^2 T_s / \partial r^2 = 0$).

Otra alternativa consiste en utilizar una condición para el sólido análoga a la del fluido como se muestra en las condiciones anteriores, considerando un coeficiente de transferencia de calor sólido-pared h_{ws} , (ecuación 2.7)

La ecuación (2.10) es considerada como la condición frontera más adecuada para la salida del lecho, pero es difícil de implementar numéricamente. Debido a esto muchos investigadores han usado las condiciones frontera de Danckwerts, (Romero 1990)., en las cuales el gradiente de temperatura a la salida es cero. Sin embargo, a menos que el lecho sea infinitamente largo esta condición de frontera no será válida ya que el fluido no alcanzará el equilibrio con el medio ambiente en forma instantánea. Esta situación resulta aun más evidente para las altas temperaturas que frecuentemente prevalecen en los lechos empacados. Las condiciones frontera propuestas por Young y Finlayson (1973) eluden esta situación, ellos derivaron en forma similar a Danckwerts las condiciones de entrada y salida del lecho para el caso en el cual tanto la dispersión axial y radial están presentes y obtuvieron una solución aproximada para sus condiciones frontera por medio de colocación ortogonal en dirección radial. Sin embargo, las condiciones de salida no tienen un gradiente de temperatura de cero, aunque se reducen a condiciones de Danckwerts cuando la dispersión radial es despreciada. La condición de frontera (2.11), del tipo Danckwerts, resulta razonablemente válida en vista de que normalmente la fase sólida no existe para $z > 0$.

Dado que los modelos predictivos son propuestos continuamente (tanto a nivel de partícula como a nivel macro, como es el caso de un horno industrial), algunas simplificaciones al modelo heterogéneo son necesarias para primeras exploraciones de

estudio y además en cumplimiento con las sugerencias antes mencionadas. Algunas guías pragmáticas para tales simplificaciones son (Romero, 1990):

1. El modelo no deberá de ser más detallado que lo absolutamente necesario para propósitos particulares involucrados.
2. El modelo deberá contener la menor cantidad posible de parámetros a estimar.
3. Los parámetros involucrados en el modelo deberán de ser estimados por medio de correlaciones confiables.
4. El esfuerzo matemático/computacional requerido para la solución del modelo deberá de ser razonable.

Algunas de las simplificaciones más comúnmente aceptadas y las cuales han sido discutidas en algunos trabajos (Romero,1990) son:

1. Presión constante en el lecho.
2. Conductividad térmica de las partículas constante.
3. Valores promedio constantes para las propiedades físicas y los parámetros de transporte.
4. Perfil de temperatura plano en la entrada del lecho.
5. Temperatura de pared constante.
6. Porosidad constante del empacado.
7. Perfil de velocidad radial plano.
8. Actividad del catalizador constante.

Las suposiciones 1, 2 y 3 son utilizadas en la mayoría de los casos. Sin embargo, descripciones matemáticas para la caída de presión, la conductividad térmica de las partículas y las propiedades físicas y los parámetros de transporte son relativamente fácil de incluir si el modelo es resuelto numéricamente. La porosidad del empacado constante y el flujo plano (6 y 7) son suposiciones que se realizan frecuentemente aunque algunos investigadores consideran que también se debe una descripción de la variación de estas

características en el conjunto de correlaciones que complementan estos modelos matemáticos.

Algunos autores consideran que las discrepancias entre la teoría y los resultados experimentales en la mayoría de los casos resultan por el uso de suposiciones tales como 6 y 7. Sin embargo es más probable que tales discrepancias se deban a un número de factores adicionales que no fueron considerados, tales como la omisión de los efectos de transferencia de calor por radiación en la modelación y estimación de parámetros (Feyo de Azevedo, 1990), errores en las mediciones experimentales inducidos por mala instrumentación, entre otros.

2.4 El modelo pseudo - homogéneo de transferencia de calor.

Es evidente que el grado de complejidad del modelo matemático que describe el comportamiento de un lecho empacado resulta en un sistema numérico que demanda un considerable esfuerzo computacional para su solución debido al proceso de discretización que se requiere normalmente para la solución de las ecuaciones diferenciales parciales que lo conforman, no obstante el rápido desarrollo de la tecnología computacional, por lo que en ocasiones necesario reducir la complejidad del modelo para acotar el tiempo de computo requerido para su solución a un nivel razonable, particularmente para modelos dinámicos.

La simplificación del modelo heterogéneo produce un grupo de estructuras predictivas alternativas de tipo fickiano conocidas como modelo "pseudo-homogéneo". En este modelo pseudo-homogéneo se supone que la resistencia al transporte interfacial de calor es despreciable, que las propiedades físicas del fluido no varían marcadamente a través del diámetro de la partícula y que la película de fluido alrededor de la partícula del catalizador es pequeña, tal que cada partícula junto con la película que la rodea es considerada como parte de un sistema homogéneo. En el balance diferencial de calor del modelo pseudo-homogéneo no se hace distinción entre las temperaturas del sólido y del fluido, por lo que el balance de energía es descrito por la siguiente expresión:

606239

Balance de energía

$$((1-\varepsilon)\rho_s C_{p_s} + \varepsilon\rho_f C_p) \frac{\partial T_b}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r k_r \frac{\partial T_b}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k_a \frac{\partial T_b}{\partial z} \right) - \frac{\partial((u\rho_f C_p - u_s \rho_s C_{p_s}) T_b)}{\partial z} \quad (2.15)$$

Con las siguientes condiciones iniciales y de frontera:

Para $t = 0$, $z \geq 0$, $r \geq 0$,

$$T_b = T_0(r, z) \quad (2.16)$$

Para $t \geq 0$,

en $r = 0$

$$\frac{\partial T_b}{\partial r} = 0 \quad (2.17)$$

en $r = R$

$$k_r \frac{\partial T_b}{\partial r} = h_w (T_w(z) - T_b) \quad (2.18)$$

en $z = 0$

$$T_b = T(r) \quad (2.19)$$

$$\text{cuando } z \rightarrow \infty \quad T_b \rightarrow T_E \quad (2.20)$$

y para $0 < z \leq L$ y $t = 0$

$$T_b(0^+) = T_b(0^-) \quad \frac{\partial T_b(0^+)}{\partial z} = \frac{\partial T_b(0^-)}{\partial z} \quad (2.21)$$

Además de la ecuación (2.14) que corresponde a la condición de frontera para $T_w(z)$.

La discusión previa respecto a las condiciones frontera alternativas aplica igualmente para el modelo pseudo-homogéneo. Además cuando se emplea este modelo para lo que es en realidad un sistema heterogéneo (dos fases) deberán atenderse cuidadosamente los siguientes aspectos (Windes *et al*, 1989):

1. Selección de una temperatura pseudo-homogénea dentro del rango de T a T_s .
2. Selección de parámetros de transporte pseudo-homogéneos que ofrezcan la mejor aproximación a los parámetros de transporte de las dos fases (heterogéneo).

También debe remarcarse que el modelo pseudo-homogéneo proporciona mejores resultados en sistemas en estado estable.

2.5 Transferencia de calor a través de la pared del horno.

El flujo de calor que se transmite de la pared del horno hacia el ambiente se da por las contribuciones en paralelo de las dos fases en contacto con la pared interior del horno y que posteriormente se transmite por el refractario que da estructura al horno y liberándolo finalmente al medio ambiente. Lo mencionado queda descrito por la siguiente expresión

$$q = h_{ws}(T_w - T_s) + h_{wf}(T_w - T_f) = \frac{k_{ref}}{\delta}(T_r - T_w) = h_a(T_a - T_r) \quad (2.22)$$

La transferencia que de calor que se presenta en la pared del horno y la transferencia de calor al ambiente pueden ser representadas por un coeficiente global, de tal forma que la temperatura de pared puede ser conocida a partir de la siguiente expresión

$$T_w = \frac{h_{ws}T_s + h_{wf}T_f + UT_a}{h_{ws} + h_{wf} + U} \quad (2.23)$$

Con la ecuación (2.23) es posible conocer la temperatura de pared a partir de la temperatura ambiente y de las temperaturas interiores del empacado. La aplicación de esta ecuación es conocer la temperatura interna de pared del horno, ya que debe ser conocida la condición de frontera, de esa forma se conoce a partir de un balance de energía y de temperatura del ambiente.

3. Sinterización de Óxido de Magnesio

Es conveniente mencionar algunos aspectos sobre las investigaciones que se han realizado sobre la sinterización de óxido de magnesio aun y cuando el enfoque principal del presente trabajo son los fenómenos de transferencia de calor. Para una mejor perspectiva sobre el comportamiento del horno se describen brevemente algunos estudios ya realizados sobre este material refractario, asimismo algunas teorías propuestas que permitan un mejor análisis de los resultados en comparación con la información disponible del proceso industrial.

De un estudio realizado con el material que se trata en estos hornos (Michel 1992) surgirá una cinética de la sinterización en función del tiempo de residencia y de la temperatura pero con el conocimiento de que algunos factores pueden alterar el proceso de sinterizado.

3.1 Investigaciones sobre la sinterización de óxido de magnesio

La sinterización es la transformación de partículas sólidas en objetos densos por la aplicación de calor, pero sin alcanzar, necesariamente, la temperatura de fusión del material. Es uno de los procesos más antiguos de fabricación de artículos metálicos y cerámicos, que permite modificar propiedades de los materiales tales como la resistencia mecánica y a la erosión, la translucidez y la conductividad térmica, entre otras, debido a una disminución en la porosidad.

Para producir MgO de alta pureza en escalas industriales se calcinan briquetas de óxido de magnesio con pureza química superior al 98% de MgO en hornos verticales a temperaturas superiores a 1700 °C, el producto final con mayor densidad tiene una

porosidad reducida y es la materia prima esencial para la elaboración de ladrillos refractarios básicos, empleados en hornos o reactores.

Estudios existentes (Castillo *et al*, 1991) sobre la sinterización del MgO han sido realizados bajo un enfoque microscópico haciendo referencia a conceptos muy importantes como la evolución del tamaño del cristal, crecimiento de grano, frontera de grano, etc. El tamaño de cristal del MgO calcinado es una característica muy estudiada por ser un parámetro directamente relacionado con la resistencia al ataque por escoria y la erosión a altas temperaturas. De esos estudios se han obtenido parámetros fundamentales pero poco aplicables en la modelación y simulación de procesos de nivel industrial como lo es el presente estudio.

Coble *et al* (1985) presentaron una descripción sobre la sinterización de MgO de alta pureza y propusieron un análisis completo de los fenómenos de sinterización y crecimiento de grano basado en una caracterización completa de polvos, compactados y su evolución microestructural, además de datos de energías interfaciales y coeficientes de transporte para el material bajo estudio.

La aplicación de los modelos de sinterización desarrollados se ha enfocado a sistemas de alta pureza con el objeto de predecir la evolución del tamaño de los cristales. A pesar de referir el presente estudio al procesamiento de material de alta pureza no es posible aplicar los resultados al presente estudio debido a que la variable estudiada es el tamaño de los cristales. Otro aspecto relevante es la atmósfera en la que se ha realizado la serie de estudios mencionados en el presente capítulo, Hartman *et al* (1994), realizaron estudios sobre el impacto de distintas atmósferas en la sinterización del material ya mencionado. Sin embargo el estudio de los mecanismos de sinterización de MgO de alta pureza, se considera la base para estudios posteriores en éste y otros sistemas cerámicos y si bien no se pueden obtener valores de algunas variables como tiempo de residencia (entre otros) bosquejan una idea de los diferentes fenómenos que pueden alterar un proceso de sinterización propuesto.

Diversos investigadores coinciden en que la sinterización del MgO se lleva a cabo en tres etapas, dependiendo de la temperatura y tamaño inicial de partículas (Michel, 1992). La etapa inicial se caracteriza por un reacomodo de partículas, la etapa intermedia es quizás la menos estudiada y se considera que en ella ocurre una densificación significativa con predominancia de difusión superficial, en la tercera etapa se considera que existe un crecimiento de grano por transporte de materia en las fronteras de grano y a través de la red.

Otros autores (Brophy *et al*, 1984) han propuesto cinéticas de crecimiento de cristales en relación a la ley de Arrhenius, sin embargo ya se ha mencionado la difícil aplicación práctica de esta clase de estudios y resultados.

Por lo anterior Michel (1992) realizó estudios sobre el encogimiento de briquetas de MgO de alta pureza a partir de material proporcionado por Química del Rey, los resultados de estos estudios son totalmente aplicables en la modelación y simulación presentadas en el presente trabajo. La aplicabilidad de estos resultados estriba en la posibilidad de conocer la evolución de la densidad de las briquetas de MgO en función del tiempo de residencia y de la temperatura.

3.2 Mecanismos de sinterización

Richerson (1982) propuso que la densificación de compactados cerámicos a alta temperatura ocurre debido a la existencia de un mecanismo de transporte de material y a una fuente de energía para activar y sostener el transporte de material. La fuerza motriz es la reducción en el área superficial y la evolución de la sinterización está descrita por la ley de Arrhenius.

Desde el punto de vista del transporte de masa existen varios trabajos reportados para describir los mecanismos de sinterización, sin embargo la explicación del fenómeno no ha sido completa, Coble *et al* (1985) y Ashby (1990) han realizado trabajos referentes a mapas de sinterización. Otros investigadores como Kingery (1976), Brophy *et al*

Sinterización de Óxido de Magnesio

(1984), Wong y Pask (1979), y Nan *et al* (1989) han hecho estudios con MgO cuyos conceptos no corresponden con el enfoque del presente trabajo.

Los autores mencionados coinciden en la existencia de tres etapas para la sinterización:

1. Etapa inicial: reacomodo de partículas.
2. Etapa intermedia: transporte de materia por difusión superficial.
3. Etapa final: crecimiento de grano.

En la etapa inicial se produce una densificación rápida de briquetas o compactados de MgO. Varela y Whittmore (1983) lo atribuyen a una rápida coalescencia de partículas pequeñas en otras de mayor tamaño, lo que da lugar a un crecimiento de grano y a la desaparición de poros pequeños, alternativamente pudiera ser un reacomodo de las partículas pero sin efectuarse una sinterización.

Wong y Pask (1979), utilizando MgO grado reactivo, realizaron pruebas de sinterización a temperaturas de 1280, 1330, 180, 1500 y 1600 °C. Para las tres primeras temperaturas, la etapa inicial superó los 100 minutos, encontrándose que la porosidad, para el mejor de los casos no es menor a 45%. Para las pruebas a 1500 y 1600 °C la duración de la etapa es menor a 10 minutos, aunque no informan el tiempo exacto señalan que el porcentaje de porosidad al final de esas corridas es de 75% y 23% respectivamente.

Nan (1989) encontró experimentalmente, para cristales 12 veces menores en tamaño que los utilizados por los investigadores mencionados anteriormente, que a una temperatura de 880 °C la etapa inicial sucede en aproximadamente 3 minutos, esta discrepancia respecto a la investigación de Wong y Pask se debe al tamaño inicial de partícula.

En la etapa intermedia se desarrolla un proceso lento, Wong y Pask (1979) consideran que esta etapa finaliza cuando se alcanza el 25% en porosidad. En esta etapa los poros se cierran como resultado del crecimiento del grano por migración de límites de grano.

En la etapa final tiene lugar el crecimiento del grano cuya fuerza motriz es la reducción en el área superficial de límites de grano, en esta etapa el transporte de materia se incrementa por difusión a través del límite de grano transformando la porosidad abierta en porosidad cerrada, ya sea intergranular o intragranular.

Durante el crecimiento del cristal se supone que los granos desaparecen por cohesión entre sí por efecto del movimiento de límites de grano. La razón a la cual los granos desaparecen es proporcional a la velocidad del límite de grano. Burke (1968) indica que la velocidad a la cual se mueve la frontera de grano es el producto de la movilidad del límite y la fuerza motriz.

Daniels *et al* (1968) obtuvieron tiempos muy variados (100 – 2500 min) para diversos tamaños de grano y para temperaturas en un rango de (1450 – 1650 °C).

Aunque los modelos propuestos están basados en idealizaciones, la valía de estos modelos radica en predecir la razón de densificación en función del tamaño de partícula.

3.3 Curvas de encogimiento para la densificación del MgO de alta pureza

La pureza química influye en la sinterización del MgO, por lo que Michel (1982) utilizó diversas técnicas analíticas para cuantificar los elementos presentes en el MgO. A continuación se presentan las composiciones obtenidas por Michel y las reportadas por Duncan, del MgO doble calcinado, de alta pureza, destacando que Química del Rey, empresa mexicana que proporcionó las briquetas para el estudio ocupa el segundo lugar a

nivel mundial en alta pureza en este material. Lo anterior se puede apreciar en la tabla 3.1.

| Compuesto | Duncan RY 99AD | Duncan RT99 AD | Michel (1992) |
|--------------------------------|-------------------|-------------------|------------------|
| MgO | 99.01 | NR | 98.91 |
| CaO | 0.7 | 0.7 | 0.71 |
| SiO ₂ | 0.1 | .01 | 0.29 |
| Fe ₂ O ₃ | 0.1 | 0.1 | NR |
| Al ₂ O ₃ | 0.09 | 0.09 | NR |
| B ₂ O ₃ | 0.003 | 0.003 | 0.005 |
| Cr ₂ O ₃ | NR | NR | 0.09 |

Tabla 3.1 Impurezas del MgO

Michel (1992) obtuvo curvas de encogimiento a partir de experimentos en condiciones isotérmicas para temperaturas de sinterización de 1400, 1500, y 1600 °C. En la tabla 3.2 se muestra el tiempo de residencia y la densidad de muestras para cada temperatura de prueba.

| Temperatura °C | Tiempo de residencia min | Densidad aparente g cm ⁻³ |
|-------------------|-----------------------------|---|
| 1400 | 18 | 2.18 |
| 1400 | 37 | 2.37 |
| 1400 | 74 | 2.43 |
| 1400 | 111 | 2.52 |
| 1500 | 20 | 2.45 |
| 1500 | 41 | 2.57 |
| 1500 | 82 | 2.64 |
| 1500 | 128 | 2.8 |
| 1600 | 15 | 2.53 |
| 1600 | 37 | 2.78 |
| 1600 | 71 | 2.85 |
| 1600 | 105 | 2.95 |

Tabla 3.2 Resultados de Michel (1992)

Con la información reportada en la tabla 3.2 se generaron las curvas de encogimiento: densidad en función del tiempo que aparecen en la figura 3.1, sobre los puntos obtenidos experimentalmente se hizo un ajuste logarítmico del que se obtienen buenas predicciones y en el que se fundamentó un ajuste más general para obtener una cinética de sinterización.

Como se puede apreciar en la figura 3.1, la densificación durante los primeros minutos de residencia a alta temperatura es rápida, factiblemente por la coalición entre partículas al reducir el alto valor de área superficial inicial.

En la tabla 3.3 se presentan los valores calculados para la densidad a 60, 90 y 120 minutos, para las temperaturas de prueba lo que da confiabilidad a los resultados del experimento y al tratamiento de los resultados experimentales.

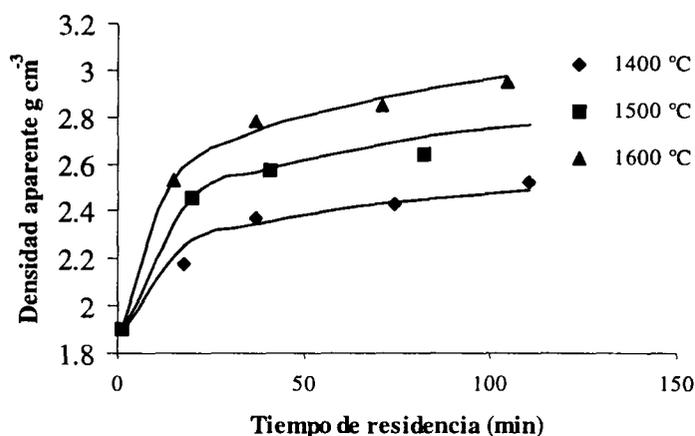


Figura 3.1 Ajuste de los resultados de Michel (1992)

| Temperatura °C | Tiempo min | | |
|-------------------|---------------|------|------|
| | 60 | 90 | 120 |
| 1400 | 2.40 | 2.46 | 2.49 |
| 1500 | 2.65 | 2.72 | 2.77 |
| 1600 | 2.84 | 2.93 | 3.00 |

Tabla 3.3 Valores calculados de densidad

Sinterización de Óxido de Magnesio

Con la información del experimento el modelo se puede generalizar con la finalidad de predecir la densificación a otras temperaturas en sistemas no isotérmicos, en la figura 3.2 se puede observar que la densificación es más lenta conforme se aproxima la temperatura a 1170 °C, por lo que ésta se puede considerar un limite inferior para el material utilizado en la mencionada experimentación. Las curvas presentadas se obtuvieron a partir de una ecuación generalizada cuyos parámetros fueron obtenidos de un ajuste logarítmico.

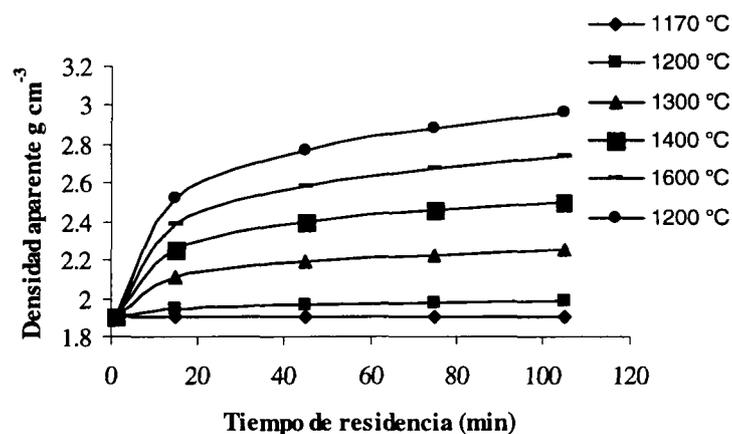


Figura 3.2 Curvas de sinterización

En un capítulo posterior se mostrará la expresión que fue obtenida para describir la densificación de las briquetas de óxido de magnesio en función del tiempo de residencia y de la temperatura.

4. Transferencia de Calor en Lechos Empacados

La transferencia de calor es el fenómeno que ejerce mayor influencia en los sistemas en los que la materia se transforma física o químicamente, lo que hace relevante una selección adecuada de la forma de predecir los parámetros que describen los mecanismos del transporte de energía térmica.

Los mecanismos que conforman la transferencia de calor en lechos empacados han sido ampliamente estudiados y se han obtenido numerosas correlaciones que permiten describir dichos mecanismos. Estos estudios se han realizado en empacados de dimensiones propias de los reactores tubulares ya que es la principal aplicación de este tipo de investigaciones. Por lo que un éxito del presente trabajo permitirá ampliar las expectativas de aplicación de estudios ya realizados y por ende el estudio y análisis de otros sistemas.

4.1 Mecanismos de transferencia de calor en lechos empacados

En los procesos que se llevan a cabo en lechos empacados la transferencia de calor es uno de los fenómenos más importantes, la manera de predecir su mecanismo es bastante incierta debido a la vasta información de las investigaciones publicadas, basadas en diferentes modelos, suposiciones, simplificaciones, condiciones experimentales, etc. En ocasiones se desprecian algunos fenómenos que influyen notablemente sobre el sistema bajo estudio (por ejemplo, la omisión de la dispersión axial, (Gunn y Khalid, 1975)). En otros casos el modelo propuesto no es adecuado para representar los datos experimentales, lo que invalida cualquier predicción o análisis posterior (Gunn, 1987).

Las dificultades a superar en la modelación de la transferencia de calor en lechos empacados es atribuida a la naturaleza heterogénea del sistema. Esto se refleja en las marcadas diferencias en las características y propiedades de las fases, lo que repercute también en diferencias en la forma de responder a cambios externos y por lo tanto se reflejan en la resolución del modelo.

En la sinterización de MgO es importante conocer el perfil de temperatura en el horno para predecir o conocer la variación de la densidad de las briquetas conforme pasan por el horno y además para verificar como afectan las condiciones de la combustión. Por lo que la modelación de los mecanismos de transferencia de calor involucra una representación matemática de un lecho empacado.

Las contribuciones significantes a la transferencia de calor en lechos empacados operando no adiabáticamente pueden enlistarse de la siguiente manera (Feyo de Azevedo *et al*, 1990):

- (a) Conducción térmica a través de las partículas sólidas.
- (b) Conducción térmica a través de la superficie de contacto de dos partículas adyacentes.
- (c) Conducción térmica a través de la película de gas alrededor de la superficie de contacto de dos partículas.
- (d) Radiación partícula a partícula.
- (e) Conducción térmica con el gas.
- (f) Dispersión térmica del gas.
- (g) Radiación entre corrientes de gases adyacentes.
- (h) Convección sólido – fluido.
- (i) Convección del fluido a la pared de la cama.
- (j) Conducción entre las partículas y las paredes.
- (k) Radiación entre las partículas y la pared.
- (l) Transferencia de calor entre la pared y los alrededores.

En los fenómenos (a) y (b) se considera que contribuye la conductividad efectiva del sólido manifestando un comportamiento isotrópico. El fenómeno (f) ocurre en las direcciones axial y radial junto con los fenómenos (e) y (g) las cuales constituyen la descripción mecánica de la transferencia de calor a través del fluido. Los fenómenos (i) a (k) describen el intercambio de calor entre el empacado y la pared de la cama.

Es obvio que los diferentes fenómenos antes enumerados suceden simultáneamente en las distintas direcciones, en serie o en paralelo. El fenómeno (h) debe combinarse con la radiación interparticular y la conducción en obediencia al modelo de calor transferido de una partícula al fluido. Esos fenómenos pueden interactuar con otros y es lo que hace difícil correlacionar los parámetros de transferencia de calor y analizar los datos experimentales en este campo.

Los modelos matemáticos normalmente empleados para el análisis de datos experimentales de transferencia de calor provienen de la representación pseudo-homogénea (una fase) y del modelo heterogéneo (dos fases). Si las variaciones de la temperatura en ambas direcciones, radial y axial, son tomadas en cuenta, entonces el modelo de una fase es caracterizado por una conductividad térmica efectiva radial (k_r), y por un coeficiente aparente de transferencia de calor de pared (h_w) y –si la dispersión axial es tomada en cuenta- una conductividad térmica efectiva axial (k_a). Las ecuaciones del modelo pseudo - homogéneo son descritas a detalle posteriormente.

En el caso del modelo heterogéneo y aplicando la condición de frontera en la pared para la fase sólida similar a la empleada para el fluido, los parámetros característicos son:

- (a) El coeficiente de transferencia de calor fluido – sólido (h).
- (b) El coeficiente de transferencia de calor fluido – pared (h_{wf}).
- (c) El coeficiente de transferencia de calor sólido –pared (h_{ws}).
- (d) Las conductividades axial y radial del fluido para el modelo de dos fases (k_{af} , k_{rf}).

- (e) Las conductividades axial y radial del fluido para el modelo de dos fases (k_{sf} , k_{rs}).

Debe ser remarcado que los parámetros involucrados en (d) y (e) para el modelo heterogéneo son mecanismos “efectivos” superpuestos en el transporte global (normalmente flujo tapón), mientras que los involucrados en el modelo pseudo – homogéneo (k_r , k_a) concentran ambos conceptos “efectivos” de transporte incurriendo en errores por la consideración de la existencia de una sola fase, para lo que es en realidad un sistema de dos fases.

En los siguientes apartados, cada uno de esos parámetros es discutido y las correlaciones disponibles en la literatura para su predicción son presentadas.

4.2 Parámetros característicos del modelo pseudo - homogéneo

4.2.1 Conductividad térmica efectiva radial

Cuando la conductividad efectiva (k_r)_o es determinada a partir de los experimentos de transferencia de calor en lechos empacados se ha observado que disminuye marcadamente en las proximidades de la pared, como si se presentara una resistencia adicional, probablemente por las variaciones de la densidad del empacado y de la velocidad del flujo. Dos formas de representar la situación anterior (Froment and Bischoff, 1990), consisten en usar un valor promedio de (k_r)_o o considerar que es constante en la parte central del lecho e introducir un nuevo coeficiente que considere la transferencia de calor cerca de la pared (h_w)_o definido como una consecuencia de la condición de frontera

$$h_w(T - T_w) = -k_r \left(\frac{\partial T}{\partial r} \right)_{r_w} \quad (4.1)$$

Esta última opción es la más utilizada con lo que se involucran dos parámetros para describir la transferencia de calor en la dirección radial.

Por otra parte el trabajo precursor de Singer y Wilhelm (1950) consistió en agrupar la transferencia de calor radial en términos de fases, en trabajos posteriores lo anterior fue representado en contribuciones por efectos estáticos y dinámicos en una sola fase global. Esto descrito por varios grupos de investigadores [Coberly y Marshall (1951), Claderbank y Pogorsky (1957), Yagi y Kunii (1957), Yagi y Wakao (1959), De Wasch y Froment (1972)] quienes encontraron una marcada dependencia lineal entre la conductividad térmica efectiva radial y el número de Reynolds basado en la partícula, lo que sugiere una interpretación por contribuciones estática y dinámica

$$(k_r)_o = (k_r^o)_o + (k_r^d)_o \quad (4.2)$$

Contribución estática

Para el efecto estático $(k_r^o)_o$, Yagi y Kunii (1957) y Kunii y Smith (1960) realizaron una destacada aportación por asumir que las partículas están rodeadas por una película estacionaria de fluido y que la transferencia de calor ocurre a través de la mencionada película en los espacios vacíos de la cama y a través de la fase sólida. La expresión propuesta por Kunii y Smith es:

$$\frac{k_r^o}{k_f} = \varepsilon \left[1 + \frac{h_{rv} d_p}{k_f} \right] + \left[\frac{(1-\varepsilon)}{1} \right] \left[\frac{d_p}{l_v} + \frac{d_p h_{rs}}{k_f} + \frac{2}{3\kappa} \right] \quad (4.3)$$

donde

$$h_{rs} = 2.27E-07 \frac{e}{2-e} T^3 \quad (4.4)$$

$$h_{rv} = 2.27E - 07 \left[1 + \frac{\varepsilon}{2(1-\varepsilon)} \frac{1-e}{e} \right]^{-1} T^3 \quad (4.5)$$

$$\phi = l_v/d_p = \begin{cases} \phi_1 & \varepsilon < 0.26 \\ \phi_2 + (\phi_1 - \phi_2) \frac{\varepsilon - 0.26}{0.216} & 0.26 < \varepsilon < 0.476 \\ \phi_2 & \varepsilon > 0.476 \end{cases} \quad (4.6)$$

$$\phi_1 = \frac{0.333(1 - 1/\kappa)^2}{\ln\{\kappa - 0.577(\kappa - 1) - 0.423(1 - 1/\kappa)\}} - \frac{2}{3\kappa} \quad (4.7)$$

$$\phi_2 = \frac{0.072(1 - 1/\kappa)^2}{\ln\{\kappa - 0.925(\kappa - 1) - 0.075(1 - 1/\kappa)\}} - \frac{2}{3\kappa} \quad (4.8)$$

$$\kappa = k_s/k_f \quad (4.9)$$

Como ε es utilizado como un indicador del estado del empacado, un valor local indica un estado local y por consiguiente un valor local de k_r^o , mientras que un valor promedio de ε proporciona la conductividad estática promedio del lecho. Esta formulación fue identificada como “paralelo – serie” por Kulkarni y Doraiswamy (1980), en contraste con el modelo de “contribución aditiva” en el que se propone que las contribuciones por conducción, convección y radiación al efecto estático deben ser sumadas. Sin embargo, el procedimiento geométrico de Zehner y Schlünder (1972) y Bauer y Schlünder (1978) ofrece mejores predicciones (Feyo de Azevedo, 1982). La correlación de Zehner y Schlünder es la siguiente

$$\frac{k_r^o}{k_f} = \left[1 - (1 - \varepsilon)^{0.5} \right] + (1 - \varepsilon)^{0.5} \frac{2}{1 - B/\kappa} \left[\frac{(1 - 1/\kappa)B}{(1 - B/\kappa)} \ln(\kappa/B) - \frac{B+1}{2} - \frac{B-1}{1 - B/\kappa} \right] + \left[1 - (1 - \varepsilon)^{0.5} \right] \frac{k_{rad}}{k_f} + (1 - \varepsilon)^{0.5} \left[\frac{k_f}{k_{rad}} + \frac{1}{\kappa} \right] \quad (4.10)$$

$$\frac{k_{rad}}{k_f} = 2.27E - 07 \left[\frac{e}{2 - e} \right] T^3 \frac{d_p}{k_f} \quad (4.11)$$

$$B = C \left[\frac{\varepsilon}{1 - \varepsilon} \right]^{10/9} \quad (4.12)$$

con $C = 1.25$ para esferas, $C = 1.4$ para partículas trituradas y $C = 2.5$ para cilindros.

Hsu, Cheng y Wong (1994) propusieron modificaciones a la correlación anterior con el fin de obtener mejores predicciones de la contribución estática a la conductividad térmica radial, logrando una mejor aproximación con los datos experimentales que el modelo original de Zehner y Schlünder, especialmente para grandes diferencias entre conductividades térmicas sólido/fluido. Una de las modificaciones considera las áreas de contacto finito entre las partículas, la cual es importante para $k_s/k_f > 10^3$ en una cama empacada. Con un factor de deformación de $\sigma = 0.002$ y una porosidad de $\varepsilon = 0.42$, los resultados del modelo de área de contacto están en concordancia con los datos experimentales para un amplio rango de razones de conductividades térmicas sólido/fluido.

La correlación modificada de Zehner y Schlünder es

$$\frac{k_r''}{k_f} = \left[1 - (1 - \varepsilon)^{0.5} \right] + \frac{(1 - \varepsilon)^{0.5}}{\kappa} \left(1 - \frac{1}{(1 + \sigma B)^2} \right) + \frac{2(1 - \varepsilon)^{0.5}}{(1 - \kappa B + (1 - \kappa)\sigma B)^x} \left(\frac{(1 - \kappa)(1 + \sigma)B}{(1 - \kappa B + (1 - \kappa)\sigma B)^2} \ln \frac{1 + \alpha B}{(1 + \sigma)B\kappa} - \frac{B + 1 + 2\alpha B}{2(1 + \sigma B)^2} - \frac{(B - 1)}{(1 - \kappa B + (1 - \kappa)\sigma B)(1 + \sigma B)} \right) \quad (4.13)$$

Melanson y Dixon (1985) probaron las correlaciones de Kunii y Smith (1960) y de Zehner y Schlünder (1972) para sistemas con bajas relaciones de diámetro de tubo respecto a diámetro de partícula ($3 < d_t/d_p < 12$) y concluyeron que a pesar de las limitaciones sobre la fracción de huecos y de la falta de ajustes para diferentes formas de partículas la ecuación de Kunii y Smith es confiable por tener bajas tendencias a subestimaciones para bajas conductividades.

La contribución dinámica

La contribución dinámica k_r^d proviene únicamente del transporte en el fluido y corresponde con el mezclado que es descrito por la difusión efectiva en la dirección radial. En este caso la propuesta ha sido utilizar la analogía con la transferencia de masa, por ejemplo, utilizar una función de potencias de los números de Reynolds y Prandtl [Coberly y Marshall (1951), Plautz y Johnstone (1955), Calderbank y Pogorski (1975), Yagi y Wakao (1959), Kunii *et al* (1968), Olbrich y Potter (1972)]. De Wasch y Froment (1972) utilizaron amplia información experimental para proponer una versión modificada en la que involucran la razón de diámetro de partícula respecto al diámetro del tubo

$$\frac{(k_r^d)_o}{k_f} = \frac{0.14 \text{ Pr Re}}{1 + 46(d_p/d_t)^2} \quad (4.14)$$

Otras correlaciones

Specchia *et al* (1980) han analizado ecuaciones propuestas por Kunii y Smith utilizando datos de trece investigadores cubriendo un rango amplio de condiciones y sugirieron la inclusión de un factor $\varepsilon/1.5$ (en base a una analogía con la transferencia de masa debida a Gunn (1968)) lo cual expresa la contribución estática en la fase fluida cuando el número de Reynolds se aproxima a cero. La relación propuesta por Specchia *et al* es

$$(k_r)_o = k_f \left[\frac{\varepsilon}{1.5} + \frac{(1-\varepsilon)}{\frac{1}{d_p/l_v + d_p h_{rs}/k_f} + \frac{2}{3\kappa}} \right] + \frac{GCpd_p}{Pe_{\infty}} \quad (4.15)$$

donde Pe_{∞} representa el valor asintótico del número de Peclet del fluido cuando el número de Reynolds tiende a infinito. Obsérvese que las expresiones (4.13) y (4.14) no incluyen los efectos de transferencia de calor por radiación debido a que los investigadores analizaron datos de experimentos realizados a bajas temperaturas.

A pesar de su amplio uso durante décadas, la propuesta de Argo y Smith (1953) brinda información utilitaria que permite ser extrapolada al análisis de modelos heterogéneos. La razón total de flujo de calor es concebida como la suma de las velocidades a través de los huecos y a través de los sólidos. El calor que pasa a través de los espacios vacíos es representado como un fenómeno de resistencia en paralelo, involucrando conducción molecular, difusión turbulenta y radiación. Los procesos mediante los que el calor es transferido en las partículas son radiación, convección de la corriente de gas y conducción a través de los puntos de contacto entre las partículas y las zonas estacionarias de gas. La representación global está dada por

$$k_r = \varepsilon(k_f + k_r^d + k_{rad}) + (1 - \varepsilon) \frac{h_{fs} k_s d_p}{2k_s + h_{fs} d_p} \quad (4.16)$$

$$h_{fs} = h_c + h_{rad} + h_p \quad (4.17)$$

h_{fs} es un coeficiente de transferencia de calor fluido-partícula el cual incluye la convección del fluido (h_c), la contribución del transporte de calor por radiación entre partículas adyacentes (h_{rad}) y la contribución de la conducción de las partículas en contacto (h_p).

Dixon y Cresswell (1979) propusieron una teoría que predice las conductividades térmicas efectivas axiales y radiales y el coeficiente aparente de transferencia de calor a partir de procesos esenciales e independientes, identificados en modelos de dos fases. Posteriormente, Dixon (1985) generalizó y extendió esta teoría para proporcionar una interpretación física de la relación entre los parámetros encontrados anteriormente, demostrando que la formulación corresponde con modelos de resistencias para transferencia de calor en lechos empacados. En esencia, la teoría de Dixon y Cresswell expresa una íntima relación entre la conductividad térmica efectiva radial (número de Peclet efectivo radial) y el coeficiente aparente de transferencia de calor de pared (números de Biot de las fases sólida y fluida). La ecuación propuesta es, para altos números de Reynolds ($Re > 100$):

$$\frac{(k_r)_o}{k_f} = \frac{(k_{rf})_o}{k_f} + \frac{(k_{rs})_o}{k_f} \left[\frac{(Bi_f)_o + 4}{(Bi_f)_o} \right] \left[\frac{8}{(N_s)_o} + \frac{(Bi_s)_o + 4}{(Bi_s)_o} \right]^{-1} \quad (4.18)$$

y para bajos números de Reynolds ($Re < 100$)

$$\frac{(k_r)_o}{k_f} = \frac{(k_{rs})_o}{k_f} + \frac{(k_{rf})_o}{k_f} \left[\frac{(Bi_s)_o + 4}{(Bi_s)_o} \right] \left[\frac{8}{(N_f)_o} + \frac{(Bi_f)_o + 4}{(Bi_f)_o} \right]^{-1} \quad (4.19)$$

donde

$$(N_s)_o = \frac{(h)_o a_v R^2}{(k_{rs})_o} \quad (4.20)$$

$$(N_f)_o = \frac{(h)_o a_v R^2}{(k_{rf})_o} \quad (4.21)$$

$$(Bi_s)_o = \frac{(h_{ws})_o R}{(k_{rs})_o} \quad (4.22)$$

$$(Bi_f)_o = \frac{(h_{wf})_o R}{(k_{rf})_o} \quad (4.23)$$

Dixon y Cresswell (1986) extendieron su teoría (desarrollada bajo la suposición de condiciones de estado estacionario) para situaciones de operación en estado no estable.

4.2.2 Coeficiente aparente de transferencia de calor de pared

Casi sin excepción este coeficiente es predicho por correlaciones empíricas propuestas por varios investigadores con fundamento en su trabajo experimental. Por consecuencia tales predicciones están en pocas ocasiones en concordancia ya que cada

investigador usa distintos modelos y suposiciones. Esas publicaciones son referidas a experimentaciones a bajas temperaturas en las que la transferencia de calor por radiación no es significativa. Una de las dos representaciones más importantes de este parámetro es en la que se le estima como un parámetro hidrodinámico y en la otra representación se hace referencia a las contribuciones estática y dinámica.

Las contribuciones estática y dinámica

Yagi y Kunii (1960) y Kunii *et al* (1968) emplearon un enfoque similar al aplicado por ellos mismos en ocasiones anteriores de la conductividad térmica efectiva,

$$(Nu_w)_o = a + b Re^c \quad (4.24)$$

donde

$$(Nu_w)_o = \frac{(h_w)_o d_p}{k_f} \quad (4.25)$$

El factor b incluye en general las contribuciones del número de Prandtl.

Specchia *et al* (1980) siguieron una propuesta con la derivación de una expresión fundamentada en el trabajo experimental de nueve investigadores que explícitamente incluyeron las contribuciones estática y dinámica

$$(h_w)_o = (h_w^o)_o + (h_w^d)_o \quad (4.26)$$

Las ecuaciones correspondientes con $(h_w^o)_o$ y $(h_w^d)_o$ fueron obtenidas por medio de una regresión no lineal, las correlaciones son las siguientes

$$\frac{(h_w^o)_o d_p^*}{k_f} = 2\varepsilon + \frac{(1-\varepsilon)}{(1/3)(k_f/k_s) + 0.0024(d_t/d_p^*)^{1.58}} \quad (4.27)$$

$$\frac{(h_w^d)_o d_p^*}{k_f} = 0.0835 \text{Re}^{0.91} \quad 10 \leq \text{Re} \leq 1200 \quad (4.28)$$

$$1200 \leq \text{Re} \leq 10^5 \quad (4.29)$$

donde d_p^* es el diámetro de una esfera cuyo volumen es el mismo de la partícula del empacado.

De Wasch y Froment (1972) propusieron una estructura similar basada en los datos experimentales que consideraron con el grado de precisión requerido para situaciones rigurosas en reactores. Dichos experimentos fueron ejecutados utilizando varios tipos de catalizadores industriales. Su correlación para aire es

$$(h_w)_o = (h_w^o)_o + 0.0481(d_t/d_p) \text{Re} \quad (4.30)$$

donde $(h_w^o)_o$ depende el tamaño y del tipo del catalizador y puede ser aproximada a partir del conocimiento de la conductividad térmica estática como

$$(h_w^o)_o = 20(k_r^o)_o/d_t \quad (4.31)$$

Análisis hidrodinámico

El coeficiente aparente de transferencia de calor de pared basado exclusivamente en la hidrodinámica fue ampliamente utilizado de acuerdo con las revisiones de Li y Finlayson (1977) y de Kulkarni y Doraiswamy (1980).

Li y Finlayson (1980) correlacionaron un arreglo de datos seleccionados rigurosamente en términos del número de Nusselt. La mejor correlación para empaado esférico (con un error promedio de 14 %) fue

$$(Nu_w)_o = 0.07 Re^{0.79} \quad (4.32)$$

para $0.05 \leq d_p/d_t \leq 0.3$ y $20 \leq Re \leq 7600$. Resultados similares fueron obtenidos para empaados cilíndricos (con un error promedio de 33%),

$$(Nu_w)_o = 0.16 Re^{0.93} \quad (4.33)$$

para $0.03 \leq d_p/d_t \leq 0.2$ y $20 \leq Re \leq 800$.

Dixon y Cresswell (1979) han demostrado que si el coeficiente de transferencia de calor de pared es correlacionado en términos del número de Biot en vez del número de Nusselt (esto último lo más habitual), una relación única con el número de Reynolds debe ocurrir la cuál es independiente del tamaño de la partícula y el fluido o la conductividad de la partícula. La relación propuesta es

$$(Bi)_o = 3 \frac{R}{d_p} Re^{-0.25} \quad (4.34)$$

para $Re > 40$ y $(Bi)_o = (h_w)_o R / (k_r)_o$. (4.35)

Paterson y Carberry (1983) utilizaron los datos experimentales de Dixon *et al* (1978) y de Dixon (1978) para generar una correlación para el número de Nusselt para la transferencia de calor en la pared:

$$(Nu_w)_o = 11.46 \left(\frac{d_p}{d_t} \right)^{0.5} \frac{\text{Pr}(0.11Re + 20.46)}{Re^{0.262}} \quad (4.36)$$

la cual muestra concordancia con los estudios recientes de transferencia de masa en la pared.

Dixon *et al* (1984) demostraron que la propuesta de Specchia es correcta sólo en sistemas en los que existe una proporción alta entre los diámetros del tubo y la partícula. Estos investigadores efectuaron experimentos de transferencia de masa en camas empacadas con una razón pequeña d_p/d_t (entre 3 y 12) y correlacionaron el número de Sherwood como una función de los números de Reynolds y Schmidt. Así, por la analogía de transferencia de calor y masa se tiene

$$(Nu_w)_o = \left[1 - 1.5 \left(\frac{d_t}{d_p} \right)^{-1.5} \right] Pr^{1/3} Re^{0.6} \quad (4.37)$$

Los resultados coincidieron con experimentos electroquímicos efectuados por los mismos investigadores, y con los datos obtenidos directamente de los experimentos de transferencia de calor.

4.2.3 Conductividad térmica axial efectiva

Las correlaciones para predecir la conductividad térmica axial efectiva $(k_a)_o$ son muy escasas en comparación con la abundancia de datos disponibles para la determinación de $(k_r)_o$. Esto refleja la amplia creencia de tener un significado poco considerable en la modelación en estado estacionario. Sin embargo, la evidencia se ha incrementado [Gunn y De Souza (1974), Gunn y Khalid (1975), Bovin *et al* (1983), Dixon y Cresswell (1986)] de la importancia de su inclusión, particularmente para la simulación y modelación en el estado no estable.

Yagi *et al* (1960) propusieron una relación empírica similar a la propuesta estática/dinámica utilizada para la conductividad térmica efectiva radial,

$$\frac{(k_a)_o}{k_f} = \frac{(k_a^o)_o}{k_f} + \delta \text{RePr} \quad (4.38)$$

con $0.7 < \delta < 0.8$ para $2 < \text{Re} < 55$. Bischoff (1962) desarrolló un método para estimar los valores de la conductividad térmica axial de datos existentes para la conductividad térmica radial. Votruba *et al* (1972) presentaron una correlación para diferentes materiales, tamaños de partícula, relaciones de diámetro de tubo a diámetro de partícula y huecos de la cama

$$\frac{1}{(\text{Pe}_a)_o} = \frac{1}{\text{RePr}} \frac{(k_a^o)_o}{k_f} + \frac{14.5}{d_p \left[1 + \frac{C}{\text{RePr}} \right]} \quad (4.39)$$

donde C es una constante que depende de las características del sistema.

Gunn y De Souza (1974) estudiaron la respuesta a la frecuencia térmica de las camas empacadas en el rango de números de Reynolds de 0.05 a 330 empleando partículas metálicas y de vidrio, concluyendo que la omisión del término de la dispersión axial explica diferencias sustanciales observadas en los estimados del número de Nusselt de pared obtenido por otros investigadores, particularmente a bajos números de Reynolds. Esta observación fue confirmada por Gunn y Khalid (1975), quien calculó los coeficientes de dispersión axial y radial y el coeficiente de transferencia de calor de pared de mediciones experimentales de perfiles de temperatura radial en lechos empacados calentados en la pared, utilizando partículas metálicas y de vidrio de diferentes tamaños para números de Reynolds en el rango de 1 a 400.

Specchia y Sicardi (1980) modificaron la propuesta de Yagi por inclusión de un término para la contribución estática en la fase fluida para el caso cuando el número de Reynolds tiende a cero, de forma similar a la intervención de Specchia *et al* (1980) para el caso de $(k_r)_o$. Specchia y Sicardi representaron los datos experimentales de Yagi *et al*

(1960), Kunii y Smith (1961), Gunn y De Souza (1974) y Gunn y Khalid (1975) con la correlación empírica

$$\frac{(k_a)_o}{k_f} = \frac{\varepsilon}{1.5} + \frac{(1-\varepsilon)}{0.312\varepsilon^{2.32} + \frac{2}{3\kappa}} \quad (4.40)$$

De su trabajo sobre ambas conductividades térmicas efectivas, axial y radial, Specchia y Sicardi observaron que los valores de ambos parámetros eran aproximadamente los mismos (con diferencias máximas de 18%), sugiriendo que se puede hablar de un mismo valor para ambos parámetros.

Wakao y Kaguei (1982), por uso de la analogía de calor – masa, recomendaron el uso de la siguiente correlación

$$\frac{(k_a)_o}{k_f} = \frac{(k_a^o)_o}{k_f} + 0.5 \text{Re Pr} \quad (4.41)$$

Dixon y Cresswell (1979) derivaron una correlación para predecir la conductividad efectiva axial haciendo uso de un análisis de perturbación-colocación de las ecuaciones de los modelos de una y de dos fases. Posteriormente Dixon (1985) extendió el análisis al hacer uso de una interpretación física para $(k_r)_o$ pero falló al producir un modelo similar en términos de resistencia para $(k_a)_o$ y argumentó que podría deberse al haber despreciado la conducción axial en la fase sólida. Sin embargo, Dixon (1985) derivó una ecuación diferente al asumir una igualdad en las temperaturas del sólido y del fluido (lo que es observado en varias situaciones),

$$(k_a)_o = (k_{af})_o + (k_{as})_o \quad (4.42)$$

Vortmeyer y Berninger (1982,1983) [basados en una teoría desarrollada previamente por Vortmeyer y Schaefer (1974)] argumentaron que un término adicional

era necesario para considerar el efecto de dispersión causado por los procesos de transferencia de calor en el modelo de dos fases, particularmente a altos números de Reynolds, la correlación está dada por

$$(k_a)_o = (k_{af})_o + (k_{as})_o + \frac{G^2 C_p^2}{a_v h} \quad (4.43)$$

Vortmeyer y Adam (1984) propusieron una correlación para flujos pequeños de gas basada no sólo en el número de Reynolds, sino empleando también el diámetro de partícula como una variable de la correlación para diferentes materiales y gases. La correlación es la siguiente

$$\frac{(k_a)_o}{k_f} = \frac{(k_a^o)_f}{k_f} + \frac{k_1 \text{Pr Re}/d_p}{1 + \mu_f k_2 \text{Re}/d_p} \quad (4.44)$$

donde k_1 y k_2 son constantes que dependen del tipo de material utilizado para el empacado.

4.3 Parámetros característicos del modelo heterogéneo

Como se mencionó previamente, siete parámetros se involucran en el transporte de calor en el modelo heterogéneo, de los que cinco se presentan en las ecuaciones diferenciales parciales que describen el balance de energía (k_{rf} , k_{rs} , k_{af} , k_{as} , h) y los otros dos (h_{wf} , h_{ws}) aparecen en las condiciones de frontera en la condición radial en la pared. Los siete parámetros pueden ser identificados formalmente por inspección de las ecuaciones que describen el modelo heterogéneo y relacionados con las condiciones de frontera. A continuación se presenta una breve discusión de las correlaciones disponibles para su predicción.

4.3.1 Conductividades térmicas efectivas radial y axial del sólido

Las publicaciones de Kunii y Smith (1961), Willhite *et al* (1962) y Littman y Silva (1970) mostraron que estos parámetros pueden ser evaluados de correlaciones disponibles para lechos fijos, y en particular, $k_{rs} = k_{as}$. El valor actual de la conductividad del “estancado” puede ser determinada de la parte “estática” de la conductividad térmica efectiva del modelo pseudo-homogéneo, por ejemplo la ecuación (4.3) debida a Kunii y Smith (1960) o por empleo de la ecuación (4.10) debida a Zehner y Schlünder (1972).

4.3.2 Conductividad térmica radial del fluido

Este parámetro puede ser estimado de las experimentos de mezclado radial [Fahien y Smith (1955), Roemer *et al* (1962), Gunn y Pryce (1969)]. Gunn (1987), por uso de un modelo estocástico para dispersión en camas empacadas y la teoría de probabilidad para incorporar la influencia de los fenómenos de convección y difusión, sugirió la relación

$$\frac{1}{(Pe_{rf})_0} = \frac{1}{Pe_{r\infty}} + \frac{\epsilon}{\tau Re Pr} \quad (4.45)$$

donde $Pe_{r\infty}$ es el número de Peclet obtenido en el límite de la turbulencia $Re \rightarrow \infty$ y τ es el factor de tortuosidad. Estos valores pueden ser encontrados a partir de las siguientes expresiones:

$$Pe_{r\infty} = 40 - 29 \exp(-7/Re), \tau = 1.2 \quad (4.46)$$

$$Pe_{r\infty} = 11 - 4 \exp(-7/Re), \tau = 1.93 \quad (4.47)$$

$$Pe_{r\infty} = 9 - 3.3 \exp(-7/Re), \tau = 1.8 \quad (4.48)$$

para esferas, cilindros sólidos y cilindros huecos respectivamente. Estas ecuaciones representan con precisión el comportamiento observado del $(Pe_{rf})_0$ en función de Re .

Otra forma de estimar este parámetro surgió de los experimentos de mezclado radial (Fahien y Smith, 1955; Roemer y *et al*, 1962; Gunn y Pryce, 1969). Gunn y Pryce sugirieron la siguiente correlación

$$\frac{1}{(Pe_{rf})_o} = \frac{1}{Pe_{\infty}} + \frac{2/3\epsilon}{Re Pr} \quad (4.49)$$

Para la anterior correlación Gunn encontró un valor constante de $Pe_{RF}(\infty) = 11$, independiente de la razón (d_t/d_p). Sin embargo, Fahien y Smith, Roemer *et al* y posteriormente Olbrich y Potter (1972) correlacionaron $Pe_{RF}(\infty)$ con (d_t/d_p) de acuerdo a

$$Pe_{RF}(\infty) = A[1 + 19.4(d_p/d_t)^2] \quad (4.50)$$

donde A toma valores entre 7 y 10.

Una revisión de los datos de Fahien y Smith revela que $Pe_{RF}(\infty)$ fluctúa en el rango de 8 a 10. En general, el mejor valor promedio a considerar es

$$Pe_{RF}(\infty) = 10 \quad (4.51)$$

4.3.3 Conductividad térmica axial del fluido

Edwards y Richardson (1968) propusieron una relación que describe adecuadamente lechos de diámetros grandes en las que los efectos de pared pueden ser despreciados

$$\frac{1}{(Pe_a)_o} = \frac{0.5}{1 + \frac{9.7\epsilon}{Re Pr}} + \frac{0.73\epsilon}{Re Pr} \quad (4.52)$$

esta correlación predice un valor asintótico de 2 cuando $Re \rightarrow \infty$.

Gunn (1978) basado en sus datos experimentales y en el de investigaciones previas, derivó una expresión para la transferencia de calor y masa fluido – partícula que presenta un comportamiento asintótico correcto

$$N_T = (7 - 10\varepsilon + 5\varepsilon^2) \left(1 + 0.7 \text{Re}^{0.2} M_T^{1/3} \right) + (1.33 - 2.4\varepsilon + 1.2\varepsilon^2) \text{Re}^{0.7} M_T^{1/3} \quad (4.58)$$

donde M_T es el número de Prandtl cuando N_T es el número de Nusselt (para transferencia de calor), y M_T es el número de Schmidt cuando N_T es el número de Sherwood (para transferencia de masa). La correlación es válida en el rango de fracción de huecos de 0.3 a 1.0 y para números de Reynolds no mayores a 10^5 .

Wakao y Funazkri, Wakao *et al* y Wakao y Kaguei han presentado una revisión detallada de correlaciones para la estimación de coeficientes de transferencia de calor y masa fluido-partícula. Wakao *et al* establecieron criterios para discriminar entre mediciones experimentales previas de varios investigadores, y corrigieron algunos de los números de Nusselt y Sherwood por medio de la inclusión de un término para la dispersión axial. Su expresión final es independiente de la fracción de huecos del empacado y es aplicable para números de Reynolds de hasta 10^4 . La expresión que propusieron es la siguiente:

$$N_T = 2 + 1.1 \text{Re}^{0.6} M_T^{1/3} \quad (4.59)$$

donde M_T y N_T tienen el mismo significado que en la ecuación (4.50).

Gunn y Wakao emplearon en trabajos independientes, el modelo de la partícula para su análisis, por lo tanto los coeficientes fluido-partícula obtenidos con las ecuaciones (4.50) y (4.51) pueden ser considerados puramente convectivos. Sin embargo, según De Wasch y Froment, si el modelo heterogéneo (donde la fase sólida es considerada como un continuo) es utilizado, la temperatura del sólido en un punto particular (z,r) representa alguna temperatura media de las partículas en la vecindad de esa posición. Por tanto el

Gunn (1987) propuso una ecuación basada en un análisis similar al realizado para la ecuación (4.42) que reproduce los datos experimentales para transferencia de masa de Edwards y Richardson y otros investigadores

$$\frac{1}{(Pe_a)_o} = \frac{Re Pr}{4\alpha_1(1-\varepsilon)}(1-p)^2 + \left[\frac{Re Pr}{4\alpha_1(1-\varepsilon)} \right]^2 p(1-p)^3 \left[\exp\left(\frac{-4(1-\varepsilon)\alpha_1^2}{p(1-p)Re Pr} \right) - 1 \right] + \frac{\varepsilon}{\tau Re Pr} \quad (4.53)$$

donde α_1 es la primera raíz de la función de Bessel $J_0(u)$, p es la probabilidad de desplazamiento axial y τ es el factor de tortuosidad. La probabilidad p y la tortuosidad τ pueden ser expresados como

$$p = 0.17 + 0.33 \exp(-24/Re), \tau = 1.40 \quad (4.54)$$

$$p = 0.17 + 0.29 \exp(-24/Re), \tau = 1.93 \quad (4.55)$$

$$p = 0.17 + 0.20 \exp(-24/Re), \tau = 1.80 \quad (4.56)$$

para esferas, cilindros sólidos y cilindros huecos respectivamente. Gunn (1969) derivó una relación entre p y el valor asintótico del número de Peclet axial como

$$Pe_{a\infty} = \frac{2p}{1-p} \quad (4.57)$$

4.3.4 Coeficiente de transferencia de calor fluido – sólido

En el análisis y diseño de lechos empacados es necesario conocer la temperatura en los sólidos y en el fluido, generalmente, la medición de la temperatura de la fase fluida no presenta dificultad mientras que en el caso de la fase sólida las mediciones no son sencillas, por lo tanto una estimación basada en el coeficiente de transferencia de calor entre la partícula y el fluido es comúnmente realizada.

coeficiente de transferencia de calor interfacial (h) debe ser tratado en este último caso como un parámetro que incluye el coeficiente de transferencia de calor de película fluido-sólido y a la conductividad de la partícula (k_s). Esta interpretación fue mostrada por Stuke (1948) por medio de la siguiente expresión:

$$\frac{1}{h} = \frac{1}{h_{fs}} + \frac{d_p}{\beta k_s} \quad (4.60)$$

donde $\beta = 10, 8$ y 6 para esferas, cilindros y fragmentos respectivamente. d_p es el diámetro de la esfera o cilindro o el grosor del trozo. De acuerdo a Argo y Smith, el coeficiente de película total h_{fs} tiene contribuciones del transporte de calor por convección, conducción y radiación en base a la siguiente ecuación:

$$h_{fs} = h_c + h_p + h_r \quad (4.61)$$

El coeficiente convectivo puede ser determinado de correlaciones tales como las descritas por las ecuaciones (4.50) y (4.51). Para la contribución conductiva, Argo y Smith sugieren la siguiente ecuación :

$$h_p = \frac{k_s^* (2k_s + h_{fs} d_p)}{d_p k_s} \quad (4.62)$$

donde k_s^* es un equivalente a la conductividad del sólido dada por:

$$\log k_s^* = -1.52 + 0.00749 \frac{k_s}{\varepsilon} \quad (4.63)$$

Para la contribución de la transferencia de calor por radiación, Argo y Smith proponen

$$h_r = \frac{k_{rad}(2k_s + h_{fs}d_p)}{d_p k_s} \quad (4.64)$$

Combinando las ecuaciones (4.53), (4.54) y (4.56) se obtiene la siguiente ecuación:

$$h_{fs} = \frac{k_s}{d_p} \left(\frac{h_c d_p + 2k_s^* + 2k_{rad}}{k_s - k_s^* - k_{rad}} \right) \quad (4.65)$$

h_{fs} también puede ser obtenido, aunque soslayando la transferencia de calor por radiación, a partir de la correlación propuesta por Handley y Heggs (1968) para $Re > 100$ y $d_t/d_p > 8$

$$\frac{h_{fs}d_p}{k_f} = \frac{0.255}{\varepsilon} Pr^{1/3} Re^{2/3} \quad (4.66)$$

Sin embargo, Hobbs *et al* (1992) han ponderado los efectos de la radiación, dado que las correlaciones como la anterior no consideran dicho fenómeno, obteniendo buenas predicciones en su trabajo sobre gasificadores de coque.

4.3.5 Coeficiente de transferencia de calor fluido pared

La determinación directa de h_{wf} es difícil debido a la transferencia de calor simultánea entre la pared y las partículas en contacto. Sin embargo, considerando la analogía de transferencia de masa y calor, es posible estimar este parámetro con experimentos de transferencia de masa. Varias correlaciones han sido propuestas (Yagi y Wakao, Kunii *et al*, Olbrich y Potter) y, como resultado de la aplicación de la analogía de la transferencia de calor-masa, la siguiente expresión ha sido propuesta:

$$(Nu_{wf})_0 = \frac{(h_{wf})_0 d_p}{k_f} = a Re^b Pr^{1/3} \quad (4.67)$$

Sin embargo, existe una considerable dispersión entre los valores predichos por tales ecuaciones debido a las técnicas experimentales empleadas por los diferentes investigadores (Dixon y Cresswell). Feyo de Azevedo optó por una estimación de los coeficientes a y b por medio de mediciones de temperatura al estado estable basado en una estrategia de estimación de parámetros de doble etapa.

Yagi y Wakao (1959) obtuvieron de la analogía con experimentos de transferencia de masa las siguientes correlaciones

$$\frac{h_{wf} d_p}{k_f} = 0.6 Pr^{1/3} Re^{1/2} \quad (Re \ 1 - 40) \quad (4.68)$$

$$\frac{h_{wf} d_p}{k_f} = 0.2 Pr^{1/3} Re^{4/5} \quad (Re \ 40 - 2,000) \quad (4.69)$$

4.3.6 Coeficiente de transferencia de calor sólido – pared

La transferencia de calor sólido-pared es normalmente descrita por el número de Biot sólido-pared:

$$(Bi_s)_0 = \frac{(h_{ws})_0 d_p}{k_s} \quad (4.70)$$

Sin embargo, es muy difícil predecir el valor de h_{ws} ya que no se dispone de información o teorías publicadas acerca de este parámetro. Un límite inferior para $(h_{ws})_0$ ha sido sugerido por Olbrich para el caso de transferencia de calor entre una pared plana y esferas de un empacado con arreglo hexagonal. De donde derivó la siguiente ecuación

$$(h_{ws})_0 = \frac{2.12(k_{rs})_0}{d_p} \quad (4.71)$$

Odendaal *et al* revisaron algunas correlaciones disponibles (Olbrich, Sullivan y Saberski, Schlünder, Specchia *et al* y Melanson y Dixon) y recomendaron el uso de la descripción de Melanson y Dixon como la formularon Odendaal y Carberry. Tal descripción es la siguiente

$$(Bi_s)_0 = \frac{k_f}{k_s} \left(2.6 \frac{d_t}{d_p} - 5 \right) \quad (4.72)$$

valida para $5 \leq d_t/d_p \leq 10$.

Recientemente, Dixon (1988) analizó los datos experimentales de Melanson y Dixon (1985) y algunas mediciones adicionales y propuso las siguientes expresiones empíricas

$$(Bi_s)_0 = 2.41 + 0.156 \left(\frac{d_t}{d_p} - 1 \right)^2 \quad (4.73)$$

$$(Bi_s)_0 = 0.48 + 0.192 \left(\frac{d_t}{d_p} - 1 \right)^2 \quad (4.74)$$

para esferas y cilindros respectivamente en el rango: $3 \leq d_t/d_p \leq 10$.

Estas expresiones han dado una predicción razonable sobre el rango descrito, pero para $d_t/d_p > 10$ fallan en su predicción. Dixon y Cresswell, han sugerido que cuando la relación d_t/d_p es “significante” es permisible considerar $(Bi_s)_0 \rightarrow \infty$ dado el efecto pequeño de este valor en la conductividad térmica efectiva (ecuaciones 4.17 y 4.18). Por lo tanto fue considerado esencial estimar $(Bi_s)_0$ de datos experimentales.

5. Resolución del Modelo

En la figura 1.1 se esquematiza y describe el horno que se está simulando, es un horno cuya geometría transversal es elíptica por lo que se sugiere una transformación geometría para un mapeo de información y resultados. Esto debido a que los métodos numéricos están ampliamente desarrollados para geometría cilíndrica de sección transversal circular.

Se han utilizado métodos numéricos de colocación ortogonal debido a su robustez y facilidad de implementación, en la resolución se han calculado puntualmente los parámetros efectivos de transferencia de calor y la combustión ha sido representada de una manera simplificada debido a restricciones de tiempo.

Con las anteriores ideas se ha construido un programa que simula el sistema a partir de información de variables de manipulación en la planta.

5.1 Estimación de parámetros de transporte

Los parámetros efectivos de transporte utilizados en los modelos matemáticos que describen la transferencia de calor en lechos empacados engloban las diferentes formas en las que se puede presentar el fenómeno. Los valores de estos parámetros pueden ser calculados a partir de las numerosas correlaciones que distintos grupos de investigadores han obtenido.

Sin embargo, en el presente trabajo se tiene bajo estudio un sistema con características de diseño y condiciones de operación diferente de los sistemas en los que se realizaron experimentos para establecer correlaciones para estimar parámetros efectivos de transporte. Debido a lo anterior debe realizarse una selección cuidadosa de las correlaciones a implementar, poniendo especial atención en algunas omisiones como ignorar algún mecanismo de transferencia de calor, considerar constantes algunas

propiedades las cuales varían notablemente con la temperatura, entre otras situaciones y que pudieran causar desviaciones en los resultados de la simulación respecto a datos de operación (Romero, 1990).

A continuación se describirán brevemente las consideraciones para seleccionar las correlaciones que mejor convienen al modelo del sistema y se podrá apreciar que, efectivamente algunos fenómenos no serán debidamente representados, lo que podrá ser mejorado a través de un ajuste de parámetros.

Los parámetros de transporte involucrados en el modelo heterogéneo de transferencia de calor para describir el comportamiento del horno son: la conductividad térmica efectiva radial para el fluido (k_{rf}) y la conductividad térmica efectiva radial para el sólido (k_{rs}), el coeficiente interfásico de transferencia de calor (h), el coeficiente de transferencia de calor pared-fluido (h_{wf}), el coeficiente de transferencia de calor pared-sólido (h_{ws}).

La conductividad térmica efectiva radial para el fluido (k_{rf}) fue calculada haciendo uso de la ecuación (4.49) que es la correlación sugerida por Gunn y Price (1969) en combinación con la propuesta de Fahien y Smith (1955). Dicha correlación puede ser utilizada sin restricción alguna obteniendo buenas aproximaciones, ha sido ampliamente utilizada por lo que no se tiene dificultad para ser implementada.

La conductividad térmica efectiva radial para el sólido (k_{rs}) fue estimada haciendo uso de la correlación debida a Zehner y Schlünder, la cual ofrece excelentes predicciones, esta correlación, como se ha visto, ha sido mejorada en aspectos como el factor de contacto, sin embargo existen dificultades para implementarla en un trabajo como este, debido al desconocimiento de los nuevos factores incluidos. Esta correlación se encuentra descrita en las ecuaciones (4.10) a (4.12), los fenómenos incluidos en esta correlación la hacen un buen modelo para predecir la conductividad radial del sólido.

Para el cálculo del coeficiente interfásico de transferencia de calor (h) se siguió el modelo propuesto por Stuke en la ecuación (4.60), en donde el coeficiente h_{fs} en otros trabajos ha sido comúnmente calculado a partir de la ecuación (4.65) que es una correlación propuesta por Argo y Smith, muy completa, pues incluye los mecanismos

de transferencia de calor que se pueden presentar en un lecho empacado. Sin embargo en este sistema esa valiosa correlación no pudo ser aplicada debido a las características del empacado en lo referente a la baja conductividad térmica del sólido, lo cual llevaría a valores erróneos (muy cercanos a cero o negativos) del coeficiente para temperaturas elevadas. Lo anterior condujo a estimar el coeficiente h_{fs} a partir de la ecuación (4.66) que es una correlación propuesta por Handley y Heggs usada por Hobbs *et al* en su trabajo sobre gasificadores de coque. En su trabajo se daban temperaturas en donde la transferencia de calor por radiación es un fenómeno predominante que ponderaron de acuerdo a un factor que multiplica al valor estimado del coeficiente y eligieron el mejor factor después de un ajuste de parámetros, dicho factor facilita una idea del verdadero peso que cobra dicho fenómeno.

El coeficiente de transferencia de calor pared-fluido (h_{wf}) fue calculado a partir de la propuesta de Yagi y Wakao (1958) cuya correlación corresponde con la ecuaciones (4.68) y (4.69), estas correlaciones son fáciles de implementar en tanto se cumpla con las condiciones en el número de Reynolds para los que estas correlaciones se encuentran reportadas.

Mientras que para el cálculo del coeficiente de transferencia de calor pared-sólido (h_{ws}) se requiere de más cuidado para la selección de la correlación a utilizar ya que en este aspecto el impacto de la proporción d_i/d_p se incrementa conforme la proporción d_i/d_p aumenta también. En este caso se ha utilizado la correlación de Melason y Dixon (1985) para esferas, ecuación (4.73) y debe ponerse especial cuidado sobre los resultados para la fase sólida en la región próxima a la pared del horno, dado que la mencionada proporción es altamente elevada en comparación a 10 que es el valor máximo recomendado para utilizar las correlaciones reportadas para estimar este parámetro.

Finalmente para el cálculo del coeficiente convectivo de transferencia de calor al ambiente se han de utilizar los valores reportados por Mc Adams (1985), Perry y Green (1998), y Kreith (1968), los cuales para convección libre oscilan en valores de 1 y $10 \text{ J m}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$.

5.2 Cinética de densificación

Del trabajo de Michel (1992) discutido anteriormente y después de ajustes estadísticos, se estableció la siguiente expresión

$$\frac{d\rho^*}{d\tau^*} = \frac{1}{\tau^*} (0.875 \ln T_s - 6.3653) \quad (5.1)$$

la cual permite predecir el incremento de la densidad de las briquetas de óxido de magnesio en función de la temperatura absoluta (K) y del tiempo de residencia (minutos) a partir de los 1,170 °C de acuerdo con el ya mencionado trabajo. En este trabajo no se pretende un análisis riguroso de la evolución de la densidad en ambas direcciones del horno, sin embargo permitirá obtener una orientación acerca del impacto de la distribución de temperatura en la densificación de las briquetas, asimismo de la zonas del horno en las que se da la sinterización, entre otras cosas que serán discutidas en la sección posterior.

5.3 Zonas de combustión

El verdadero comportamiento del horno en lo referente a la combustión requiere conocimientos detallados de modelación de chorros turbulentos en medios empacados y además contribuciones del área de cinética de combustión y de equilibrio termodinámico, por lo que en este trabajo se decidió representar este fenómeno como fuentes volumétricas de calor en la malla de colocación, esto en pequeños volúmenes anulares cuasi-diferenciales en cada una de las zonas de los quemadores. La cantidad de calor liberada de la combustión se ha calculado a partir de un balance de energía, en donde se supone que el combustible en cada una de las etapas se ha consumido en su totalidad.

En la ecuación del modelo heterogéneo que representa el balance de energía térmica para el fluido se ha incluido un término que representa el calor liberado por la combustión, este término representa la cantidad de calor generada por unidad de volumen y por unidad de tiempo, como el flujo de calor de la combustión (calculado a partir del balance de energía) esta dado como una razón de energía por unidad de

tiempo entonces debe ser dividido por el volumen en el que se genera con el fin de poder incluir dicha cantidad en la ecuación correspondiente en el modelo.

Como el método numérico propuesto consta de varios puntos en la dirección radial (como se esquematiza en la figura 5.1) entonces el calor liberado debe ser distribuido en una forma ponderada en cada uno de esos puntos, dicha ponderación puede ser seguida a partir de modelos sencillos de flamas, sin embargo, dichas ponderaciones deberán ser modificadas hasta obtener resultados satisfactorios. Para este trabajo se eligió la siguiente distribución del calor en la dirección radial como lo muestra la tabla 5.1.

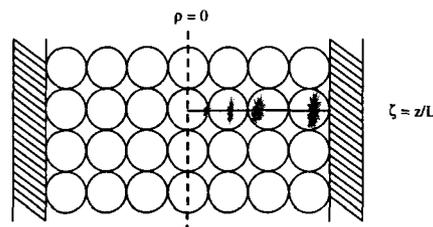


Figura 5.1 Distribución del calor de combustión

| r/R | Porcentaje del calor liberado |
|--------|-------------------------------|
| 0.2390 | 8 |
| 0.5262 | 13 |
| 0.7639 | 23 |
| 0.9275 | 56 |

Tabla 5.1 Distribución radial del calor de combustión

Estos valores fueron encontrados después de una búsqueda de buenas aproximaciones con los datos de planta y a partir de una primera aproximación basada en modelos simplificados de flama (Splading, 1983).

La distribución radial del calor de combustión no es suficiente para la representación del fenómeno, también debe hacerse una distribución axial en la zona de los quemadores, ya que en concordancia con la realidad, la flama abarca una zona axial en regiones inferiores y superiores a la ubicación de los quemadores, por lo que una vez que se tiene un valor de calor de combustión para cada posición radial de la malla de

resolución no puede ser ubicado en una sola posición axial que correspondería con un paso en la integración del modelo. Por lo que este calor debe ser ahora distribuido en la dirección axial en zonas previas y posteriores a una longitud axial que correspondería con la boquilla de los quemadores. Estas zonas circunvecinas a las boquillas fueron fijadas para este trabajo como 10 veces el diámetro de la boquilla en cada una de las direcciones, por lo que en la resolución del modelo conforme se dé la integración.

Con lo anterior se generaron volúmenes anulares de generación de calor alrededor de cada punto de colocación cuya altura corresponde con lo que se acaba de describir y cuya diferencia en los radios interno y externo del anulo generador de calor corresponde con un diámetro de la boquilla. En la figura 5.2 se puede apreciar como Δr .

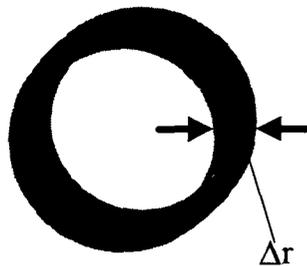


Figura 5.2 Anulo diferencial generador de calor

No es suficiente haber distribuido de una manera ponderada en ambas direcciones el calor, es necesario también indicar al programa la distribución de acuerdo al número de pasos de integración requeridos por el método numérico en la zona de combustión, esto se obtiene de un monitoreo de los pasos demandados en dicha zona hasta que se obtiene el factor correcto de distribución, es decir la zona en la que se distribuye axialmente el calor es una longitud constante, sin embargo puede no serlo el número de pasos de integración que corresponde con el número de rodajas anulares diferenciales que “contendrán” las fuentes volumétricas de calor.

5.4 Transformación geométrica de la sección transversal del horno

Como se mencionó en el capítulo de introducción el horno tiene una geometría transversal elíptica, contrario a las habituales secciones circulares. En el presente trabajo se está haciendo uso de la siguiente transformación geométrica

$$r_c^2 = \frac{e_1^2 e_2^2}{e_1^2 \sin^2 \theta + e_2^2 \cos^2 \theta} \quad (5.2)$$

$$R_c = (e_1 e_2)^{1/2} \quad (5.3)$$

con la finalidad de aplicar las técnicas numéricas y herramientas matemáticas que están referidas a sistemas de sección transversal circular. Esta transformación permite mapear información dada en la región elíptica para proponerla en el método de resolución y a la vez la información obtenida al resolver el modelo poder ubicarla en la geometría real.

5.5 Algoritmo de resolución

En el presente trabajo los fenómenos a considerados en el modelo heterogéneo fueron: el movimiento en contracorriente y en dirección axial del sólido y del fluido, la dispersión térmica radial para ambas fases, la transferencia de calor interfásica y la generación volumétrica de transferencia de calor por efectos de la combustión en la fase fluida. Aunque esta última considerada únicamente en la zona de los quemadores del horno.

Las variables independientes de las EDPs (longitud radial y axial) fueron normalizadas y después de un reacomodo quedaron de la siguiente forma

$$\frac{\partial T}{\partial \zeta} = \alpha \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial T}{\partial \rho} \right) + \beta (T_s - T) + \gamma Q^\circ \quad (5.4)$$

$$\frac{\partial T_s}{\partial \zeta} = \alpha' \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial T}{\partial \rho} \right) - \beta' (T_s - T) \quad (5.5)$$

Debe mencionarse que el signo del segundo término del lado derecho de la ecuación (5.5) es negativo de acuerdo con el principio que indica que una de las fases debe elevar su temperatura mientras la otra disminuye, sin embargo en el momento de integrar en una sola dirección, en este sistema, el signo del mencionado término debe ser positivo, debido a que ambas fases se mueven en dirección opuesta.

Las condiciones de frontera también fueron modificadas, quedando como sigue:

$$\text{en } \rho = 0 \quad \frac{\partial T}{\partial \rho} = 0 \quad \frac{\partial T_s}{\partial \rho} = 0 \quad (5.6)$$

$$\text{en } \rho = 1 \quad \frac{\partial T}{\partial \rho} = Bi_f [T_w(\zeta) - T] \quad \frac{\partial T_s}{\partial \rho} = Bi_s [T_w(\zeta) - T_s] \quad (5.7)$$

$$\text{en } \zeta = 0 \quad T = T^0 \quad T_s = T_s^0 \quad (5.8)$$

Los grupos característicos para las EDPs normalizadas quedan como sigue:

$$\alpha = \frac{L}{G C p_f} \frac{1}{R^2} k_{rf} \quad \beta = \frac{a_v h L}{G C p_f} \quad \gamma = \frac{L}{G C p_f} \quad (5.9)$$

$$\alpha' = \frac{L}{G_s C p_s} \frac{1}{R^2} k_{rs} \quad \beta' = \frac{a_v h L}{G_s C p_s} \quad (5.10)$$

$$Bi_f = \frac{h_{wf} R}{k_{rf}} \quad Bi_s = \frac{h_{ws} R}{k_{rs}} \quad (5.11)$$

El sistema anterior de EDPs fue resuelto por el método de colocación ortogonal, el cual ha sido utilizado en sistemas similares y ha arrojado resultados de excelente aproximación en mallas de pocos puntos (3 ó 4) (Finlayson, 1971) de colocación en comparación con el tradicional método de diferencias finitas, otra característica para su

Resolución del Modelo

elección es su baja demanda de memoria y de tiempo de cómputo, no obstante que en la actualidad prácticamente han dejado de ser una limitación.

Discretizando el sistema en la dirección radial y aplicando el método de colocación ortogonal y su nomenclatura, las EDPs pueden ser escritas como a continuación se muestra

$$\frac{dT_j}{d\zeta} = \alpha_j \sum_i^{N+1} B_{ji} T_i + \beta_j (T_s - T)_j + \gamma_j Q_j^0 \quad (5.12)$$

$$\frac{dT_{sj}}{d\zeta} = \alpha_j \sum_i^{N+1} B_{ji} T_{si} - \beta_j (T_s - T)_j \quad (5.13)$$

asimismo las condiciones de frontera en $\rho = 1$

$$\sum_{i=1}^{N+1} A_{N+1,i} T_i = B_{i_{jN+1}} [T_w(\zeta) - T_{N+1}] \quad (5.14)$$

$$\sum_{i=1}^{N+1} A_{N+1,i} T_{si} = B_{i_{sN+1}} [T_w(\zeta) - T_{sN+1}] \quad (5.15)$$

En este trabajo se utilizaron polinomios de Jacobi para determinar los puntos de colocación y las matrices que requiera la integración del sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias. Estos sistemas resultantes de EDOs para resolver modelos heterogéneos se caracterizan por ser rígidos, lo que implicar recurrir a métodos especiales que contemplen esas dificultades. En este caso se recurrió a la subrutina IVPAG de IMSL la cual está diseñada para resolver problemas de valor inicial de sistemas rígidos de ecuaciones diferenciales ordinarias utilizando el método de Gear BDF.

5.6 Estructura del programa

En la figura 5.3 se muestra la estructura del programa el cual fue construido en FORTRAN®, en donde se muestra principalmente la interacción entre las diferentes subrutinas y funciones.

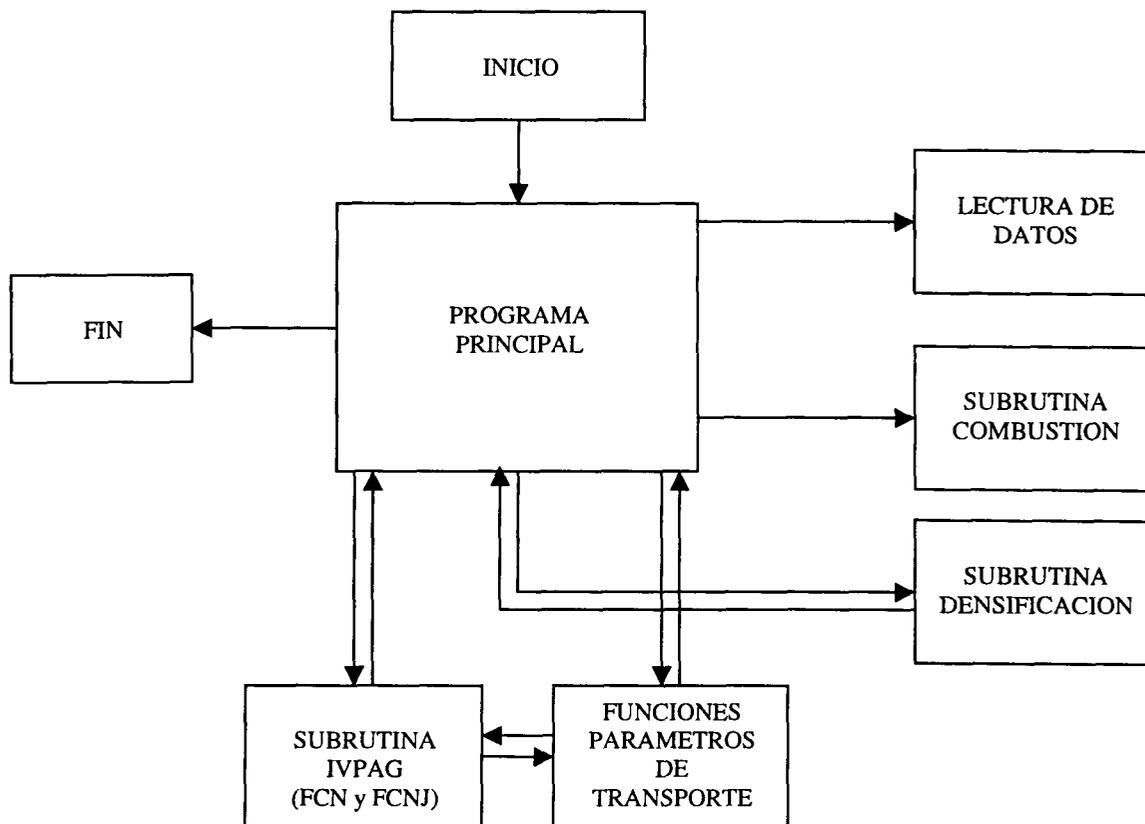


Figura 5.3 Estructura del programa

En el archivo de LECTURA DE DATOS se encuentran las condiciones de operación que se pueden modificar y suministrar al programa (de acuerdo a lo disponible en planta) para conocer su impacto en los perfiles de temperatura del horno y predecir el grado de sinterización. En este archivo es posible modificar la temperatura del producto, la temperatura ambiente, la temperatura de entrada del aire, el flujo de sólidos, el combustible utilizado y el exceso de aire. En este archivo también es posible modificar las características del sólido procesado si es que se

Resolución del Modelo

desea estudiar el comportamiento del horno con otro tipo de material o bien con el mismo material pero modificando algunas de sus características.

Posteriormente el programa principal hace uso de la SUBRUTINA COMBUSTION, la cual por un balance de energía calcula el calor liberado por la combustión y que después será distribuido en la zona de quemadores.

En seguida el programa principal llama a la SUBRUTINA IVPAG para el procedimiento de integración en la dirección axial de las ecuaciones diferenciales ordinarias. IVPAG hace uso de las subrutinas FCN y FCNJ, en FCN se calculan los valores de las funciones (ecuaciones diferenciales ordinarias) y en FCNJ se calcula el jacobiano del conjunto de EDOs. Ambas, FCN y FCNJ, llaman a las FUNCIONES PARAMETROS DE TRANSPORTE, lo que es el conjunto de correlaciones ya mencionadas, esto con el fin de calcular en cada punto de colocación y en cada paso de integración los parámetros efectivos.

El programa principal llama a la SUBRUTINA IVPAG en cada paso de integración, antes de hacer cada llamado en el programa principal se calculan las condiciones en el punto de colocación que esta ubicado en la frontera, esto a través de las ecuaciones algebraicas de condición de frontera por lo que el programa principal también hace interacción con las FUNCIONES PARAMETROS DE TRANSPORTE.

El programa principal también intercambia información con la SUBRUTINA DENSIFICACION con el fin de calcular la densidad del sólido en los puntos de la malla de colocación, en cada paso de integración.

El programa esta diseñado para obtener información de los perfiles axiales de temperatura de ambas fases y de la densidad de las briquetas en las posiciones radiales determinadas por el método numérico.

5.7 Corridas propuestas

Para analizar el sistema bajo estudio se realizaron seis corridas de acuerdo con los datos disponibles en la planta, los cuales consisten variables manipulables de operación y sus respectivos perfiles de temperatura de pared del horno, con esta información disponible será posible una comparativa entre los resultados del modelo y datos reales. Los datos que se le implementarán al programa en cada corrida se muestran en la tabla 5.2

| | Corrida 1 | Corrida 2 | Corrida 3 | Corrida 4 | Corrida 5 | Corrida 6 |
|---|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| Temperatura ambiente (°C) | 25 | 25 | 26 | 23 | 25 | 25 |
| Alimentación de sólidos (kg s ⁻¹) | 1.11 | 0.84 | 1.13 | 1.12 | 1.28 | 1.42 |
| Flujo de gas natural (m ³ hr ⁻¹) | 0.1138 | 0.1016 | 0.1138 | 0.1125 | 0.1125 | 0.1143 |
| Flujo de aire (m ³ hr ⁻¹) | 1.3651 | 1.2638 | 1.2328 | 1.4392 | 1.5324 | 1.5961 |
| Porcentaje de exceso de aire | 21.37 | 25.61 | 21.37 | 28.96 | 34.9 | 39.7 |
| Temperatura de alimentación (°C) | 302.22 | 320.00 | 222.22 | 87.77 | 130.00 | 130.00 |
| Temperatura del producto (°C) | 426.00 | 296.00 | 391.00 | 587.00 | 448.00 | 448.00 |
| Temperatura de los gases (°C) | 414.21 | 441.11 | 429.44 | 397.78 | 330.00 | 282.78 |

Tabla 5.2 Datos para las corridas

De los resultados de estas corridas será posible analizar la temperatura de pared, único dato disponible para una comparativa del modelo. Se podrán obtener perfiles axiales y radiales para ambas fases y además un perfil de la sinterización a través de la densidad del óxido de magnesio.

Además se planteó un análisis de sensibilidad para la fracción de huecos, la emisividad, la influencia del medio ambiente y el diámetro de la partícula. Un análisis de sensibilidad para la fracción de huecos es definitivo para observar su influencia, de la planta se conoce un valor estimado, sin embargo la influencia de la carga del empacado provoca variaciones en esta variable debido a pulverización de algunas briquetas, además la configuración transversal del horno y las ya conocidas distribuciones radiales no uniformes.

En lo referente a la emisividad el análisis de sensibilidad es requerido no sólo para observar su influencia sino para un ajuste de parámetros, ya que este factor se puede manejar como desconocido para cualquier sistema dadas las interacciones que

se presentan entre las partículas, factores geométricos, entre otros (Wakao y Kaguei, 1982).

El análisis de sensibilidad en la influencia del ambiente ha sido referido a variaciones en el coeficiente convectivo de transferencia de calor entre la pared del horno y el ambiente, oscilando en un rango como se muestra en la tabla 5.3, se eligió esta opción de análisis ya que el coeficiente engloba la influencia de velocidad del viento, diferencia de temperatura, propiedades, etc.

Y el análisis en el tamaño de partícula ha sido considerado con la finalidad de algunas observaciones sobre el tamaño del sólido que se está alimentando y lograr algunas recomendaciones sobre esta variable de operación.

| Variable | Valores | | | | |
|------------------------------|----------------|--------|----------|--------|--------|
| ϵ | 0.3125 | 0.3625 | 0.4125 | 0.4625 | 0.5125 |
| e | 0.1 | 0.2 | 0.25 | 0.3 | 0.4 |
| h_a | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 |
| Dp | 0.024 | 0.026 | 0.028575 | 0.03 | 0.032 |

Tabla 5.3 Variables para análisis de sensibilidad

Las variaciones en cada una de las variables fue realizada sobre el conjunto de datos de la corrida número 4, mostrados en la figura 5.2.

6. Análisis de Resultados y Conclusiones

En la planta industrial se cuenta con registros de temperatura para varios puntos de la dirección axial (comunicación personal) de la coraza exterior del horno, lo que permite estimar la temperatura en el interior del horno, esto haciendo uso de un simulador generado en la empresa. Este simulador fue generado a partir de un balance de energía en el que se consideran las propiedades de los materiales aislantes como la conductividad térmica, espesor, resistencia y emisividad, el punto de partida, como se mencionaba, es el perfil de temperaturas externo de la coraza de acero (González, 1998).

Los perfiles mencionados son de utilidad para una comparativa con los resultados de la simulación, los perfiles de operación existen para varias condiciones de operación en lo referente a alimentación de sólidos, flujo de combustible utilizado (el cual se maneja en la planta como una función de la alimentación de sólidos), flujo de aire y exceso del mismo. En el programa pueden modificarse con facilidad estas variables, con la finalidad de que el usuario proporcione los valores y conozca el comportamiento del horno.

Por otra parte, algunos parámetros han sido propuestos dado su desconocimiento a partir de datos experimentales o bien existentes en la literatura y que deberán ser ajustados en cada una de las etapas posteriores a este primer estudio. Para las corridas realizadas se han propuesto valores típicos para la emisividad del sólido y la fracción de huecos. La emisividad es un factor desconocido completamente para este sistema y la fracción de huecos es un promedio estimado para el empaquetado, sin embargo se sabe que las variaciones en este parámetro puede afectar significativamente la transferencia de calor [Schnitzlein, K, (1993) y Borkink, J. y Westeretp, K., (1993)] .

Los resultados presentados en este capítulo permiten apreciar la tendencia del modelo propuesto y la sensibilidad en la variación de algunos parámetros. También se presentan sugerencias para un análisis más completo del sistema en estudios posteriores.

6.1 Resultados

Se realizaron seis corridas de simulación a partir de datos de operación de las variables que se presentan en la tabla 5.1, a continuación de las figuras 6.1 a 6.6 se muestra una comparación entre los datos de pared interna obtenidos de la planta y los datos obtenidos de la resolución del modelo. Los datos de operación de la planta para las distintas corridas se muestran en la tabla 5.2.

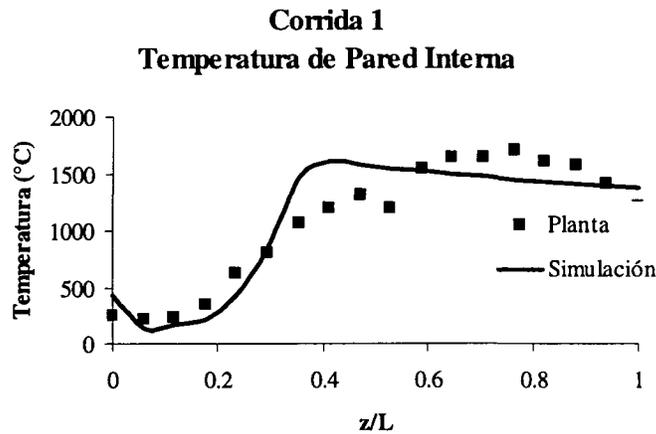


Figura 6.1 Corrida 1

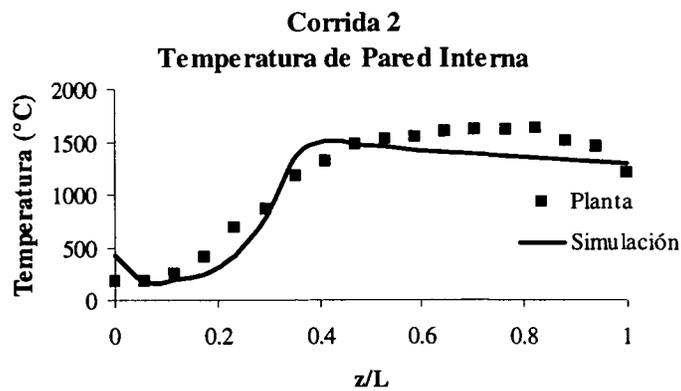


Figura 6.2 Corrida 2

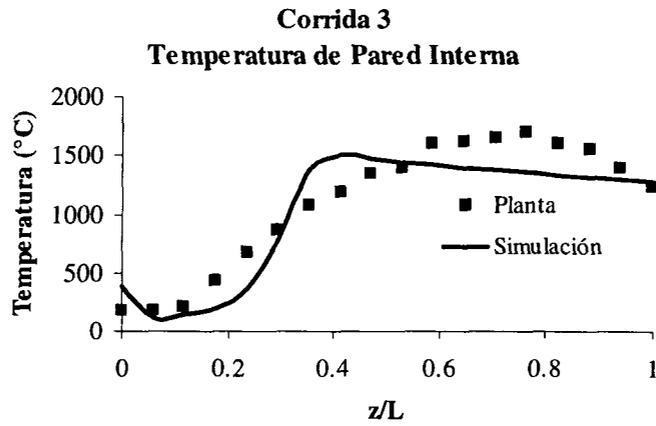


Figura 6.3 Corrida 3

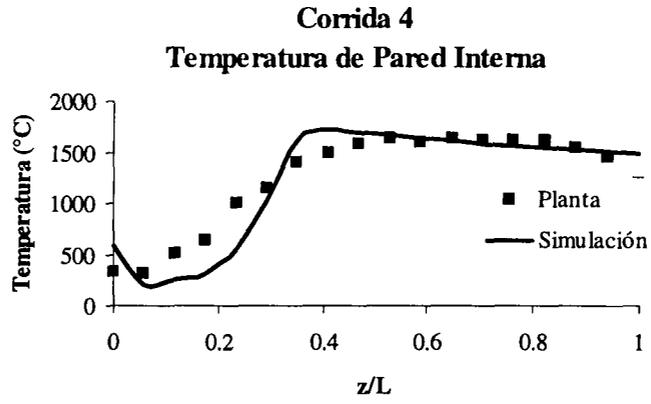


Figura 6.4 Corrida 4

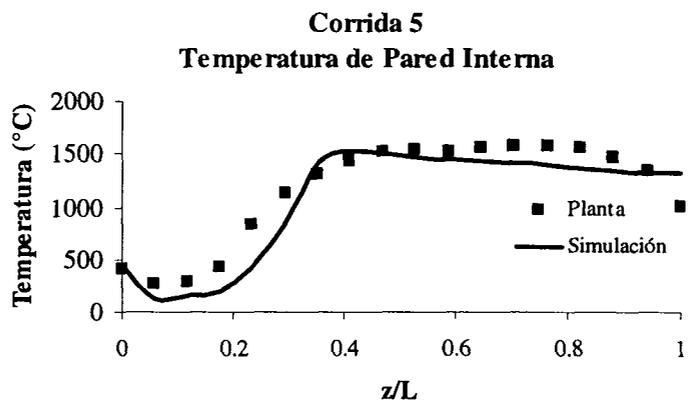


Figura 6.5 Corrida 5

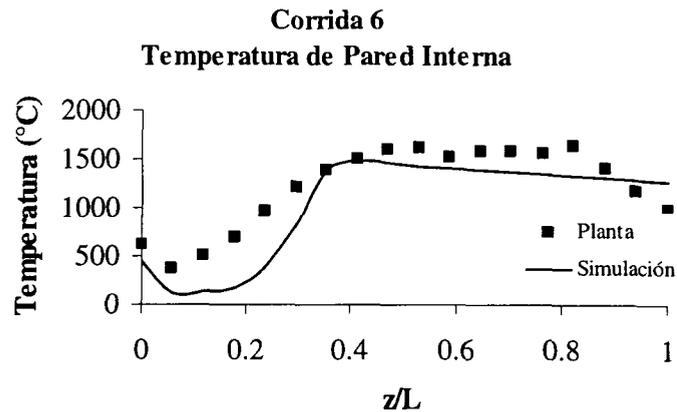


Figura 6.6 Corrida 6

De los resultados anteriores se pueden observar una buena aproximación de los resultados dados por el modelo a los datos de planta, esto a pesar de la serie de supuestos en la zona de combustión y de algunos factores, la emisividad principalmente. Debe destacarse que estos resultados de temperatura de pared, obtenidos de la resolución del modelo, están sujetos a los valores de temperatura que el programa obtiene para los puntos de colocación en los que se localiza la combustión, lo que habla de una buena predicción de la transferencia de calor en el lecho.

A continuación en las figuras 6.7 y 6.8 se muestran perfiles axiales de temperatura para ambas fases, estos resultados corresponden con la corrida 4.

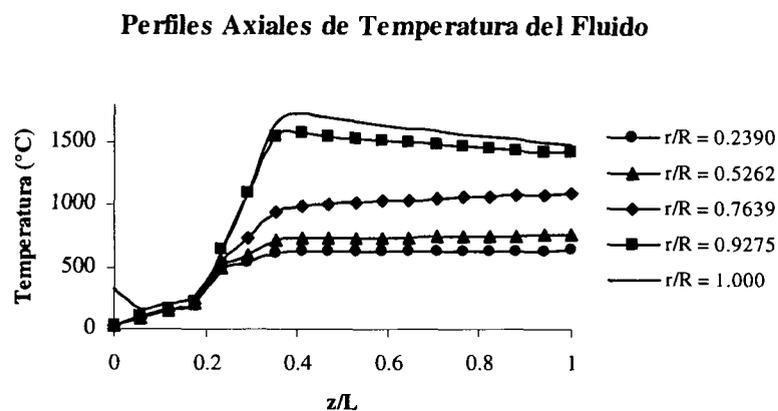


Figura 6.7

Perfiles Radiales de Temperatura del Fluido

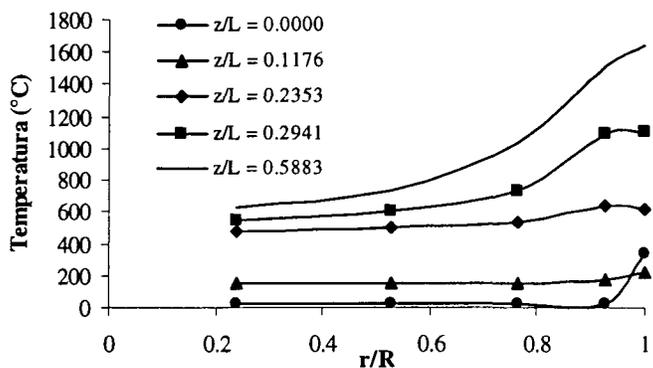


Figura 6.9

Perfiles Radiales de Temperatura del Sólido

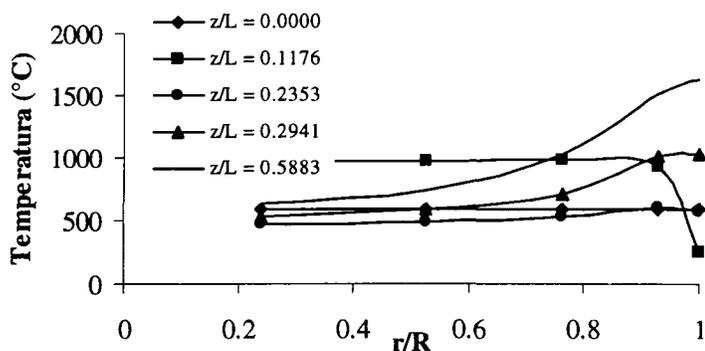


Figura 6.10

En cada una de las figuras 6.9 y 6.10 se aprecia como en las regiones cercanas a la pared del horno la temperatura es superior por estar en las proximidades de los quemadores. A excepción de la región inferior del horno en la que cerca de la pared los sólidos tienen una temperatura inferior que los sólidos que están hacia el interior del horno, esto en obediencia a los efectos del medio ambiente sobre el sistema y la predicción de las canalizaciones en esa región del horno.

Ahora en la figura 6.11 se muestran perfiles de densidad

Perfil Axial de Densidad de MgO

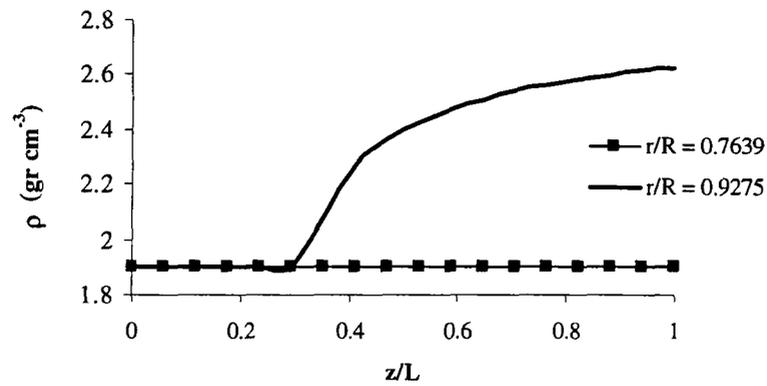


Figura 6.11

De la figura 6.11 se puede apreciar por lo menos cualitativamente que sólo en las regiones próximas a los quemadores es posible una sinterización significativa.

En la figura 6.12 se observa el análisis de sensibilidad para la emisividad

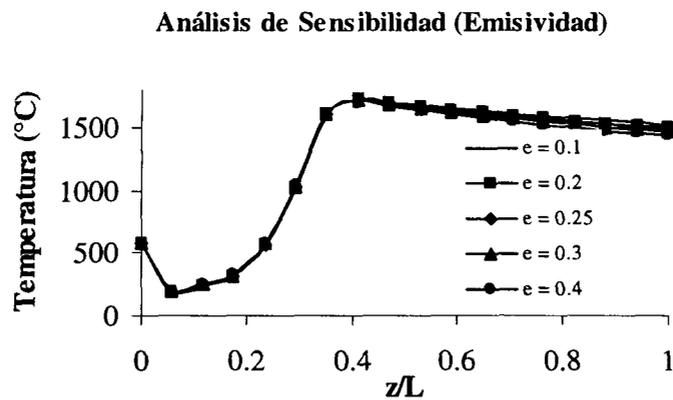
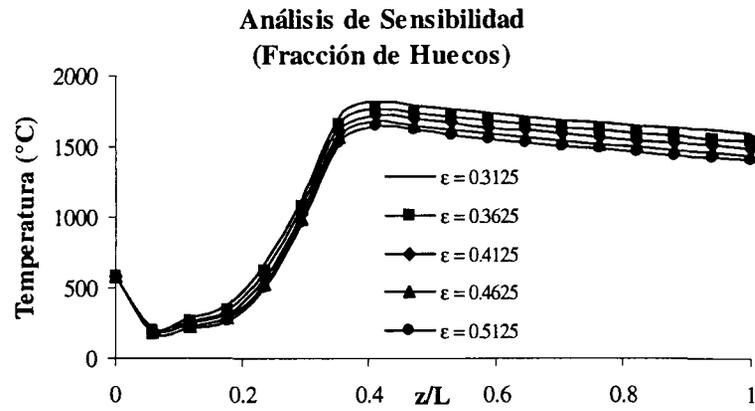
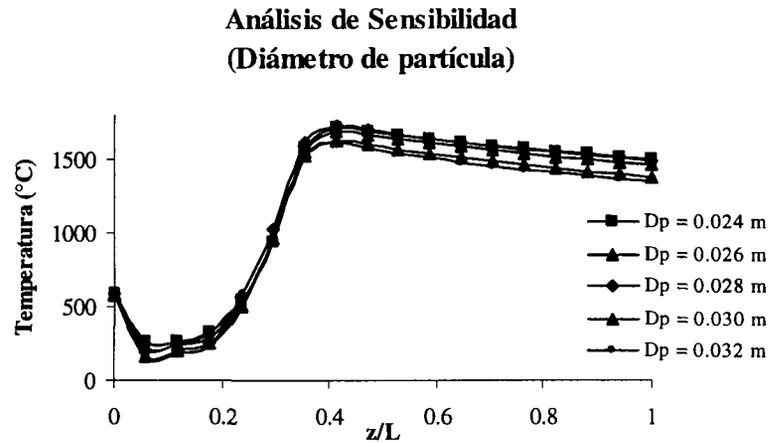


Figura 6.12

Ahora en la figura 6.13 se presenta el análisis de sensibilidad para la fracción de huecos



También se presenta en la figura 6.14 el análisis de sensibilidad para el diámetro de partícula.



Del análisis de sensibilidad se discutirá en la siguiente sección.

6.2 Análisis de resultados

Antes de discutir los resultados obtenidos, es conveniente mencionar que en la planta se realizan mediciones de temperatura en la coraza del horno y a partir de las leyes básicas de conducción de calor se obtienen valores de temperatura del interior del horno, las cuales se muestran en los gráficos de las figuras 5.1 a 5.6 con la representación de puntos. Esta información es lo más valioso con lo que se cuenta con

finés de una comparativa en el progreso del presente estudio y posteriormente un ajuste de parámetros.

En las figuras 6.1 a 6.6 se puede observar que aún y cuando se desconocen los valores reales de algunos parámetros y otros han sido propuestos en forma aproximada se ha obtenido del modelo un perfil de temperatura de pared que es similar en tendencia y además los valores obtenidos de las temperaturas son bastante aproximados. Con estos resultados se visualiza que el modelo propuesto ha sido bastante acertado en la elección de correlaciones para cálculo de parámetros y además la representación de la combustión ha favorecido el funcionamiento del modelo.

Además algunas consideraciones para la resolución del modelo han implicado valores promedio constantes para las propiedades físicas de las fases involucradas en la estimación de los parámetros efectivos. Asimismo se han considerado perfil plano de temperatura en la condición inicial debido a la carencia de información en este aspecto y también han sido consideradas constantes tanto la fracción de huecos del empacado como el perfil de velocidad.

En el aspecto de estimación de parámetros efectivos se ha visto que las diferencias existentes entre este sistema y los sistemas en los que las correlaciones fueron obtenidas fue un problema superado, dando con esto una amplia confianza de aplicación de los estudios ya existentes en nuevos problemas. Sin embargo existen algunos detalles que en este trabajo debieron ser observados en forma especial.

Dichos detalles sobre la estimación de parámetros son los que tienen que ver con el cálculo del coeficiente de transferencia de calor entre el sólido y la pared, debido a que sus correlaciones son recomendadas en un rango restringido de d_t/d_p pudiera en un principio existir incertidumbre para utilizar las correlaciones existentes, sin embargo en el presente estudio las deficiencias que pudieran resultar al haber aplicado la correlación de Melason y Dixon son de bajo orden de magnitud y eso puede ser apreciado en los resultados de temperatura del sólido para la posición radial que corresponde con la condición de frontera y por ende la temperatura de pared. Con esto se puede destacar que la restricción en la proporción diámetro de tubo a diámetro de partícula puede dejar de ser rigurosa.

Para la predicción del coeficiente interfásico como se vio en el capítulo anterior, se utilizó una correlación que no incluye los efectos de la radiación, fenómeno altamente importante en este sistema debido a las altas temperaturas producto de la combustión. Sin embargo, es posible representar este factor a través de un coeficiente de ponderación, ya sea constante o en función de la temperatura, como lo hacen Hobbs *et al* (1992) en su trabajo sobre gasificadores de carbón en lecho empacado, para el presente modelo dicho factor de ponderación fue unitario.

Por otra parte ponderar los valores del calor de la combustión en los puntos de colocación no es una tarea fácil, las investigaciones son muy amplias pero no conjuntan las características de este sistema, por lo que no hay puntos avanzados de partida y la generación de un modelo exclusivo de la combustión impactando en un medio empacado puede ser tarea de una o más tareas de investigación posteriores. En el apartado de sugerencias para trabajos futuros se recomiendan algunas de las investigaciones publicadas las cuales pueden ser una valiosa base para fundamentar un modelo de combustión para este sistema. Sin embargo, una primera aproximación para estas ponderaciones puede realizarse a partir de los modelos con combustión instantánea en chorro libre turbulento presentados por Splading (1983), sin embargo el chorro presenta distorsiones debido a la presencia del lecho. Por lo que posterior a esas propuestas deben surgir modificaciones en los valores con el fin de orientar el modelo. No obstante la forma en la que la combustión fue representada en el modelo las temperaturas alcanzadas corresponden con temperaturas características de un proceso de combustión y además se pueden apreciar en el perfil de temperatura de pared.

Al respecto de la resolución numérica aun y cuando el sistema es rígido y se presentaron problemas de convergencia por tratarse de un sistema de fases a contracorriente el problema fue superado a través de reducción en el paso de integración, en el programa elaborado el paso propuesto de integración asegura resultados confiables sin problemas de inestabilidad.

En lo referente a la cinética de sinterización la correlación obtenida para predecir la sinterización de las briquetas puede ser poco confiable, aun y cuando no se cuenta con información de planta se sabe que la densidad final alcanzada es superior a la que se

muestra en la figura 6.11. Las ventajas de haber correlacionado la densidad en función del tiempo de residencia y de la temperatura absoluta permiten conocer de una manera cualitativa el impacto de la combustión, una aproximación de la temperatura mínima de sinterización y también al conocer el impacto de la transferencia de calor en el empacado, con lo que se visualizan zonas en las que existen temperaturas menores a la temperatura mínima de sinterización.

Del análisis de sensibilidad para la emisividad, el cual se observa en la figura 6.12 se observa que no afecta los resultados de una manera notable, las variaciones se encuentran en la región superior del horno, lo que se presenta en el gráfico es el perfil de temperatura de pared que sería la primera variable a considerar para un ajuste de parámetros. De lo observado en el gráfico se encuentra que no debe haber dificultad para el ajuste de este parámetro, debido a que se conserva un comportamiento global y a mínimas magnitudes en la variación.

Por otra parte en la figura 6.13 se observa una variación considerable después de considerar otros valores de fracciones de huecos, desde el punto de vista del ajuste de parámetros no debe representar problemas, sin embargo si se puede observar el impacto en la temperatura, por lo que las variaciones en la fracción de huecos que se presenten en la operación repercutirán sobre la temperatura del sistema, se sabe que estos problemas de pulverización de briquetas, por ejemplo, existen en la operación real del sistema, lo cual origina regiones donde existe mayor o menor dificultad a la transferencia de calor.

Posteriormente en la figura 6.14 se observa el bajo impacto que tiene el tamaño de partícula en la transferencia de calor, aún y cuando el tamaño de la partícula fue conveniente realizar un análisis de sensibilidad en esta variable para observar sus efectos y en su caso sugerir algunas recomendaciones.

6.3 Recomendaciones para trabajos futuros

6.3.1 Perfil no plano de temperatura en la región inferior del horno.

En la parte inferior del horno, que es la que se toma como región inicial para la integración numérica del modelo, se sabe que no existe un perfil plano de temperatura, en el presente estudio se ha omitido ese efecto debido a que no se cuenta con información real que permita por lo menos una buena aproximación de ese perfil de temperatura, por lo que para estudios posteriores del sistema deben realizarse mediciones para obtener este perfil. Lo cual no demanda modificaciones en el programa aquí desarrollado puede esta previsto para proponer un perfil inicial variable tanto en el sólido como en el fluido.

6.3.2 Efectos del medio ambiente

Los resultados del análisis de sensibilidad en lo referente a los efectos del medio ambiente no se presentan gráficamente, sin embargo, no se mostraron efectos de esta variable en el análisis de sensibilidad propuesto y realizado, por lo que debe realizarse otra forma de análisis de dicho coeficiente bajo criterios de convección forzada y con mediciones meteorológicas en la planta. Es fundamental el conocimiento de algunas variables de este tipo como lo pueden ser la dirección del viento, su velocidad y su temperatura.

6.3.3 Impacto de la pulverización de las briquetas

Otra variable que resultó ser muy importante al ser variada en el análisis de sensibilidad fue la fracción de huecos. Por lo que es recomendable un estudio de la misma a través de un perfil variable de esta fracción, ya sea basado en observaciones de planta o bien en una exploración a priori fundamentada en algunas investigaciones publicadas Borkink y Westertrp, (1993).

6.3.4 Cinética de sinterización

Para obtener una correlación de buen carácter predictivo de la sinterización del material deben considerarse otros efectos como la atmósfera en la que se da el proceso, y el tamaño de la partícula y su grado de compactación. Las variables mencionadas intervienen de manera fundamental en el proceso de sinterización por lo que no deben ignorarse en predicciones cinéticas (Mai y Edgar, 1989; Michel, 1992 y Hartman, 1994)

6.3.5 Modelación de la combustión

La modelación de la combustión será un paso trascendental que lleve este modelo a un modelo con un grado de incertidumbre mucho menor, esta modelación deberá incluir modelos de flamas en los que se dé combustión no instantánea, modelos de chorros turbulentos en medios porosos, cinética química y equilibrio químico de la combustión. De los anteriores modelos mencionados se encuentra información disponible que al ser conjuntada puede ser punto de partida para el desarrollo e implementación de un modelo de flama característico de este sistema. (Spalding, 1986; Hsu *et al*, 1993; Mohamad *et al*, 1993; Heynderickx *et al*, 2001)

6.3.6 Ajuste de parámetros

El presente modelo puede someterse a rutinas de optimización con la finalidad de ajustar la emisividad y la distribución del calor de en cada punto de colocación, para esto es recomendable tomar mediciones de planta en distintas posiciones radiales con la finalidad de comparar temperaturas y verificar que verdaderamente la distribución de calor en el modelo es una buena aproximación, una modelación de la flama eliminaría esta incertidumbre y el ajuste de parámetros estaría orientado a la emisividad y a verificar los valores de otras variables como el coeficiente interfásico de transferencia de calor y un perfil de distribución de fracción de huecos.

6.4 Conclusiones finales

Aun y cuando el modelo no fue sometido a un criterio de validación se ha obtenido un modelo que proporciona un comportamiento aproximado, lo cual se fundamenta en los datos conocidos a partir de mediciones de planta. Este modelo permitirá obtener una mejor descripción del sistema una vez que la combustión pueda ser descrita de acuerdo a lo mencionado. Los resultados obtenidos a partir de este modelo son los siguientes:

1. Se obtuvo una descripción de la transferencia de calor para dos fases al estado estable que predice el comportamiento del horno de manera confiable, fundamentado esto en el perfil de temperatura de pared disponible de la operación del horno.
2. Se incluyó en el modelo una cinética de sinterización basada en datos experimentales realizados a partir de material utilizado en el horno industrial.
3. Se obtuvo un programa de simulación completo del modelo matemático propuesto para la transferencia de calor, adaptable a una modelación de la combustión y a rutinas de optimización para un ajuste de parámetros de un modelo al estado estable.
4. Este programa puede ser utilizado con la finalidad de estudiar el procesamiento de otro tipo de sólidos.

Los resultados obtenidos en esta etapa del proyecto de simulación ofrecen una validación a priori de lo que sucede en el horno, esto fundamentado en las aproximaciones con los datos tomados en la planta.

De los resultados de este primer estudio se han obtenido perfiles de temperatura en la dirección radial que muestran una deficiencia de transferencia de calor hacia el núcleo del horno con lo que no se logra una uniformidad en las características del producto.

También debe destacarse la exitosa implementación de correlaciones para predicción de parámetros, por lo que se amplían los campos de aplicación de dichos estudios.

Bibliografía

Adebiyi, G. A. and Chenevert, D. J. (1996), An Appraisal of One-Dimensional Analytical Models for the Packed Bed Thermal Storage Systems Utilizing Sensible Heat Storage Materials, Transactions of the ASME 118, 44-49

Argo, W. B. and Smith, J. M. (1953), Heat Transfer in Packed Beds – Prediction of Radial Rates in Gas-Solid Beds, Chem. Eng. Progr. 49, 443-451.

Ashby M.F. (1990) HIP 6.0 User Manual. Cambridge University.

Bauer, R. and Schlünder, E. U. (1978), Effective Radial Thermal Conductivity of Packings in Gas Flow. Part II: Thermal Conductivity of the Packing Fraction Without Gas Flow. Int. Chem. Eng. 18, 189-204.

Bischoff, K. B. (1962), Axial Thermal Conductivities in Packed Beds. Can. J. Chem. Eng. 40, 161-163.

Borkink, J. and Westertrp, K., (1993), Significance of Radial Porosity Profile for Description of Heat Transport in Wall-Cooled Packed Beds. Chem. Eng. Sci. 49, 863-876.

Bovin, D., Rinker, R. G. and Mellichamp, D. (1983), On Controlling an Autothermal Fixed Bed Reactor at an Unstable State I: Steady State and Dynamic Modelling. Chem. Eng. Sci. 38, 233-244.

Brophy J., Rose, R. and Wulff, J., (1984), Ciencia de los Materiales Vol. 2. Propiedades Termodinámicas. Limusa, México.

Burke J. (1968), Grain Growth. Microstructures: their Analysis, Significance and Production. John Wiley and Sons. USA

Calderbank, P. H. and Pogorsky, L. A. (1957), Heat Transfer in Packed Beds, Trans. Inst. Chem. Eng. 35, 195-207

Castillo, A., Das, T. y Ortiz U. (1991), Estudio Experimental de Fusión de Magnesia (MgO) para la Industria de Refractarios. Tesis. UANL. México.

Coberly, C. A. and Marshall, W.R. (1951), Temperature Gradients in Gas Streams Flowing Thorough Fixed Granular Beds, Chem. Eng. Progr. 47, 141-150.

Coble, R. L., Song H. and Brook R (1985), Sintering and Grain Growth in Alumina and Magnesia. Advanced Ceramics. 10839-52.

- Daniels, A. U., Lowrie, R. C., Gibby, R. L. and Cutler, I. B. (1968), Observations on Normal Grain Growth of Magnesia and Calcia. *Journal of the American Ceramic Society*. Jun(1968). 282-285.
- De Wasch, A. P. and Froment, G. F. (1971), A Two Dimensional Heterogeneous Model for Fixed Bed Catalytic Reactors, *Chem. Eng Sci.* 26, 629-634.
- De Wasch, A. P. and Froment, G. F. (1972), Heat Transfer in Packed Beds, *Chem. Eng. Sci.* 27, 567-576.
- Dixon, A. G. (1978), Heat Transfer in Packed Beds of Low Tube/Particle Diameter Ratio. Ph. D. Thesis, University of Edinburg, U. K.
- Dixon, A. G. (1985), Thermal Resistance Models of Packed Bed Effective Heat Transfer Parameters. *AIChE J.* 31, 826-834.
- Dixon, A. G. and Cresswell, D. L. (1986), Effective Heat Transfer Parameters for Transient Packed Bed Models. *AIChE J.* 32, 809-819.
- Dixon, A. G. and Cresswell, D. L. (1979), Theoretical Prediction of Effective Heat Transfer Parameters in Packed Beds, *AIChE J.* 25, 663-676.
- Richardson, D. (1968), *Modern Ceramic Engineering*. Marcel Dekker. USA
- Fahien, R. W. and Smith, J. M. (1955), Mass Transfer in Packed Beds, *AIChE. J.* 1, 28-37.
- Feyo de Azevedo, S. J. C., Romero-Ogawa, M. A. y Wardle, A. P. (1990), Modeling of Tubular Fixed Bed Catalytic Reactors – A Brief Review, *Chem. Eng. Res. Des.*
- Froment, G. F. y Bischoff, K. B. (1990), 'Chemical Reactor Analysis and Design', 2nd Ed., J. Wiley, New York (USA).
- González, A. (1998), Determinación de la Temperatura Interna de un Horno de Calcinación Mediante Simulación en Excel, XLVIII Convención Nacional del IMIQ, México.
- Gros, J. B. y Bugarel, R. (1976), Etude Comparative de Modeles de Reacteurs Catalitiques a Lite Fixe, *Chem. Eng. J.* 13, 165-177.
- Gunn, D. J. and De Souza, J. F. C. (1974), Heat Transfer and Axial Dispersion in Packed Beds. *Chem. Eng. Sci.* 29, 1363-1371.
- Gunn, D. J. (1987), Axial and Radial Dispersion in Packed Beds. *Chem. Eng. Sci.* 42, 363-373.
- Gunn, D. J. and Khalid, M. (1975), Thermal Dispersion and Wall Heat Transfer in Packed Beds, *Chem. Eng. Sci.* 30, 261-267.

Bibliografía

Gunn, D. J. and Pryce, C. (1969), Dispersion in Packed Beds, *Trans. Inst. Chem. Eng.* 47, T341-T350.

Handley, D., and Heggs, P. J., (1968), Momentum and Heat Transfer Mechanisms in Regular Shaped Packings, *Trans. Inst. Chem. Engrs.*, 46, T251.

Hartman, M., Trnka, O. and Veselý V., (1994), Thermal Dehydration of Magnesium Hydroxide and Sintering of Nascent Magnesium Oxide. *AIChE J.* 40, 536-542.

Hennecke, F. W. and Schlünder, E. U., (1973), Wärmeübergang in Beheizten oder Gekühlten Rohren mit Schüttungen aus Kugeln, Zylindern und Rasching-ringen. *Chem. Ing. Tech.* 45, 277-284.

Heynderickx, G. J., Oprins, A. J. M., and Marin, G. B., (2001), Three-Dimensional Flow Patterns in Cracking Furnaces with Long-Flame Burners, *AIChE J.* 47, 388-400.

Hobbs, M. L.; Radulovic, P. T. and Smoot, L. (1992), D. Modeling Fixed-Bed Coal Gasifiers, *AIChE Journal*, 38, 681-702.

Hsu, C. T., Cheng, P., and Wong, K. W. (1994), Modified Zehner-Schlunder models for stagnant thermal conductivity of porous media, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 37, 2751-2759

Jalalzadeh-Azar, A. A., Steele, W. G. and Adebisi, G. A. (1996), Heat Transfer in a High-Temperature Packed Bed Thermal Energy Storage System-Roles of Radiation and Intraparticle Conduction, *Transactions of the ASME*, 118, 50-57.

Kingery, W. D., Bowen, H. K. and Uhlmann, D. R. (1976), *Introduction to Ceramics 2nd Edition*. John Wiley and Sons. USA.

Kreith, F., (1968), *Principles of Heat Transfer*, International Textbook Company, USA.

Kulkarni, B. D. and Doraiswamy, L. K., (1980), Estimation of Effective Transport Properties in Packed Bed Reactors. *Cat. Rev. Sci. Eng.* 22, 431-483

Kunii, D., Suzuki, M. and Ono, N. (1968), Heat Transfer from Wall Surface to Packed Beds at High Reynolds Numbers. *J. Chem. Eng. Japan.* 1, 21-26.

Kunii, D and Smith, J. M., (1960), Heat Transfer Characteristics of Porous Rocks. *AIChE J.* 6, 71-78.

Kunii, D and Smith, J. M., (1961) Heat Transfer Characteristics of Porous Rocks: II. Thermal Conductivities of Unconsolidated Particles with Flowing Fluids. *AIChE J.* 7, 29-34.

Legawiec B. and Ziolkowski D. (1995), Mathematical Simulation of Heat Transfer within Tubular Flow Apparatus with Packed Bed by a Model Considering System Inhomogeneity, *Chem. Eng. Sci.* 50, 673-683.

- Li, C. H. and Finlayson, B. A., (1977), Heat Transfer in Packed Beds – A Reevaluation. Chem. Eng. Sci. 32, 1055-1066.
- Finlayson, B. A. (1980), Non Linear Analysis in chemical engineering, McGraw-Hill International Book Co. USA
- Littman, H. and Silva, D. E. (1970), Gas-Particle Heat Transfer Coefficients at Low Reynolds Numbers. 4th International Heat Transfer Conference, Paris-Versailles. 1, CT1.4
- Mai, M. C. and Edgar, T. F., (1989) Surface Area Evolution of Calcium Hydroxide During Calcination and Sintering, AIChE J, 35, 30-36.
- McAdams, W. H. (1985), Heat Transmision 3rd Edition, Malabar, Fla. R. E. Krieger, USA.
- Melanson, M. M. and Dixon, A. G., (1985), Solid Conduction in Low dt/dp Beds of Spheres, Pellets and Rings. Int. J. Heat Mass Transfer. 28, 383-394.
- Michel Uribe, Carlos Rafael (1992), Estudio de la Sinterización de Óxido de Magnesio de Alta Pureza, Tesis de Maestría en Ingeniería, ITESM, México.
- Mohamad, A. A., Ramadhyani, S. and Viskanta R., (1993), Modelling of Combustion and Heat Transfer in a Packed Bed with Embedded Coolant Tubes, Int. J. Heat Mass Transf, 37, 1181-1191.
- Nan L., (1989), Formation, Compressibility and Sintering of Aggregated MgO Powder. Journal of Materials Science. 24 pp 485-492.
- Odendaal, W. and Carberry, J. J., (1987), On Ceramic Particle-Wall Heat Transfer in Fixed Beds. Int. J. Heat Mass Transf, 30, 2683-2685.
- Olbrich, W. E. and Potter, O. E. (1972), Mass Transfer from the Wall in Small Diameter Packed Beds, Chem. Eng. Sci. 27, 1733-1743.
- Paterson, W. R. and Carberry, J. J. (1984), Fixed Bed Catalytic Reactor Modelling. The Heat Transfer Problem. Chem. Eng. Sci. 38, 175-180.
- Perry, R. and Green, D. (1998), Perry's Chemical Engineering Handbook, McGraw-Hill, USA.
- Plautz, D. A. and Johnstone, H. F., (1955), Heat and Mass Transfer in Packed Beds. AIChE J. 1, 193-199.
- Roemer, G., Dranoff, J. S. and Smith, J. M. (1962), Diffusion in Packed Beds at Low Flow Rates, Ind. Eng. Chem Fundam. 1, 284-287.
- Romero, M. A. (1990), Dynamics and Modeling of Fixed Bed Tubular Reactors, Ph. D. Thesis, University of Wales (Swansea), U.K.

Bibliografía

Singer, E. and Wilhelm, R. M., (1950), Heat Transfer in Packed Beds – Analytical Standard Design Method. Chem. Eng. Progr. 46, 343-357.

Spalding, D. B., (1983), Combustión y transferencia de masa, CECSA, México.

Specchia, V. and Sicardi, S., (1980), Modified Correlation for the Conductive Contribution of Thermal Conductivity in Packed Bed Reactors. Chem. Eng. Comm. 6, 131-139.

Specchia, V., Baldi, G. and Sicardi, S. (1980), Heat Transfer in Packed Bed Reactors with one Phase Flow, Chem. Eng. Comm. 4, 361-380.

Stuke, B. (1948), Berechnung des Wärmeaustausches in Regeneratoren mit Zylindrischen und Kugelformigen Fullmaterial, Angewandte Chemie. B20, 262.
Sullivan y Saberski

Vortmeyer, D. and Adam, W., (1984), Steady-State Measurements and Analytical Correlations of Axial Effective Thermal Conductivities in Packed Beds at Low Gas Flowrates. Int. J. Heat and Mass Transfer. 27, 1465-1472.

Vortmeyer, D. and Berninger, R. (1982), Comments on the Paper, Theoretical Prediction of Effective Heat Transfer Parameters in Packed Beds by A. G. Dixon and D. L. Cresswell [AIChE J. 25, 663(1979)]. AIChE J. 28, 508-510.

Vortmeyer, D. and Schaefer, D. J., (1974), Equivalence of One and Two Phase Models for Heat Transfer Processes in Packed Beds: One Dimensional Theory. Chem. Eng. Sci. 29, 485-491.

Wakao, N. and Funazkri, T. (1978), Effect of Fluid Dispersion on Particle to Fluid Mass Transfer Coefficients in Packed Beds. Correlation of Sherwood Numbers. Chem. Eng. Sci. 33, 1375-1384.

Wakao, N. and Kaguei, S., (1982), Heat and Mass Transfer in Packed Beds. Gordon and Breach Sci. Publ., New York, USA.

Wijngaarden, R. J. and Westerterp, K. R., (1993), A Heterogeneous Model For Heat Transfer in Packed Beds. Chem. Eng. Sci. 48, 1273-1280.

Windes, L. C., Cinar, A. and Ray, W. H. (1989), Dynamic Estimation of Temperature and Concentration Profiles in Packed Bed Reactor. Chem. Eng. Sci. 44, 2075-2086.

Wong, B. and Pask, J. Experimental Análisis of Sintering of MgO Compacts. Journal of the American Ceramic Society. Mar-Apr (1979) pp 141-146.

Yagi, S., Kunii, D. and Wakao, N., (1960), Studies on Axial Effective Thermal Conductivities in Packed Beds. AIChE J. 6, 543-553.

Yagi, S. and Kunii, D (1957), Studies on Effective Thermal Conductivities in Packed Beds, AIChE J. 3, 373-381.

Yagi, S. and Wakao, N. (1959), Heat and Mass Transfer from Wall to Fluid in Packed Beds, *AIChE J.* 5, 79-85.

Young, L. C. and Finlayson, B. A. (1973), Axial Dispersion in Nonisothermal Packed Bed Chemical Reactors, *Ind. Eng. Chem. Fund.* 12, 412-422.

Zehner, P. and Schlünder, E. U. (1972), Einflub der Warmetransport und des Druckes auf den Warmetransport in nitch Durchstromten Schuttungen, *Chem. Ing. Tech.* 44, 1303-1308.

Ziolkowsky, D. and Legawiec, B., (1987), Remarks upon thermokinetic parameters of the one- and two-dimensional mathematical models of heat transfer in a tubular flow apparatus with a packed bed. *Chem. Engng. Process*, 21, 65-76.

Centro de Información-Biblioteca



30002006062996