



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

# **Modelado y simulación de un proceso de oxicomcombustión en un horno de la industria cementera**

## ***Modeling and simulation of oxy-fuel combustion process in a kiln cement industry***

**David Alejandro Granados Morales**

Universidad Nacional de Colombia  
Facultad de minas (Escuela de Procesos y Energía)  
Medellín, Colombia

2012



# **Modelado y simulación de un proceso de oxidación en un horno de la industria cementera**

**I.M. David Alejandro Granados Morales**

Tesis presentada como requisito parcial para optar al título de:

**Magister en Ingeniería Mecánica**

Director:

Ph.D. Farid Chejne Janna

Modelado y simulación de procesos Físico-químicos

TAYEA (Termodinámica Aplicada y Energías Alternativas)

Universidad Nacional de Colombia

Facultad de Minas (Escuela de Procesos y Energía)

Medellín, Colombia

2012



## DEDICATORIA

*A mis padres por su gran sacrificio e incondicional apoyo.*

*A mi hermano, esa gran voz de aliento que siempre está ahí caminando a mi lado.*

*A mi novia Catalina por su gran amor y su invaluable compañía en esta importante etapa de mi vida.*



## **Agradecimientos**

Al profesor Farid Chejne, un gran ejemplo de integridad, un maestro en todo el sentido de la palabra.

A Juan Manuel Mejía y Carlos Andrés Gómez, quienes con sus grandes aportes hicieron de este proyecto una realidad.

A los compañeros y amigos del grupo TAYEA, y a todos lo que de una u otra forma aportaron para que este proyecto tuviera un excelente fin.

A la empresa ARGOS por la financiación, a los Ingenieros Ariel Berrío y William Jurado quienes con su valiosa información ayudaron a culminar esta investigación.

A los demás profesores de la Maestría en Ingeniería Mecánica e Ingeniería Química por el apoyo y la compañía durante todo este proceso.



## Resumen

En la presente tesis se presentan dos modelos desarrollados para un horno rotatorio de cemento operado bajo los procesos de combustión de carbón con aire y oxicomustión. El primer modelo fue desarrollado mediante herramientas de dinámica de fluidos computacional (CFD) y permitió evaluar la energía aportada hacia la carga, logrando una caracterización de la intensidad de radiación de los gases y partículas de carbón en cada uno de los procesos. El segundo modelo, desarrollado como complemento del primero y con el que se obtuvo información detallada de la transformación de la carga mediante el proceso de descarbonatación, fue incorporado en el software FORTRAN<sup>®</sup> y resuelto mediante el método de Gear [1].

Los resultados de las simulaciones muestran las bondades que la tecnología de oxicomustión brinda al proceso productivo del cemento cuando parte de los gases de combustión son recirculados. La longitud de las llamas se acortan y el aporte de energía se aumenta favoreciendo el proceso productivo.

Es prudente seguir investigando en esta tecnología con el fin de mejorar y refinar aspectos técnicos que permitan reducir costos de capital y hagan atractiva a la industria la inversión.

### **Palabras claves:**

Oxicombustión

Dinámica de fluidos computacional

Modelado

Recirculación de gases

Descarbonatación

## Abstract

In the present thesis two models were developed for a Cement Rotary Kiln, operated by coal combustion with air and oxy-fuel combustion. The first model was developed through Computational Fluid Dynamics (CFD) tools and it allows to evaluate energy contribution provided to charge in order to achieve gases and coal particles radiation intensity in each process. The second model was developed as complement of the first one and it was used to obtain detail information about charge conversion through decarbonation process then, it was incorporated in FORTRAN® and solved with Gear's Method [1].

Simulation results show the benefits that oxy-fuel technology with flue gas recirculation could provide in cement industry. In this process a flame densest due to its short length is obtained. This high energy density encourages the production process.

In order to make the oxy-fuel process more attractive to the investment industry, is prudent to continue research in this technology to improve and refine the technical aspects that allow reduction of capital costs.

### Keywords:

Oxy-fuel Combustion

Computer Fluid Dynamics

Modeling

Flue gas recirculation

Decarbonation

# Contenido

	Pág.
<b>Resumen</b> .....	<b>IX</b>
<b>Lista de figuras</b> .....	<b>XIV</b>
<b>Lista de tablas</b> .....	<b>XVI</b>
<b>Introducción</b> .....	<b>1</b>
<b>1. Estado del arte</b> .....	<b>5</b>
1.1 Oxicombustión en la industria.....	5
1.2 Modelos y simulaciones en la industria .....	7
1.3 Costos.....	8
<b>2. Modelo Matemático 3D para el horno de cemento</b> .....	<b>15</b>
2.1 Pre-proceso.....	16
2.1.1 Descripción del sistema .....	16
2.1.2 Mallado del sistema .....	17
2.1.3 Condiciones de frontera.....	18
2.1.4 Independencia de mallas .....	19
2.2 Propuesta del modelo matemático en CFD .....	19
2.2.1 Ecuaciones de balance para el fluido.....	19
2.2.2 Ecuaciones de balance para la fase discreta .....	21
2.2.3 Modelo de turbulencia.....	23
2.2.4 Modelo de combustión de No-premezcla.....	24
2.2.5 Modelo de radiación .....	26
2.3 Solución del modelo .....	27
2.3.1 Esquemas de discretización .....	27
<b>3. Propuesta del modelo fenomenológico para el horno de cemento</b> .....	<b>29</b>
3.1 Modelo global del horno .....	31
3.1.1 Balances de masa .....	31
3.1.2 Balances de masa por componentes.....	31

3.1.3	Balances de energía .....	32
3.2	Modelo local en el horno .....	33
3.3	Modelo para las partículas de carbón .....	34
3.3.1	Balance de masa.....	35
3.3.2	Balance de momentum.....	37
3.3.3	Balance de energía .....	39
3.4	Modelo para el clinker .....	41
3.4.1	Balance de masa por componentes .....	41
3.4.2	Balance de Energía.....	42
3.5	Modelo para la fase gaseosa .....	43
3.5.1	Balance de masa por componentes .....	43
3.5.2	Balance de Energía.....	44
3.6	Solución del modelo.....	45
3.7	Independencia de malla.....	45
<b>4.</b>	<b>Resultados .....</b>	<b>49</b>
4.1	Simulación del horno por dinámica de fluidos computacional-CFD .....	49
4.1.1	Perfil de temperaturas .....	53
4.1.2	Análisis del aporte de energía por convección .....	55
4.1.3	Análisis del aporte de energía por radiación.....	56
4.1.4	Longitud de llama .....	59
4.1.5	Comparación con la literatura.....	60
4.2	Simulación local del proceso de descarbonatación .....	61
4.2.1	Comparación del modelo con datos experimentales .....	63
4.2.2	Fase dispersa.....	73
4.2.3	Análisis de gases y partículas con RADCAL .....	75
<b>5.</b>	<b>Conclusiones y recomendaciones .....</b>	<b>79</b>
5.1	Conclusiones .....	79
5.2	Recomendaciones .....	80
	<b>Bibliografía .....</b>	<b>83</b>



## Lista de figuras

	<b>Pág.</b>
<b>Figura I-1:</b> Esquema del proceso de oxidación con recirculación de gases .....	2
<b>Figura 2-1:</b> Esquema del horno. a) Vista lateral. b) Vista posterior.....	16
<b>Figura 2-2:</b> Esquema de mallas para el horno de cemento. a) Malla con 137.000 elementos. b) Malla con 364.000 elementos [19, 20]. .....	18
<b>Figura 3-1:</b> Volumen de control para los modelos global y local en el horno .....	30
<b>Figura 3-2:</b> Elemento diferencial para el modelo local.....	30
<b>Figura 3-3:</b> Temperatura del sólido en un nodo central.....	46
<b>Figura 3-4:</b> Temperatura del gas en un nodo central. ....	46
<b>Figura 3-5:</b> Temperatura del sólido en la longitud del horno. ....	47
<b>Figura 3-6:</b> Temperatura del gas en la longitud del horno.....	47
<b>Figura 3-7:</b> Conversión de la caliza. ....	48
<b>Figura 4-1:</b> Contornos de temperatura en un plano central del horno. ....	53
<b>Figura 4-2:</b> Comparación de temperaturas máximas en el gas.....	54
<b>Figura 4-3:</b> Temperaturas máximas en la superficie de la carga.....	55
<b>Figura 4-4:</b> Flujo de calor por convección. ....	56
<b>Figura 4-5:</b> Perfiles de radiación absorbida por la carga. ....	57
<b>Figura 4-6:</b> Relación de energía aportada por convección y radiación.....	58
<b>Figura 4-7:</b> Flujo total de calor entregado a la carga.....	58
<b>Figura 4-8:</b> Longitud de llama. ....	59
<b>Figura 4-9:</b> Contornos de longitud de llama. ....	60
<b>Figura 4-10:</b> Temperaturas máximas en mezclas de $O_2/CO_2$ y $O_2/N_2$ [11] .....	61
<b>Figura 4-11:</b> Comparación de resultados para descarbonatación. ....	65
<b>Figura 4-12:</b> Comparación de resultados para la temperatura del gas.....	65
<b>Figura 4-13:</b> Comparación de resultados para la temperatura del sólido. ....	66
<b>Figura 4-14:</b> Temperatura del gas y del sólido para combustión con aire. ....	67
<b>Figura 4-15:</b> Descarbonatación para combustión con aire.....	68
<b>Figura 4-16:</b> Comparación de fracción molar de $O_2$ entre simulación sin partículas y con partículas. ....	68
<b>Figura 4-17:</b> Comparación de fracción molar de $CO_2$ entre simulación sin partículas y con partículas. ....	69
<b>Figura 4-18:</b> Temperaturas en el gas.....	70
<b>Figura 4-19:</b> Temperaturas en el sólido. ....	70
<b>Figura 4-20:</b> Descarbonatación de la caliza.....	71
<b>Figura 4-21:</b> Descarbonatación de la caliza con recirculación de 30%. ....	72

---

<b>Figura 4-22:</b>	Descarbonatación de la caliza con recirculación de 55%.....	72
<b>Figura 4-23:</b>	Descarbonatación de la caliza con recirculación de 70%.....	73
<b>Figura 4-24:</b>	Temperatura de partículas.....	74
<b>Figura 4-25:</b>	Masa de partículas .....	74
<b>Figura 4-26:</b>	Radiación de gases de combustión y partículas. ....	76
<b>Figura 4-27:</b>	Radiación de gases de combustión. ....	77

## Lista de tablas

	<b>Pág.</b>
<b>Tabla 1-1:</b> Costos de equipos mecánicos y eléctricos para una planta convencional [5]. .....	9
<b>Tabla 1-2:</b> Costos adicionales en montaje y construcción en una planta convencional [5]. .....	9
<b>Tabla 1-3:</b> Costos de operación de un planta convencional [5]. .....	9
<b>Tabla 1-4:</b> Costos fijos en una planta convencional [5]. .....	10
<b>Tabla 1-5:</b> Costos de equipos mecánicos y eléctricos para una planta operada con oxicombustión [5]. .....	10
<b>Tabla 1-6:</b> Costos adicionales en montaje y construcción de planta operada con oxicombustión [5]. .....	11
<b>Tabla 1-7:</b> Costos de operación de planta operada con oxicombustión [5]. .....	11
<b>Tabla 1-8:</b> Costos fijo de planta operada con oxicombustión [5]. .....	12
<b>Tabla 1-9:</b> Tabla comparativa de costos [5]. .....	12
<b>Tabla 1-10:</b> Comparación del costo de producción del cemento [5]. .....	13
<b>Tabla 2-1:</b> Análisis próximo y último del carbón utilizado. .....	17
<b>Tabla 2-2:</b> Condiciones de frontera. .....	18
<b>Tabla 2-3:</b> Esquemas de discretización. .....	27
<b>Tabla 3-1:</b> Reacciones heterogéneas para la combustión de la partícula [39, 40]. .....	35
<b>Tabla 3-2:</b> Reacciones homogéneas para la combustión de la partícula [39, 40]. .....	36
<b>Tabla 3-3:</b> Parámetros de reacción superficial del char [15, 31, 41, 42]. .....	37
<b>Tabla 4-1:</b> Fracciones molares de gases oxidantes. .....	50
<b>Tabla 4-2:</b> Condiciones de frontera consideradas en la simulación. .....	50
<b>Tabla 4-3:</b> Flujo másico de oxidante en la entrada primaria y en la secundaria. .....	51
<b>Tabla 4-4:</b> Parámetros evaluados a partir de resultados de simulaciones. .....	52
<b>Tabla 4-5:</b> Condiciones de operación consideradas. .....	62
<b>Tabla 4-6:</b> Composición de la fase sólida[18]. .....	62
<b>Tabla 4-7:</b> Composición del carbón utilizado en la simulación. .....	63
<b>Tabla 4-8:</b> Parámetros utilizados en la simulación. .....	63
<b>Tabla 4-9:</b> Condiciones de operación del horno seleccionadas para la comparación de resultados. .....	64
<b>Tabla 4-10:</b> Fracciones molares de especies en gases de combustión. .....	76





# Introducción

El proceso productivo del cemento requiere grandes cantidades de energía, cerca del 2% del consumo de energía primario y entre el 6-7% del uso de energía industrial global es consumido en este proceso productivo [2]. A este gran consumo energético se suma las grandes cantidades de CO<sub>2</sub> enviadas al ambiente generadas en la combustión de los combustibles utilizados y en el proceso de transformación de la materia prima.

Son numerosos los investigadores e institutos de investigación que tienen en desarrollo proyectos en donde profundizan en temas de energías alternativas, procesos energéticos más eficientes o nuevas energías alternativas [3-6], con el objetivo de mitigar en gran medida los efectos ambientales ocasionados por los procesos térmicos convencionales con combustibles fósiles y aumentar las eficiencias de estos procesos. Estos proyectos de investigación son apoyados en gran medida por entidades gubernamentales y por grandes industrias de gran consumo energético como cementeras y termoeléctricas que se ven ampliamente favorecidas por los resultados que de estos proyectos se obtengan [2, 5-7].

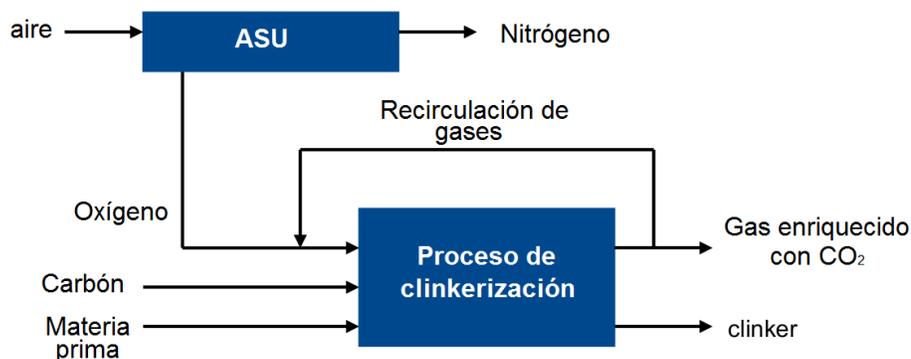
En la empresa ARGOS (cementera líder en Colombia y quinto productor en América Latina) la producción de cemento se realiza mediante el proceso de combustión de carbón con aire. En este proceso se emite CO<sub>2</sub> al ambiente, contaminantes generados como consecuencia del nitrógeno presente en el aire y presenta altos costos de producción por los altos costos de los combustibles. Es por esta razón que la empresa, apoyada en su departamento de investigación y desarrollo, le apuesta a nuevos panoramas energéticos que impacten en el campo económico, social y ambiental.

A partir del interés de la industria ARGOS por mejorar sus procesos productivos, el grupo de investigación TAYEA, perteneciente a la Facultad de Minas de la Universidad Nacional de Colombia sede Medellín, decidió investigar las bondades del proceso de oxcombustión por ser uno de los temas actuales en desarrollo y de impacto en procesos de producción de cemento. Este proceso de combustión ha mostrado tener resultados

optimistas encontrados en pequeñas pruebas de laboratorio y modelos desarrollados para su evaluación en lo que se refiere al tema energético y al tema de impacto ambiental [8-17].

En proceso de oxidcombustión consiste en alimentar oxígeno puro en lugar de aire para la combustión del carbón. El oxígeno es separado del nitrógeno en una unidad de separación de la que se pueden obtener purzas entre 95-97%. Como consecuencia de este aumento en la concentración de oxígeno, la concentración de dióxido de carbono es incrementada significativamente, pudiendo presentarse un alto impacto en los procesos de transformación de la caliza. Las temperaturas obtenidas al interior del horno en la zona de sinterización aumentan respecto a la combustión con aire, pero, por medio de la recirculación de gases producidos en la combustión, esta temperatura puede ser controlada [5]. La recirculación de los gases de combustión es un parámetro determinante para ajustar la temperatura de la llama. Un esquema del proceso es mostrado en la Figura I-1.

**Figura I-1:** Esquema del proceso de oxidcombustión con recirculación de gases



La mayor disponibilidad de oxígeno presente en el proceso hace que mejore la ignición y la combustión de las partículas. Los mayores niveles de dióxido de carbono mejoran el aporte de energía por radiación desde el gas hacia la carga debido a las propiedades térmicas del dióxido de carbono. Estas mayores concentraciones del dióxido de carbono, de hasta un 80% [5], abre nuevas líneas de investigación en el tema de captura de este componente con el fin de eliminar o mitigar las emisiones al ambiente. El proceso de captura de dióxido de carbono, se hace más manejable cuando las concentraciones aumentan.

Conocidos los potenciales beneficios que puede llegar a generar el proceso de oxidación en una planta de producción de cemento y las dificultades de implementarlo en una planta, llevó a trazar como objetivo de este trabajo de investigación, modelar y simular el proceso de oxidación en un horno de cemento. Para llevar a cabo este objetivo, se estudiaron los flujos energéticos entre los gases de combustión y la materia prima bajo diferentes niveles de recirculación, analizados mediante simulaciones por dinámica de fluidos computacional (CFD), se analizó también por medio de un segundo modelo, la descarbonatación de la caliza cuando la recirculación de gases fue variada. Algunas propiedades adicionales del proceso, como la longitud de llama fueron evaluadas también.

En el modelo CFD no se pudo analizar el proceso de descarbonatación de la caliza debido a la forma de modelar el sólido en la parte inferior del horno (materia prima), ya que por simplicidad, se supuso que no tenía desplazamiento en el horno y no presentaba reacciones químicas. Esta limitante llevó a plantear un segundo modelo fenomenológico del horno de cemento con tres fases en consideración: Dos fases continuas y una fase dispersa. El gas y la materia prima conforman las fases continuas y la fase dispersa la componen las partículas de carbón. Este modelo constituyó un gran complemento para el modelo CFD, ya que permitió obtener perfiles de las reacciones de descarbonatación de la caliza para diferentes recirculaciones de gases, la temperatura axial en el sólido, la concentración de especies en el gas y la variación de las propiedades de las partículas de carbón durante la combustión. Los resultados obtenidos en los modelos fueron comparados con datos experimentales reportados en la literatura [11, 18].

Este trabajo de investigación, partió del estudio de los trabajos realizados en el año 2009 para la empresa ARGOS [19, 20] por parte de la Universidad Nacional de Colombia sede Medellín, en donde se estudió la sustitución de la combustión de carbón con aire por la combustión de un gas pobre, generado en un proceso de gasificación, como fuente energética para la producción del cemento.

Las condiciones iniciales para las simulaciones realizadas del proceso de oxidación, fueron obtenidas a partir de un modelo termodinámico global desarrollado con este fin. Este modelo arrojó información de las temperaturas y flujos máxicos de las corrientes gaseosas consideradas en el horno y las concentraciones de las especies en cada una

de ellas. Esta información obtenida del modelo global fue complementada por datos reales de operación brindados por el personal de ARGOS.

Para realizar el análisis de transferencia de energía por radiación en el segundo modelo desarrollado, se utilizó la herramienta de libre acceso RADCAL [21]. En este software se evaluó la incidencia del  $\text{CO}_2$  y del  $\text{H}_2\text{O}$  en la intensidad de radiación variando la temperatura del gas. La radiación de las partículas sólidas al interior del horno fue también analizada con este software.

El presente trabajo está dividido en 4 capítulos. En el primer capítulo se describe la geometría del sistema, las consideraciones para el mallado, los modelos matemáticos utilizados, los parámetros característicos de la simulación y las consideraciones necesarias para la solución del sistema.

En el segundo capítulo se presenta la descripción de un segundo modelo desarrollado como complemento al modelo presentado en el primer capítulo. Se muestran los modelos matemáticos utilizados para el modelo, consideraciones realizadas para las simulaciones, estudio de independencia de malla y la solución del sistema de ecuaciones.

El tercer capítulo presenta los resultados y análisis de los resultados obtenidos en ambos modelos y se discute las implicaciones de una eventual implementación de la oxidación en el proceso productivo del cemento.

El cuarto capítulo presenta las conclusiones más relevantes de la investigación desarrollada y algunas sugerencias de temas de investigación que son considerados prometedores en el panorama industrial.

# 1. Estado del arte

En este capítulo se describen brevemente algunos estudios en el área de oxidación. Se ha separado el tema en tres aspectos: temas que tratan la oxidación en la industria, modelos matemáticos y lo relacionado con los costos de inversión de la tecnología.

## 1.1 Oxidación en la industria

La aplicación del proceso de oxidación con recirculación de gases de combustión con fines de reducir las emisiones de  $\text{CO}_2$ , ha sido estudiada predominantemente por el sector energético en los últimos años [5]. Luego de encontrar resultados prometedores en ensayos a escala piloto, la compañía eléctrica Sueca Vattenfall Europe, construyó una planta a escala piloto con la tecnología de oxidación para generación de energía [5]. Esta planta fue concebida con separación criogénica de aire con puridades de hasta 99.5% y con una planta de separación del  $\text{CO}_2$ . La planta cuenta con una capacidad de 30 MW. La compañía planea para el año 2015 tener en funcionamiento una planta a gran escala y enfocarse en temas de optimización e identificación de puntos críticos en estas mayores escalas.

Las investigaciones realizadas en el sector termoeléctrico constituyen un gran punto de inicio para el sector cementero. Experimentaciones se han llevado a cabo en la industria del cemento en estados unidos teniendo como objetivo principal el incremento de la capacidad productiva. Industrias cementeras Alemanas han desarrollado pruebas con esta tecnología de oxidación con miras a emplear combustibles de menor poder calorífico. Debido a la ausencia de Nitrógeno que no debe ser calentado en los gases oxidantes, la temperatura adiabática de combustión aumenta y la llama se acorta y se vuelve más brillante [13]. Un aumento en la capacidad del horno de entre 20-50% ha sido reportado con aumentos de oxígeno del 30-35%. Otras experiencias han mostrado que el enriquecimiento de oxígeno en la combustión con aire está limitado a una concentración de oxígeno entre 23-25% [14, 22]. Esta limitación se debe a daños producidos en el refractario del horno en la zona de sinterización y a altas emisiones de  $\text{NO}_x$  por el incremento de temperatura [23].

Liu et al [16], investigaron experimentalmente el comportamiento de la combustión de carbón pulverizado con aire y con combinaciones de oxígeno y dióxido de carbono en un pequeño horno de 20 kW de 193 milímetros de diámetro interno y 3 metros de longitud. En este estudio se compararon perfiles de temperatura de los gases, perfiles de composiciones, emisiones de especies como NO<sub>x</sub>, SO<sub>2</sub> y CO. En estas pruebas experimentales se evaluaron ocho diferentes medios de combustión, uno de ellos fue la combustión con aire, y siete variando la concentración de oxígeno desde 21 hasta 35% y combinando la alimentación de estos gases en las entradas primarias y secundarias. Se encontraron buenos resultados con gases oxidantes compuestos con 30% de oxígeno y 70% de dióxido de carbono.

Tang et al [24], estudiaron también las características de la combustión de carbón en una mezcla de oxígeno y dióxido de carbono en un horno vertical de 0.3 MW en donde se evaluó la transferencia de calor, la formación de sulfuros, óxidos de Nitrógeno, composición del gas de combustión. Las pruebas fueron realizadas variando el oxígeno hasta un máximo de 35% y teniendo como base de comparación la combustión con aire. En este estudio se obtuvieron conclusiones similares a las obtenidas por [16] en la concentración de oxígeno pero como conclusión adicional, se encontró que las condiciones de la combustión con oxígeno favorecen considerablemente la transferencia de calor al interior del horno.

Suda et al [17], realizaron un estudio experimental para determinar la velocidad de propagación de la llama cuando se opera con el proceso de oxidación. Las mediciones fueron realizadas con cámaras de alta velocidad. Tres tipos de carbón con diferentes cantidades de material volátil fueron utilizados para los ensayos, al igual que tres mezclas diferentes de gases oxidantes (Ar/O<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> y N<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>), manteniendo constante la concentración de oxígeno en 40%. Se encontró que la velocidad de propagación de la llama en atmósferas de CO<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> se reduce de 3 a 5 veces cuando se comparó con la obtenida con la atmósfera de N<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>.

Zeman [25], analizó una propuesta de un diseño para implementar un proceso de oxidación en una planta industrial para la transformación de clínker. En este trabajo se analizaron cada uno de los componentes y procesos involucrados en el diseño de la planta como recirculación de gases, unidad de generación de O<sub>2</sub>, descarbonatación en el

Clinker, precalentadores de gases, estación para la captura y almacenamiento de CO<sub>2</sub> y compresión posterior a la captura. Como resultado de este estudio se encontraron conclusiones interesantes como el incremento de eficiencia de la planta debido a la recuperación de energía de los gases de combustión, pero por otro lado, un incremento en el consumo eléctrico de la planta se presenta debido a los componentes adicionales para operar con el nuevo proceso.

## 1.2 Modelos y simulaciones en la industria

Chui et al [26], implementaron un modelo CFD para evaluar la combustión en un horno vertical de 0.3 MW a escala piloto con variaciones del gas oxidante y con dos tipos diferentes de quemadores. Las variaciones en el gas oxidante consistieron en modificar el enriquecimiento del oxígeno y la recirculación de los gases. Esta herramienta fue utilizada para evaluar la combustión, la transferencia de calor y la formación de especies contaminantes en la combustión. Como resultado de este estudio se encontraron buenas predicciones por parte del modelo CFD en temperaturas, producción de CO, O<sub>2</sub> y NO.

Andersson et al [10] estudiaron el aporte energético por radiación en el proceso de oxicomustión, teniendo como base la combustión con aire y desarrollaron un modelo para obtener la radiación en cada caso simulado. Durante el estudio, parámetros como la fracción molar del oxígeno (25% – 29%) y la recirculación de gases de combustión fueron variados. Las validaciones de este estudio fueron realizadas en un horno vertical de 100 kW y los resultados obtenidos de las simulaciones tuvieron un buen ajuste con los datos experimentales. Los autores concluyeron que la recirculación de gases de combustión es un parámetro que rige las condiciones de operación del proceso de oxicomustión, siendo posible controlar la temperatura y la intensidad de radiación con variaciones de la recirculación de gases.

Nikolopoulos et al [27] realizaron una investigación por medio de un modelo tridimensional para comparar los procesos de combustión de carbón con aire y con oxígeno. El modelo fue aplicado a un horno vertical del que se obtuvieron datos experimentales del proceso con aire con buenas similitudes con el modelo CFD también para el aire. En el estudio se compararon temperaturas en el horno, componentes en el gas, velocidades del gas y transferencia de calor. Se encontraron buenos resultados que

favorecen la combustión con oxígeno en cuanto a transferencia de calor, temperaturas y producción de componentes perjudiciales se refiere.

Al-Abbas et al [8], realizaron un estudio por CFD de los procesos de combustión con aire y con oxígeno con el fin de encontrar las propiedades de la llama basándose en las temperaturas en la longitud axial del horno, velocidades de los flujos, concentración de especies en los gases generados y consumo de partículas de carbón en el proceso de combustión. Las validaciones de este trabajo fueron realizadas en un horno de 100 kW a escala de laboratorio con buenas similitudes con el modelo.

### **1.3 Costos**

Institutos como Energy Cement Research Academy (ECRA) han realizado investigaciones en el tema de captura de dióxido de carbono [5, 7]. Estas investigaciones han permitido concluir que uno de los procesos mas favorables para la captura de este componente es el proceso de oxidación, debido a las grandes concentraciones de dióxido de carbono que se generan en la combustión. Esta alta generación hace más eficiente el proceso de captura.

Durante el desarrollo de estas investigaciones, los costos de implementación de plantas de cemento fueron evaluados a profundidad y se compararon con los costos de implementación y de operación de una planta de cemento operada con el proceso convencional de combustión y operada con la tecnología en desarrollo de oxidación.

Los costos evaluados para una planta convencional de cemento dimensionada para un millón de toneladas de cemento por año y proyectada para 25 años de operación, se muestran en la Tabla 1-1.

Además de estos costos de equipos mecánicos y eléctricos, se tuvieron en cuenta costos adicionales como: Diseño e ingeniería, gastos de construcción y montajes, contingencias, impuestos, etc. Los costos adicionales se muestran en la Tabla 1-2.

**Tabla 1-1:** Costos de equipos mecánicos y eléctricos para una planta convencional [5].

.Sección del proceso de la planta	Costos (€M)
<i>Trituración y mezclado de materia prima</i>	5.83
<i>Molienda y homogenización</i>	27.18
<i>Pre-calentador</i>	6.2
<i>Pre-calcinador</i>	0.5
<i>Horno rotatorio</i>	12
<i>Enfriador de cemento</i>	25.3
<i>Preparación del carbón</i>	5
<i>Preparación del coke de petróleo</i>	5
<i>Molienda del cemento</i>	20
<i>Embalaje y carga del cemento</i>	13
<b>TOTAL</b>	<b>120</b>

**Tabla 1-2:** Costos adicionales en montaje y construcción en una planta convencional [5].

Descripción	Costos (€M)
<i>Diseño e ingeniería</i>	42
<i>Construcción</i>	48
<i>Contingencia</i>	12
<i>Impuestos</i>	5
<i>Otros costos</i>	37
<b>TOTAL</b>	<b>144</b>

**Tabla 1-3:** Costos de operación de un planta convencional [5].

Descripción	Costo unitario (€/unidad)	Consumo	Costos por año (€M/año)
<i>Caliza</i>	3/t	1.245.973 t/año	3.74
<i>Arena</i>	50/t	7.473 t/año	0.37
<i>Oxido de hierro</i>	50/t	7.473 t/año	0.37
<i>Yeso</i>	10/t	40.000 t/año	0.4
<i>Carbón</i>	65/t	0.0633 Mt/año	4.11
<i>Coque de petróleo</i>	80/t	0.0319 Mt/año	2.55
<i>Materiales diversos</i>			1.15
<i>Energía</i>	0.05/kWh	80.809 MWh/año	4.04
<i>Agua para el proceso</i>	0.1/t	240.000 t/año	0.02
<b>TOTAL</b>			<b>16.76</b>

La Tabla 1-3 contiene los costos de operación derivados de los elementos consumibles asociados con 330 días de trabajo al año en la planta de cemento considerada para el análisis.

La contribución de los costos fijos a los costos de operación de la planta son mostrados en la Tabla 1-4.

**Tabla 1-4:** Costos fijos en una planta convencional [5].

Descripción	Costos por año (€/año)
<i>Mantenimiento</i>	9.4
<i>Trabajo operativo</i>	3.2
<i>Supervisión</i>	0.6
<i>Administración y gastos generales</i>	1.2
<i>Tasas locales</i>	2.4
<i>Seguros</i>	2.4
<b>TOTAL</b>	<b>19.1</b>

**Tabla 1-5:** Costos de equipos mecánicos y eléctricos para una planta operada con oxidación [5]

Sección del proceso de la planta	Costos (€M)
<i>Trituración y mezclado de materia prima</i>	5.83
<i>Molienda y homogenización</i>	24.78
<i>Horno de precalentamiento</i>	2.5
<i>Pre-calcinador Pre-calentador</i>	3.7
<i>Pre-calcinador</i>	0.5
<i>Horno rotatorio</i>	12
<i>Enfriador de cemento</i>	25.3
<i>Preparación del carbón</i>	5
<i>Preparación del coke de petróleo</i>	5
<i>Molienda del cemento</i>	20
<i>Embalaje y carga del cemento</i>	13
<i>Unidad de recuperación de calor</i>	3.9
<i>Unidad separadora de aire</i>	9
<i>Recirculación</i>	1.5
<i>Precipitador electrostático</i>	1.8
<i>Purificación y compresión de CO<sub>2</sub></i>	7.6
<b>TOTAL</b>	<b>145.8</b>

Estos costos estimados para una planta de cemento convencional fueron comparados con la estimación de los costos para una planta con la misma capacidad de producción operada con oxidcombustión. Los costos de equipos mecánicos y eléctricos se muestran en la Tabla 1-5.

Los costos de montajes, diseño e ingeniería, impuestos, etc., se muestran en la Tabla 1-6.

**Tabla 1-6:** Costos adicionales en montaje y construcción de planta operada con oxidcombustión [5]

Descripción	Costos (€M)
<i>Diseño e ingeniería</i>	51
<i>Construcción</i>	59
<i>Contingencia</i>	17
<i>Impuestos</i>	6
<i>Otros costos</i>	49
<b>TOTAL</b>	<b>182</b>

Costos adicionales de operación bajo las mismas consideraciones de la planta convencional (330 días de trabajo por año) son mostrados en la Tabla 1-7.

**Tabla 1-7:** Costos de operación de planta operada con oxidcombustión [5]

Descripción	Costo unitario (€/unidad)	Consumo	Costos por año (€M/año)
<i>Caliza</i>	3/t	1.256.739 t/año	3.77
<i>Arena</i>	50/t	7.542 t/año	0.38
<i>Oxido de hierro</i>	50/t	7.542 t/año	0.38
<i>Yeso</i>	10/t	40.000 t/año	0.4
<i>Carbón</i>	65/t	0.07121 Mt/año	4.68
<i>Coque de petróleo</i>	80/t	0.0271 Mt/año	2.17
<i>Materiales diversos</i>			1.15
<i>Energía</i>	0.05/kWh	174.562 MWh/año	8.73
<i>Agua para el proceso</i>	0.01/t	1.7 Mt/año	0.04
<b>TOTAL</b>			<b>21.7</b>

Los costos fijos de operación de la planta con oxidcombustión se muestran en la Tabla 1-8.

**Tabla 1-8:** Costos fijo de planta operada con oxidcombustión [5]

Descripción	Costos por año (€/año)
<i>Mantenimiento</i>	10.7
<i>Trabajo operativo</i>	4
<i>Supervisión</i>	0.8
<i>Administración y gastos generales</i>	1.4
<i>Tasas locales</i>	2.9
<i>Seguros</i>	2.9
<b>TOTAL</b>	<b>22.8</b>

La disminución de emisiones de CO<sub>2</sub> como consecuencia del proceso de captura produce, a su vez, una disminución en los costos de producción. Para el proceso convencional, se estima una producción de CO<sub>2</sub> de 0.728 toneladas por tonelada de cemento producido, esto quiere decir que en un año productivo se estarían emitiendo 728.422 toneladas de CO<sub>2</sub> al ambiente. Cuando se cuenta con la planta de captura de CO<sub>2</sub> se calcula una captura del 64%, esto es, un total de 465.014 toneladas de CO<sub>2</sub> serán capturadas al año, mientras 282.853 toneladas serán emitidas al ambiente. De esta forma, la ganancia por dejar de emitir CO<sub>2</sub> al ambiente será de 40.2 € / t CO<sub>2</sub> acompañado de un coste de 34.3 € / t CO<sub>2</sub> capturada en el sistema.

La Tabla 1-9 muestra una comparación de los ítems considerados en el cálculo de los costos de la planta.

**Tabla 1-9:** Tabla comparativa de costos [5]

	Unidad	Planta convencional	Planta oxidcombustión
Equipo eléctrico y mecánico	€M	120	145.8
Ingeniería y Montaje	€M	144	182
<i>Total costo inversión</i>	€M	<i>264</i>	<i>327.8</i>
Costos de operación	€/año	16.76	21.7
Costos fijos	€/año	19.1	22.8

De acuerdo a los costos estimados para las plantas, se obtuvo un valor del costo de producción del cemento en cada uno de los procesos. Este costo se muestra en la Tabla 1-10.

**Tabla 1-10:** Comparación del costo de producción del cemento [5]

Tipo de planta	Costo productivo (€/t)
Planta convencional sin captura de CO <sub>2</sub>	65.6
Planta con oxidación y captura de CO <sub>2</sub>	81.6

Cabe mencionar que, a pesar de que la conclusión del estudio de los costos dio al proceso de oxidación como una opción que necesita ser más desarrollada e investigada como consecuencia de sus grandes costos en la actualidad, la estimación de costos no contempló ahorros energéticos del proceso debido a los incrementos en los flujos de calor al interior del horno entre el gas y la carga cuando es operado con esta tecnología.



## 2. Modelo Matemático 3D para el horno de cemento

En este capítulo se presenta el modelo y la simulación realizada, por medio de dinámica de fluidos computacional, a un horno de cemento operado bajo los procesos de combustión de carbón con aire y oxicomustión. En la simulación del horno fueron consideradas 2 fases: Gas y partícula, cada una de ellas transfiriendo energía con las paredes del horno y con un sólido ubicado en la parte inferior que hace las veces de clinker. Se plantearon ecuaciones de transporte para materia, energía y cantidad de movimiento. Además de estos balances, se utilizaron modelos de turbulencia, radiación, mezclado, combustión, desvolatilización y acoplamiento entre las fases.

Se estudió y analizó en la operación del horno de cemento y la incidencia de la recirculación de gases en la transferencia de energía por radiación y convección entre las fases y otros parámetros adicionales como la longitud de la llama y temperaturas al interior del horno. Los flujos energéticos consideran los aportes del gas, partículas y las paredes del horno gracias al modelo considerado para el estudio de la radiación, que, aunque es uno de los modelos computacionalmente más costosos, es muy completo a la hora de considerar los aportes energéticos. Los resultados obtenidos para el proceso de oxicomustión fueron comparados con el caso de combustión de carbón con aire.

El sólido ubicado en la parte inferior del horno se consideró sin movimiento y sin reacciones, pero interviene en la transferencia energética con las fases; por consiguiente, En esta primera parte de simulación no es posible obtener directamente información acerca del proceso químico de descarbonatación de la materia prima. Para considerar esto último, se desarrolló un nuevo modelo matemático que da cuenta del fenómeno de descarbonatación que se describe en el capítulo 3.

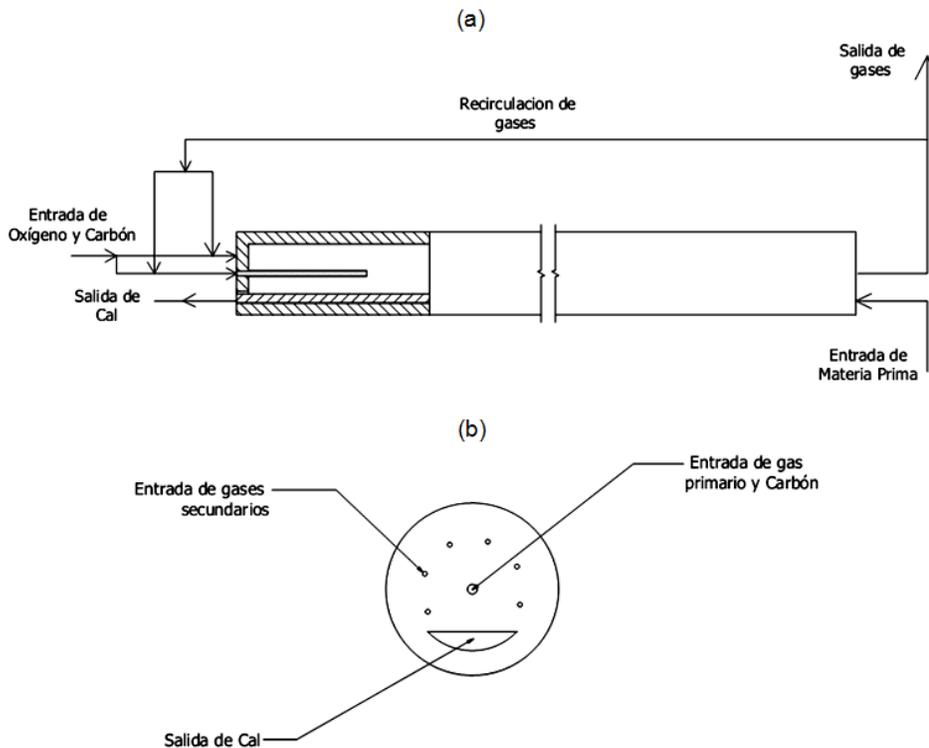
## 2.1 Pre-proceso

El pre-proceso en una simulación está conformado por actividades como la definición del sistema que será simulado, la realización de la malla computacional del sistema, reconocimiento de las condiciones de frontera más apropiadas y análisis de independencia de mallas. Todo lo anterior es realizado con el fin de tener la mayor proximidad posible a la realidad del proceso.

### 2.1.1 Descripción del sistema

El sistema que se modeló se presenta en la Figura 2-1, corresponde a un horno rotatorio de la industria cementera. Este horno tiene un diámetro interior de 2.6 metros, una longitud de 40 metros y una inclinación de 2.5 grados respecto a la horizontal. El horno cuenta con un aislamiento refractario compuesto principalmente de Alúmina al 70% en la zona de llama y al 50% en el resto del horno [19, 20].

**Figura 2-1:** Esquema del horno. a) Vista lateral. b) Vista posterior.



El efecto del proceso de oxicomcombustión sobre la operación del horno fue evaluado variando el porcentaje de gases recirculados.

El combustible utilizado fue carbón con un flujo másico de 0,4 kg/s y sus propiedades son mostradas en la Tabla 2-1. La distribución de tamaños del carbón fue de acuerdo a la distribución Rosin-rambler con diámetro menor  $1 \times 10^{-7}$  m, diámetro máximo  $1.6 \times 10^{-4}$  and diámetro medio  $2.9 \times 10^{-5}$  m.

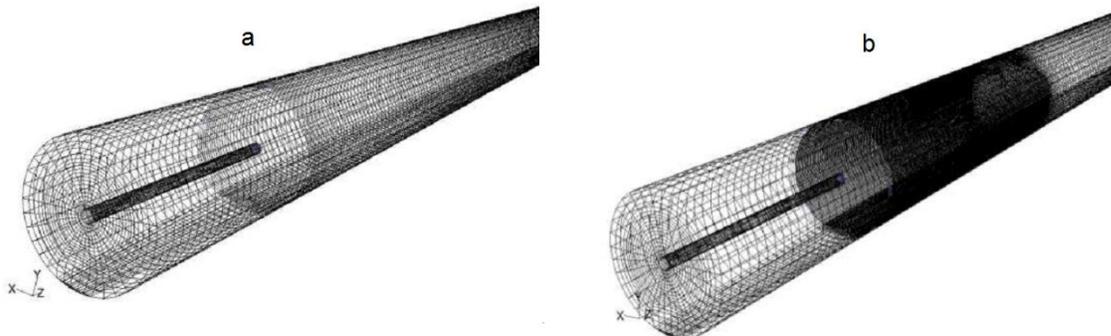
**Tabla 2-1:** Análisis próximo y último del carbón utilizado.

Análisis último			
C (% w/w)	H (% w/w)	N (% w/w)	S (% w/w)
62.01	4.85	1.72	0.35
Análisis Próximo			
Humedad (%)	Volátiles (%)	Carbono fijo (%)	Cenizas (%)
8.42	37.29	52.20	2.1

### 2.1.2 Mallado del sistema

La malla utilizada en este trabajo de investigación es una modificación de las mallas creadas en proyectos anteriores [19, 20]; sin embargo, fue necesario modificar la malla existente con el fin de tener el sistema simulado lo más próximo al sistema real. Este cambio consistió en eliminar siete entradas laterales para el aire secundario y unir las en una sola entrada en un plano en la parte posterior del horno. La malla del horno fue realizada en el preprocesador de CFD GAMBIT® [19, 20]. Se enmalló todo el volumen de acuerdo con el algoritmo Cooper y fue refinada cerca del quemador ya que en esta zona se presentan cambios muy rápidos en las propiedades del fluido y se adaptó una función de crecimiento de celdas aguas abajo del quemador en la que la diferencia en tamaño entre un grupo de celdas y el siguiente, en dirección axial fuera 5%. Dos mallas (gruesa con 137.000 elementos y fina con 364.000 elementos aproximadamente) fueron generadas para evaluar independencia entre ellas. Mallas por encima de 400.000 elementos están por encima de la capacidad computacional de la que se dispone [19, 20]. Un bosquejo de estas mallas es presentado en la Figura 2-2.

**Figura 2-2:** Esquema de mallas para el horno de cemento. a) Malla con 137.000 elementos. b) Malla con 364.000 elementos [19, 20].



A este dominio computacional se le adicionó una zona sólida en la parte inferior con el fin de representar la transferencia de calor entre el fluido y el sólido.

### 2.1.3 Condiciones de frontera

Para iniciar con el proceso de solución del modelo, las condiciones de frontera deben ser definidas en todo el dominio del horno. Las condiciones de frontera consideradas en el horno, tanto geométricas como numéricas, fueron las mostradas en la Tabla 2-2.

**Tabla 2-2:** Condiciones de frontera.

Frontera geométrica	Frontera numérica
Entrada de aire primario-combustible	MASS FLOW INLET
Entrada de aire secundario	MASS FLOW INLET
Salida de gases del horno	OUTFLOW
Paredes del horno	WALL ( <i>radiación, convección</i> )
Carga de caliza y cal	SOLID ( <i>inerte</i> )
Gases en el interior	FLUID

Las condiciones de entrada para el modelo fueron obtenidas de un modelo global realizado al horno de cemento. El personal de ARGOS brindó información real de operación del horno con el proceso de combustión convencional de carbón con aire.

### **2.1.4 Independencia de mallas**

Para evaluar la influencia de la densidad de la malla en los resultados de la simulación, se evaluó la temperatura y la velocidad de un fluido que entra a 100 m/s a temperatura de 2000 K sin reacción química y con un flujo másico de 1.6 kg/s a través del quemador. Esta evaluación representa un menor costo computacional y los valores seleccionados se aproximan a los logrados en el horno real, de acuerdo a información de ARGOS. Para las dos mallas creadas se probaron los esquemas de discretización UPWIND de primer y segundo orden [19, 20]. Para efectos prácticos, en el presente trabajo se consideró que el cambio realizado en la malla en la entrada del aire secundario no afecta el análisis de independencia de mallas.

En las pruebas de independencia de malla, se concluyó que la malla gruesa evaluada con esquema de discretización de segundo orden generaría resultados similares que la malla fina con esquema de discretización de primer orden. Este nivel de independencia de malla obtenido se consideró suficiente para evaluar las principales tendencias en temperaturas, concentraciones y velocidades al interior del horno [19, 20].

## **2.2 Propuesta del modelo matemático en CFD**

En esta sección se describen los modelos utilizados para representar el comportamiento fluido-dinámico de un horno de cemento. La fase gaseosa y discreta fueron modelados en el sistema como Euleriano y Lagrangiano respectivamente. A continuación se describe cada uno de los modelos para cada una de las fases.

### **2.2.1 Ecuaciones de balance para el fluido**

Para realizar las simulaciones en el horno, se resolvieron las ecuaciones de balance de masa, momentum y energía sobre el fluido [28]. Esta fase gaseosa se trabajó en un marco de referencia Euleriano. El balance de masa puede ser expresado como:

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = S_m \quad (2-1)$$

Donde  $\rho$  es la densidad del fluido,  $\vec{v}$  es el vector velocidad y  $S_m$  es un término fuente asociado a la fase discreta como consecuencia de procesos de evaporación, desvolatilización o combustión de las partículas de carbón.

La ecuación de balance del momentum se expresa como [28]:

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_j}(-\rho \overline{u'_i u'_j}) \quad (2-2)$$

Donde  $p$  es la presión estática,  $\mu$  es la viscosidad molecular,  $u$  es la velocidad del fluido y el término  $-\rho \overline{u'_i u'_j}$  es llamado esfuerzos de Reynolds y representa los efectos de la turbulencia. Este último término puede ser expresado como [28]:

$$-\rho \overline{u'_i u'_j} = \mu_t \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \quad (2-3)$$

En (2-3)  $\mu_t$  es la viscosidad turbulenta,  $k$  es la energía cinética turbulenta.

La ecuación de energía para la fase continua se puede expresar de la siguiente manera [28]:

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i H) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( k_t \frac{\partial H}{\partial x_j} \right) + S_h \quad (2-4)$$

donde  $k_t$  es la conductividad turbulenta del gas,  $S_h$  representa una fuente de energía debido a reacciones químicas de las partículas de carbón y  $H$  es la entalpía total del gas que puede expresarse como:

$$H = \sum_j Y_j H_j \quad (2-5)$$

$$H_j = \int_{T_{ref,j}}^T c_{pj} dt + h_j^0(T_{ref,j}) \quad (2-6)$$

En donde  $H_j$  y  $Y_j$  representan la entalpía y la fracción del componente  $j$  en el gas,  $h_j^0$  representa la entalpía de formación de la especie  $j$  a la temperatura de referencia  $T_{ref,j}$ .

### 2.2.2 Ecuaciones de balance para la fase discreta

La variación de la masa de las partículas de carbón es explicada por los modelos de desvolatilización y combustión. El modelo utilizado para la desvolatilización del carbón asume que la tasa de desvolatilización es de primer orden y depende de la cantidad de volátiles aún presentes en la partícula y se expresa de la siguiente manera [29]:

$$-\frac{dm_p}{dt} = k[m_p - (1 - f_{v,0})(1 - f_{w,0})m_{p,0}] \quad (2-7)$$

En donde  $m_p$  es la masa de la partícula,  $f_{v,0}$  es la fracción másica de volátiles presente inicialmente en la partícula,  $f_{w,0}$  es la fracción másica de material que se evapora (en caso de tener una combustión con partículas húmedas),  $m_{p,0}$  es la masa inicial de la partícula y  $k$  es la constante cinética en unidades de  $s^{-1}$ . Esta constante cinética tiene la forma del tipo Arrhenius y está en términos de un factor pre-exponencial y de una energía de activación los cuales tienen valores preestablecido en FLUENT de 492000 y  $7.4 \times 10^7$  J/kmol respectivamente

La ecuación (2-5) tiene la solución aproximada:

$$m_p(t + \Delta t) = (1 - f_{v,0})(1 - f_{w,0})m_{p,0} + [m_p(t) - (1 - f_{v,0})(1 - f_{w,0})m_{p,0}]e^{-k\Delta t} \quad (2-8)$$

Esta solución se puede obtener asumiendo que la temperatura de la partícula tiene pequeños cambios entre pequeños pasos de tiempo.

El modelo utilizado para la combustión superficial de la partícula fue el modelo de velocidades cinéticas y difusivas, el cual asume que las velocidades de las reacciones superficiales son determinadas por velocidades cinéticas o por velocidades difusivas [30, 31].

$$\frac{dm_p}{dt} = -A_p p_{ox} \frac{D_i R_i}{D_i + R_i} \quad (2-9)$$

donde  $A_p$  representa el área superficial de la partícula,  $p_{ox}$  es la presión parcial del oxidante y  $D_i$  y  $R_i$  son las velocidades de difusión y cinética respectivamente. Estas

velocidades se expresan en términos de la temperatura de la partícula,  $T_p$ , de la temperatura del gas oxidante,  $T_g$ , de constantes cinéticas,  $C_{1i}$  y  $E_i$ , y de una constante de difusión para la especie oxidante,  $C_{2i}$ , tal como se indica a continuación [30, 31]:

$$R_i = C_{1i} \exp\left(\frac{-E_i}{RT_p}\right) \quad (2-10)$$

$$D_i = \frac{C_{2i}}{d_p} \left(\frac{T_p + T_g}{2}\right)^{0.75} \quad (2-11)$$

Las trayectorias de las partículas son predichas integrando el balance de fuerza y se puede expresar de la siguiente forma:

$$\frac{du_p}{dt} = K_D(u - u_p) + \frac{g_x(\rho_p - \rho)}{\rho_p} + F_x \quad (2-12)$$

Donde  $F_x$  es un término adicional de aceleración,  $K_D(u - u_p)$  representa las fuerzas de arrastre por unidad de masa, y  $K_D$  se expresa de la siguiente manera [32]:

$$K_D = \frac{18\mu C_D Re}{\rho_p d_p^2 24} \quad (2-13)$$

En estas expresiones  $u$ ,  $u_p$ ,  $\mu$ ,  $\rho$ ,  $\rho_p$  y  $d_p$  son la velocidad de la fase fluido, la velocidad de la partícula, la viscosidad del fluido, la densidad del fluido, densidad de la partícula y el diámetro de la partícula respectivamente. El coeficiente de arrastre,  $C_D$ , puede ser estimado mediante las siguientes correlaciones [33]:

$$C_D = \frac{24}{Re_{sph}} \left(1 + b_1 Re_{sph}^{b_2}\right) + \frac{b_3 Re_{sph}}{b_4 + Re_{sph}} \quad (2-14)$$

$$b_1 = \exp(2.3288 - 6.4581\phi + 2.4486\phi^2) \quad (2-15)$$

$$b_2 = 0.0964 + 0.5565\phi \quad (2-16)$$

$$b_3 = \exp(4.905 - 13.8944\phi + 18.4222\phi^2 - 10.2599\phi^3) \quad (2-17)$$

$$b_4 = \exp(1.4681 - 12.2584\phi + 20.7322\phi^2 - 15.8855\phi^3) \quad (2-18)$$

El factor de forma  $\phi$  se define como:

$$\phi = \frac{s}{S} \quad (2-19)$$

En las correlaciones (2-12) a (2-17)  $s$  es el área superficial de una esfera con el mismo volumen de la partícula,  $S$  es el área superficial de la partícula,  $Re_{sph}$  es el número de Reynolds calculado con el diámetro de la esfera y  $Re$  es el número de Reynolds definido como:

$$Re = \frac{\rho d_p |u_p - u|}{\mu} \quad (2-20)$$

La ecuación de balance de energía sobre la partícula durante las reacciones superficiales es:

$$m_p C_p \frac{dT_p}{dt} = h A_p (T_\infty - T_p) - \frac{dm_p}{dt} H_{reacc} + A_p \epsilon_p \sigma (\theta_R^4 - \theta_p^4) \quad (2-21)$$

donde  $C_p$  es la capacidad calorífica. El primer término del lado derecho representa la transferencia de energía por convección entre la partícula con el fluido, el segundo término representa el cambio de energía debido a las reacciones de combustión y el tercer término representa el intercambio de energía por radiación con otros sistemas considerados en el modelo.

### 2.2.3 Modelo de turbulencia

De acuerdo con los cálculos realizados con el diámetro del horno de 2.5 metros y las propiedades del gas a 343°K se obtuvo un número de Reynolds de  $8.1 \times 10^4$ , que indica un flujo turbulento en el horno. Para tratar este régimen turbulento se seleccionó el modelo  $k-\epsilon$ , puesto que permite una buena capacidad de predicción a un bajo costo computacional [28]. En esta aproximación, el espectro de turbulencia es modelado en su totalidad. El modelo está basado en la hipótesis de difusividad de remolino y permite expresar los esfuerzos de Reynolds en términos del gradiente de la velocidad. La constante de proporcionalidad es denominada viscosidad turbulenta y se obtiene mediante la solución numérica de las ecuaciones de transporte de la energía cinética turbulenta ( $k$ ) y la velocidad de disipación de energía ( $\epsilon$ ). De esta forma, el modelo

reproduce el comportamiento de las escalas mayores de la turbulencia. Las ecuaciones del modelo k-ε son [34]:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \text{div}(\rho k \mathbf{U}) = \text{div}\left(\frac{\mu_t}{\sigma_k} \text{grad} k\right) + 2\mu_t E_{ij} \cdot E_{ij} - \rho \varepsilon \quad (2-22)$$

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \text{div}(\rho \varepsilon \mathbf{U}) = \text{div}\left(\frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \text{grad} \varepsilon\right) + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} 2\mu_t E_{ij} \cdot E_{ij} - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (2-23)$$

Por su parte, la viscosidad turbulenta  $\mu_t$  se define como:

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (2-24)$$

donde  $C_\mu, \sigma_\varepsilon, \sigma_k, C_{1\varepsilon}$  y  $C_{2\varepsilon}$  son constantes ajustables del modelo y  $E_{ij}$  es la componente principal de la deformación de un elemento de fluido. Las constantes toman los siguientes valores para este modelo [34]:

$$C_\mu = 0.09; \sigma_k = 1.00; \sigma_\varepsilon = 1.30; C_{1\varepsilon} = 1.44; C_{2\varepsilon} = 1.92$$

### 2.2.4 Modelo de combustión de No-premezcla

La combustión del carbón es representada con el modelo de combustión de no-premezcla. La fracción de mezcla,  $f$ , definida como la fracción másica elemental originada en la corriente del combustible, es una cantidad escalar conservada que relaciona el estado termoquímico del fluido. Si  $Z_i$  es la fracción másica elemental para el elemento  $i$ , ( $i = C, H, O$ ), entonces  $f$  está dada por [35]:

$$f = \frac{Z_i - Z_{i,ox}}{Z_{i,fuel} - Z_{i,ox}} \quad (2-25)$$

Los subíndices *ox* y *fuel* son los valores de los flujos de entrada del oxidante y el combustible respectivamente. Para el caso de carbón, se pueden representar dos corrientes de combustible diferentes: una de volátiles y otra de semicoque. Esta aproximación hace que las tres fracciones de mezcla no varíen independientemente y se necesite cierta parametrización para su resolución. Este modelo asume que la cinética química es muy rápida y la etapa controlante es el mezclado turbulento. El modelo es

computacionalmente eficiente porque en lugar de resolver una ecuación de balance por cada especie, resuelve dos ecuaciones adicionales para la media y para la varianza de la fracción de mezcla. La ecuación para la media de la fracción de mezcla pueden ser expresada como [35]:

$$\frac{\partial(\rho\bar{f})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\vec{v}\bar{f}) = \nabla \cdot \left( \frac{\mu_t}{\sigma_t} \nabla \bar{f} \right) + S_m \quad (2-26)$$

donde  $\bar{f}$  es la media de la fracción de mezcla,  $\mu_t$  se define de acuerdo a la ecuación (2-22),  $S_m$  es un término fuente debido a la transferencia de masa entre fluido y partículas de carbón y  $\sigma_t$  es una constante del modelo. En un ambiente turbulento, la fracción de mezcla puede fluctuar caóticamente cerca de sus valores medios para todo punto al interior del horno [34]. Para caracterizar los procesos de mezclado y las reacciones químicas, se requiere información adicional relacionada con la estadística de la fluctuación de la fracción de mezcla.

Para modelar las fluctuaciones de la fracción de mezcla, se incorpora su varianza,  $\overline{f'^2}$ , y se define su ecuación de transporte de la siguiente manera [34, 35]:

$$\frac{\partial(\rho\overline{f'^2})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\vec{v}\overline{f'^2}) = \nabla \cdot \left( \frac{\mu_t}{\sigma_t} \nabla \overline{f'^2} \right) + C_g \mu_t (\nabla \bar{f})^2 - C_d \rho \frac{\varepsilon}{k} \overline{f'^2} \quad (2-27)$$

En esta expresión  $\varepsilon$  y  $k$  son las variables del modelo de turbulencia y  $\sigma_t$ ,  $C_g$  y  $C_d$  son constantes del modelo que toman los siguientes valores [34]:

$$\sigma_t = 0.85; C_g = 2.86; C_d = 2.0 \quad (2-28)$$

La ventaja de este modelo está en que se pueden expresar todas las variables termoquímicas (temperatura, densidad, etc.) en términos de la fracción de mezcla y la entalpía; esto conlleva a obtener valores instantáneos de las variables más importantes en el flujo reactivo turbulento. La interacción química-turbulencia es representada mediante una Función de Distribución de Probabilidad (FDP) con una forma asumida a priori. El método del FDP permite integrar las fluctuaciones turbulentas de las variables en el sistema. En este trabajo se considera que la forma de la FDP sigue una distribución beta:

$$\bar{\phi}_i = \int_0^1 \phi_i(f, \bar{H}) p(f) df \quad (2-29)$$

$$p(f) = \frac{f^{\alpha-1}(1-f)^{\beta-1}}{\int f^{\alpha-1}(1-f)^{\beta-1} df} \quad (2-30)$$

$$\alpha = \bar{f} \left[ \frac{\bar{f}(1-\bar{f})}{\bar{f}'^2} - 1 \right] \quad (2-31)$$

$$\beta = (1-\bar{f}) \left[ \frac{\bar{f}(1-\bar{f})}{\bar{f}'^2} - 1 \right] \quad (2-32)$$

donde  $\bar{\phi}_i$  es el valor promedio de una variable termoquímica escalar y  $\phi_i$  es el valor instantáneo en el flujo. La función  $p(f)$  es llamada función de distribución  $\beta$ .

### 2.2.5 Modelo de radiación

Para abordar el tema de la radiación se seleccionó el modelo de ordenadas discretas (DO). Este modelo resuelve una ecuación de transferencia de energía por radiación para un número finito de ángulos sólidos, asociados con un vector de dirección fijo en el sistema cartesiano (x, y, z). El modelo soluciona tantas ecuaciones como vectores directores sean definidos, por lo que aumentar la precisión del método, es decir, aumentar la cantidad de vectores implicaría un gran costo computacional. La ecuación en la dirección del vector de dirección se escribe como [36, 37]:

$$\nabla \cdot (I(\vec{r}, \vec{s}) \vec{s}) + (a + \sigma_s) I(\vec{r}, \vec{s}) = a n^2 + \frac{\sigma T^4}{\pi} \int_0^{4\pi} I(\vec{r}, \vec{s}') \phi(\vec{s}, \vec{s}') d\Omega' \quad (2-33)$$

Donde  $a$  es el coeficiente de absorción,  $\sigma_s$  es el coeficiente de dispersión,  $\sigma$  es la constante de Boltzmann,  $I$  es la intensidad de radiación,  $T$  es la temperatura local,  $\phi$  es la función de fase y  $\Omega$  el ángulo sólido.

En la simulación se trabajó con un método desacoplado que, soluciona de manera independiente las ecuaciones de Intensidad de radiación y energía [36, 37].

## 2.3 Solución del modelo

El modelo matemático fue resuelto mediante el programa Fluent 6.3. El criterio de convergencia para las ecuaciones de energía y ordenadas discretas fue de  $1 \times 10^{-6}$  y para las demás variables se mantuvo en  $1 \times 10^{-4}$ . Se adoptó también el criterio del cierre de los balances de masa y energía. En todos los casos simulados el balance de masa cerró con diferencias del orden de  $1 \times 10^{-3}$  kg/s respecto a la masa de entrada de la fase discreta y  $1 \times 10^{-6}$  kg/s para la fase gaseosa; el balance de energía cerró con diferencias entre el 1% y el 10% de la energía de entrada que tiene órdenes de magnitud de  $1 \times 10^6$  W.

### 2.3.1 Esquemas de discretización

Las ecuaciones de conservación se resolvieron de manera segregada y secuencial en estado estacionario. El acoplamiento entre la velocidad y la presión se manejó por medio del algoritmo SIMPLE. Los esquemas de discretización utilizados se muestran en la Tabla 2-3.

**Tabla 2-3:** Esquemas de discretización.

Variable	Esquema
Presión	PRESTO
Momentum	Second order upwind
Energía cinética turbulenta	Second order upwind
Velocidad de disipación de turbulencia	Second order upwind
Energía	Second order upwind
Ordenadas discretas	Second order upwind
Fracción de mezcla	Second order upwind
Varianza de la fracción de mezcla	Second order upwind



### **3.Propuesta del modelo fenomenológico para el horno de cemento**

En este capítulo se presenta un modelo fenomenológico local del horno de cemento operado bajo condiciones de combustión de carbón con aire y oxidación. Este modelo se desarrolló con el fin de complementar la información brindada por el modelo CFD. Con este modelo local se obtuvo información acerca de la reacción de descarbonatación, perfiles de temperaturas del gas y del sólido y concentración de especies en el horno. Los resultados fueron comparados con estudios experimentales encontrados en la literatura científica [18].

La evaluación de la operación del horno bajo condiciones de oxidación se realizó con un gas oxidante conformado de gases recirculados del proceso de combustión y oxígeno proveniente de una unidad separadora de aire. Se recirculó solo un porcentaje de los gases generados en el proceso, entre 30% y 85%, y el número de Reynolds se mantuvo igual al interior del quemador del horno. El esquema del horno se muestra en la Figura 3-1

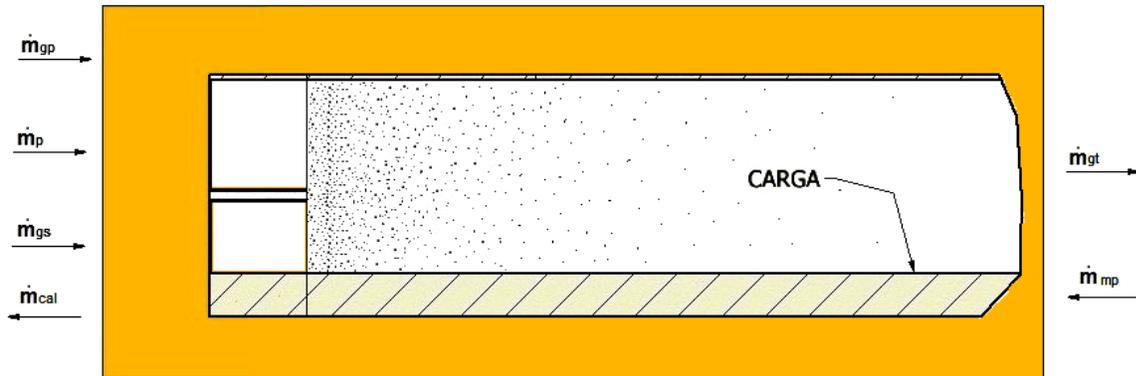
El horno se modeló involucrando tres fases: La primera fase es conformada por el gas oxidante, la segunda fase es conformada por el sólido o materia prima. Estas dos fases se trabajaron bajo un enfoque Euleriano. La tercera fase es conformada por las partículas del carbón y fue tratada con un enfoque Lagrangiano.

El modelo local del horno se dividió en dos partes:

1. Realización de un modelo global del horno de combustión comprendido entre la entrada de carbón y gases oxidantes y la salida de los gases de combustión (ver Figura 3-1). Las reacciones de secado, desvolatilización, combustión de la partícula de carbón y la descarbonatación del sólido fueron considerados en este modelo. Como salidas del modelo se consideraron dos flujos: Un flujo total de gas y un flujo de cal. El gas estará conformado por las especies producidas en el

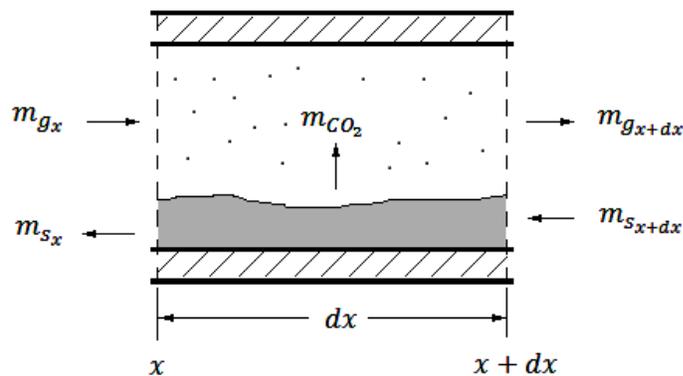
secado, desvolatilización, combustión de la partícula de carbón y en la descarbonatación del sólido.

**Figura 3-1:** Volumen de control para los modelos global y local en el horno



2. Construcción de un modelo local que de cuenta del proceso de descarbonatación del clinker. Los resultados del modelo global fueron las condiciones iniciales para el modelo local en donde se trabajaron las tres fases anteriormente descritas. En el modelo local se consideró que la entrada de las partículas es homogénea a través de un plano perpendicular al quemador del horno ubicado en su extremo, tal y como se muestra en la Figura 3-1.

**Figura 3-2:** Elemento diferencial para el modelo local



En la Figura 3-2 se presenta un elemento diferencial del horno en donde se consideran transferencias energéticas por convección y radiación entre las fases.

### 3.1 Modelo global del horno

En este modelo se presenta el secado, desvolatilización, combustión de la partícula de carbón y descarbonatación de la caliza. Los componentes generados en estos procesos forman parte del gas total en la salida del volumen de control. La transferencia de energía entre las fases son consideradas..

Se supuso condiciones de equilibrio en el punto de salida del volumen de control. Los flujos de entrada al sistema fueron: Gas primario ( $\dot{m}_{gp}$ ), gas secundario ( $\dot{m}_{gs}$ ), partículas ( $\dot{m}_p$ ) y caliza ( $\dot{m}_{mp}$ ). Los flujos de salida de este volumen de control fueron: Un flujo de gases en la salida del horno ( $\dot{m}_{gt}$ ), compuesto por el gas primario o de arrastre, gas secundario, la humedad aportada por la partícula, las especies producto de la desvolatilización y la combustión y los gases generados en la descarbonatación y un flujo de cemento ( $\dot{m}_{cal}$ ).

#### 3.1.1 Balances de masa

El balance de masa del volumen de control se puede escribir de la siguiente manera:

$$\dot{m}_{gp} + \dot{m}_p + \dot{m}_{gs} + \dot{m}_{mp} = \dot{m}_{gt} + \dot{m}_{cal} \quad (3-1)$$

El flujo inicial de la partícula de carbón está conformado de la siguiente forma:

$$\dot{m}_p = \dot{m}_{char} + \dot{m}_{H_2O} + \dot{m}_{vol} \quad (3-2)$$

Y el flujo inicial de materia prima (caliza) se consideró compuesta de la siguiente forma:

$$\dot{m}_{mp} = \dot{m}_{cal} + \dot{m}_{CO_2} \quad (3-3)$$

#### 3.1.2 Balances de masa por componentes

El balance de masa por componentes al interior del volumen de control (considerando las especies  $H_2, N_2, O_2, S, C, H_2O, CO, CO_2$  y tar) queda de la siguiente forma sin considerar acumulación al interior:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Salida por las} \\ \text{fronteras} \\ \text{del sistema} \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{l} \text{Entrada por} \\ \text{las fronteras} \\ \text{del sistema} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{Generación} \\ \text{dentro del} \\ \text{sistema} \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{l} \text{Consumo} \\ \text{dentro del} \\ \text{sistema} \end{array} \right\}$$

O lo que es lo mismo:

$$\dot{m}_{i,salida} - \dot{m}_{i,entrada} = \dot{S}_{i,gen} - \dot{F}_{i,cons} \quad (3-4)$$

Las especies que se liberan de la partícula de carbón y las que se generan al interior del volumen de control son transferidas al gas. En el caso del secado, el 100% del agua pasa a la fase gaseosa. Esta cantidad de agua se obtuvo de los análisis últimos y próximos del carbón.

La generación de especies en la partícula de carbón durante el proceso de desvolatilización es considerada instantánea y fue modelada en unidades de fracciones másicas de acuerdo a [38] como sigue:

$$W_{H_2} = 0.157 - 0.869W_{V,daf} + 1.338W_{V,daf}^2 \quad (3-5)$$

$$W_{H_2O} = 0.409 - 2.389W_{V,daf} + 4.554W_{V,daf}^2 \quad (3-6)$$

$$W_{CO} = 0.423 - 2.389W_{V,daf} + 4.845W_{V,daf}^2 \quad (3-7)$$

$$W_{CO_2} = 0.135 - 0.900W_{V,daf} + 1.906W_{V,daf}^2 \quad (3-8)$$

$$W_{CH_4} = 0.201 - 0.469W_{V,daf} + 0.241W_{V,daf}^2 \quad (3-9)$$

$$W_{tar} = -0.325 + 7.279W_{V,daf} - 12.884W_{V,daf}^2 \quad (3-10)$$

En donde  $W_i$  es el peso másico de la especie  $i$  perdida en el proceso de desvolatilización y  $W_{V,daf}$  es el peso del carbón libre de humedad y cenizas.

### 3.1.3 Balances de energía

El balance de energía realizado en el volumen de control fue el siguiente:

$$\dot{E}_{gp} + \dot{E}_p + \dot{E}_{gs} + \dot{E}_{mp} = \dot{E}_{gt} + \dot{E}_{cal} \quad (3-11)$$

O lo que es lo mismo:

$$\begin{aligned}
 & \dot{m}_{gp} C_{p_{gp}} (T_{gp} - T_{ref}) + \dot{m}_p C_{p_p} (T_p - T_{ref}) + \dot{m}_{gs} C_{p_{gs}} (T_{gs} - T_{ref}) \\
 & \quad + \dot{m}_{mp} C_{p_{mp}} (T_{mp} - T_{ref}) \\
 & = \dot{m}_{gt} C_{p_{gt}} (T_{gt} - T_{ref}) + \dot{m}_{cal} C_{p_{cal}} (T_{cal} - T_{ref}) \\
 & \quad + \dot{m}_{H_2O} (H_{vap}(T_{ref}) - H_l(T_2))
 \end{aligned} \tag{3-12}$$

Tomando como temperatura de referencia la temperatura de entrada del carbón, se elimina el término de energía en la corriente de entrada del carbón como sigue:

$$\begin{aligned}
 & \dot{m}_{gp} C_{p_{gp}} (T_{gp} - T_{ref}) + \dot{m}_{gs} C_{p_{gs}} (T_{gs} - T_{ref}) + \dot{m}_{mp} C_{p_{mp}} (T_{mp} - T_{ref}) \\
 & = \dot{m}_{gt} C_{p_{gt}} (T_{gt} - T_{ref}) + \dot{m}_{cal} C_{p_{cal}} (T_{cal} - T_{ref}) \\
 & \quad + \dot{m}_{H_2O} (H_{vap}(T_{ref}) - H_l(T_2))
 \end{aligned} \tag{3-13}$$

Una vez se obtuvieron resultados con este modelo global se pasó a modelar el sistema de tres fases (fase dispersa y dos fases continuas) tomando estos resultados como condiciones iniciales.

## 3.2 Modelo local en el horno

Como se mencionó anteriormente, este modelo local fue realizado con la necesidad de obtener información del proceso de descarbonatación del sólido a partir de sus perfiles axiales de temperatura. Las principales consideraciones realizadas para la construcción del modelo son listadas a continuación:

1. El modelo es unidimensional.
2. Existen tres fases en el horno: Una fase gaseosa compuesta por gases de combustión recirculados, oxígeno proveniente de la unidad separadora de aire, humedad de la partícula como consecuencia del secado y especies producidas en la desvolatilización y combustión de las partículas de carbón y en la descarbonatación de la caliza; y una segunda fase compuesta por el sólido que fluye a través del horno y una tercera fase dispersa compuesta por las partículas de carbón.

3. El secado y la desvolatilización de las partículas de carbón se realizan instantáneamente al ingresar al horno.
4. Se analizó la evolución de las propiedades de las fases en el tiempo, por tanto el modelo se realizó en estado transitorio.
5. El modelo Lagrangiano para la fase dispersa se compone de los balances de masa, momentum y energía. Para las fases continuas se plantearon balances de masa y energía considerando los términos de acoples entre las fases.
6. Se consideró que no existen mecanismos de transporte difusivos en los balances de materia y energía.
7. El flujo de los gases al interior del horno se consideró flujo pistón.
8. Las partículas de carbón fueron inyectadas de forma homogénea a través de un plano transversal del horno ubicado en el extremo del quemador, tal y como se muestra en la Figura 3-1.
9. Las condiciones de entrada fueron obtenidas del modelo global planteado en la sección 3.1.
10. Se consideró una porosidad al interior del horno  $\phi$  relacionada con la fracción volumétrica de sólidos y con el consumo de las partículas a medida que el proceso de combustión se realiza.
11. Se consideró un acople de dos vías entre las partículas y la fase gaseosa. Las dos fases intercambian masa, momentum y energía.

### 3.3 Modelo para las partículas de carbón

A continuación se presentarán los balances propuestos para las partículas de carbón teniendo en cuenta que la desvolatilización y el secado se presentan justo en la entrada del horno en un diferencial de tiempo muy pequeño. Esta consideración puede ser realizada por las altas temperaturas de entrada de los gases de arrastre obtenidos en el modelo global. Por esta razón solo se consideró pérdida de masa de la partícula en el tiempo debido al proceso de combustión.

En esta sección se presentan las ecuaciones de balance para una sola partícula, pero en el sistema simulado se tendrá un número  $N$  de partículas, a las cuales se les conoce su ubicación en el tiempo con el fin de realizar los cálculos de las transferencias energéticas

con el gas y el sólido. Se calculará entonces la evolución de las propiedades de las partículas en el tiempo y en el espacio.

### 3.3.1 Balance de masa

La pérdida de masa de la partícula es consecuencia solo del proceso de combustión  $\dot{m}_{comb}$ , como se muestra en la siguiente expresión:

$$-\frac{dm_p}{dt} = \dot{m}_{comb} \quad (3-14)$$

Este balance de masa sobre la partícula de carbón es similar al realizado en la simulación por dinámica de fluidos computacional. La diferencia fundamental radica en que la simulación por CDF se consideró que las partículas de carbón ingresan al horno secas, por lo que la variación de la masa debido a la pérdida de humedad no se consideró. El proceso de desvolatilización de la partícula es modelado de la misma forma como se mostró en la sección 3.1.1. La combustión de la partícula de carbón inicia una vez ingresa al horno. Esta combustión es iniciada posterior a los procesos de desvolatilización y secado que se dan instantáneamente. Las reacciones heterogéneas y homogéneas que se consideraron en este proceso de combustión son mostradas en la Tabla 3-1 y en la Tabla 3-2:

*Reacciones heterogéneas:*

**Tabla 3-1:** Reacciones heterogéneas para la combustión de la partícula [39, 40]

	Reacción	Energía de Formación (kJ/kmol)
<b>1</b>	$C + \frac{1}{2}O_2 \xrightarrow{yields} CO$	$\Delta H_r = -110.4$
<b>2</b>	$C + CO_2 \xrightarrow{yields} 2CO$	$\Delta H_r = 170.7$

Reacciones homogéneas:

**Tabla 3-2:** Reacciones homogéneas para la combustión de la partícula [39, 40]

	Reacción	Energía de Formación (kJ/kmol)
<b>3</b>	$CO + \frac{1}{2}O_2 \xrightarrow{yields} CO_2$	$\Delta H_r = -283.2$

Las velocidades de las reacciones heterogéneas (reacciones (1) y (2)) son gobernadas por la velocidad de difusión de las especies de la fase gaseosa en la superficie de la partícula y por la velocidad cinética. La velocidad de consumo del char estará dado por la siguiente expresión [30, 31]:

$$\dot{m}_{comb} = \sum_{i=1}^2 \frac{dm_i}{dt} \quad (3-15)$$

En donde  $\frac{dm_i}{dt}$  es la variación de la masa de la partícula debido a la reacción  $i$  y se define como [30, 31]:

$$\frac{dm_i}{dt} = A_p P_{ox} \frac{R_i D_i}{R_i + D_i} \quad (3-16)$$

Y en donde  $A_p$  es el área superficial de la partícula,  $P_{ox}$  es la presión parcial de la especie oxidante en la superficie de la partícula,  $R_i$  es la velocidad cinética en la reacción  $i$  y se define como [30, 31]:

$$R_i = C_{1i} \exp\left(\frac{-E_i}{RT_p}\right) \quad (3-17)$$

En donde  $T_p$  es la temperatura de la partícula de carbón y  $C_{1i}$  y  $E_i$  son constantes cinéticas en cada una de las reacciones que toman los valores mostrados en la Tabla 3-3.  $D_i$  es la velocidad de difusión en cada reacción de las especies de la fase gaseosa en la superficie de la partícula definida como [30]:

$$D_i = \frac{C_{2i}}{d_p} \left( \frac{T_p + T_g}{2} \right)^{0.75} \quad (3-18)$$

En donde  $T_g$  es la temperatura del gas oxidante y  $C_{2i}$  es una constante de difusión para la especie oxidante que toma el valor de acuerdo a la Tabla 3-3, considerando la reacción con oxígeno para altos niveles de  $CO_2$  [15, 41].

**Tabla 3-3:** Parámetros de reacción superficial del char [15, 31, 41, 42]

Reacción	$C_{1i}, kg/s.m^2.Pa$	$E_i, J/kmol$	$C_{2i}, S/K^{0.75}$
1	0.005	$74 \times 10^6$	$4.4 \times 10^{-12}$
2	$6.35 \times 10^{-3}$	$162 \times 10^6$	$1.69 \times 10^{-12}$
3	$1.9219 \times 10^{-3}$	$147 \times 10^3$	

La reacción homogénea (3), será controlada solo por la velocidad cinética por medio de la siguiente expresión [43]:

$$\frac{d[CO]}{dt} = -A_r \cdot \exp\left(-E/RT_g\right) [CO][O_2]^{0.3}[H_2O]^{0.5} \quad (3-19)$$

Siendo  $A_r = 2.5 \times 10^8 \text{ kmol}/m^3s$  y  $E/R = 8052 \text{ K}$  [43, 44].

La variación total de la masa de la partícula será la suma de las velocidades en las reacciones heterogéneas.

$$-\frac{dm_p}{dt} = \sum_{i=1}^2 \frac{dm_i}{dt} = A_p P_{ox} \frac{R_1 D_1}{R_1 + D_1} + A_p P_{ox} \frac{R_2 D_2}{R_2 + D_2} \quad (3-20)$$

### 3.3.2 Balance de momentum

Con el objetivo de poder obtener información de velocidades y trayectorias de las partículas de carbón, se realiza el balance de momentum sobre la partícula mostrado a continuación:

$$\frac{d\vec{u}_p}{dt} = \vec{F}_D + \vec{F}_G + \vec{F}_V + \vec{F}_P + \vec{F}_L + \vec{F}_B \quad (3-21)$$

En donde  $u_p$  es la velocidad de la partícula y  $\vec{F}_D$  es la fuerza de arrastre,  $\vec{F}_G$  es la fuerza debido a la gravedad,  $\vec{F}_V$  es la fuerza de masa virtual,  $\vec{F}_P$  es la fuerza debido a los gradientes de presión,  $\vec{F}_L$  es la fuerza de sustentación y  $\vec{F}_B$  es la fuerza de Basset.

Debido al carácter unidimensional del modelo, a la baja velocidad relativa y a la gran diferencia de densidades entre las dos fases ( $\rho_p/\rho_g > 1000$ ) [45], se pueden despreciar las fuerzas de gravedad, la fuerza virtual, la fuerza de sustentación, las fuerzas de presión estática y Basset.

La diferencia de este balance de momentum con el planteado en el modelo CFD radica en la no consideración de la fuerza de gravedad ni fuerzas de sustentación por el carácter unidimensional del modelo.

La única fuerza externa actuando sobre la partícula será la fuerza de arrastre y será modelada por medio de la siguiente expresión [32]:

$$\vec{F}_D = K_D(\vec{u} - \vec{u}_p) \quad (3-22)$$

Siendo  $K_D$  [32]:

$$K_D = \frac{18\mu C_D Re}{\rho_p d_p^2 24} \quad (3-23)$$

En donde  $\mu$  es la viscosidad del fluido alrededor de la partícula,  $Re$  es el número de Reynolds de partícula y  $C_D$  es el coeficiente de arrastre que se modela de la siguiente forma [33]:

$$C_D = \frac{24}{Re_{sph}} (1 + b_1 Re_{sph}^{b_2}) + \frac{b_3 Re_{sph}}{b_4 + Re_{sph}} \quad (3-24)$$

$Re_{sph}$  es el número de Reynolds evaluado con el diámetro de una esfera que tiene el mismo volumen de la partícula y los valores de las constantes  $b_1, b_2, b_3$  y  $b_4$  son determinados de acuerdo a [33]:

$$C_D = \frac{24}{Re_{sph}} (1 + b_1 Re_{sph}^{b_2}) + \frac{b_3 Re_{sph}}{b_4 + Re_{sph}} \quad (3-25)$$

$$b_1 = \exp(2.3288 - 6.4581\phi + 2.4486\phi^2) \quad (3-26)$$

$$b_2 = 0.0964 - 0.5565\phi \quad (3-27)$$

$$b_3 = \exp(4.905 - 13.8944\phi + 18.4222\phi^2 - 10.2599\phi^3) \quad (3-28)$$

$$b_4 = \exp(1.4681 - 12.2584\phi + 20.7322\phi^2 - 15.8855\phi^3) \quad (3-29)$$

En donde  $\phi$  es el factor de forma expresado como:

$$\phi = \frac{s}{S} \quad (3-30)$$

Y  $s$  es el área superficial de una esfera con el mismo volumen de la partícula y  $S$  es el área superficial de la partícula.

La ecuación de momentum para la partícula quedará entonces de la siguiente manera:

$$\frac{du_p}{dt} = \frac{18\mu C_D Re}{\rho_p d_p^2} \frac{C_D Re}{24} (u - u_p) \quad (3-31)$$

Una vez calculada la velocidad por medio de la anterior expresión, la trayectoria de la partícula podrá ser calculada usando la siguiente expresión:

$$\frac{dx_i}{dt} = u_p \quad (3-32)$$

La posición de la partícula es de gran importancia a la hora de calcular los términos de acople entre fases, es decir, para calcular la masa o la energía aportada desde las partículas hacia el sólido o gas, se debe realizar un conteo de las partículas que se encuentran en el volumen de control del medio continuo y considerar el aporte de cada una de ellas.

### 3.3.3 Balance de energía

En el balance de energía durante la combustión de la partícula se debe tener en cuenta la transferencia de calor por convección con el gas, la transferencia de calor por radiación

con las paredes del horno y la generación de calores durante las reacciones heterogéneas superficiales.

$$m_p c_p \frac{dT_p}{dt} = \dot{q}_{conv}''' + \dot{q}_{rad}''' + \dot{q}_{het}''' \quad (3-33)$$

En donde  $c_p$  es la capacidad calorífica de la partícula,  $\dot{q}_{conv}'''$  es el flujo de calor por convección desde la partícula hacia la fase gaseosa,  $\dot{q}_{het}'''$  es el flujo de calor generado en las reacciones heterogéneas superficiales y  $\dot{q}_{rad}'''$  es el flujo de calor por radiación.

Cada uno de estos flujos de calor se expresarán tal y como sigue:

$$\dot{q}_{conv}''' = -\pi d_p^2 \lambda_g Nu (T_p - T_g) \quad (3-34)$$

$$\dot{q}_{rad}''' = \sum_{k=1}^{n_{part}} A_p \epsilon_p \sigma (T_p^4 - T_i^4) - A_p \epsilon_p \sigma (T_p^4 - T_w^4) \quad (3-35)$$

En donde  $\lambda_g$  es la conductividad térmica del gas en las proximidades de la partícula de carbón y  $Nu$  es el número de Nusselt que por simplicidad tomará el valor de  $Nu = 2$ ,  $\frac{dm_p}{dt}$  es la velocidad con la que varía la masa de la partícula,  $\epsilon_p$  es la emisividad de la partícula y  $\sigma$  es la constante de Stefan-Boltzmann que tiene un valor de  $5.68 \times 10^{-8} \text{ W/m}^2\text{k}^4$ . El calor generado por las reacciones heterogéneas superficiales será:

$$\begin{aligned} \dot{q}_{het}''' &= \frac{dm_p}{dt} H_{reac} = \sum_{i=1}^2 \frac{dm_i}{dt} H_{reac_i} \\ &= \left( A_p P_{ox} \frac{R_1 D_1}{R_1 + D_1} \right) \Delta H_{reac_1} + \left( A_p P_{ox} \frac{R_2 D_2}{R_2 + D_2} \right) \Delta H_{reac_2} \end{aligned} \quad (3-36)$$

En donde  $H_{reac_i}$  es el calor generado en la reacción heterogénea  $i$ .

Reemplazando las expresiones (3-33), (3-34) y (3-35) en la ecuación de balance de Energía, se convierte en la siguiente expresión:

$$\begin{aligned}
m_p c_p \frac{dT_p}{dt} = & -\pi d_p^2 \lambda_g Nu (T_p - T_g) + \sum_{k=1}^{n_{part}} A_p \epsilon_p \sigma (T_p^4 - T_i^4) - A_p \epsilon_p \sigma (T_p^4 - T_w^4) \\
& + \sum_{i=1}^2 \frac{dm_i}{dt} H_{reac_i}
\end{aligned} \tag{3-37}$$

O lo que es lo mismo:

$$\begin{aligned}
m_p c_p \frac{dT_p}{dt} = & -\pi d_p^2 \lambda_g Nu (T_p - T_g) + \sum_{k=1}^{n_{part}} A_p \epsilon_p \sigma (T_p^4 - T_i^4) - A_p \epsilon_p \sigma (T_p^4 - T_w^4) \\
& + + \left( A_p P_{ox} \frac{R_1 D_1}{R_1 + D_1} \right) H_{reac_1} + \left( A_p P_{ox} \frac{R_2 D_2}{R_2 + D_2} \right) H_{reac_2}
\end{aligned} \tag{3-38}$$

### 3.4 Modelo para el clinker

Este modelo realizado para el clinker se realizó bajo un enfoque Euleriano. Se realizaron balances de materia y energía considerando el término adicional de transporte de energía por conducción, de acuerdo a la ley de Fourier.

#### 3.4.1 Balance de masa por componentes

El balance de masa por especies se plantea de la siguiente manera:

$$\frac{\partial \rho_{s,i}}{\partial t} + \frac{\partial (\rho_{s,i} \vec{v}_{s,i})}{\partial x} = \dot{r}_{s,i} \tag{3-39}$$

Las especies consideradas para el sólido son:  $j = \text{CaCO}_3, \text{CaO}, \text{SiO}_2, \text{C}_2\text{S}, \text{C}_3\text{S}, \text{Al}_2\text{O}_3, \text{C}_3\text{A}, \text{Fe}_2\text{O}_3, \text{C}_4\text{AF}, \text{H}_2\text{O}$ . El modelo solo considera la reacción de descarbonatación dada por:



La reacción procederá siempre y cuando la presión de descomposición del  $\text{CaCO}_3$  sea mayor que la presión parcial del  $\text{CO}_2$  en la fase gas que rodea la fase sólida [46]. La presión de equilibrio del  $\text{CO}_2$  en la reacción de descarbonatación estará influenciada por la naturaleza de la caliza, pureza y por la malla estructural [39]. Una expresión para la

presión de equilibrio del CO<sub>2</sub> en la reacción de descarbonatación expresada en unidades de atmósferas está dada por:

$$P_{eq} = 4.137 \times 10^7 \exp\left(-\frac{20474}{T}\right) \quad (3-41)$$

La velocidad neta de descarbonatación dependerá de varios factores tales como la transferencia de energía desde la fase de partículas y gaseosa hacia la superficie sólida, transporte de energía por conducción a través del sólido, reacción química – liberación de CO<sub>2</sub>, difusión másica del CO<sub>2</sub> hacia la superficie sólida [39] y transferencia de CO<sub>2</sub> hacia la fase gas. La velocidad de reacción se puede expresar como:

$$\dot{r} = k_s A_s \quad (3-42)$$

Siendo A<sub>s</sub> el área superficial de la partícula sólida y la constante cinética k<sub>s</sub> dada por un comportamiento tipo Arrhenius [47]:

$$k_s = A_0 \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad (3-43)$$

donde A<sub>0</sub>=1.18 × 10<sup>3</sup> kmol m<sup>-2</sup> s<sup>-1</sup>, E<sub>a</sub>=185 kJ mol<sup>-1</sup> y el calor de reacción es: ΔH=179.4 kJ mol<sup>-1</sup> [47]:. El efecto de la presión parcial del CO<sub>2</sub> se incorpora dentro del modelo asumiendo que la constante cinética depende linealmente de la diferencia de la presión del CO<sub>2</sub> con respecto al estado de equilibrio:

$$k'_s = \begin{cases} k_s, & P < 10^{-2} P_{eq} \\ k_s \frac{P_{eq} - P}{P_{eq}}, & 10^{-2} P_{eq} < P < P_{eq} \end{cases} \quad (3-44)$$

### 3.4.2 Balance de Energía

El balance de energía se presenta de la siguiente forma:

$$\rho_s c_p \frac{\partial T_s}{\partial t} + \frac{\partial \rho_s h_s \vec{v}_s}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial x} \right) + \dot{q}_{conv}''' + \dot{q}_{rad}''' + \dot{S}_g \quad (3-45)$$

En donde  $\dot{q}_{conv}'''$  denota la transferencia de energía por convección con la fase gaseosa,  $\dot{q}_{rad}'''$  es la transferencia de energía por radiación con la fase dispersa y  $\dot{S}_g$  es el consumo de energía debido a las reacciones que se presentan en el proceso.

### 3.5 Modelo para la fase gaseosa

El planteamiento de las ecuaciones para la fase gaseosa fue realizado bajo un enfoque Euleriano. Ecuaciones de balance de masa y energía fueron planteadas teniendo en cuenta las interacciones con el clinker y las partículas de carbón.

#### 3.5.1 Balance de masa por componentes

Los cambios de masa en los componentes de la fase gaseosa serán ocasionados por las reacciones homogéneas y heterogéneas.

$$\frac{\partial \rho_{g,i}}{\partial t} + \frac{\partial (\rho_{g,i} \vec{v}_{g,i})}{\partial x} = \dot{r}_{g,i} \quad (3-46)$$

En donde  $\rho$  es la densidad del gas,  $\vec{v}$  es la velocidad,  $x$  es la posición espacial,  $\dot{r}_{g,i}$  es la velocidad neta de reacción, que se expresa como:

$$\dot{r}_{g,i} = \sum_{k=1}^{N_{pvol}} \dot{r}_{g,i_k} \quad (3-47)$$

En donde  $N_{pvol}$  es el número de partículas al interior del volumen de control que aportan especies a la fase gaseosa,  $\dot{r}_{g,i_k}$  es la velocidad de producción o consumo de la especie  $i$  de  $k$ -ésima partícula dentro del volumen de control hacia la fase gaseosa.

$$\dot{r}_{g,i_k} = \sum_{gg=1}^{nr_{gg}} r_{i,gg} M_i + \sum_{gs=1}^{nr_{gs}} \frac{r_{i,gs}}{V_p} \quad (3-48)$$

En donde  $r_{i,gg}$  es la velocidad de reacción homogénea,  $M_i$  es el peso molecular,  $r_{i,gs}$  es la velocidad de reacción heterogénea y los subíndices  $g$ ,  $s$  e  $i$  denotan la fase gas, fase sólida y las especies. El primer término del lado derecho se obtiene de la generación de especies de las reacciones homogéneas y el segundo término de las reacciones heterogéneas presentes en el proceso de combustión como se muestra a continuación.

$$\dot{r}_{g,CO} = -r_{CO,r4} M_{CO} + \frac{r_{CO,r1}}{V_p} + 2 \frac{r_{CO,r2}}{V_p} \quad (3-49)$$

$$\dot{r}_{g,O_2} = -\frac{1}{2}r_{O_2,r4}M_{O_2} - \frac{1}{2}\frac{r_{O_2,r1}}{V_p} \quad (3-50)$$

$$\dot{r}_{g,CO_2} = r_{CO_2,r4}M_{CO_2} - \frac{r_{CO_2,r1}}{V_p} \quad (3-51)$$

### 3.5.2 Balance de Energía

El cambio en la temperatura del gas es debido al intercambio por convección y por radiación con la fase sólida y por el calor generado en las reacciones homogéneas y heterogéneas que se presentan en el proceso.

$$\rho_g c_p \frac{\partial T_g}{\partial t} + \frac{\partial \rho_g h_g \vec{v}_g}{\partial x} = \dot{q}_{conv}''' + \dot{q}_{rad}''' + \dot{S}_g \quad (3-52)$$

En donde  $\dot{q}_{conv}'''$  es la transferencia total de calor por convección con las partículas dentro del volumen de control y  $\dot{q}_{rad}'''$  es la radiación entre el gas y las paredes del horno,  $\dot{S}_g$  representa la energía consumida/liberada por las reacciones químicas presentes en el proceso, y como solo se considera una sola reacción homogénea, se tendrá solo un término. Los términos de flujo de energía se expresan de la siguiente forma:

$$\dot{q}_{conv}''' = \sum_{k=1}^{N_{pvol}} \pi d_p^2 \lambda_g Nu (T_{pk} - T_g) \quad (3-53)$$

$$\dot{q}_{rad}''' = A_p \epsilon_p \sigma (T_g^4 - T_w^4) \quad (3-54)$$

$$\dot{S}_{gco} = \sum_{K=1}^{N_{pvol}} r_{CO,r4} \Delta H_f M_{CO} \quad (3-55)$$

En donde  $\Delta H_f$  es la entalpía de formación en la reacción 3.

Reemplazando estas expresiones en el balance de energía se convierte en:

$$\begin{aligned} & \rho_g c_p \frac{\partial T_g}{\partial t} + \frac{\partial \rho_g h_g \vec{v}_g}{\partial x} \\ & = \sum_{k=1}^{N_{pvol}} \pi d_p^2 \lambda_g Nu (T_{pk} - T_g) - A_p \epsilon_p \sigma (T_g^4 - T_w^4) + \sum_{K=1}^{N_{pvol}} r_{CO,r4} \Delta H_f M_{CO} \end{aligned} \quad (3-56)$$

### 3.6 Solución del modelo

Para las ecuaciones de balance locales, el espacio fue discretizado por medio de la implementación del método de los volúmenes finitos utilizando el esquema de avance [28]. Para la solución del sistema de ecuaciones se seleccionó el método de Gear incorporado en la librería DIVPAG [1] del software Fortran. La tolerancia del método de Gear se estableció en  $1 \times 10^{-16}$ .

El tamaño de paso temporal para la fase gaseosa se fijó utilizando como criterio que el número de Courant fuera menor o igual a 0.9 con el fin de asegurar la estabilidad numérica de la solución del conjunto de ecuaciones diferenciales parciales.

El modelo se solucionó primero para las fases continuas y luego a partir de esta información se resolvió la fase discreta. La solución obtenida en la fase discreta será incorporada para la próxima iteración de las fases continuas. Una diferencia de escalas temporales se detectó en los fenómenos ocurriendo en las fases; por esta razón se decidió como método de solución para el modelo que por cada iteración de la fase continua se realizan 10 iteraciones de la fase discreta. Debido a las limitaciones computacionales que se tuvieron, se decidió fijar el número de iteraciones de la fase discreta en 10.

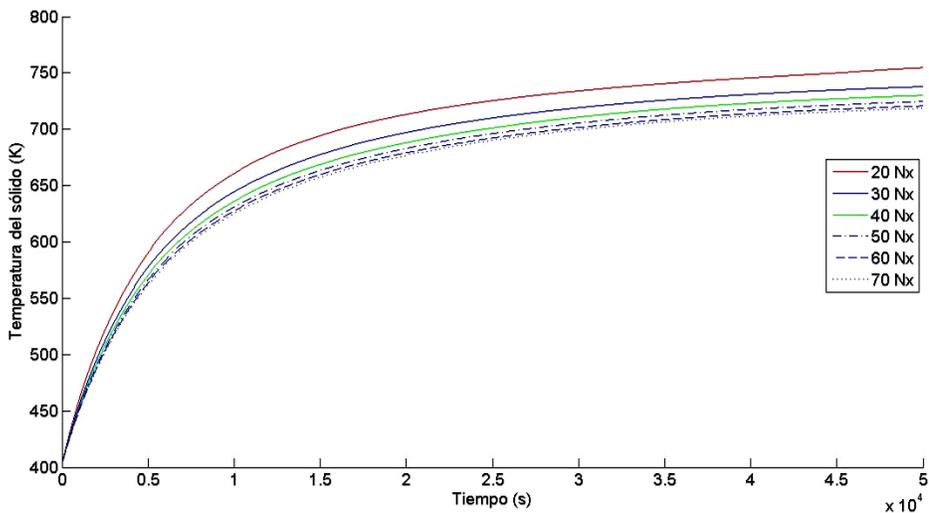
### 3.7 Independencia de malla

Como paso inicial en las simulaciones del proceso de combustión con el modelo local, se realizó una evaluación de independencia de mallas para determinar el mínimo número de nodos con los cuales se puede obtener resultados con buena precisión sin aumentar el costo computacional. Por simplicidad, el modelo fue solucionado sin incorporar la fase discreta y solo fueron solucionadas las fases continuas. La malla fue evaluada con 20,

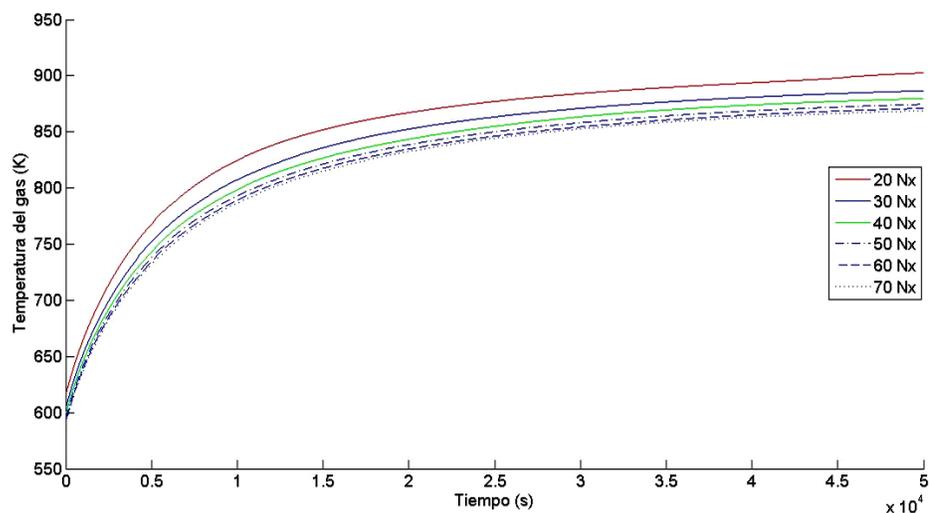
30, 40, 50, 60 y 70 volúmenes finitos en la dirección axial del horno y se evaluó la temperatura del gas y del sólido en función del tiempo y en estado estacionario.

En la Figura 3-3 y en la Figura 3-4 se presentan la evolución temporal de la temperatura del sólido y del gas respectivamente, en un punto ubicado en el centro de la longitud del horno. En las Figura 3-5 y Figura 3-6 los resultados de los perfiles axiales de temperatura del sólido y del gas respectivamente, son mostradas. El número de volúmenes finitos en dirección axial tiene impacto sobre la solución numérica del sistema de ecuaciones.

**Figura 3-3:** Temperatura del sólido en un nodo central.

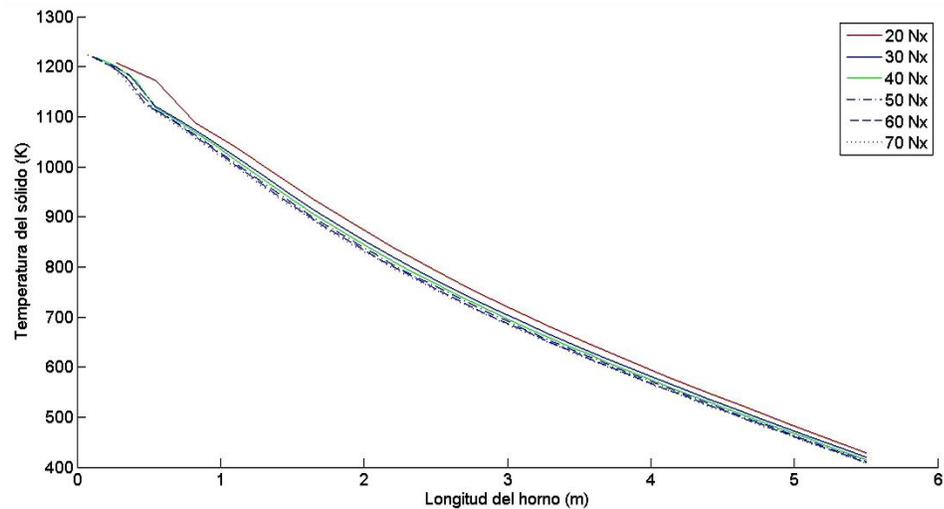


**Figura 3-4:** Temperatura del gas en un nodo central.

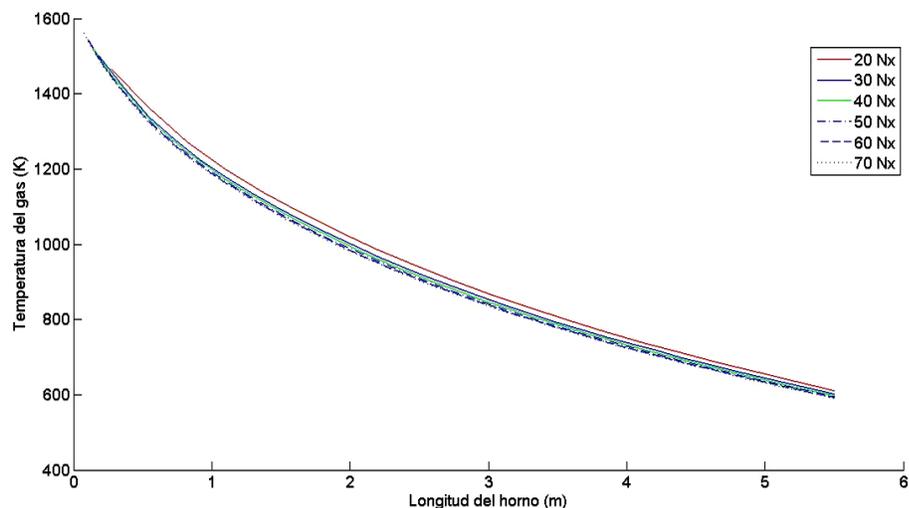


Cuando se evalúa la evolución temporal de temperaturas tanto en el sólido como en el gas, es claro que las mallas con menores volúmenes en dirección axial (20, 30 y 40) se apartan un poco del comportamiento de las restantes. Las mallas más densas generan resultados similares en todo el intervalo de tiempo evaluado. Este comportamiento lleva a descartar las mallas menos densas de 20, 30 y 40 nodos.

**Figura 3-5:** Temperatura del sólido en la longitud del horno.



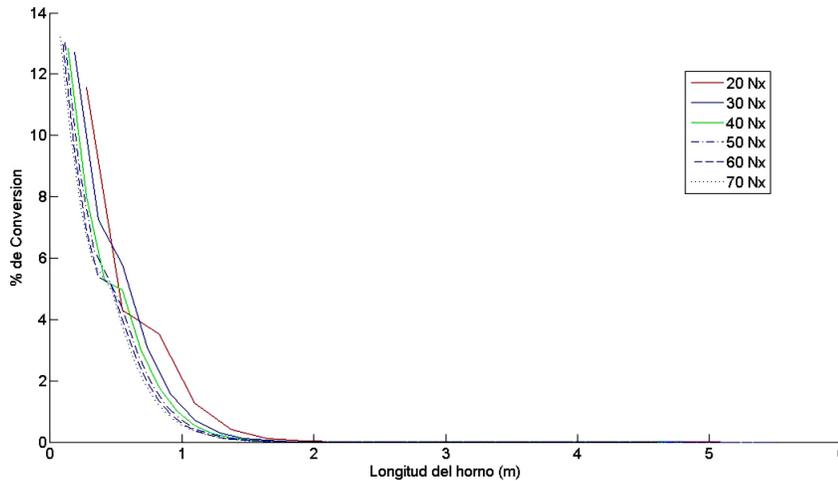
**Figura 3-6:** Temperatura del gas en la longitud del horno.



En la evaluación axial de temperaturas el comportamiento es un poco diferente al presentado en las gráficas para el tiempo, ya que los resultados de todas las mallas son

similares exceptuando la malla de 20 volúmenes finitos que presenta un comportamiento un poco diferente apartándose de las restantes.

**Figura 3-7:** Conversión de la caliza.



Cuando se evaluó la reacción de descarbonatación en el sólido para cada una de las mallas, se pudo observar la gran diferencia de los resultados obtenidos con las mallas menos densas (20 y 30) con las restantes y la gran similitud entre las mallas más densas de 40, 50 60 y 70 volúmenes finitos.

Con estos tres resultados evaluados en las corridas de independencia de mallas y teniendo en cuenta el costo computacional, es posible seleccionar una malla de 50 volúmenes finitos en dirección axial, y afirmar que se obtendrán soluciones numéricas adecuadas.

## 4. Resultados

En este capítulo se muestran los resultados obtenidos en los dos modelos desarrollados. En la parte inicial se presentan los resultados del modelo del horno realizado por dinámica de fluidos computacional. Perfiles de temperaturas máximas en el gas, flujos de energía por convección y por radiación y longitudes de llama hacen parte de los resultados presentados para los 9 casos simulados en el horno. Los resultados de las simulaciones para ambos procesos fueron analizados y comparados.

En la parte final del capítulo se presentan los resultados del modelo local desarrollado como complemento del modelo evaluado en dinámica de fluidos computacional. Los resultados de este modelo son comparados con datos experimentales obtenidos de la literatura [18]. Se presentan los perfiles axiales de temperatura para la materia prima y su proceso de descarbonatación bajo diferentes niveles de recirculación. Para el gas se muestran los perfiles axiales de temperatura y de concentraciones de especies como consecuencia de los procesos de combustión y descarbonatación. Por último, para las partículas de carbón se muestra la evolución de la masa y la temperatura en el proceso de combustión.

### 4.1 Simulación del horno por dinámica de fluidos computacional-CFD

A continuación se presentan los resultados de las simulaciones realizadas al horno de 2.5 metros de diámetro interior y 40 metros de longitud operado con combustión de carbón. Los resultados corresponden a simulaciones realizadas al horno operando con carbón y 9 tipos de gases oxidantes: Aire y ocho combinaciones diferentes de  $O_2$  y  $CO_2$ . Las 8 combinaciones son el resultado de diferentes niveles de recirculación de gases de combustión (30%, 40%, 55%, 60%, 65%, 70%, 80% y 85%). En el caso simulado de la combustión con aire, se consideró un exceso de aire del 5%. En la Tabla 4-1 se presentan las fracciones molares del  $O_2$  y  $CO_2$  presentes en los ocho gases oxidantes

con los que se realizaron las simulaciones, extraídos del modelo global descrito anteriormente en la sección 3.1.

**Tabla 4-1:** Fracciones molares de gases oxidantes.

Recirculación	O <sub>2</sub>	CO <sub>2</sub>
30%	68%	32%
40%	65%	35%
55%	51%	49%
60%	47%	53%
65%	42%	58%
70%	37%	63%
80%	28%	72%
85%	23%	77%

Las condiciones de frontera incorporadas en el software son mostradas en la Tabla 4-2. La condición “MASS FLOW INLET” representa la entrada constante de gas oxidante primario y secundario a través del quemador y la cara posterior del horno respectivamente, la condición “OUTFLOW” representa la salida constante de gases de combustión, la condición “WALL” representa las paredes internas del horno con las propiedades seleccionadas para la simulación y las condiciones “FLUID” y “SOLID” representan el lecho del horno y los gases oxidantes y de combustión.

**Tabla 4-2:** Condiciones de frontera consideradas en la simulación.

Límites físicos en la geometría del horno	Condiciones de Frontera Numéricas
Primary gas-fuel input	MASS FLOW INLET
Secondary gas input	MASS FLOW INLET
Flue gas output	OUTFLOW
Internal and external wall	WALL
load of lime and limestone	SOLID (inert)
Internal gas	FLUID

Los flujos máxicos de los gases de arrastre (primario) y secundario son mostrados en la Tabla 4-3, obtenidos también a partir del modelo global desarrollado en la sección 3.1 conservando el número de Reynolds al interior del quemador.

**Tabla 4-3:** Flujo máxico de oxidante en la entrada primaria y en la secundaria.

Recirculación	Gas de arrastre (kg/h)	Gas secundario (kg/h)
30%	0.858	0.050
40%	0.828	0.117
55%	0.790	0.618
60%	0.778	0.861
65%	0.768	1.169
70%	0.757	1.576
80%	0.738	2.984
85%	0.729	4.381

A partir de las propiedades obtenidas en los resultados de las simulaciones por CFD, se calculó el coeficiente de transferencia de calor por convección,  $h_{CGS}$ , el número de Reynolds,  $Re_D$ , y el número de Nusselt,  $Nu$ , y se obtuvo en cada caso, un valor único de estos parámetros representativo para todo el horno promediando los valores obtenidos en su longitud.

El número de Reynolds, el coeficiente de convección y el Nusselt fueron obtenidos a partir del trabajo desarrollado por Tscheng et al., [48, 49] quienes estudiaron la transferencia de calor en hornos rotatorios y desarrollaron las siguientes expresiones:

$$h_{CGS} = 0.46 \frac{K_G}{D_e} Re_D^{0.535} Re_w^{0.104} \eta^{-0.341} \quad (4-1)$$

$$Re_D = \frac{\rho_g \mu_g D_e}{\mu_g} \quad (4-2)$$

$$Re_w = \frac{\rho_g w D_e^2}{\mu_g} \quad (4-3)$$

$$D_e = \frac{0.5D(2\pi - \Gamma + \sin \Gamma)}{(\pi - (\Gamma/2) + \sin(\Gamma/2))} \quad (4-4)$$

$$\eta = \frac{\Gamma - \sin \Gamma}{2\pi} \quad (4-5)$$

$$Nu = 0,0296Re^{\frac{4}{5}}Pr^{\frac{1}{3}} \quad (4-6)$$

Se quiso obtener la transferencia de calor entre los gases de combustión y el plano superficial de la carga; por tal razón, se utilizó la correlación para el número de Nusselt que tiene aplicación para planos con flujo externo. Los valores obtenidos en cada uno de estos parámetro se muestran en la Tabla 4-4.

**Tabla 4-4:** Parámetros evaluados a partir de resultados de simulaciones.

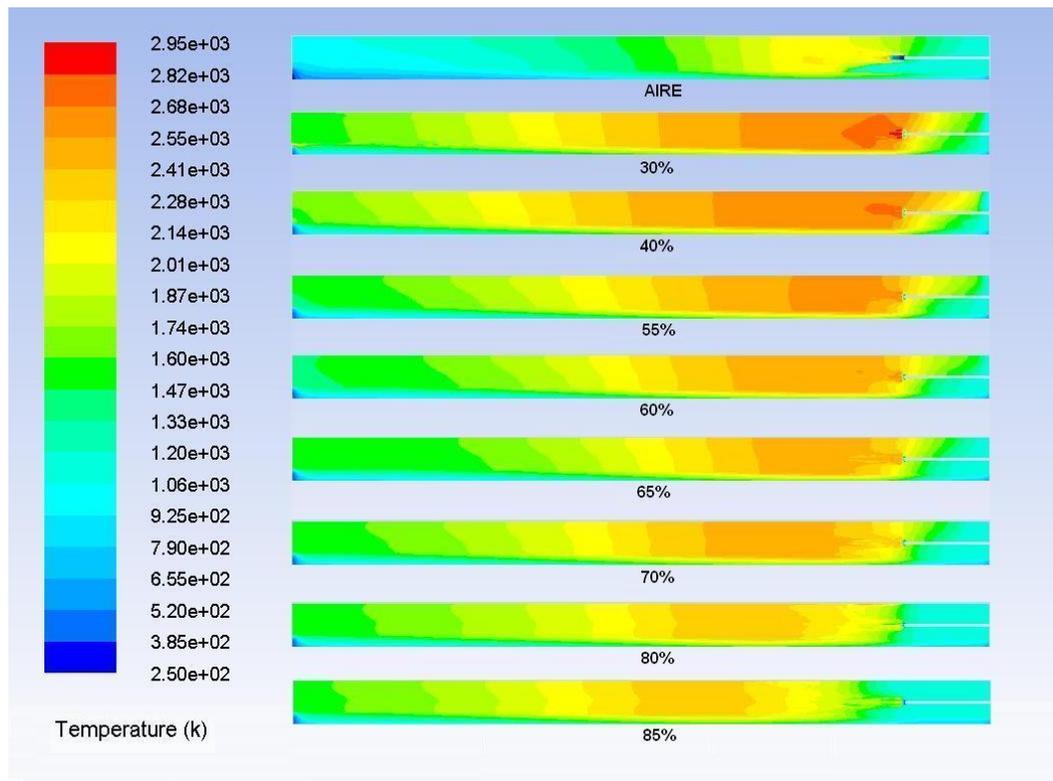
Recirculación	Re	$h_{conv}$	Nu
Aire	24838	21.673	737.80
30%	17409	27.185	583.83
40%	20747	29.271	674.06
55%	24370	29.868	766.55
60%	25497	30.096	803.59
65%	35161	34.515	1015.04
70%	39929	34.981	1131.61
80%	76774	45.04	1902.99
85%	108129	50.315	2500.83

Era de esperarse que cuando la recirculación de gases aumenta el número de Reynolds aumenta también. Se puede observar en la Tabla 4-4 que cuando la recirculación de gases toma un valor de aproximadamente 55% el número de Reynolds se aproxima al obtenido con el aire. El coeficiente de transferencia de calor calculado mostró también el comportamiento esperado, donde el caso de mayor recirculación de gases presenta el mayor coeficiente.

### 4.1.1 Perfil de temperaturas

Como resultado de los diferentes procesos de transferencia de calor presentes en cada uno de los casos simulados, las temperaturas tanto de la carga como las temperaturas de los gases varían considerablemente. En cada uno de los 9 casos simulados, las temperaturas del gas fueron graficadas en un plano vertical ubicado en el centro del horno (Figura 4-1), en donde se puede apreciar la distribución de la temperatura.

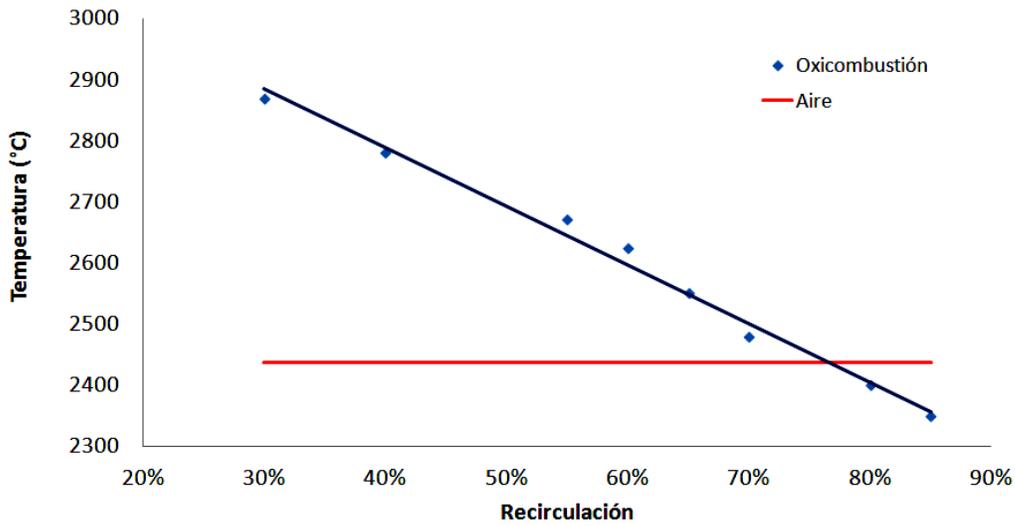
**Figura 4-1:** Contornos de temperatura en un plano central del horno.



Se observa cómo a medida que la recirculación de gases de combustión aumenta, la máxima temperatura alcanzada en el proceso disminuye, teniendo menor energía térmica disponible para ser transferida hacia la carga. La zona de máxima temperatura en cada uno de los casos es desplazada también por la recirculación de gases, es decir, la zona de máxima temperatura cuando se hace recircular el 30% de los gases de combustión se alcanza cerca al quemador del horno, mientras que para una recirculación del 85% la zona de máxima temperatura se obtiene cerca al centro del horno (Figura 4-1).

A partir de la Figura 4-1 se graficó la máxima temperatura para cada uno de los casos simulados tal y como se muestra en la Figura 4-2. Se encontró que para los casos en donde la recirculación de gases es menor que aproximadamente el 77%, las temperaturas máximas del proceso son mayores comparadas con las obtenidas por la combustión con aire.

**Figura 4-2:** Comparación de temperaturas máximas en el gas.

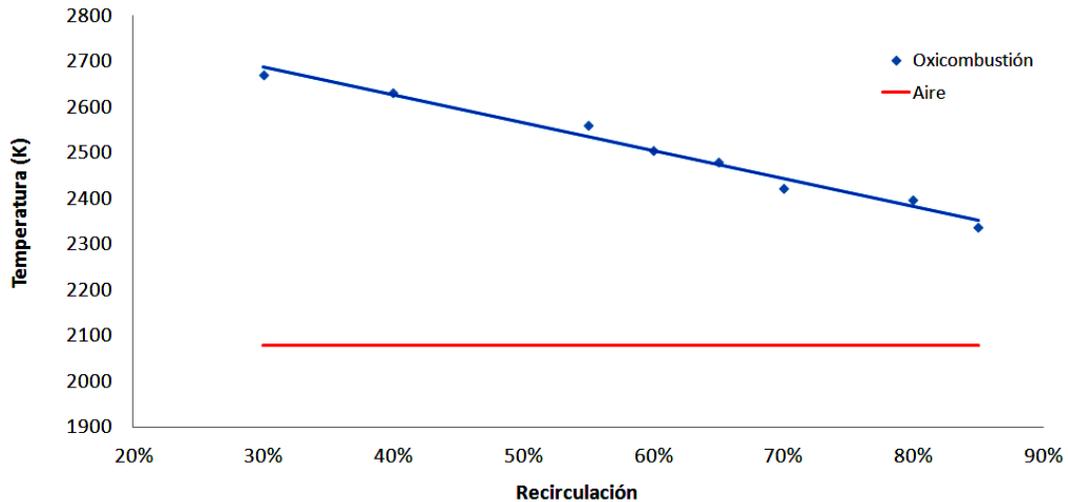


Este resultado hace pensar en una gran bondad del proceso de oxidcombustión con recirculación de gases ya que mejoran las condiciones de transferencia de calor debido a la mayor energía disponible en los gases cuando las recirculaciones son menores de 77% aproximadamente. A partir de este resultado se generan dos escenarios interesantes de investigación como son: El primer escenario sería un proceso de oxidcombustión con recirculaciones menores a 77% disminuyendo el consumo de combustible para lograr condiciones de operación similares a las del proceso convencional. El segundo escenario sería un proceso de oxidcombustión con recirculaciones menores a 77% con igual consumo de combustible que el proceso convencional; esto genera un proceso de descarbonatación mas rápido de la carga permitiendo un aumento en el flujo de la materia prima.

Un estudio similar fue realizado para la temperatura de la carga en un plano sobre su superficie. Los resultados encontrados son mostrados en la Figura 4-3 y tuvieron comportamiento similar a los encontrados anteriormente. Los resultados encontrados

para los casos en donde la recirculación de gases supera el 77% son aptos para análisis, pues en estos casos las temperaturas del gas son menores que en el caso con aire, pero en el sólido son mayores.

**Figura 4-3:** Temperaturas máximas en la superficie de la carga.

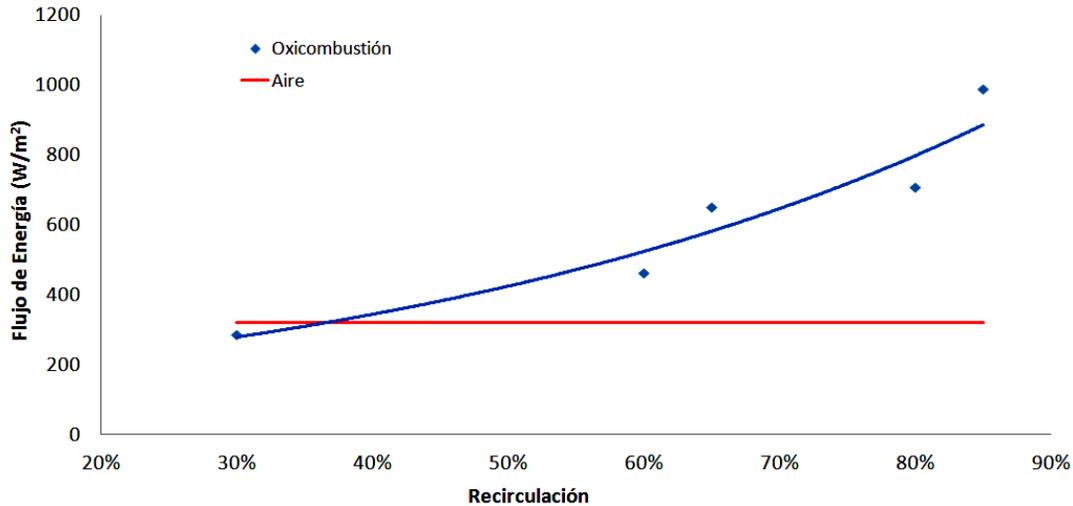


Esta diferencia en las temperaturas puede ser ocasionado por la mayor velocidad de los gases de combustión que se logran con altas recirculaciones, favoreciendo aumentando el coeficiente de transferencia de calor por convección (Tabla 4-4) y por ende la transferencia de calor entre las fases.

#### 4.1.2 Análisis del aporte de energía por convección

El análisis de flujo de energía por convección fue realizado para cada uno de los casos mostrados en la Tabla 4-1, teniendo como diferencia fundamental los flujos máxicos de las corrientes oxidantes a la entrada del horno y sus composiciones.

A partir de los parámetros calculados y mostrados en la Tabla 4-4, se obtuvo el flujo de calor por convección hacia la carga en cada uno de los casos, los cuales se muestran en la Figura 4-4. En esta figura se observa el incremento del aporte calórico cuando la recirculación de los gases de combustión aumenta. Cuando el porcentaje de recirculación de gases es de 37% aproximadamente, el flujo de calor iguala al flujo obtenido con la combustión con aire.

**Figura 4-4:** Flujo de calor por convección.

Por debajo de este nivel de recirculación, el flujo calórico disminuye hasta 0.95 veces el obtenido con el aire, pero cuando se sobrepasa el 37% de recirculación, el flujo de calor aumenta considerablemente llegando a ser hasta de cinco veces el valor obtenido en la combustión con aire. Este efecto es consecuencia principalmente del gran aumento de la velocidad de los gases en los niveles mayores de recirculación.

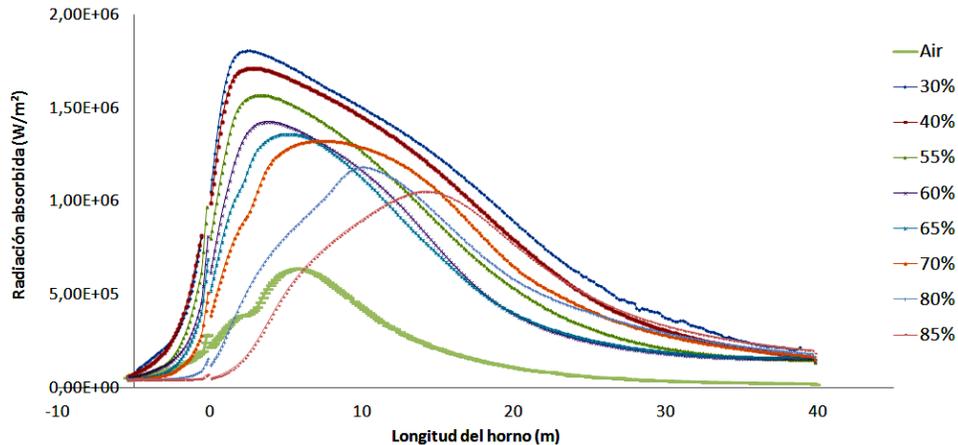
### 4.1.3 Análisis del aporte de energía por radiación

Para cada uno de los casos simulados se obtuvo el perfil axial de la radiación absorbida por la carga, tal y como se muestra en la Figura 4-5. Se observa que cuando la fracción molar de oxígeno se reduce en el horno con aumento de la recirculación de gases, la radiación máxima absorbida por la carga se reduce. Este resultado es consecuencia directa del resultado mostrado en la Figura 4-2, en donde la temperatura disminuye directamente con la fracción molar de oxígeno.

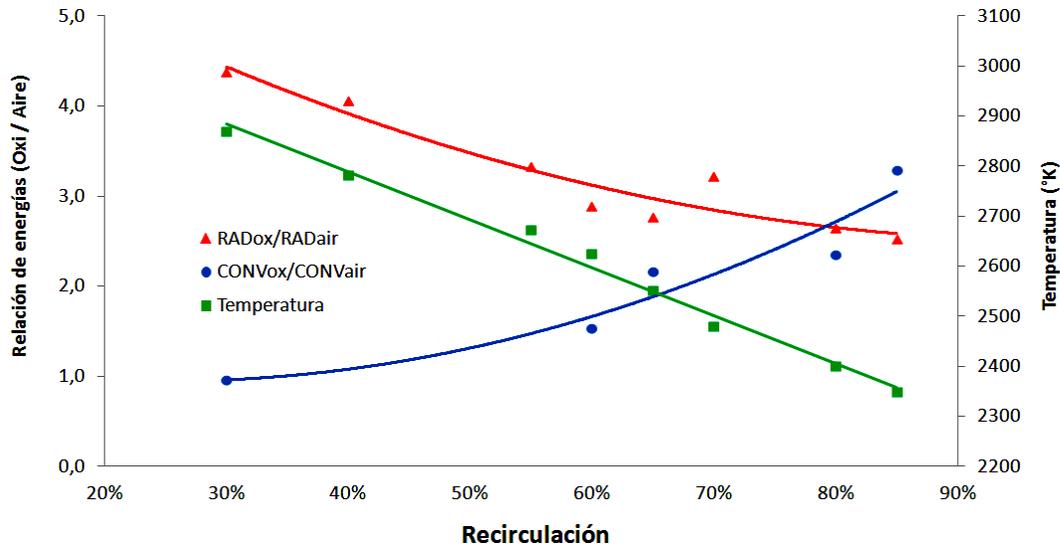
El perfil de radiación absorbida por la carga en el proceso de combustión con aire se muestra también en la Figura 4-5, y se observa que aún para el peor de los casos en oxidación el aporte calórico por radiación es mayor. Un aspecto importante para destacar de la gráfica anterior es que este resultado es coherente con el presentado en la Figura 4-1, ya que el punto donde se da el máximo aporte por radiación entregado hacia la carga corresponde con el punto de máxima temperatura de los gases y de la misma

manera se desplaza hacia la derecha a medida que el porcentaje de recirculación aumenta.

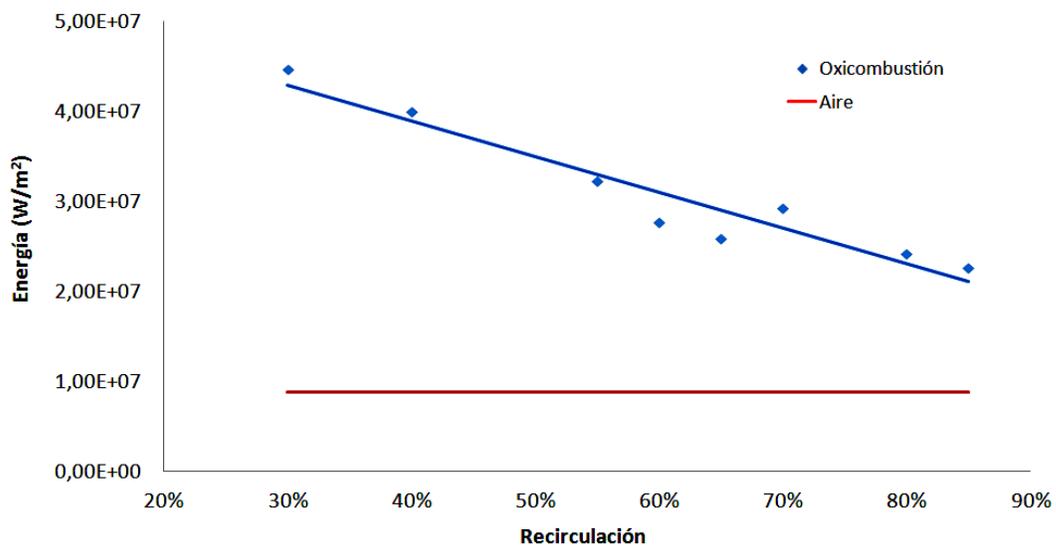
**Figura 4-5:** Perfiles de radiación absorbida por la carga.



La radiación total absorbida por la carga para cada caso fue obtenida encontrando el área bajo cada una de las curvas presentadas en la Figura 4-5. A partir de este valor encontrado y con la información de los aportes de energía por convección, se realizó un análisis comparativo de los aportes energéticos por radiación y convección entre los dos procesos de combustión estudiados. Este comparación es presentada en la Figura 4-6 y se combina con la Figura 4-2 para tener mayor claridad en la información presentada. Es claro que ambos mecanismos de transferencia de energía se ven ampliamente favorecidos con el proceso de oxicomustión. Aunque en los casos de menores niveles de recirculación (30-37%) se presentan menores aportes energéticos por convección hacia la carga, la energía total aportada se ve favorecida debido a la notoria mejoría en la transferencia de energía por radiación que se dan en estos niveles. El aporte de la energía por convección en la energía total entregada a la carga encontrado en este estudio es de sólo el 5%. Esto quiere decir que este tipo de transferencia energética en este caso podría ser despreciada y realizar análisis a partir de energía radiante. Este resultado es ocasionado por las altas temperaturas presentes en los procesos de combustión en donde los procesos por radiación toman gran relevancia.

**Figura 4-6:** Relación de energía aportada por convección y radiación.

A partir de la información obtenida de cada uno de los mecanismos de transferencia de calor, se construyó la Figura 4-7 en donde se presenta la energía total aportada hacia la carga.

**Figura 4-7:** Flujo total de calor entregado a la carga.

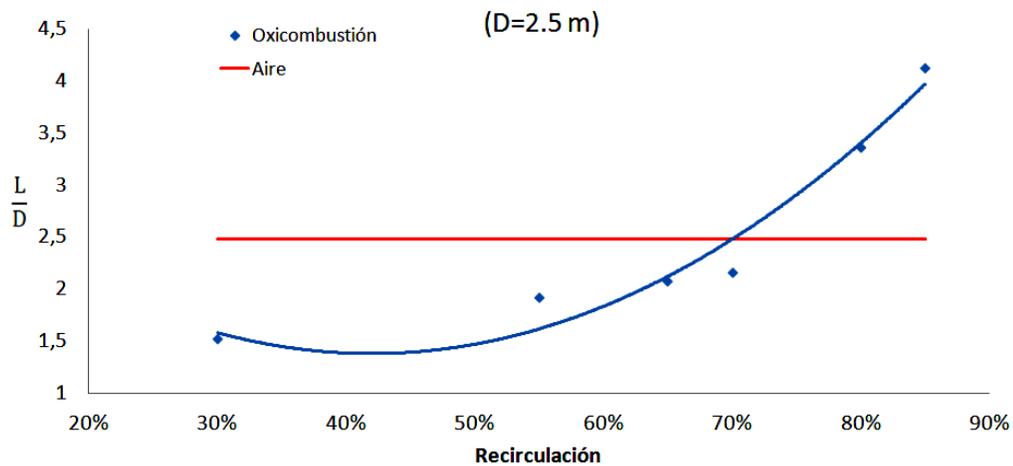
Es interesante mencionar que independiente del nivel de recirculación que se le den a los gases de combustión, siempre se obtendrá un aporte energético mayor hacia la carga (desde 2.5 veces cuando la recirculación de gases de combustión es de 85%, hasta 4.3

veces cuando la recirculación es de 30%). Con este resultado se reafirma lo mencionado en la sección 4.1.1, en donde se mencionan los dos escenarios de interés investigativo en el tema de reducción de combustible conservando el aporte energético del proceso convencional o aumento de producción manteniendo el consumo de combustible.

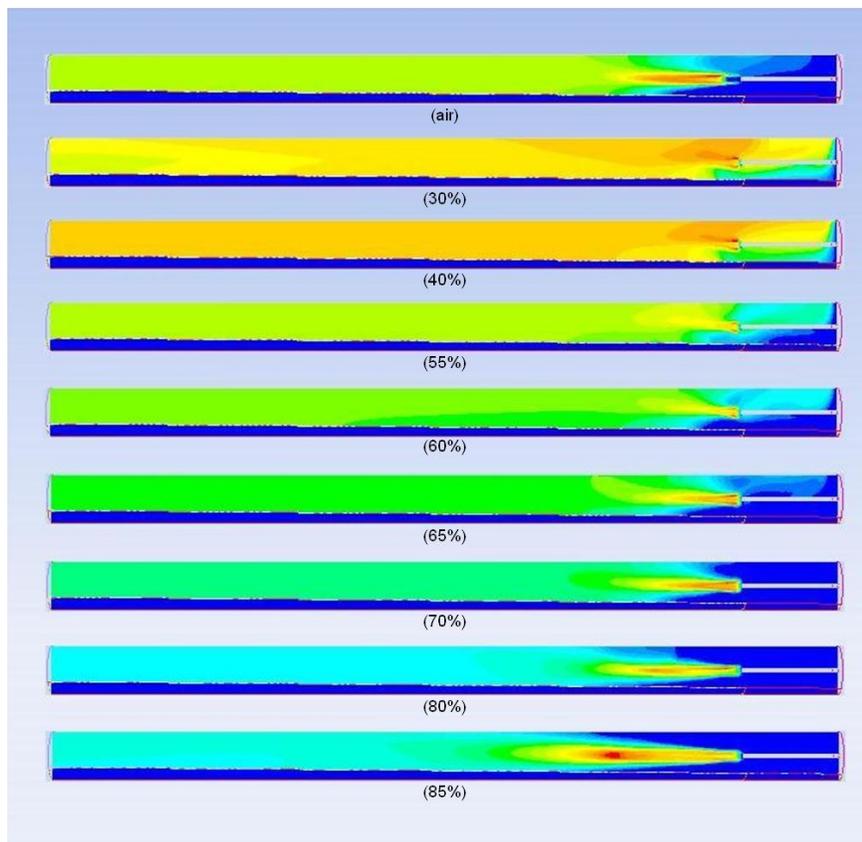
#### 4.1.4 Longitud de llama

La longitud de llama fue también evaluada en cada caso simulado. Esta característica del proceso, presentada en la Figura 4-8, da claridad a los perfiles de radiación mostrados en la Figura 4-5 respecto al desplazamiento de la zona de mayor transferencia de energía. Cuando la concentración de oxígeno es alta y la recirculación es baja, la llama se hace más pequeña y brillante (Figura 4-8) y se aproxima al quemador (Figura 4-9). Este efecto es debido a que la energía liberada en las reacciones de combustión no debe ser consumida calentando el nitrógeno, la temperatura aumenta y cada vez se da más rápida la reacción hasta el consumo total de la partícula.

**Figura 4-8:** Longitud de llama.



La longitud de llama tiene un gran efecto en el proceso productivo debido a que tiene la capacidad de transferir mayor energía por unidad de área a la caliza durante su proceso de transformación, como consecuencia de mayores temperaturas logradas en la combustión.

**Figura 4-9:** Contornos de longitud de llama.

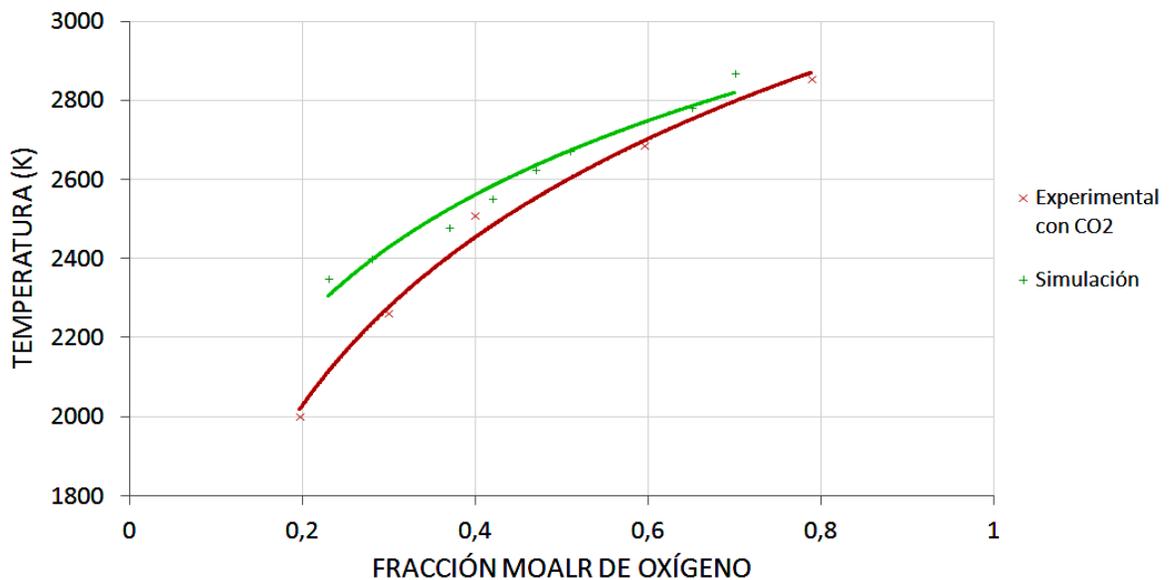
Un proceso de oxidación con bajos niveles de recirculación de gases debe ser estudiado con mayor detenimiento debido a sus prometedores resultados y a la posibilidad que abre de construir equipos de menor tamaño.

#### 4.1.5 Comparación con la literatura

Debido a la gran dificultad para validar o comparar el modelo con actividades prácticas propias en la industria del cemento, se optó por investigar en la literatura que autores han realizado pruebas experimentales en hornos de la industria del cemento para compararlos con los resultados de la simulación por CFD. Un trabajo encontrado fue el desarrollado por Bejarano et al. [11], quienes evaluaron la combustión de partículas de dos tipos de carbones con diámetros en los rangos de  $45\text{-}53\ \mu\text{m}$  y  $75\text{-}90\ \mu\text{m}$  y en atmósferas de  $\text{O}_2/\text{CO}_2$  y  $\text{O}_2/\text{N}_2$ . La fracción molar de oxígeno fue variada en cada una de las atmósferas en el rango de 0.2-0.8. Las temperaturas máximas alcanzadas en la

combustión de las partículas de carbón en cada una de las atmósferas fueron medidas. Los autores concluyeron que los tamaños de las partículas en los rangos evaluados no tenían gran incidencia en las temperaturas máximas encontradas con cada gas oxidante y es por esto que en la Figura 4-10 solo se muestra una curva de temperatura que da cuenta de todos los diámetros evaluados. Debido a esto, podemos realizar la comparación de los resultados obtenidos en el modelo realizado en esta simulación con los encontrados por Bejarano et al. [11] en las pruebas experimentales.

**Figura 4-10:** Temperaturas máximas en mezclas de  $O_2/CO_2$  y  $O_2/N_2$  [11]



La Figura 4-10 muestra las temperaturas máximas de combustión en las atmósferas mostradas. Los resultados obtenidos con el modelo CFD muestran buena concordancia con los datos experimentales, presentando la mayor desviación (7.7%) cuando la fracción molar de oxígeno se aumenta hasta 0.7. Para una fracción molar de oxígeno de 0.2 el comportamiento es muy similar a la prueba experimental, teniendo una desviación de apenas un 2%.

## 4.2 Simulación local del proceso de descarbonatación

Como se detalló en el capítulo anterior, el horno se modeló teniendo tres fases: Fase gaseosa, fase sólida y fase dispersa. Las dos iniciales fueron consideradas como Euleriano y la última de ellas se trabajó en un marco Lagrangiano.

Valiosa información de cada una de las fases puede ser obtenida en el modelo como temperaturas y composiciones. Para cada una de las partículas de carbón se puede tener información de su temperatura, masa, posición y velocidad en cualquier instante de tiempo.

Se consideraron los parámetros geométricos y de operación mostrados en la Tabla 4-5, tomados del trabajo de Watkinson et al. [18]. Las experimentaciones fueron realizadas para una composición de la caliza presentada en la Tabla 4-6. Las propiedades termodinámicas y de transporte fueron obtenidas de la literatura [18, 47].

**Tabla 4-5:** Condiciones de operación consideradas.

Variable	Valor
Temperatura ambiente	298 K
Presión	1 bar
Temperatura de alimentación de los sólidos	300 K
Temperatura de alimentación del gas	1600 K
Diámetro interno refractario	0.406 m
Diámetro externo refractario	0.59 m
Diámetro externo metal	0.61 m
Diámetro externo aislante	0.63 m
Longitud del horno	5.5 m
Velocidad de rotación del horno	1.5 RPM
Angulo de inclinación del horno	1 grado
Fracción volumétrica del lecho	0.1
Flujo másico de sólidos	0.013 kg/s

**Tabla 4-6:** Composición de la fase sólida [18].

Especie	Composición (w/w)	Especie	Composición (w/w)
CaCO <sub>3</sub>	9.89E-01	H <sub>2</sub> O	0
CaO	0	MgO	4.90E-03
SiO <sub>2</sub>	4.80E-03	SO <sub>3</sub>	3.80E-05
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	4.00E-04	K <sub>2</sub> O	4.00E-05

Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	1.00E-03	Na <sub>2</sub> O	0
--------------------------------	----------	-------------------	---

En el modelo se consideró que en cada paso del tiempo de la fase continua, una inyección de 100 partículas se realiza. Cada partícula es inyectada con una velocidad diferente con el fin de obtener información en una gama amplia de velocidades para un mismo diámetro de partículas. En la Tabla 4-7 y Tabla 4-8 se muestran las propiedades del carbón consideradas en la simulación.

**Tabla 4-7:** Composición del carbón utilizado en la simulación.

Análisis último		Análisis próximo	
H	0.0418	H <sub>2</sub> O	8.42
N	0.0144	Cenizas	2.10
C	0.5066	Volátiles	37.29
S	0.0045	Carbono Fijo	52.20

**Tabla 4-8:** Parámetros utilizados en la simulación.

Propiedad	Valor
Flujo másico (kg/h)	$3.6 \times 10^{-3}$
Densidad del carbón (kg/m <sup>3</sup> )	1400
Diámetro de partícula (m)	$2 \times 10^{-4}$

#### 4.2.1 Comparación del modelo con datos experimentales

Una de las dificultades encontradas en este trabajo de investigación fue la comparación de los resultados con datos experimentales debido a la dificultad de implementar esta prueba en una planta real de producción de cemento. Para superar esta dificultad, se optó por recurrir a la literatura científica y realizar las comparaciones a partir de experiencias ya realizadas por investigadores en el tema de producción de cemento con hornos rotatorios. Un trabajo encontrado en para la evaluación del proceso productivo del cemento, fue el realizado por Watkinson et al. [18], quienes realizaron experiencias en un horno rotatorio piloto rotatorio operado con gas natural con el fin de evaluar parámetros del proceso que influyen la descarbonatación de la caliza.

La prueba de combustión con gas natural fue realizada en un horno de 5.5 metros de longitud y 0.406 metros de diámetro interior. Caliza seca fue alimentada a razón de 86 kg/h en contracorriente con los gases de combustión del horno. El horno fue calentado durante 5 horas para alcanzar su estado estacionario. Una vez en él, el material fue alimentado al horno y se realizó la experimentación durante 4 horas. Cuando la corrida fue terminada y el horno fue apagado, se realizaron mediciones de profundidad del lecho en diferentes puntos axiales del horno. Durante las pruebas experimentales se mantuvo la relación estequiométrica para la combustión de gas natural.

Debido a que en el trabajo de Watkinson et al. [18], no se incluyeron partículas de carbón, la evaluación de los resultados del modelo se realizó antes de incorporar la fase discreta en el programa. Las simulaciones se realizaron un gas caliente que transfiere energía con a carga y se evaluaron el proceso de calcinación y los perfiles axiales de temperatura del gas y del sólido.

Las corridas realizadas por Watkinson et al. [18], se realizaron variando los valores de algunos parámetros de operación del horno con el fin de evaluar la incidencia en la descarbonatación. Para efectos prácticos, se seleccionaron las condiciones de operación mostradas en la Tabla 4-9 para realizar la comparación.

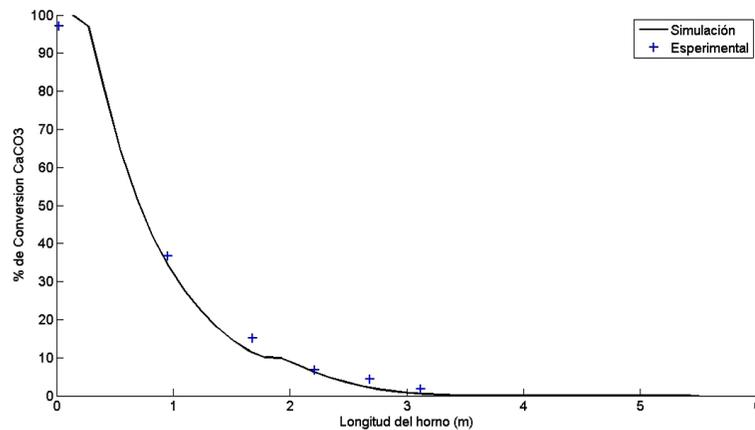
**Tabla 4-9:** Condiciones de operación del horno seleccionadas para la comparación de resultados.

Parámetros de operación	Valor
Velocidad de rotación (rpm)	1.5
Angulo de inclinación (grados)	1
Diámetro de sólidos (m)	$4.6 \times 10^{-3}$
Alimentación de gas natural (m <sup>3</sup> /h)	9.85
Alimentación de aire (m <sup>3</sup> /h)	98.5
Alimentación de caliza (Kg/h)	47.6

Los resultados de las comparaciones de los resultados numéricos y experimentales de la descarbonatación de la caliza, temperatura del gas y temperatura del sólido se muestran en las Figura 4-11, Figura 4-12 y Figura 4-13. En estas gráficas, la longitud igual a cero

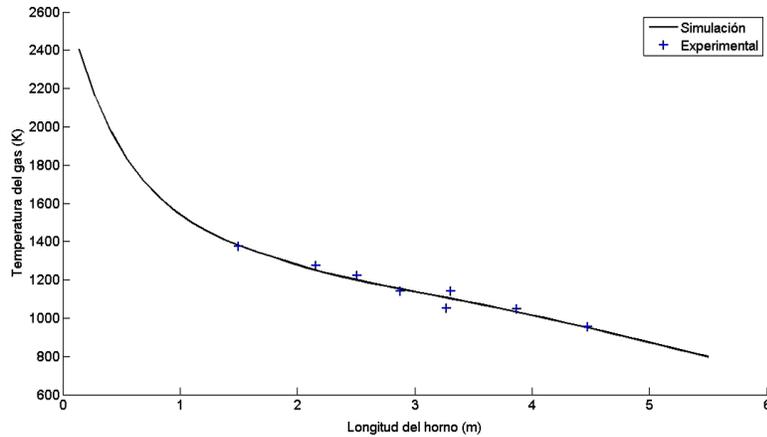
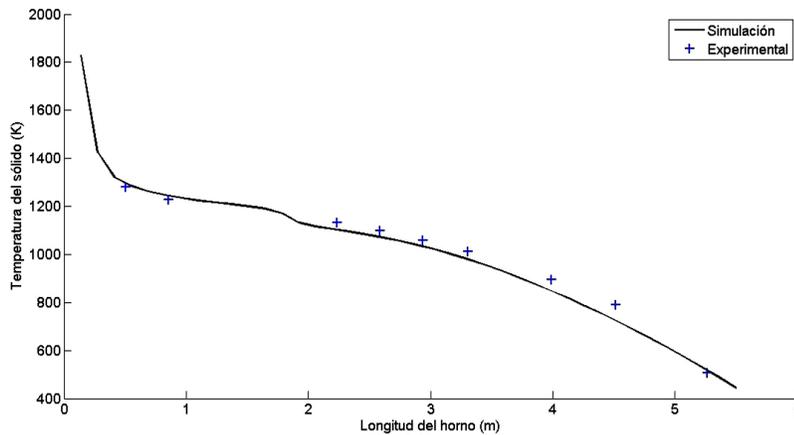
corresponde a la entrada de los gases y las partículas, y la longitud iguala a 5.5.m corresponde a la entrada de la materia prima. El modelo reproduce bien la descarbonatación del sólido según se observa en Figura 4-11. Un efecto interesante en este resultado es el cambio de pendiente que se muestra cerca de los 3.5 metros desde la entrada de la caliza. Este efecto puede ser atribuido a que en este punto la presión parcial del  $\text{CO}_2$  alcanza valores de equilibrio haciendo que la reacción se detenga. La transferencia de calor en este punto continúa hasta el punto en que el equilibrio se rompe y se reactiva la reacción de descarbonatación.

**Figura 4-11:** Comparación de resultados para descarbonatación.



En la Figura 4-12 y Figura 4-13 se evidencia la coherencia entre lo modelado y lo experimental. Es importante notar dos zonas que se generan en la temperatura del gas. La primera zona es de una pérdida de temperatura casi lineal como consecuencia del calentamiento del sólido hasta aproximadamente los 3.5 metros desde la entrada del sólido. La segunda zona se observa entre la entrada del gas y el punto anterior (3.5 metros desde la entrada del sólido). Claramente se nota la rápida pérdida de temperatura del gas debido a que en esta región se está presentando la reacción altamente endotérmica de descarbonatación.

De la misma forma, se notan cuatro zonas de análisis en la temperatura del sólido. La primera zona en donde se presenta un calentamiento aproximadamente homogéneo desde su entrada hasta aproximadamente los 3.5 metros

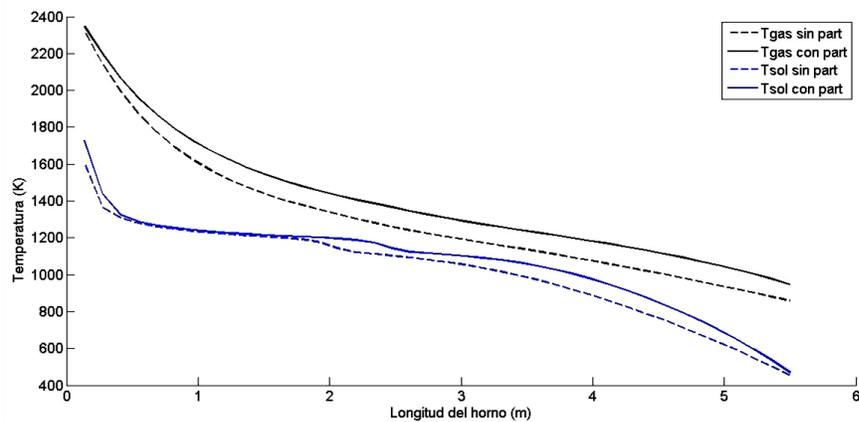
**Figura 4-12:** Comparación de resultados para la temperatura del gas.**Figura 4-13:** Comparación de resultados para la temperatura del sólido.

Luego se presenta una segunda zona donde la temperatura aumenta considerablemente (entre 3.5 y 3.7 metros desde la entrada). Una tercera zona donde la temperatura se mantiene casi constante debido a las reacciones de descarbonatación y una zona final donde la temperatura aumenta drásticamente debido a que el sólido terminó su proceso de transformación e inicia una etapa de calentamiento de la cal. La segunda zona observada, es acorde con el comportamiento analizado en la Figura 4-11 para el proceso de descarbonatación del sólido. En este punto, como consecuencia de la suspensión de la reacción, y al dejar de presentarse un consumo de energía en el sólido en la reacción de descarbonatación, la temperatura del sólido aumenta rápidamente hasta que se rompe el punto de equilibrio y se reactiva la reacción en el sólido.

Una vez realizada la comparación de los resultados y teniendo certeza de que el modelo reproduce de buena forma lo medido experimentalmente por Watkinson et al. [18], se avanza en la construcción del modelo adicionando la fase discreta.

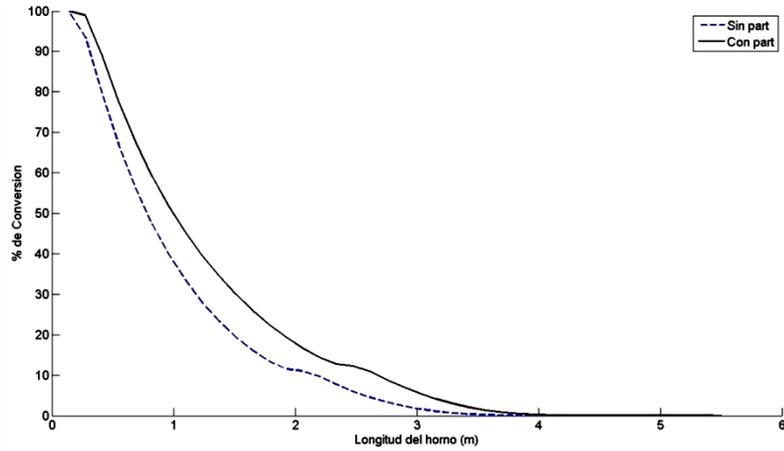
Cuando las partículas de carbón son incorporadas en el modelo, iniciando con el caso de combustión con aire, las condiciones de operación del horno cambian aumentando la temperatura del gas y por ende la del sólido. Este efecto es evidenciado en la Figura 4-14.

**Figura 4-14:** Temperatura del gas y del sólido para combustión con aire.

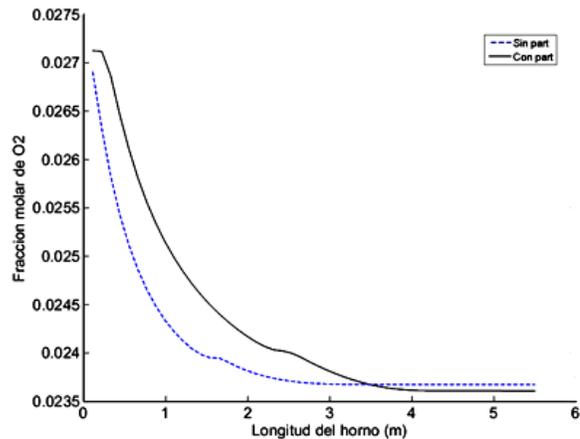


La incorporación de las partículas al modelo, genera que el proceso de descarbonatación inicie más rápido, es decir, la reacción inicia más cerca del punto de entrada del material debido al incremento de temperatura en el sólido. La comparación del proceso de descarbonatación para el modelo sin partículas y con partículas se muestra en la Figura 4-15.

Una dificultad se presentó a la hora de realizar la simulación que incorpora las partículas de carbón: Cuando el número de partículas de carbón se incrementa, el tiempo computacional requerido por el modelo aumenta considerablemente. Por esta razón, se decidió correr las simulaciones con inyecciones de 100 partículas de carbón por cada iteración de la fase continua. El número de partículas incrementa drásticamente con el paso del tiempo, llegando a tener más de 8.000 en el horno. Esta cantidad de partículas es relativamente grande para la simulación, pero sólo representa un 0.2% de la masa del carbón que debería ser alimentada en cada paso de tiempo para cumplir con la relación de combustión estequiométrica.

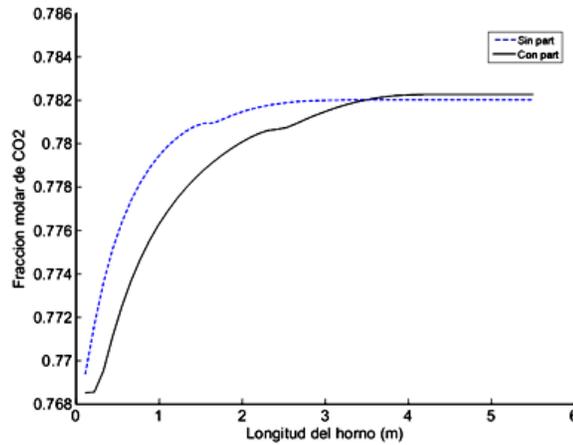
**Figura 4-15:** Descarbonatación para combustión con aire.

Los perfiles de las especies en la longitud del horno también se compararon cuando la fase discreta se vinculó al modelo. Estas comparaciones son mostradas en la Figura 4-16 y en la Figura 4-17 para el oxígeno y el  $\text{CO}_2$  respectivamente.

**Figura 4-16:** Comparación de fracción molar de  $\text{O}_2$  entre simulación sin partículas y con partículas.

Para el caso del  $\text{CO}_2$  se presentó una situación similar. La masa se aumentó en la salida del horno debido al aporte adicional en las reacciones de combustión, aumentando por ende su fracción molar.

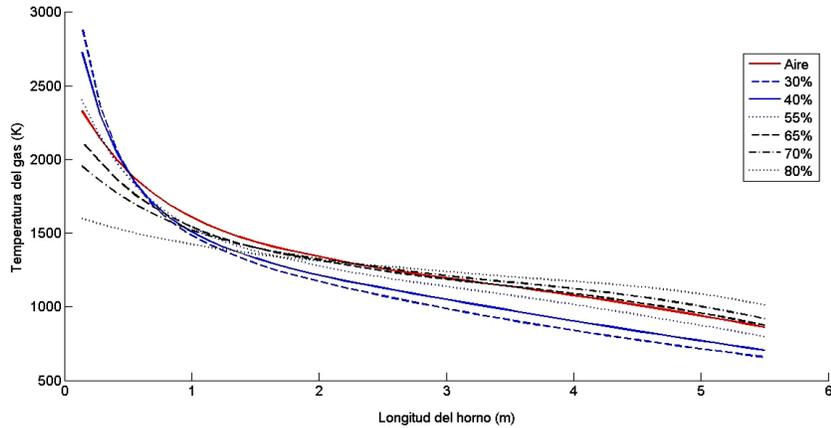
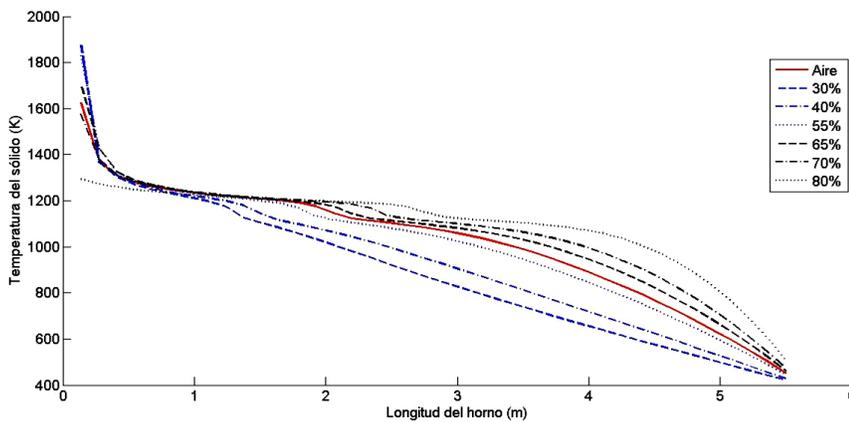
**Figura 4-17:** Comparación de fracción molar de CO<sub>2</sub> entre simulación sin partículas y con partículas.



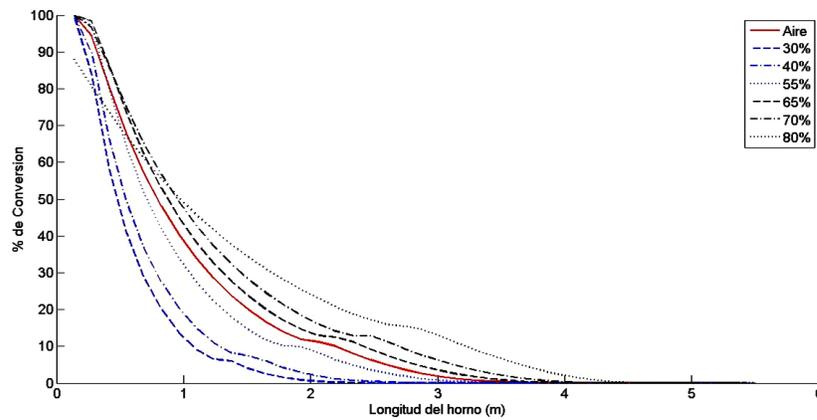
En la simulación realizada sin las partículas de carbón, la masa del oxígeno se mantiene constante en toda la longitud del horno, pero su fracción molar disminuye debido al aumento en la masa del CO<sub>2</sub> como consecuencia de la reacción de descarbonatación. Cuando se incorporó la combustión de las partículas, la masa de oxígeno en el horno disminuye axialmente debido a su consumo en las reacciones de combustión del carbón; presentándose una reducción mayor en su fracción molar.

Luego de comprobar el adecuado efecto generado en el modelo con la adición de las partículas de carbón y combustión con aire, se continuó con la simulación de la combustión de partículas bajo el proceso de oxicomustión con variaciones en los niveles de recirculación (30%, 40%, 55%, 65%, 70% y 80%). Los resultados de cada uno de los casos simulados fueron comparados tal y como se muestran en la Figura 4-18, Figura 4-19 y Figura 4-20.

El perfil de temperatura axial en el gas es claramente modificado cuando se pasa del proceso de combustión con aire al proceso de oxicomustión. Las mayores temperaturas en las simulaciones son obtenidas con el proceso de oxicomustión cuando las recirculaciones son bajas. La menor temperatura obtenida para el proceso de oxicomustión fue con la recirculación de 80%.

**Figura 4-18:** Temperaturas en el gas.**Figura 4-19:** Temperaturas en el sólido.

Los resultados de la descarbonatación en cada uno de los casos simulados se presenta en la Figura 4-20. El comportamiento presentado en el caso con 80% de recirculación de gases muestra que el proceso de descarbonatación no se logra completamente, lo que indica que una cantidad de piedra caliza sale del horno sin transformarse. Este resultado no es conveniente para el proceso productivo, ya que sería necesario disminuir la velocidad de alimentación de la materia prima para alcanzar el 100% de la conversión. Para los demás casos simulados la descarbonatación se presenta completamente, siendo más rápida para los casos de menores recirculación de gases (30%, 40% y 55%) y un poco más lenta en los casos con recirculaciones de gases altas (65%, 70%).

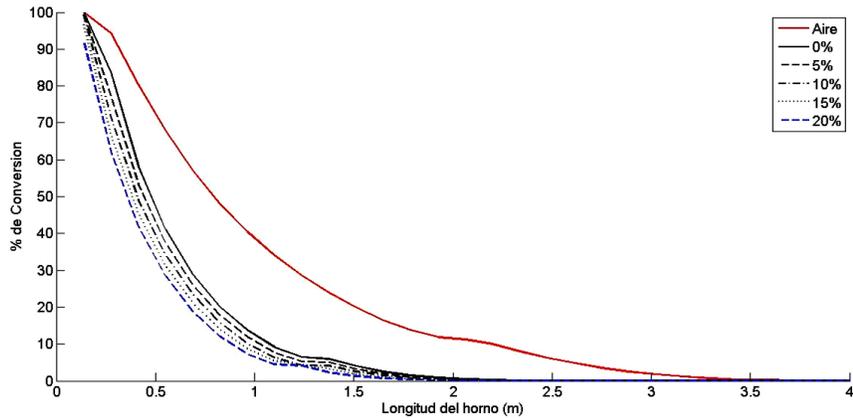
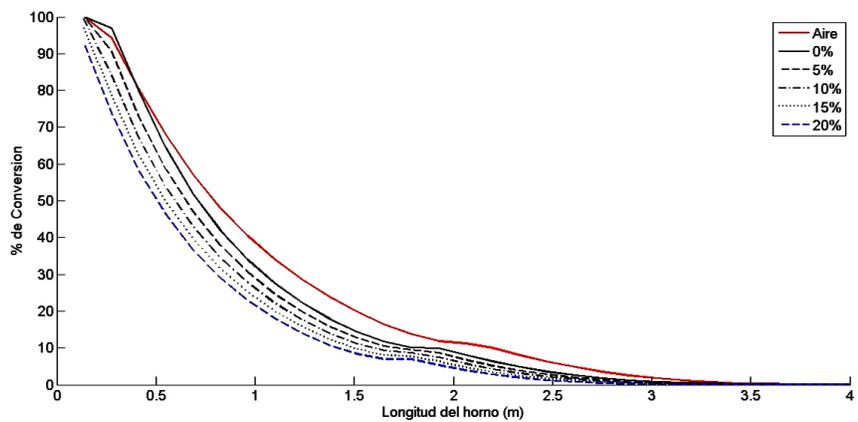
**Figura 4-20:** Descarbonatación de la caliza.

Los resultados encontrados para las recirculaciones menores, en donde la descarbonatación se presenta en una longitud muy corta del horno, son dignos de análisis. Tener esta descarbonatación en tan poca longitud del horno hace pensar en construcciones de hornos de menores longitudes para el mismo proceso productivo. Por obvias razones, pensar en una disminución de la longitud en hornos existentes no es una opción. Por otro lado es posible pensar en aumentos en el flujo de la materia prima tratando de aprovechar las zonas de grandes aportes energéticos. A partir de estos resultados se evaluó el proceso de descarbonatación con incrementos en el flujo de materia prima con miras a obtener un valor máximo con el que la descarbonatación se presente completamente. Los resultados de estas pruebas son presentados en la

Figura 4-21, Figura 4-22 y Figura 4-23 para recirculaciones de 30%, 55% y 70% respectivamente.

Se consideraron incrementos de materia prima de 5%, 10% y 20% de la cantidad original. Los resultados arrojaron información valiosa para determinar un nivel de recirculación que permita mejorar el proceso productivo. Esta mejoría en el proceso consiste en incrementar la producción de cal conservando el consumo de combustible.

Para el caso con recirculación de 30% se obtuvo una descarbonatación completa cuando el flujo original de materia prima se incrementó en 5% y 10%. Cuando se realizó un incremento de 15% la descarbonatación alcanzó el 96% y cuando el aumento de materia prima fue de 20% sólo se alcanzó una transformación de aproximadamente el 94%.

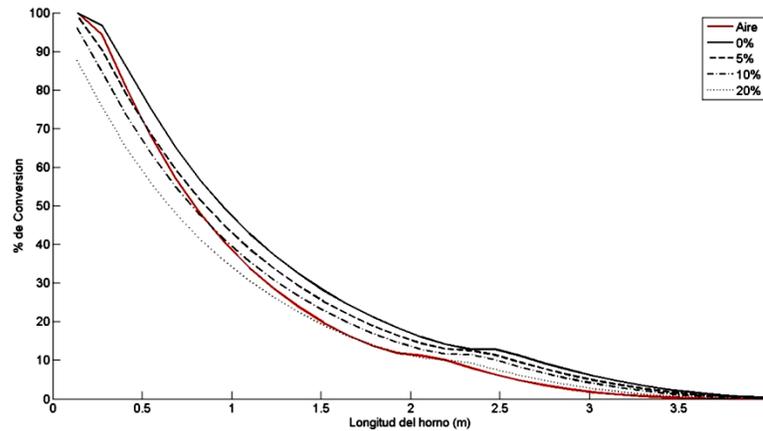
**Figura 4-21:** Descarbonatación de la caliza con recirculación de 30%.**Figura 4-22:** Descarbonatación de la caliza con recirculación de 55%.

Una recirculación de gases de combustión del 55% admite un incremento de la materia prima, garantizando transformación completa de 10%. Con un aumento del 15% la transformación se dio hasta el 98% aproximadamente y con el aumento de 20% la descarbonatación alcanzó solo el 92% aproximadamente.

La simulación con 70% de recirculación de gases admitió un incremento de flujo de materia prima hasta un 5% del original para obtener una descarbonatación completa. Se observó que cuando se aumentó la materia prima en 10% sólo se obtuvo una

transformación de aproximadamente 96% y cuando se aumentó la materia prima en un 20% se alcanzó una transformación de aproximadamente el 88%.

**Figura 4-23:** Descarbonatación de la caliza con recirculación de 70%



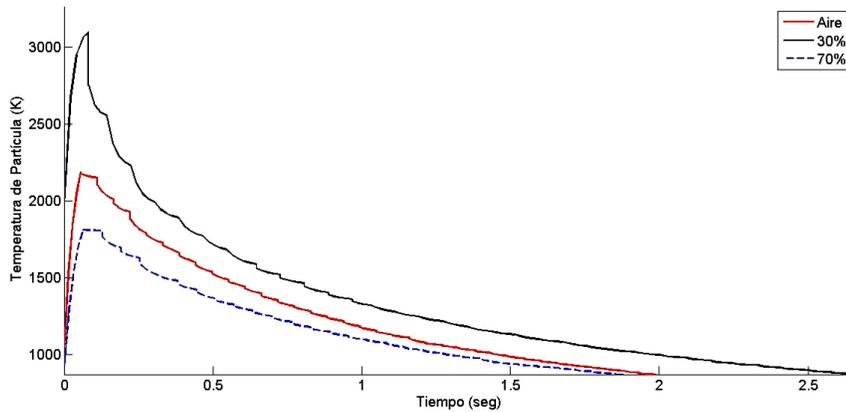
A partir de los análisis anteriores de descarbonatación, se puede concluir que las bajas recirculaciones permiten mayores incrementos en los flujos en la materia prima que los niveles de altas recirculaciones, debido a que las llamas cortas generan regiones de altas transferencias energéticas que favorecen el procesos de descarbonatación. En conclusión, la transferencia tecnológica de una planta de cemento desde combustión con aire hacia oxicomustión, implica un incremento de entre el 10% y el 15% en la productividad de un horno. Este análisis energético debe estar acompañado de un riguroso estudio económico, el cual se propone como campo de estudio para trabajos futuros.

#### 4.2.2 Fase dispersa

Un estudio de la fase dispersa se realizó para las simulaciones realizadas considerando solamente los casos de combustión con aire y oxicomustión con 30% y 70% de recirculación de gases. Las partículas de carbón fueron analizadas durante su recorrido en el horno y en su proceso de combustión. En cada simulación se inyectaron 100 partículas de carbón por cada iteración del medio continuo y se dejó iterar el programa hasta llegar a un estado estacionario (aproximadamente 70.000 segundos). Con el modelo se puede analizar la evolución temporal de la temperatura y la masa de la

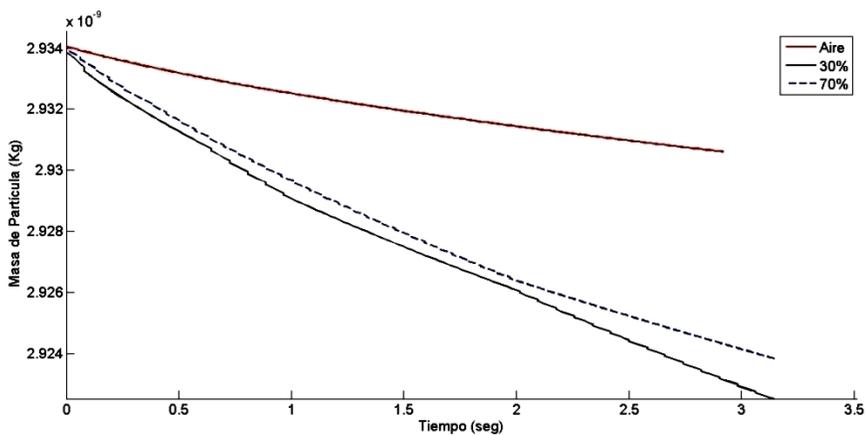
partícula en el proceso de combustión tal y como se muestra en la Figura 4-24 y Figura 4-25.

**Figura 4-24:** Temperatura de partículas



La temperatura alcanzada por las partículas en el proceso de oxidación con recirculación de 30% es mucho mayor que en los demás casos analizados y las velocidades de calentamiento de las partículas durante la combustión son muy altas, alcanzando en aproximadamente 0.2 segundos temperaturas de 3100°C, 2190°C y 1810°C para los tres casos analizados.

**Figura 4-25:** Masa de partículas



La variación de la masa en la partícula en los procesos de combustión analizados se muestran en la Figura 4-25, y se observa que en el proceso de oxicomustión el consumo de las partículas es más rápido. Este resultado en el proceso de combustión aumenta la transferencia de la energía disponible en la partícula de carbón hacia la carga sin tener modificaciones su diámetro.

### 4.2.3 Análisis de gases y partículas con RADCAL

Con el fin de analizar detalladamente el aporte energético por radiación al interior del horno, se comparó el aporte de cada uno de los componentes en cada caso de combustión simulado. Estos componentes son básicamente los gases de combustión ( $H_2O$  y  $CO_2$  principalmente) y las partículas sólidas conformadas por el carbón, hollín y cenizas.

Para analizar el potencial de emisión de radiación por gases y partículas se decidió utilizar del programa de código abierto RADCAL [21], el cual permite el análisis de radiación de gases de combustión. Este programa calcula intensidad de radiación que sale de un volumen no isotérmico de gases que puedan contener mezclas de  $CO_2$ ,  $H_2O$ ,  $CH_4$ ,  $CO$ ,  $N_2$ ,  $O_2$  y hollín. El coeficiente de absorción se calcula con un modelo de banda angosta, propiedades espectrales tabuladas y aproximaciones de las bandas moleculares de rotación-vibración. El hollín se trata como una sustancia que absorbe en el límite de Rayleigh.

La intensidad espectral en RADCAL se calcula de la siguiente manera:

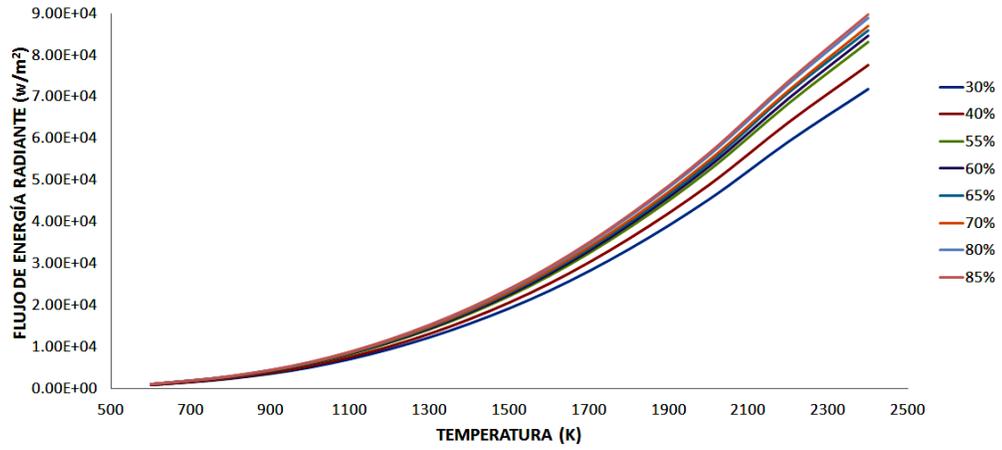
$$i'_{\lambda}(l) = i'_{\lambda,w} e^{-k_{\lambda}(l)} + \int_0^{k_{\lambda}(l)} i_{b,\lambda}(l^*) \exp[-(k_{\lambda}(l) - k_{\lambda}(l^*))] dk_{\lambda}(l^*) \quad (4-7)$$

Donde  $i_{b,\lambda}$  es la función de Planck de cuerpo negro,  $\lambda$  es la longitud de onda,  $w$  se refiere a la condición de frontera de pared y  $k_{\lambda}$  es el espesor óptico definido como:

$$k_{\lambda} = \int_0^l a_{\lambda}(l^*) dl^* \quad (4-8)$$

El análisis en RADCAL fue realizado sobre un cubo de 0.01 m considerando que los gases de combustión están en equilibrio químico y a diferentes temperaturas y para las partículas se consideró el flujo másico del carbón, lo que nos arroja una fracción



**Figura 4-27:** Radiación de gases de combustión.

Es claro que el aporte energético por radiación de las partículas es mucho mayor, según se observa en la Figura 4-26. Para los gases de combustión, se observa el efecto del aumento del CO<sub>2</sub> y del H<sub>2</sub>O en la radiación emitida a medida que la temperatura de estos gases aumenta. Este efecto es observado en la Figura 4-27.



## 5. Conclusiones y recomendaciones

### 5.1 Conclusiones

- Se simuló la alternativa de oxidación en un horno rotatorio destinado a la producción de cemento mediante la aplicación de balances de materia, momentum y energía. Los resultados de estos balances permiten confirmar las bondades de la oxidación, como una práctica altamente recomendable desde el punto de vista energético para ser implementada en la producción del clinker.
- En términos generales se aprecia que la práctica de la oxidación permite incrementar, bajo dadas condiciones de operación, la transferencia de energía hacia la fase sólida. La transferencia de calor por radiación puede ser mucho más eficaz y darse a una tasa mayor a la fase sólida, aunque la transferencia de calor por convección se haga lenta para esas mismas condiciones. Esta transferencia de energía por radiación se ve ampliamente favorecida por las mayores temperaturas generadas en el proceso, por la radiación molecular de los gases de combustión con sus altos niveles de CO<sub>2</sub>. Estos factores garantizan que durante la oxidación se obtenga una adecuada conversión de la caliza.
- Los modelos permiten analizar paramétricamente el impacto de diferentes condiciones de operación en los mecanismos de transferencia de calor entre las fases sólida y gas. El modelo local unidimensional permite evaluar dinámicamente el efecto de las condiciones de operación en el proceso de descarbonatación. Al tener en cuenta múltiples especies en la fase sólida y gas, el modelo puede ser modificado para estudiar el impacto de diferentes combustibles y/o materias primas en el proceso de producción de clinker.

- Como conclusión final del estudio de costos, se encontró que producir cemento con oxidcombustión es un 24% mayor con respecto al proceso con aire pero, de acuerdo con los resultados de esta investigación, la producción de cemento puede incrementarse entre 10 y 15% con la migración a la oxidcombustión. Es por esto que nuevas investigaciones en este tema deben ser iniciadas para tratar de dar soluciones a las limitaciones actuales y poder convertir el proceso de oxidcombustión en una opción atractivo para la industria.

## 5.2 Recomendaciones

Estudios que podrían realizarse a partir del tema de investigación actual, pueden ser:

- Estudiar el diseño de quemadores que brinden mejores condiciones de operación con la tecnología de oxidcombustión.
- Estudiar la captura del  $\text{CO}_2$  a partir del proceso de oxidcombustión.
- A partir del modelo desarrollado, estudiar nuevos combustibles que puedan brindar otras alternativas al sector cementero.
- Investigar el tema de costos de implementación en plantas de cemento existentes y nuevas.





# Bibliografía

- [1] "IMSL® Computational Technology Toolkit," Visual Numerics.
- [2] IEA, "CO2 Capture in the Cement Industry," Agency Greenhouse Gas R&D programme, Gloucestershire, Final Report2008.
- [3] F. Chejne and J. P. Hernandez, "Modelling and simulation of coal gasification process in fluidised bed," *Fuel*, vol. 81, pp. 1687-1702, 2002.
- [4] F. Chejne, *et al.*, "Modelling and simulation of time-dependent coal combustion processes in stacks," *Fuel*, vol. 79, pp. 987-997, 2000.
- [5] ECRA, "ECRA CCS Project - Report about phase II," ECRA (European Cement Research Academy), Duesseldorf, Technical Report2009.
- [6] F. Zeman and K. Lackner, "The Redusced Emission Oxygen Kiln," The Eart Institute al Columbia University, New Tork2008.
- [7] ECRA, "Carbon Capture Technology - Options and Potentials for the Cement Industry," ECRA (European Cement Research Academy), Duesseldorf, Technical Report2007.
- [8] A. H. Al-Abbas, *et al.*, "CFD modelling of air-fired and oxy-fuel combustion of lignite in a 100 KW furnace," *Fuel*, vol. 90, pp. 1778-1795, 2011.
- [9] L. Álvarez, *et al.*, "CFD modelling of oxy-coal combustion in an entrained flow reactor," *Fuel Processing Technology*, vol. In Press, Corrected Proof, 2011.
- [10] K. Andersson, *et al.*, "Radiation intensity of lignite-fired oxy-fuel flames," *Experimental Thermal and Fluid Science*, vol. 33, pp. 67-76, 2008.

- [11] P. A. Bejarano and Y. A. Levendis, "Single-coal-particle combustion in O<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> and O<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub> environments," *Combustion and Flame*, vol. 153, pp. 270-287, 2008.
- [12] S. S. Daood, *et al.*, "Deep-staged, oxygen enriched combustion of coal," *Fuel*, vol. In Press, Corrected Proof, 2011.
- [13] J. G. Friday, "Oxygen enrichment for cement kiln firing," in *Cement Industry Technical Conference, IEEE-IAS/PCA 2001.*, 2001, pp. 271-277.
- [14] C. A. Gotro, "Oxygen enrichment at Cemex's Victorville plant," in *Cement Industry Technical Conference, IEEE-IAS/PCA 2001.*, 2001, pp. 281-287.
- [15] S. P. Khare, *et al.*, "Factors influencing the ignition of flames from air-fired swirl pf burners retrofitted to oxy-fuel," *Fuel*, vol. 87, pp. 1042-1049, 2008.
- [16] H. Liu, *et al.*, "Comparisons of pulverized coal combustion in air and in mixtures of O<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub>," *Fuel*, vol. 84, pp. 833-840, 2005.
- [17] T. Suda, *et al.*, "Effect of carbon dioxide on flame propagation of pulverized coal clouds in CO<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> combustion," *Fuel*, vol. 86, pp. 2008-2015, 2007.
- [18] A. Watkinson and J. Brimacombe, "Limestone calcination in a rotary kiln," *Metallurgical and Materials Transactions B*, vol. 13, pp. 369-378, 1982.
- [19] "Estudio teórico y experimental de la combustión del gas pobre para su uso en el proceso de Calcinación en la Industria Cementera," Universidad Nacional de Colombia-Cementos ARGOS, Medellín, Colombia2009.
- [20] C. Parra, "Evaluación de la sustitución de carbón de síntesis en un horno de calcinación de la industria cementera," Maestría en Ingeniería Química, Facultad de minas, Universidad Nacional de Colombia, Medellín, 2009.
- [21] W. L. Grosshandler, "RADCAL: A Narrow-Band Model for Radiation Calculations in a Combustion Environment," U.S. Department of Commerce National Institute of Standards and Technology1993.

- [22] B. Shafer, "Oxygen enrichment at California Portland Cement Company's Mojave Plant," in *Cement Industry Technical Conference, IEEE-IAS/PCA 2001.*, 2001, pp. 293-298.
- [23] G. Mayes, "Oxygen enrichment at the TXI Midlothian cement plant," in *Cement Industry Technical Conference, IEEE-IAS/PCA 2001.*, 2001, pp. 289-292.
- [24] Y. Tan, *et al.*, "Combustion characteristics of coal in a mixture of oxygen and recycled flue gas," *Fuel*, vol. 85, pp. 507-512, 2006.
- [25] F. Zeman, "Oxygen combustion in cement production," *Energy Procedia*, vol. 1, pp. 187-194, 2009.
- [26] E. H. Chui, *et al.*, "Modeling of oxy-fuel combustion for a western Canadian sub-bituminous coal☆," *Fuel*, vol. 82, pp. 1201-1210, 2003.
- [27] N. Nikolopoulos, *et al.*, "Numerical investigation of the oxy-fuel combustion in large scale boilers adopting the ECO-Scrub technology," *Fuel*, vol. 90, pp. 198-214, 2011.
- [28] H. K. Versteeg and W. Malalasekera, *An Introduction to Computational Fluid Dynamics, the Finite Volume Method*. London, 1996.
- [29] S. Badzioch and P. G. W. Hawksley, "Kinetics of Thermal Decomposition of Pulverized Coal Particles," *Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development*, vol. 9, pp. 521-530, 1970.
- [30] M. M. Baum and P. J. Street, "Predicting the Combustion Behaviour of Coal Particles," *Combustion Science and Technology*, vol. 3, pp. 231-243, 1971/07/01 1971.
- [31] M. A. Field, "Rate of combustion of size-graded fractions of char from a low-rank coal between 1 200°K and 2 000°K," *Combustion and Flame*, vol. 13, pp. 237-252, 1969.
- [32] S. A. Morsi and A. J. Alexander, "An investigation of particle trajectories in two-phase flow systems," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 55, pp. 193-208, 1972.
- [33] A. Haider and O. Levenspiel, "Drag coefficient and terminal velocity of spherical and nonspherical particles," *Powder Technology*, vol. 58, pp. 63-70, 1989.

- [34] B. E. Launder and D. B. Spalding, *Lectures in mathematical models of turbulence*. London; New York: Academic Press, 1972.
- [35] Y. R. Sivathanu and G. M. Faeth, "Generalized state relationships for scalar properties in nonpremixed hydrocarbon/air flames," *Combustion and Flame*, vol. 82, pp. 211-230, 1990.
- [36] E. H. Chui and G. D. Raithby, "COMPUTATION OF RADIANT HEAT TRANSFER ON A NONORTHOGONAL MESH USING THE FINITE-VOLUME METHOD," *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, vol. 23, pp. 269-288, 1993/04/01 1993.
- [37] G. D. Raithby and E. H. Chui, "A Finite-Volume Method for Predicting a Radiant Heat Transfer in Enclosures With Participating Media," *Journal of Heat Transfer*, vol. 112, pp. 415-423, 1990.
- [38] R. Loison and R. Chauvin, "Pyrolyse rapide du charbon," *Chimie et industrie*, vol. 91, p. 269, 1964.
- [39] D. K. Fidaros, *et al.*, "Numerical modelling of flow and transport processes in a calciner for cement production," *Powder Technology*, vol. 171, pp. 81-95, 2007.
- [40] P. Edge, *et al.*, "Combustion modelling opportunities and challenges for oxy-coal carbon capture technology," *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 89, pp. 1470-1493, 2011.
- [41] L. Chen, *et al.*, "Oxy-fuel combustion of pulverized coal: Characterization, fundamentals, stabilization and CFD modeling," *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. In Press, 2011.
- [42] L. D. Smoot, "A decade of combustion research," *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 23, pp. 203-232, 1997.
- [43] H. C. Hottel, *et al.*, "Kinetic studies in stirred reactors: Combustion of carbon monoxide and propane," *Symposium (International) on Combustion*, vol. 10, pp. 111-121, 1965.

- [44] J. P. Kim, *et al.*, "Comparison of Different Global Reaction Mechanisms for MILD Combustion of Natural Gas," *Combustion Science and Technology*, vol. 180, pp. 565-592, 2008.
- [45] Y. C. Guo, *et al.*, "Numerical studies of pulverized coal combustion in a tubular coal combustor with slanted oxygen jet," *Fuel*, vol. 82, pp. 893-907, 2003.
- [46] B. R. Stanmore and P. Gilot, "Review—calcination and carbonation of limestone during thermal cycling for CO<sub>2</sub> sequestration," *Fuel Processing Technology*, vol. 86, pp. 1707-1743, 2005.
- [47] K. S. Mujumdar and V. V. Ranade, "Simulation of Rotary Cement Kilns Using a One-Dimensional Model," *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 84, pp. 165-177, 2006.
- [48] F. P. Incropera and D. P. D. Witt, *Fundamentos de transferencia de calor*, Cuarta Edición ed.: Pearson, 2009.
- [49] S. H. Tscheng and A. P. Watkinson, "Convective heat transfer in a rotary kiln," *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, vol. 57, pp. 433-443, 1979.