

MODELACIÓN DEL PROCESO DE GASIFICACIÓN DE BIOMASA EN UN
REACTOR DE LECHO FIJO CON CALENTAMIENTO INDIRECTO

PAULA ALEJANDRA ACOSTA CAMARGO
LAURA ALEJANDRA CHIPATECUA HERNÁNDEZ

FUNDACIÓN UNIVERSIDAD DE AMÉRICA
FACULTAD DE INGENIERÍAS
PROGRAMA DE INGENIERIA QUÍMICA
BOGOTÁ D.C
2018

MODELACIÓN DEL PROCESO DE GASIFICACIÓN DE BIOMASA EN UN
REACTOR DE LECHO FIJO CON CALENTAMIENTO INDIRECTO

PAULA ALEJANDRA ACOSTA CAMARGO
LAURA ALEJANDRA CHIPATECUA HERNÁNDEZ

Proyecto de investigación para optar el título de
INGENIERO QUÍMICO

Director
Libardo Mendoza Geney
Ingeniero Mecánico

Codirector
Andrea Lache
Ingeniera Química

FUNDACIÓN UNIVERSIDAD DE AMÉRICA
FACULTAD DE INGENIERIAS
PROGRAMA E INGENIERIA QUÍMICA
BOGOTÁ D.C
2018

Nota de aceptación:

Firma del presidente del jurado

Firma del jurado

Firma del jurado

DIRECTIVAS DE LA UNIVERSIDAD

Presidente de la Universidad y Rector del claustro

Dr. Jaime Posada Díaz

Vicerrector de Desarrollo y Recursos humanos

Dr. Luis Jaime Posada García-Peña

Vicerrector Académico y de Posgrados

Dra. Ana Josefa Herrera Vargas

Secretario General

Dr. Juan Carlos Posada García-Peña

Decano general Facultad de Ingenierías

Ing. Julio Cesar Fuentes Arismendi

Director de Investigaciones

Ing. Armando Fernández

Director del Departamento de Ingeniería Química

Ing. Leonardo de Jesús Herrera Gutiérrez

Las directivas de la Universidad de América, los jurados calificadores y los docentes no son responsables por las ideas y conceptos emitidos en el presente documento. Estos corresponden únicamente al autor.

*Dedico este logro primeramente a Dios que me bendijo con la fortaleza y las herramientas para finalizar este ciclo de mi vida.
A mis padres que me apoyaron durante todo este proceso, que fueron mi bastón y la voz de aliento, por no permitir que me rindiera ni que desfalleciera, a mi hermana por creer en mí y ser una compañía a lo largo de la carrera y finalmente a mi sobrino por estar siempre para mí y ser una ayuda incondicional.*

Paula Alejandra Acosta Camargo

Dedico este trabajo a Dios y al universo por darme fuerza para seguir adelante a lo largo de toda mi carrera.

A mis padres por haberme apoyado durante todas las noches en vela y ser un ejemplo de lucha, a mis abuelos por ser mi voz de aliento, a mi hermano por siempre creer en mí y mi tío por ser la voz racional en este proceso.

A todas las personas que fueron un apoyo para que culminara este proyecto y que me brindaron alguna enseñanza para finalizar este capítulo en mi vida.

Laura Alejandra Chipatecua Hernández

AGRADECIMIENTOS

Quiero agradecer a Dios por permitir que se cumpliera y finalizara este proyecto con éxito.

A mi mentor y director, el Ingeniero Libardo Mendoza quien me impartió sus conocimientos y experiencias durante esta travesía, lo cual fue vital para mi crecimiento académico y personal.

A la Ingeniera Andrea Lache por sus consejos, su paciencia y su ánimo de transmitir vivencias y coraje a una nueva generación.

A mi compañera Laura Chipatecua, este trabajo no habría visto la luz sin ella, me brindó su ayuda, su escucha y se convirtió en el complemento que se necesita cuando se desea llevar a cabo un proyecto de manera satisfactoria.

Un especial agradecimiento al grupo de Energías Alternativas.

Paula Alejandra Acosta Camargo

Infinitas gracias...

AGRADECIMIENTOS

Infinitas gracias a todos aquellos que aportaron fortaleza intelectual y emocional para poder culminar este proyecto.

A Libardo Mendoza, director de este trabajo y Andrea Lache por todos los conocimientos que aportaron a nuestro crecimiento profesional.

Laura Alejandra Chipatecua Hernández

Infinitas gracias...

CONTENIDO

	pág.
INTRODUCCIÓN	21
OBJETIVOS	25
1. GENERALIDADES TEÓRICAS	26
1.1 GASIFICACION	26
1.1.1 Parámetros del proceso	27
1.1.2 Etapas del proceso.	28
1.2 TIPOS DE GASIFICADORES	29
1.2.1 Lecho fijo.	32
1.2.1.1 Tipos de Calentamiento.	34
2. MODELO MATEMÁTICO	38
2.1 DESCRIPCIÓN DEL PROCESO	38
2.1.1 Materia prima.	42
2.1.2 Proceso.	47
2.1.2.1 Pirólisis	47
2.1.2.2 Gasificación	49
2.1.3 Equipo.	50
2.1.3.1 Temperatura	50
2.1.3.2 Presión	51
2.1.3.3 Agente de gasificación.	52
2.1.3.4 Agente de arrastre.	52
2.1.4 Suposiciones del modelo	52
2.2 ECUACIONES DE GOBIERNO	55
2.2.1 Balance de especies.	55
2.2.2 Balance de energía.	57
2.2.2.1 Condiciones de frontera	60
2.2.3 Balance de momento.	62
2.2.4 Calculo de grados de libertad	62
2.3 CALCULO DE PROPIEDADES FÍSICAS	65
2.3.1 Capacidad calorífica	65
2.3.1.1 De los componentes.	65
2.3.1.2 De la mezcla.	67
2.3.2 Viscosidad dinámica	67
2.3.2.1 De los componentes.	67
2.3.2.2 De la mezcla.	68
2.3.3 Densidad.	69
2.3.4 Conductividad térmica	69

2.3.4.1 De los componentes	69
2.3.4.2 De la mezcla.	70
2.3.5 Fase sólida.	70
2.4 CALCULO DE COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA DE CALOR	72
3. SOLUCIÓN DEL MODELO MATEMÁTICO	75
3.1 ECUACIONES DEL SISTEMA	75
3.1.1 Balance de energía	75
3.1.2 Balance de especies	78
3.1.3 Propiedades del gas	78
3.2 ALGORITMO DE SOLUCIÓN	80
3.3 DESARROLLO DEL MÉTODO	81
3.3.1 Gradientes de temperatura de las partículas	83
3.3.1.1 Coeficiente convectivo de transferencia de calor o de película	83
3.3.1.2 Número de biot.	84
3.3.2 Convergencia de malla	84
4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS	86
4.1 PERFIL DE TEMPERATURA	86
4.2 PERFIL DE CONCENTRACIONES	89
4.3 COMPARACIÓN CON LA LITERATURA	93
4.3.1 Composición del gas de síntesis.	93
4.3.2 Perfil de temperatura.	94
5. CONCLUSIONES	97
6. RECOMENDACIONES	98
BIBLIOGRAFÍA	99

LISTA DE TABLAS

	pág.
Tabla 1. Potenciales energéticos de residuos agrícolas	23
Tabla 2. Características de algunos tipos de gasificadores.	31
Tabla 3. Resumen de las características de los gasificadores para el proceso de gasificación.	35
Tabla 4. Aproximaciones para diferencias finitas	36
Tabla 5. Análisis elemental y próximo de las biomásas de interés.	43
Tabla 6. Propiedades gravimétricas del fruto de palma, el cuesco y nuez para una humedad de 8,3% y 8,3% en base seca.	44
Tabla 7. Propiedades estructurales de la madera de haya.	45
Tabla 8. Conductividad térmica de maderos suaves y duros	45
Tabla 9. Algunas propiedades físicas del cuesco de palma.	46
Tabla 10. Parámetros cinéticos de los productos de la pirólisis de madera de haya	49
Tabla 11. Parámetros cinéticos de la gasificación de carbonizados de biomasa.	50
Tabla 12. Rango de temperaturas de descomposición de los compuestos en la pirólisis.	51
Tabla 14. Coeficientes para la determinación de la capacidad calorífica.	66
Tabla 15. Coeficientes para la determinación de la capacidad calorífica de los alquitranes.	66
Tabla 16. Constantes básicas de los componentes volátiles	68
Tabla 17. Coeficientes para el cálculo de la conductividad térmica.	70
Tabla 18. Coeficientes de convección a diferentes alturas del gasificador.	83
Tabla 19. Coeficientes convectivos para diferentes fluidos.	84
Tabla 20. Comparación entre las composiciones experimentales y del modelo, libre de agua.	94

LISTA DE CUADROS

	pág.
Cuadro 1. Normas une-cen/ts para la caracterización de combustibles de biomasa.	44
Cuadro 2. Recopilación de parámetros del equipo y del proceso	55
Cuadro 3. Propiedades térmicas y estructurales de la biomasa.	71

LISTA DE GRÁFICOS

	pág.
Gráfica 1. Perfil de porosidad en función del radio adimensional.	72
Gráfica 2. Perfil de temperatura de la cama de partículas a una temperatura de pared de 973,15 K.	87
Gráfica 3. Perfil de temperatura de la cama de partículas en la posición $r=0$ del reactor a diferentes temperaturas de pared.	88
Gráfica 4. Composición másica de la biomasa y la fase volátil en función de la temperatura	89
Gráfica 5. Influencia del agente de gasificación en la descomposición de la biomasa.	90
Gráfica 6. Composición másica del gas según la longitud del reactor para $r=r/4$ y $t_p=1000^\circ\text{C}$	91
Gráfica 7. Descomposición completa de la biomasa	92
Gráfica 8. Composición final del gas	93
Gráfica 9. Comparación de datos entre la distribución de temperatura axial y la distribución experimental para $r/2$ del reactor.	95

LISTA DE FIGURAS

	pág.
Figura 1. Procesos de conversión energética de biomasa.	26
Figura 2. Diagrama ternario del proceso de gasificación	28
Figura 3. Gasificador de lecho fluidizado burbujeante	30
Figura 4. Gasificador de lecho fluidizado circulante.	31
Figura 5. Gasificador de lecho fijo downdraft.	32
Figura 6. Gasificador de lecho fijo updraft	33
Figura 7. Gasificador de lecho fijo crossdraft.	34
Figura 8. Malla de volúmenes finitos de dos dimensiones.	37
Figura 9. Ilustración de los procesos que ocurren al interior del gasificador	38
Figura 10. Representación gráfica de las coordenadas cilíndricas.	39
Figura 11. Esquema general del modelo.	40
Figura 12. Reacciones de la pirólisis. Donde (1) reacciones de descomposición primaria. (2) reacciones de descomposición secundaria.	41
Figura 13. Perfil de temperatura en un reactor de lecho fijo con calentamiento indirecto	51
Figura 14. Perfil de temperatura que se forma al interior del gasificador.	54
Figura 15. Simetría térmica al interior del gasificador.	54
Figura 16. Fenómenos de transferencia de masa al interior del gasificador.	55
Figura 17. Fenómenos de transferencia de calor al interior del gasificador.	57
Figura 18. Puntos de referencia del reactor	60
Figura 21. Malla de nodos bidimensional para la solución del modelo por diferencias finitas.	81
Figura 22. Acercamiento a un nodo interno de la grilla.	82

LISTA DE ECUACIONES

	pág.
Ecuación 1. Discretización del método de volúmenes finitos	37
Ecuación 2. Ecuación de biot	46
Ecuación 3. Ecuación de arrhenius	47
Ecuación 4. Ecuación general de la cinética de reacción	47
Ecuación 5. Cinética de reacción de la pirólisis	48
Ecuación 6. Cinética de reacción de la gasificación	50
Ecuación 7. Balance de masa para la fase gaseosa	56
Ecuación 8. Balance de especies para la fase gaseosa	56
Ecuación 9. Balance de especies para la fase sólida	57
Ecuación 10. Balance de energía general para la fase gaseosa	58
Ecuación 11. Balance de energía para la especie gaseosa	59
Ecuación 12. Balance de energía general para la fase sólida	59
Ecuación 13. Balance de especies para la especie gaseosa	60
Ecuación 14. Calculo de grados de libertad.	64
Ecuación 15. Capacidad calorífica de cada especie	66
Ecuación 16. Capacidad calorífica de la mezcla de gases	67
Ecuación 17. Viscosidad de compuestos inorgánicos	67
Ecuación 18. Viscosidad de compuestos orgánicos	68
Ecuación 19. Viscosidad de la mezcla de gases	68
Ecuación 20. Ecuación de interacción entre componentes	69
Ecuación 21. Densidad de cada componente	69
Ecuación 22. Densidad de la mezcla de gases	69
Ecuación 23. Conductividad de cada componente	69
Ecuación 24. Conductividad de la mezcla de gases	70
Ecuación 25. Coeficiente de película	72
Ecuación 26. Velocidad del gas	73
Ecuación 27. Error relativo	85

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolo	Término	Unidades
A	Área	m ²
a _{wf}	Concentración de cenizas en base seca	
Bi	Número de Biot	
C	Concentración	mol/m ³
C _p	Capacidad calorífica molar	J/molK
C _{waf}	Concentración de carbono libre de agua y cenizas	
D _c	Coefficiente de dispersión térmica	
D	Diámetro	m
E _a	Energía de activación	
ΔH	Entalpía	kJ/kmol
H _{waf}	Concentración de hidrógeno libre de agua y cenizas	
h	Coefficiente de convección	W/m ² K
K	Constante de velocidad de reacción	
K ₀	Factor pre - exponencial de choque	
K _y	Coefficiente de difusión másica	
L	Longitud	m
M	Masa molar	g/mol
ṁ	Caudal másico	kg/s
M	Masa	kg
N _{waf}	Concentración de nitrógeno libre de agua y cenizas	
O _{waf}	Concentración de oxígeno libre de agua y cenizas	
P	Presión	Pa
P _c	Presión crítica	Pa
Q	Flujo volumétrico	m ³ /s
R	Constante universal de los gases	J/mol K
r	Coordenada radial	m
r _i	Velocidad de reacción	mol/m ³ s
T	Temperatura	K
T _c	Temperatura crítica	K
T _r	Temperatura reducida	
t	Tiempo	s
V	Volumen	m ³
W	Agua	
x	Fracción molar	
y	Fracción másica	
z	Coordenada axial	m

Subíndices	Término	
Ax	Axial	
b	Lecho	
esp	Específica	
G	Gas	
i	Especie i	
m	Mezcla	
p	Pared	
S	Sólido	
t	Total	
Rad	Radial	
Superíndices	Término	
g	Gaseosa	
n	Grado de la reacción	
rxn	Reacción	
s	Sólida	
Símbolo griego	Término	
β	Coefficiente de transferencia de masa	m/s
ε	Porosidad	
λ	Conductividad térmica	W/mK
μ	Viscosidad dinámica	Pa*s
ρ	Densidad	kg/m ³
ω	Velocidad	m/s

GLOSARIO

ANÁLISIS ELEMENTAL: es una técnica usada como herramienta para la cuantificación de hidrógeno, nitrógeno, carbono y azufre presentes en una muestra de naturaleza orgánica e inorgánica.

ANÁLISIS PRÓXIMO: es usado para definir la composición de cenizas, humedad, carbono fijo y materia volátil de la materia orgánica.

BIOMASA: es todo material orgánico proveniente de cualquier organismo vivo exceptuando los minerales originados en las formaciones volcánicas.

BIOMASA RESIDUAL: tipo de biomasa que se obtiene cuando se ha realizado un proceso industrial a un producto que contiene algún grado de concentración de carbono.

FLUIDIFIZACIÓN: operación donde un gas se hace pasar o se pone en contacto directo con una corriente de fluido, ya sea gas o líquido, a raíz de esta operación el sólido adopta características del fluido con el cual tuvo el contacto.

GASIFICACIÓN: es un proceso de descomposición termoquímica u oxidación parcial de la biomasa que se lleva a cabo en presencia de una baja cantidad de oxígeno y un alto suministro energético con la finalidad de obtener un gas de síntesis flexible en la aplicación y con un poder calorífico moderado.

LECHO FIJO: es un tipo de lecho que poseen algunos reactores en el cual se lleva a cabo un sistema de reacción heterogéneo para catalizar usualmente reacciones en fase gaseosa, aquí la cama de partículas o biomasa permanece estacionaria durante todo el proceso.

PODER CALORÍFICO: se denomina como la cantidad de energía que un tipo determinado de biomasa puede entregar a cualquier aplicación de tipo energético.

RESUMEN

El presente proyecto surge del interés del semillero de investigación de Energías Alternativas por conocer y evaluar la utilidad del proceso de gasificación de biomasa residual para la obtención de un gas de síntesis, que luego de transformaciones físicas y químicas posteriores, pueda llegar a ser utilizado como combustible. El aprovechamiento energético y eficiente de esta fuente de energía sostenible, impulsa el desarrollo de un modelo teórico-matemático y la solución del mismo con el objetivo de obtener una mejor visualización de la distribución de productos resultantes luego de la finalización del proceso. Como valor añadido para el modelo que se llevará a cabo, el reactor de lecho fijo posee un calentamiento indirecto.

Lo anterior, genera que el modelo deba tener en cuenta tanto las variables y/o ventajas físicas como las limitaciones al momento de generar la solución respectiva, además es necesario comprender que los modelos son perfiles de procesos de forma aproximada, que buscan ser cercanos a datos experimentales y también implementar la mayor cantidad de variables posibles manteniendo la simplicidad para el momento de la solución, siendo este el caso, donde se abarca la caracterización de la biomasa, parámetros del proceso y parámetros del reactor para generar un modelado que aunque pretende ser real, a su vez permita la solución despreciando parámetros poco significantes o mínimamente influyentes en la resolución.

Palabras Clave: biomasa, gasificación, gas de síntesis, lecho fijo, modelación, pirólisis.

INTRODUCCIÓN

El calentamiento global es un fenómeno que el planeta ha experimentado desde sus orígenes, puesto que se sabe que la temperatura de la Tierra siempre ha aumentado de forma constante y a una tasa de velocidad prácticamente imperceptible, pero desde la revolución industrial en el siglo XIX se ha observado un crecimiento acelerado de la temperatura del planeta, llegando a aumentar casi 0,6°C en dos siglos¹, esto debido a que durante esta época se desarrollaron procesos industriales generadores de emisiones. Este incremento inusual ha hecho mella en la situación climática y es consecuencia de otros fenómenos que se producen actualmente como lo son el cambio climático y la formación de gases de efecto invernadero, ambos fenómenos conducen a desastres naturales como inundaciones, sequías, derrumbes, desbordamiento de ríos, entre otros.

El aumento de la temperatura terrestre deviene en un escenario donde la concentración de los gases de efecto invernadero, como lo son CO₂, CH₄ y NO₂, ha incrementado en un 30%, 143%, y 14% respectivamente desde la época de 1750². Las tendencias y demandas energéticas actuales que se presentan debido a la industrialización de diferentes sectores productivos son una de las causas principales que llevan a la búsqueda de la disposición y aprovechamiento de fuentes energéticas denominadas combustibles fósiles que permitan satisfacer las necesidades humanas, a costa de provocar y permitir la explotación indiscriminada de recursos naturales³, cuya extracción puede ser crítica para el medio ambiente o indispensable para la sobrevivencia de diferentes especies animales y vegetales.

Consecuente al alza de temperatura, el calentamiento global ha sido estudiado por diferentes científicos que buscan afirmar la existencia del mismo y también crear consciencia en la necesidad de realizar algún cambio en los hábitos que coadyuvan a la proliferación de este fenómeno, proponiendo nuevas estrategias que mitiguen los efectos del mismo. Es importante mencionar que los combustibles fósiles tales como el petróleo, el gas natural, gas licuado del petróleo y el carbón, pertenecen a la gama de recursos no renovables⁴, esto quiere decir que en algún instante se agotarán dejando la demanda completamente abierta y sin un medio de satisfacerla,

¹ Green Facts. Consenso científico sobre el cambio climático. [Consultado el Noviembre 27,2017]. Disponible en: <https://www.greenfacts.org/es/cambio-climatico-ie3/cambio-climatico-ie3-greenfacts.pdf>

² MONTOYA CAMPUZANO, Maria Isabel. Modelación Matemática Del Transporte Y Transformaciones Del Nitrógeno Procedente De La Aplicación Agrícola De Purines En La Zona no Saturada Del Suelo. Influencia De Las Variables Relacionadas Con La Estructura Del Terreno. Universidad Politécnica de Valencia, 2008. p. 8

³ METROLOGY AND TESTING CZECH OFFICE FOR STANDARDS. Surface active agents - Determination of amide nitrogen content - Potentiometric titration; Amendment AC. Apr 25,.

⁴ RIERA, Pere, et al. Manual De Economía Ambiental Y De Los Recursos Naturales. Tercera ed. 2016.

estas limitaciones generan incertidumbre sobre la dependencia energética de estos recursos.

Asimismo, existen los recursos renovables los cuales son vistos como una de las alternativas no contaminantes para la obtención de combustible. Actualmente, estos recursos son utilizados en tareas comunes, pero no son explotados a gran escala a excepción de la energía hidráulica, para el beneficio energético de una comunidad, dentro de estos recursos renovables se encuentra la energía solar, eólica, geotérmica y biomasa.

En el presente proyecto se trabajó la biomasa como fuente energética, la cual se encuentra definida como todo material orgánico de origen vegetal, animal o la que es producto de la transformación natural o artificial de las anteriores excluyendo a la materia que está englobada en formaciones geológicas que han sufrido de mineralización⁵ existiendo diferentes tipos de biomasa como se muestra a continuación:

- Biomasa natural: La biomasa natural es aquella que se da sin intervención humana, el ejemplo más claro es de las ramas que se encuentra en los suelos de los bosques.
- Biomasa residual: Existen tres tipos de biomasa residual: la agrícola que es producto de la actividad agrícola y se produce en los campos de cultivo teniendo como residuo más abundante a nivel mundial la paja de cereales⁶. La biomasa residual proveniente del sector pecuario que consiste básicamente en el estiércol producto de la cría de animales. Por otro lado, se encuentran los residuos orgánicos de origen urbano los cuales poseen cerca de 50% de peso húmedo de biomasa siendo esencialmente heterogénea⁷.
- Cultivos energéticos: Son aquellos cultivos cuyo objetivo final es obtener biocombustibles sólidos, líquidos o gaseosos⁸.

El tipo de biomasa que se empleó en el presente trabajo es la residual, en primer lugar al estar al final del ciclo productivo no se le da una disposición adecuada y se está perdiendo material que es fuente aprovechable para la producción de energía eléctrica y en segundo lugar porque al ser producto de una actividad humana

⁵ ELÍAS CASTELLS,Xavier. Biomasa Y Bioenergía. Madrid, ES: Ediciones Díaz de Santos, 2012. 9788499691244

⁶ NOGUES,Fernando Sebastian; GARCIA-GALINDO,Daniel y REZEU,Adeline. Energía De La Biomasa (Volumen I). Zaragoza: Prensas Universitarias de Zaragoza, 2010. p. 77

⁷ ELIAS CASTELLS,Xavier. Aprovechamiento De Residuos Agrícolas Y Forestales. En: [Anónimo]Reciclaje De Residuos Industriales. Madrid: Ediciones Díaz de Santos, 2012a. p. 702.

⁸ RINCON MARTINEZ,Jose Maria y SILVA LORA,Electo Eduardo. Bioenergía: Fuentes, Conversión Y Sustentabilidad. La red iberoamericana de aprovechamiento de residuos orgánicos en producción de energía, 2014. p. 58-60

significa que el espacio necesario para producir la biomasa para aprovechamiento energético no compite con las extensiones de tierra destinados a el cultivo de alimentos.

Ahora bien, en Colombia para el año 2015 la Unidad de Planeación Minero Energética (UPME) publicó el libro titulado *Integración de las energías renovables no convencionales en Colombia*, en el capítulo 2 describe varios tipos de energías renovables no convencionales en donde para la biomasa reporta toneladas de residuo y potencial energético para diferentes tipos de biomasa agrícolas, estos datos se encuentran consignados en la tabla 1 extraída de dicha fuente.

Tabla 1. Potenciales energéticos de residuos agrícolas

Cultivo	Toneladas producto (2012)	Residuo agrícola	Toneladas residuo (2012)	Potencial energético (TJ/año)
Palma	1.137.984	Cuesco	246.714	3.428
		Fibra	712.946	8.845
		Raquis	1.206.490	8.645
Caña azúcar	2.681.348	RAC	8.741.194	42.761
		Bagazo	7.186.013	78.814
Café	1.092.361	Pulpa	2.327.929	8.354
		Cisco	224.262	3.870
		Tallos	3.303.299	44.701
Maíz	1.206.467	Rastrojo	1.126.840	11.080
		Tusa	325.746	3.389
		Capacho	254.564	3.863
Arroz	2.318.025	Tamo	5.447.359	19.476
		Cascarilla	463.605	6.715
Banano	1.834.822	Raquis	1.834.822	788
		Vástago	9.174.108	5.172
		Rechazo	275.223	484
Plátano	3.201.476	Raquis	3.201.476	1.374
		Vástago	16.007.378	9.024
		Rechazo	480.221	844
			Total	330.350

Fuente: Unidad de Planeación Minero Energética. Integración de las energías renovables no convencionales en Colombia; Bogotá: La Imprenta Editores S.A., 2015. 43-47 p

Como se puede observar en la Tabla 1, Colombia es un país con una producción de biomasa con un potencial energético aprovechable mediante alguno de los

procesos de transformación para la obtención de energía eléctrica que puede ser una solución viable para las Zonas No Interconectadas que existen en el país, éstas son zonas que no están conectadas a la red eléctrica del país y requieren de una solución local para satisfacer la necesidad energética.

El proceso de transformación que se estudió en este trabajo es el de gasificación de la biomasa en la cual se obtiene un combustible en estado gaseoso que se puede emplear en un sistema de generación eléctrica que está constituido por un motor de combustión interna. Según Sánchez,⁹ la gasificación representa grandes ventajas como lo son versatilidad en la valorización del residuo, esto refiriéndose a su aprovechamiento ya sea para fines eléctricos, gas de síntesis o en forma de calor, para una etapa posterior de manufacturación de productos químicos. Provee de un buen rendimiento eléctrico y contribuye a reducir el impacto ambiental. De los procesos anteriores a la gasificación los cuales son el secado y la pirólisis, sólo se tendrá en cuenta la pirólisis, ya que la biomasa se asume como seca a la entrada del reactor, con una humedad menor al 3%.

Con el fin de poder implementar dicha tecnología en las zonas que necesitan suplir sus requerimientos energéticos el primer paso para conocer el proceso mediante la implementación de modelos matemáticos en los cuales se describe los fenómenos que toman lugar a lo largo de todo el proceso, con el fin de hacer el escalamiento. Además, el uso de modelos matemáticos permite realizar una optimización en los parámetros de operación sin necesidad de realizar experimentación disminuyendo principalmente los costos del proceso.

En este trabajo la modelación matemática se realizó con base al análisis del balance de energía y el balance de las especies que componen la fase volátil, que está compuesta por el gas y los alquitranes, y el de la biomasa como tal. Todo este estudio es un estudio teórico, lo que quiere decir que no se realizó ningún tipo de experimentación y que todos los datos requeridos en el modelo fueron recopilados y obtenidos de la literatura de experimentación que realizaron otros autores.

⁹ SANCHEZ BRAVO, Alvaro. Ciudades, Medio Ambiente Y Sostenibilidad. España: ArCiBel Editores, 2007.

OBJETIVOS

OBJETIVO GENERAL

Modelar el proceso de gasificación de biomasa en un reactor de lecho fijo con calentamiento indirecto para determinar la distribución de productos generados durante el proceso.

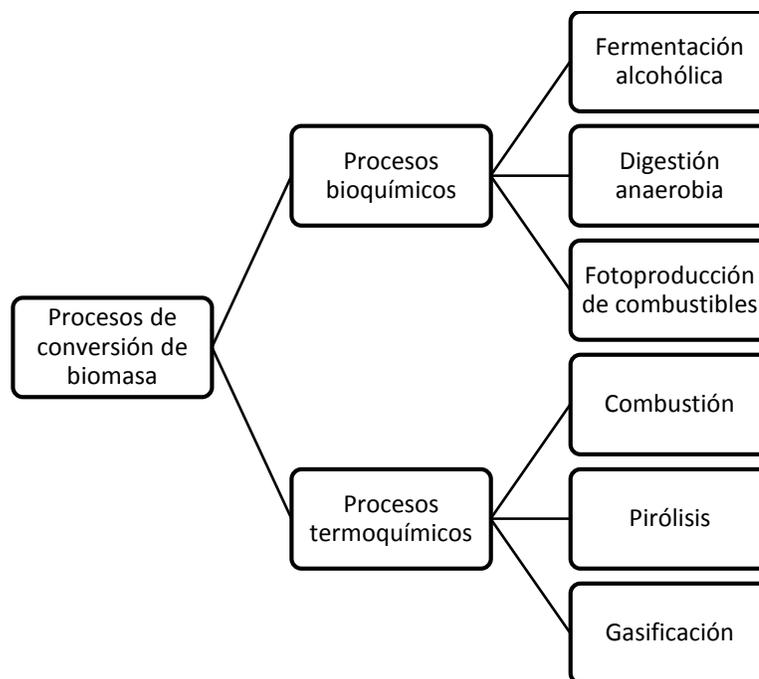
OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Definir parámetros y variables determinantes en el proceso de gasificación de biomasa en un reactor de lecho fijo de calentamiento indirecto.
- Solucionar las ecuaciones de gobierno del proceso de gasificación de acuerdo con las condiciones establecidas en el reactor a través de un software matemático.
- Comparar los resultados teóricos obtenidos en el modelo desarrollado con resultados experimentales obtenidos de la literatura.

1. GENERALIDADES TEÓRICAS

Con el fin de obtener energía a partir de cualquier tipo de biomasa, ésta requiere llevarse a procesos de transformación. En la industria existe diferentes tipos de procesos de transformación a los cuales la biomasa se puede someter y el tipo de proceso depende del tipo de biomasa y del tipo de combustible que se desee obtener, en la Figura 1 se encuentran los diferentes procesos, el proceso de interés del presente trabajo es la gasificación la cual se encuentra descrita a continuación.

Figura 1. Procesos de conversión energética de biomasa.



1.1 GASIFICACION

La gasificación es un proceso termoquímico que corresponde a la oxidación parcial de combustibles sólidos en presencia de un agente gasificante u oxidante para la producción de un gas combustible denominado gas de síntesis, que se encuentra compuesto por hidrógeno (H_2), nitrógeno (N_2), dióxido de carbono (CO_2), monóxido de carbono (CO), metano (CH_4), agua e hidrocarburos pesados.

Dentro de las ventajas que tiene el proceso está en primer lugar que el gas producido puede ser un sustituto del gas natural, ya que se puede emplear en los mismos usos y, por otro lado, como ya se mencionó anteriormente el gas de síntesis

puede alimentar motores de combustión interna y turbinas de gas con el fin de generar energía eléctrica¹⁰.

1.1.1 Parámetros del proceso. Dentro de los parámetros con mayor influencia en el proceso están:

- La temperatura: Las reacciones de gasificación y algunas de pirólisis son de carácter endotérmico, así que para que se produzcan necesitan de la energía que se le agrega en forma de calor. Las reacciones de pirólisis se dan en un rango de temperaturas de 200 a 500°C en donde ya se han descompuesto los tres compuestos principales de la biomasa, que son la celulosa, la hemicelulosa y la lignina, y las de gasificación en un rango de 800 a 1000°C.¹¹
- El tiempo de permanencia: Este parámetro puede afectar la composición del gas de síntesis, corresponde al tiempo de contacto entre la fase volátil o agente gasificante con la fase sólida que es el carbonizado producido en la pirólisis. Si hay mayor tiempo de reacción entre estos dos, el material sólido producto de todo el proceso disminuye y además se favorecen las reacciones secundarias lo que implica una disminución en la concentración de los compuestos volátiles pesados llamados alquitranes¹².
- Agente oxidante: El medio de gasificación o agente gasificante reacciona con el carbonizado producto de la pirólisis produciendo principalmente CO y H₂. El agente oxidante o gasificante usualmente es dióxido de carbono, aire, oxígeno o vapor de agua.

Cuando se usa aire como agente de gasificación el gas de síntesis producido es de menor poder calorífico que con los otros agentes de gasificación ya que debido a su composición (21% O₂, 79% N₂) el nitrógeno en el gas diluye la mezcla de gases que se van produciendo.

Por otro lado, en la Figura 2 se muestra la conversión dependiendo del agente de gasificación y los diferentes componentes que se producen. Si se utiliza oxígeno el camino de producción se inclina hacia la esquina de oxígeno o si se utiliza vapor de agua como agente oxidante el proceso se va más a la esquina de H teniendo una proporción más alta entre H/C¹³.

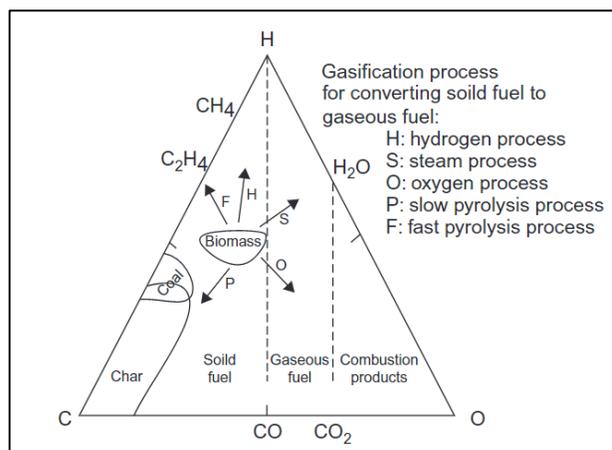
¹⁰ Fortalecimiento de la Capacidad en Energía Renovable para América Central. Manuales Sobre Energía Renovable: Biomasa/ Biomass. 2002.

¹¹ RINCÓN, Sonia; GÓMEZ, Alexánder y KLOSE, Wolfgang. Gasificación De Biomasa Residual De Procesamiento Agroindustrial. 2011.

¹² SANCHEZ LOPEZ, Ismael. Análisis Comparativo De Las Tecnologías De Valorización De Residuos Basadas En La Gasificación. España: 2014. p. 14-16

¹³ BASU, Prabir. Biomass Gasification, Pyrolysis and Torrefaction : Practical Design and Theory. Amsterdam: Academic Press, 2013. 9780123964885

Figura 2. Diagrama ternario del proceso de gasificación.



Fuente: BASU, Prabir. Biomass Gasification, Pyrolysis and Torrefaction : Practical Design and Theory. Amsterdam: Academic Press, 2013.

- La materia prima: la materia prima de la gasificación es el carbonizado, producto de un proceso previo de pirólisis, que al finalizar este proceso logra obtener una gran área superficial, que es ideal para el inicio de la gasificación.

1.1.2 Etapas del proceso. Durante el proceso de gasificación ocurren una serie de subprocesos en la medida en que la materia prima es transformada en el producto final que es la mezcla de gases combustibles:

- Secado: Es la etapa inicial de cualquier proceso de descomposición de biomasa termoquímica, el contenido de humedad en la biomasa reduce el rendimiento del proceso de gasificación ya que aumenta los requerimientos energéticos del reactor en el intento de reducir la humedad y obtener una biomasa seca. Cuando la biomasa tiene un contenido de humedad mayor al 10% o 20%¹⁴ es necesario considerar un secado antes de cualquier proceso termoquímico, ya que la energía del calentamiento sería destinada a la deshidratación de la biomasa.
- Pirólisis: Luego del secado la biomasa pasa directamente a un de descomposición térmica en ausencia o en una concentración controlada de oxígeno, este proceso es conocido como pirólisis, reduciéndola a carbonizado, alquitranes y gas pobre donde el carbonizado, es la materia prima de la gasificación¹⁵.

¹⁴ BRANDT, Jack C. y DONAHUE, Walker S. Pyrolysis : Types, Processes, and Industrial Sources and Products. New York: Nova Science Publishers, Inc, 2009. 9781607416692

¹⁵ RAVEENDRAN, K.; GANESH, Anuradda y KHILAR, Kartic C. Pyrolysis Characteristics of Biomass and Biomass Components. 1996. p. 987-9980016-2361

1.2 TIPOS DE GASIFICADORES

Los gasificadores pueden ser clasificados de acuerdo con su configuración y al movimiento relativo entre el reactor y la materia prima. Existen cuatro clases principales de gasificadores: lecho fijo, lecho fluidizado, flujo de arrastre y lecho móvil. Los de lecho fluidizado y lecho fijo se subdividen por el tipo de corriente que poseen.

El fenómeno de fluidificación es aquel que genera la diferenciación entre los lechos fijos y fluidizados, sucede que cuando las velocidades de flujo del fluido a través de los intersticios de las partículas que conforman el sólido son bajas, se puede afirmar que la cama de partículas de biomasa permanece estacionaria y considerarse un gasificador de lecho fijo. Por otro lado, en un lecho fluidizado las velocidades de flujo de la fase volátil son muy altas al atravesar los intersticios de las partículas, que generan movimiento en las mismas, permitiendo que tengan un desplazamiento a través del gasificador¹⁶.

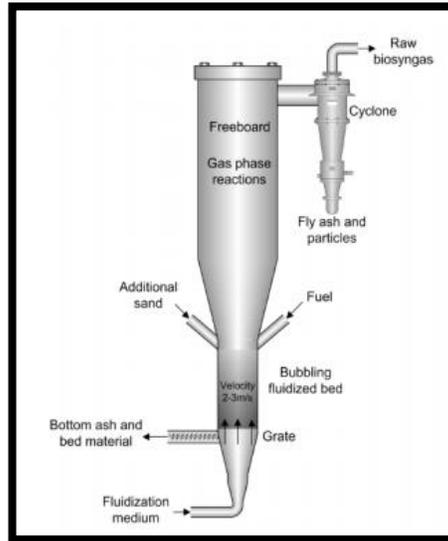
Los gasificadores de lecho fluidizado son:

- **Gasificador de lecho fluidizado burbujeante (BFB):** En este tipo de gasificadores la interface muestra un comportamiento similar a las burbujas de gas. Esto se debe a la intensa mezcla al interior del reactor donde a diferencia de los de lecho fijo no se distinguen ninguna de las zonas de secado, pirólisis o reducción como se puede observar en la Figura 3. Este gasificador provee uniformidad en la distribución de la temperatura, es apto para recibir partículas de diferentes tamaños, alcanza altas velocidades de transferencia de calor entre el material inerte, el combustible y el gas y finalmente logra una alta conversión con bajo porcentaje de alquitrán y cenizas¹⁷.

¹⁶ ELIAS CASTELLS,Xavier. Tratamiento Y Valorización Energética De Residuos. Madrid, ES: Ediciones Díaz de Santos, 2012b. 9788499691411

¹⁷ DRAPCHO,Caye; NHUAN,Nghiem Phu y WALKER,Terry H. Biofuels Engineering Process Technology. New York [u.a.]: McGraw-Hill, 2008. p. 160-1809780071487498

Figura 3. Gasificador de lecho fluidizado burbujeante.



Fuente: BULL,Doug. Performance improvements to a fast internally circulating fluidized bed (FICFB) biomass gasifier for combined heat and power plants University of Canterbury, 2008. p. 56-58.

- **Gasificador de lecho fluidizado circulante:** Este tipo de gasificadores presentan una dirección de flujo similar a los gasificadores de lecho fluidizado burbujeante, la diferencia radica en el material particulado que circula internamente a través de una clase de camino fuera del gasificador. Aquí la biomasa se quema en un régimen de fluidización rápida, tanto así que la velocidad del gas es suficiente para retirar todos los sólidos del reactor. Es aconsejable para las reacciones rápidas, se logran altas velocidades de calentamiento y de conversión con un bajo porcentaje de obtención de alquitranes y cenizas.

Gran parte del material particulado que abandona el reactor es capturado por un gas separador de sólidos, posteriormente el material es recirculado a la base del reactor. Usualmente, un gasificador de esta especie se compone de: vasija, ciclón, recirculador de sólidos e intercambiador de calor externo^{18 19 20}.

¹⁸ BULL,Doug. Performance Improvements to a Fast Internally Circulating Fluidized Bed (FICFB) Biomass Gasifier for Combined Heat and Power Plants University of Canterbury, 2008. p. 56-58

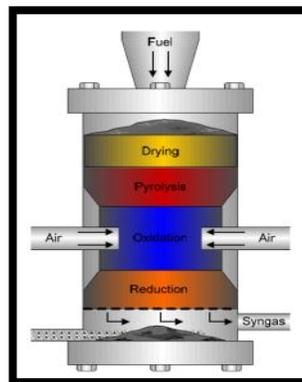
¹⁹ PEÑA MONTAÑO,Ivonne Vanessa y REYES FONSECA,Maria Camila. Diseño Conceptual De Un Proceso De Gasificación De Biomasa Residual Lignocelulosica En Reactores De Lecho Fluidizado. Fundación Universidad de América, 2016.

²⁰ DRAPCHO,Caye; NHUAN,Nghiem Phu y WALKER,Terry H. Biofuels Engineering Process Technology. New York [u.a.]: McGraw-Hill, 2008. p. 160-1809780071487498

1.2.1 Lecho fijo. Un reactor denominado de lecho fijo posee unas características específicas como la amplia gama de distribución de temperaturas que respalda la presentación de puntos calientes que permiten la fusión de cenizas. Asimismo, esta característica confiere a los lechos fijos una baja capacidad específica y hace que requieran largos periodos de puesta en marcha, al tiempo que limita su potencial de pasar a mayor escala de tamaño. Para plantas en las que se requiera una elevada potencia, la limitación de tamaño conlleva mayores costes de inversión debido a la necesidad de instalar varias unidades en cascada. Para evitar la aparición de canales de gas en el seno del lecho, el tamaño del sólido debe ser muy uniforme. Las principales ventajas del lecho fijo son la alta eficiencia en la conversión del carbono contenido en la alimentación, el amplio rango de contenido de cenizas que puede tener el sólido y la posibilidad de fundirlas. Además, los gasificadores downdraft producen un gas limpio con bajo contenido en alquitranes²¹.

- **Gasificador de lecho fijo downdraft:** En este tipo de reactor la fase volátil que se genera al interior del reactor tiene la misma dirección del flujo de la materia prima y el gas de síntesis generado es retirado por la parte inferior del reactor. Este tipo de reactor es ampliamente usado por su bajo costo y por el bajo porcentaje de producción de alquitranes y los minerales permanecen con el carbonizado, para que de esta manera no sea necesario un ciclón, el gasificador se encuentra ilustrado en la Figura 5²².

Figura 5. Gasificador de lecho fijo Downdraft.



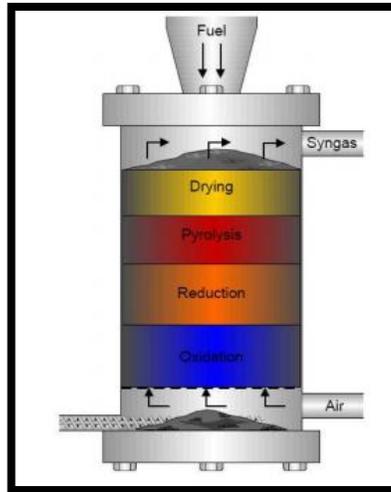
Fuente: DRAPCHO,Caye; NHUAN,Nghiem Phu andWALKER,Terry H. Biofuels engineering process technology. New York [u.a.]: McGraw-Hill, 2008. 160-180 p.

²¹ ELIAS CASTELLS,Xavier. Tratamiento Y Valorización Energética De Residuos. Madrid, ES: Ediciones Díaz de Santos, 2012b. 9788499691411

²² DRAPCHO,Caye; NHUAN,Nghiem Phu y WALKER,Terry H. Biofuels Engineering Process Technology. New York [u.a.]: McGraw-Hill, 2008. p. 160-1809780071487498

- **Gasificador de lecho fijo updraft:** Este tipo de gasificador indica que el agente gasificante ingresa al gasificador por la parte inferior y asciende, en un flujo a contracorriente, donde el gas producido se retira por la parte superior del gasificador como se ilustra en la figura 6. Permite tratar biomasa con alto contenido de humedad y contenido inorgánico²³.

Figura 6. Gasificador de lecho fijo Updraft.



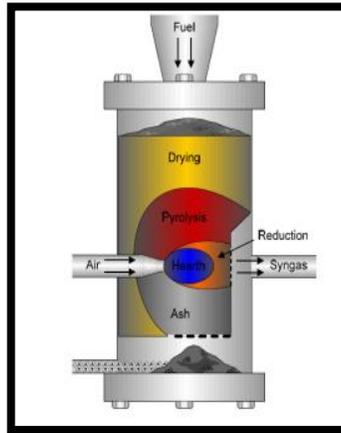
Fuente: DRAPCHO,Caye; NHUAN,Nghiem Phu andWALKER,Terry H. Biofuels engineering process technology. New York [u.a.]: McGraw-Hill, 2008. 160-180 p.

- **Gasificador de lecho fijo crossdraft:** Este gasificador introduce el agente gasificante por uno de sus lados y remueve el gas obtenido por el lado opuesto, en vez de ser a contracorriente aquí las reacciones ocurren de forma concéntrica. Este tipo de reactores son ideales para un proceso a pequeña escala. En la figura 7 podemos ver una ilustración de este tipo de reactor²⁴

²³ Ibid

²⁴ DRAPCHO,Caye; NHUAN,Nghiem Phu y WALKER,Terry H. Biofuels Engineering Process Technology. New York [u.a.]: McGraw-Hill, 2008. p. 160-1809780071487498

Figura 7. Gasificador de lecho fijo crossdraft.



Fuente: DRAPCHO,Caye; NHUAN,Nghiem Phu andWALKER,Terry H. Biofuels engineering process technology. New York [u.a.]: McGraw-Hill, 2008. 160-180 p.

1.2.1.1 Tipos de Calentamiento.

- *Calentamiento Directo por combustión:* Se emplea el proceso de combustión donde se quema parte del producto cuya obtención deriva del gasificador para generar la reacción, de forma que la ignición libere calor, el calor liberado debe suplir la demanda térmica que se desea alcanzar. En este caso el agente de combustión y la reacción se encuentran en contacto directo con la fase que se desea calentar, para procesos como la pirólisis y la gasificación es muy útil, donde se asegura que toda la biomasa que se encuentra al interior del reactor reaccionara debido a la combustión directa.
- *Calentamiento Indirecto por transportador de calor:* Este calentamiento usualmente se da en una chaqueta alrededor del reactor, en ocasiones se emplea la corriente eléctrica para calentar un fluido al interior de la chaqueta y que por transferencia de calor a través de las paredes del reactor se genere el calentamiento de la fase de interés, también se consigue este suministro energético a través de la estimulación del proceso de combustión en la chaqueta, este calentamiento también es menos utilizado para la pirólisis y gasificación, puesto que se genera un perfil de temperaturas al interior del gasificador donde la biomasa no reacciona de manera uniforme a diferencia de su contraparte.

Para la realización del modelo matemático y la simulación se escogió el gasificador de lecho fijo downdraft con calentamiento indirecto por transportador de calor, debido a que es ideal para el trabajo que se desarrolló donde fue necesario considerar solamente las variables más relevantes que permitieron generar un

modelo completo con una solución práctica, además de manera conceptual estos gasificadores permiten identificar las zonas donde ocurren los diferentes procesos a modelar, al ser un reactor de uso común y bajos costos su implementación en la industria será más viable y presenta ventajas dentro de las cuales se enlista ser una tecnología comercial más experimentada que permite producir un gas de síntesis, cuyo poder calorífico logra alimentar motores de 0,25MW y obtener un bajo porcentaje de alquitranes como se muestra en la Tabla 3²⁵.

Asimismo, el objetivo del gasificador de lecho fijo con calentamiento indirecto es lograr una velocidad baja de las fases heterogéneas donde se permita un mayor contacto entre las mismas, esto con el fin de lograr una mayor conversión durante el proceso de gasificación, además el calentamiento indirecto asegura que el suministro energético será provisto por una chaqueta alrededor del reactor, puesto que como ya se ha mencionado anteriormente, el agente de combustión (aire) al tener un 79% de nitrógeno en su composición diluye el gas de síntesis.

Tabla 3. Características de los gasificadores para el proceso de gasificación.

	Temperatura (°C)		Alquitrán	Partícula
	Reacción	Gas sólido		
Lecho Fijo				
Downdraft	1000	800	m. bajo	Moderado
Updraft	1000	250	m. alto	Moderado
Contracorriente	900	900	m. alto	Alto
Lecho Fluidizado				
Reactor único	850	800	Normal	Alto
Lecho F. rápido	850	850	Bajo	m. alto
Lecho circulante	850	850	Bajo	m. alto
Lecho arrastrado	1000	100	Bajo	m. alto
Reactores gemelos	800	700	Alto	Alto
Lecho Móvil				
Múltiple	700	600	Alto	Bajo
Horizontal	700	600	Alto	Bajo
Inclinado	800	700	Bajo	Bajo
Tornillo	800	700	Alto	Bajo

Fuente: ELÍAS CASTELLS,Xavier andVELO,Enric. La gasificación. Madrid, ES: Ediciones Díaz de Santos, 2012.

²⁵ ELÍAS CASTELLS,Xavier. Biomasa Y Bioenergía. Madrid, ES: Ediciones Díaz de Santos, 2012. 9788499691244

1.3 MODELACIÓN MATEMÁTICA DE LA GASIFICACIÓN

Con el fin de modelar la transferencia de calor de un sistema estacionario en primer lugar se realiza la construcción de una malla que divide el sistema que se está estudiando con el fin de facilitar el cálculo y el entendimiento del modelo, además al ser un modelo bidimensional la variación de la temperatura, composición y propiedades se presenta en dirección radial como en dirección axial.

De esta manera para un sistema estacionario el método numérico que más se ajusta para la resolución de este tipo de problemas son los elementos finitos, debido a que a su vez se dividen en diferentes métodos dependiendo su punto de referencia para la solución, en este caso los más importantes son:

- Diferencias Finitas: El método de diferencias finitas corresponde a una malla nodal donde se resalta el nodo que se está evaluando de la siguiente manera.

Las diferencias finitas son una clase de métodos numéricos especialmente aptos para resolver problemas en que el valor de la derivada satisface una ecuación diferencial en derivadas parciales (EDP) con una variable temporal y unas pocas variables “espaciales” (activos subyacentes). Los métodos de diferencias finitas ofrecen muchas ventajas sobre métodos más sencillos de valoración de derivadas. Por otro lado, estos métodos se pueden refinar más fácilmente para aumentar su precisión y eficiencia. Para las diferencias finitas se tienen diferencias progresivas y regresivas, como se muestran en la Tabla 4.

Tabla 4. Aproximaciones para diferencias finitas.

Derivada	Aproximación	Error
$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right _i$	$\frac{u_{i+1}-u_i}{\Delta}$	$O(\Delta)$
	$\frac{u_i-u_{i-1}}{\Delta}$	$O(\Delta)$
	$\frac{u_{i+1}-u_{i-1}}{2\Delta}$	$O(\Delta^2)$
$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right _i$	$\frac{u_{i+1}-2u_i+u_{i-1}}{\Delta^2}$	$O(\Delta^2)$
	$\frac{-u_{i+2}+16u_{i+1}-30u_i+16u_{i-1}-u_{i-2}}{12\Delta^2}$	$O(\Delta^4)$
$\left. \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right _i$	$\frac{u_{i+2}-2u_{i+1}+2u_{i-1}-u_{i-2}}{2\Delta^3}$	$O(\Delta^2)$

Fuente: YARKO NIÑO,C. Clase10 FD 3. [0]. [Consultado el Nov 29,2017]. Disponible en: <https://es.scribd.com/document/247978524/Clase10-FD-3>

- Volúmenes Finitos: Para el método de volúmenes finitos se toma el volumen alrededor del nodo y se debe realizar un cálculo con áreas finitas y muy pequeñas. El método de los volúmenes de control finitos permite discretizar y resolver numéricamente ecuaciones diferenciales. Es un método alternativo a los de diferencias finitas y elementos finitos.

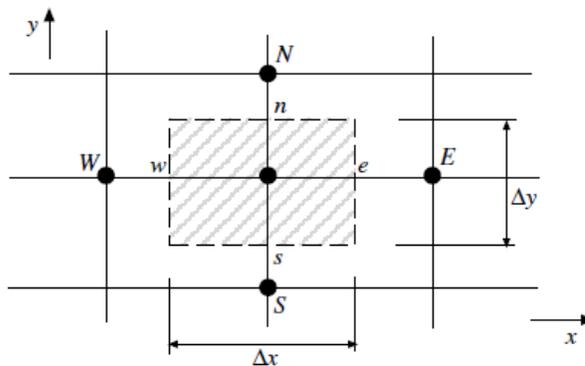
Consideremos una malla (Figura 8) de discretización del espacio fluido. En torno a cada punto de esta malla se construye un volumen de control que no se traslapa con los de los puntos vecinos. De esta forma el volumen total de fluido resulta ser igual a la suma de los volúmenes de control considerados.

La ecuación diferencial por resolver se integra sobre cada volumen de control, lo cual entrega como resultado una versión discretizada de dicha ecuación. Para realizar la integración se requiere especificar perfiles de variación de la variable dependiente entre los puntos de la malla, de modo de poder evaluar las integrales resultantes. La principal propiedad del sistema de ecuaciones discretizadas resultante es que la solución obtenida satisface en forma exacta las ecuaciones de conservación consideradas, independientemente del tamaño de la malla²⁶.

Ecuación 1. Discretización del método de volúmenes finitos

$$a_P T_P^1 = a_E T_E^0 + a_W T_W^0 + (a_P^0 - a_E - a_W) T_P^0$$

Figura 8. Malla de volúmenes finitos de dos dimensiones.



Fuente: GOLDSTEIN, R. J., et al. Heat transfer—A review of 2005 literature. En: INTERNATIONAL JOURNAL OF HEAT AND MASS TRANSFER. vol. 53, no. 21, p. 4397-4447

²⁶ GOLDSTEIN, R. J., et al. Heat transfer—A review of 2005 literature. En: International Journal of Heat and Mass Transfer. vol. 53, no. 21, p. 4397-4447

2. MODELO MATEMÁTICO

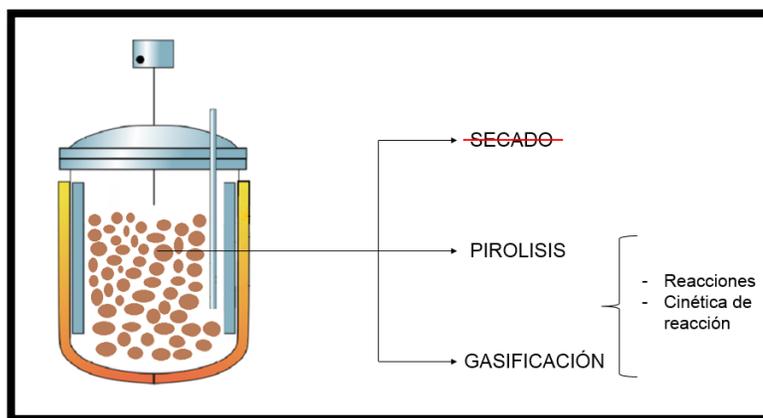
Para la generación del modelo se escogió el uso de ecuaciones de gobierno de masa y energía porque esta metodología permite plantear ecuaciones de balance a partir de los fenómenos que suceden en un reactor, lo que facilita dibujar la zona de reacción y plantear un método matemático que describa esta situación.

2.1 DESCRIPCIÓN DEL PROCESO

El planteamiento del modelo matemático requiere de una interpretación grafica del mismo, además de la identificación de las variables de entrada del modelo, las cuales se definen acorde a los conocimientos que se poseen de los procesos que sucederán al interior del reactor y las condiciones de frontera, factores que logran limitar los valores o el alcance que puede tener el modelo. Los fenómenos que se tienen en cuenta en la modelación al interior del reactor son la pirólisis y la gasificación (ver Figura 9). La biomasa se asume como seca cuando entra al reactor debido a un pretratamiento con una humedad menor al 3% por lo tanto dentro del reactor el proceso de secado no se tuvo en cuenta.

Para llevar a cabo la modelación del proceso de gasificación y de pirólisis es necesario tener en cuenta las características físico - químicas de la biomasa, así como el comportamiento cinético durante el proceso de gasificación y pirólisis. En este proyecto se realiza una revisión bibliográfica para determinar estos parámetros para el cuesco de palma y la madera de haya.

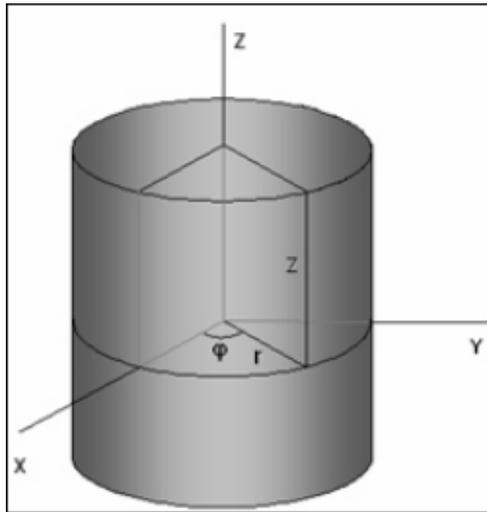
Figura 9. Ilustración de los procesos que ocurren al interior del gasificador.



La Figura 10 muestra las coordenadas cilíndricas que se necesitarán más adelante para el planteamiento de las ecuaciones de balance. Donde r corresponde a la dirección de flujo radial, ϕ corresponde a la dirección de flujo angular y z al flujo en la dirección axial.

Prosiguiendo con la descripción del modelo, el reactor de lecho fijo posee un calentamiento indirecto, por lo que se desea evaluar el desempeño que este posee para generar la descomposición de la biomasa respecto al calentamiento directo convencional. Se sabe que el calentamiento directo provee al proceso de un alto rendimiento, permitiendo que toda la biomasa al interior del gasificador reaccione, formando la distribución de productos ilustrada en la Figura 11, de igual forma aumenta la proporción de todos los productos, no solo el gas de síntesis, sino también el carbón activado y los alquitranes, los cuales no poseen utilidad alguna dentro del proceso modelado y no fueron del interés de la investigación, asimismo, los alquitranes originan un problema a lo largo de los procesos posteriores, ya que puede provocar ensuciamiento y taponamiento debido a la condensación de estos compuestos cuando el gas es enfriado.²⁷

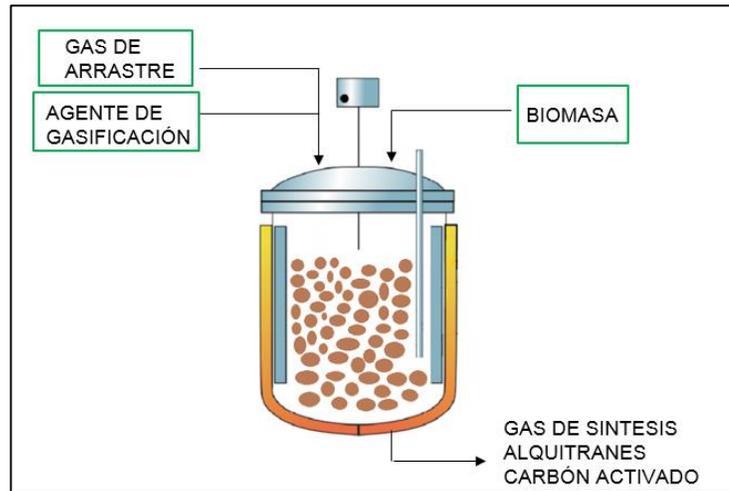
Figura 10. Representación gráfica de las coordenadas cilíndricas.



Fuente: RODRIGUEZ E, Miguel. Diseño de un módulo de medición de cilindros para una fresadora vertical CNC. Instituto Tecnológico de Costa Rica, 2012. p. 21.

²⁷ NOGUES, Fernando Sebastian; GARCIA-GALINDO, Daniel y REZEU, Adeline. Energía De La Biomasa (Volumen I). Zaragoza: Prensas Universitarias de Zaragoza, 2010. p. 77

Figura 11. Esquema general del modelo.



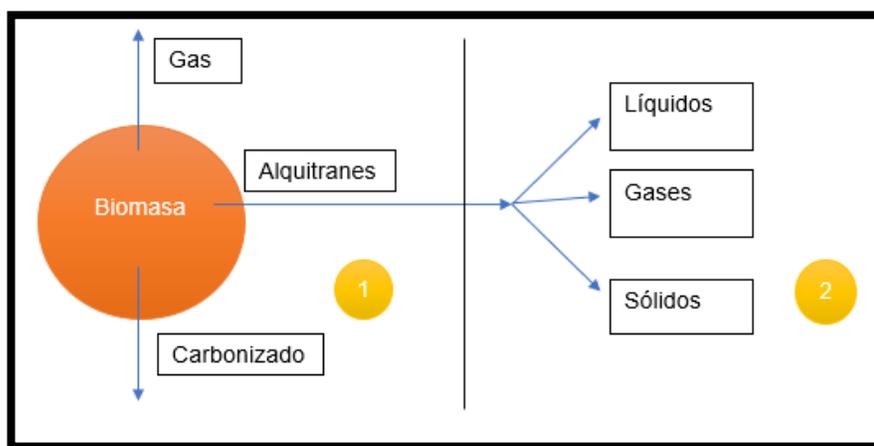
El propósito principal del calentamiento indirecto es evitar la reducción de la calidad del gas de síntesis obtenido a través del calentamiento directo, cuando se recurre al segundo, el método para generar la temperatura deseada es la liberación de calor a través de la combustión y como el agente de combustión por excelencia es el oxígeno, se debe inyectar aire al reactor, siendo la alternativa más económica y viable de obtener oxígeno para la combustión, sin embargo, el aire está compuesto por una mezcla correspondiente a 21%mol oxígeno y 79%mol nitrógeno, el cual diluye el gas de síntesis que se produce mediante este método de calentamiento. El modelo se plantea con la intención de buscar la mejor alternativa, donde el gas de síntesis presente flexibilidad en la aplicación, mayor poder calorífico, y a su vez una calidad alta del gas.

- Pirólisis: En esta etapa se da la degradación térmica de la biomasa en un rango de temperaturas comprendido entre 200 y 500°C, en ausencia de aire o un suministro muy limitado del mismo, obteniendo productos sólidos, líquidos y gaseosos. En la Figura 12 se ilustra la descomposición térmica de una partícula de biomasa durante el proceso de pirólisis y la distribución de productos del mismo, en esta primera etapa se produce carbonizado o pirolizado que corresponde a la materia prima del proceso siguiente, llevado a cabo en el reactor correspondiente a la gasificación. La eficiencia de la pirólisis depende enteramente de la velocidad de calentamiento, temperatura del proceso y caracterización de la biomasa.

Luego de la formación de alquitranes, estos a su vez se descomponen para formar gases no condensables (CH_4 , CO_2 , CO , H_2), líquidos y carbonizado, estas reacciones de descomposición son homogéneas y se dan en la fase gaseosa con ayuda de reacciones térmicas heterogéneas entre las fases gaseosa y sólida. En

la primera de estas fases, los vapores condensables se transforman en moléculas pequeñas de gases no condensables correspondientes a CO_2 y CO ²⁸. Con la finalidad de mantener la simplicidad del modelo no se modelaron las reacciones secundarias que tienen lugar al interior del reactor, puesto que son reacciones indeseadas y que no aportan de manera energética al interés principal del modelo que es el gas de síntesis luego de la gasificación.

Figura 12. Reacciones de la pirólisis. Donde (1) Reacciones de descomposición primaria. (2) Reacciones de descomposición secundaria.



- Gasificación: Como este proceso corresponde a la oxidación parcial del carbonizado de la pirólisis el reactor necesita una temperatura que oscila entre 700 y 1100°C y de la escogencia de un agente gasificante u oxidante que es la sustancia que permite que las reacciones de gasificación, mostradas a continuación, se produzcan. Para el modelo se escogió como agente el vapor de agua, este agente es eficiente, de fácil obtención y no incurre en gastos energéticos para su implementación en el modelo. En la gasificación se toman las reacciones donde el agente gasificante corresponde al escogido, las cuales son las reacciones de Boudouard y agua – biomasa:

❖ Reacciones heterogéneas

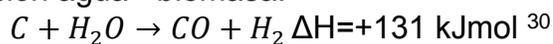
Reacción Boudouard:



²⁸ BASU, Prabir. Chapter 3 - Pyrolysis and Torrefaction. En: BASU, Prabir. Biomass Gasification and Pyrolysis. Boston: Academic Press, 2010. p. 65-96.

²⁹ RINCÓN, Sonia; GÓMEZ, Alexander y KLOSE, Wolfgang. Gasificación De Biomasa Residual De Procesamiento Agroindustrial. 2011.

Reacción agua - biomasa:

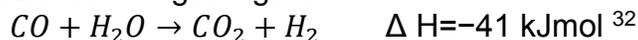


Formación de metano:



❖ Reacciones homogéneas

Desplazamiento agua - gas:



Reformado de vapor:



Aun cuando se utiliza un gasificador de lecho fijo downdraft, donde las fases heterogéneas son diferenciadas, no sucede lo mismo con los procesos ocurridos al interior del reactor, es así como no se puede diferenciar una zona para pirólisis y otra para gasificación, de manera que es necesario estandarizar los parámetros del reactor para ambos procesos como la temperatura del proceso, tiempo de residencia y la cinética de la reacción. La caracterización de la biomasa es importante y muy necesaria para el proceso de gasificación, de ella depende el ajuste de rangos para los parámetros previamente mencionados, además de los resultados que se obtuvieron para y la distribución de los productos.

2.1.1 Materia prima. Para la descripción del modelo y para la implementación de la pirólisis y la gasificación al interior del reactor, es indispensable realizar la caracterización de la biomasa escogida que corresponde al cuesco de palma y la madera de haya. Esta caracterización desempeña un papel fundamental en el desarrollo del modelo, ya que en el capítulo anterior se mencionó que la eficiencia energética tanto del proceso de pirólisis como del proceso de gasificación, depende de este parámetro. Se obtiene el análisis elemental y próximo para las biombras escogidas, donde se observa un análisis de combustibles en la Tabla 5.

³⁰ RINCÓN, Sonia; GÓMEZ, Alexánder y KLOSE, Wolfgang. Gasificación De Biomasa Residual De Procesamiento Agroindustrial. 2011.

³¹ Ibid

³² OJEDA, Jorge B. Uso del Cuesco de la Palma Africana en la fabricación de Adoquines y Bloques de Mampostería. En: Seventh LACCEI Latin American and Caribbean Conference for Engineering and Technology. Jun 5,.

Tabla 5. Análisis elemental y próximo de las biomásas de interés.

	Análisis elemental (%)				Análisis próximo (%)			Poder calorífico (MJ/kg)	
	C _{waf}	H _{waf}	N _{waf}	O _{waf} ¹	w	F _{waf}	a _{wf}	H _{o,wf} ²	H _{u,wf} ²
Cuesco	52,8	5,7	<1	40,5	11,2	79	1,4	22,2	21,1 ³
Madera de haya	48,9	0,5	<1	45,4	5,53	90	0,39	18,3	17,1

Fuente: GÓMEZ,Alexánder; KLOSE,Wolfgang andRINCÓN,Sonia. Pirólisis de Biomasa. Cuesco de palma de aceite. Kassel: Kassel university press, 2008.

¹Valor calculado por diferencia

²Valores de correlación Boie

³Valor experimental

En el análisis elemental se encuentra el porcentaje de carbono, hidrógeno, nitrógeno y oxígeno que la biomasa posee en su composición química en donde la relación carbono e hidrógeno representa la cantidad de energía contenida por la materia prima, esto se refleja en su poder calorífico.

En el análisis próximo se encuentra el porcentaje de humedad, materia volátil y cenizas para las biomásas residuales de interés, los datos reportados en la Tabla 5 fueron tomados de documentos previos experimentales, donde su interés era realizar la caracterización de la biomasa y conocer su composición aproximada a través del análisis de combustibles. Finalmente, el poder calorífico libre de agua para el sólido y para el gas.

El carbonizado que se obtiene luego de la gasificación de la biomasa es superior en aproximadamente en un 80% que el de la misma biomasa antes del proceso.

Luego de la caracterización de los productos de las biomásas comprendidas como madera de haya y cuesco de palma, realizadas según la norma ISO 647, dicta que del 100 % de la energía que contiene la biomasa, entre del 48 al 52% permanece en el carbonizado, 27 a 37 % en los alquitranes y 8 a 11 % en el gas (porcentajes determinados en base seca y libre de ceniza).³³

En el Cuadro 1 se definen las normas utilizadas en la caracterización de la biomasa residual, para el contenido de agua, contenido de ceniza, contenido de materia volátil, poder calorífico y densidad aparente.

³³ GÓMEZ,Alexánder; KLOSE,Wolfgang y RINCÓN,Sonia. Pirólisis De Biomasa. Cuesco De Palma De Aceite. Kassel: Kassel university press, 2008.

Cuadro 1. Normas UNE-CEN/TS para la caracterización de combustibles de biomasa.

Característica	Combustible de biomasa
Contenido de agua	UNE-CEN/TS 14774-2
Contenido de ceniza	UNE-CEN/TS 14775
Contenido de materia volátil	UNE-CEN/TS 14774
Poder calorífico	UNE-CEN/TS 14918 ó UNE-CEN/TS 15234
Densidad aparente	UNE-CEN/TS 15103

En cuanto a los parámetros estructurales de la biomasa se obtuvieron de la literatura los datos para la densidad (aparente, real y a granel) del cuesco de palma, datos presentados en la Tabla 6, y la madera de haya cuyos datos están presentados en la Tabla 7, el tamaño de grano y la conductividad térmica, el ultimo parámetro permite definir la existencia de gradientes térmicos al interior de las partículas de biomasa, los cuales serán despreciados en los procesos de transferencia de calor como se muestra en la sección 2.2.2, ya que se considera la partícula de biomasa muy pequeña y sus cambios de temperatura a nivel estructural no serán tenidos en cuenta.

Tabla 6. Propiedades gravimétricas del fruto de palma, el cuesco y nuez para una humedad de 8,3% y 8,3% en base seca.

Propiedades	Fruto de Palma (±SEM)	Cuesco de Palma (±SEM)	Nuez de Palma (±SEM)
Densidad real (g/cm ³)	1,01±0,04c	1,19±0,01b	1,22±0,05a
Densidad a granel (g/cm ³)	0,64±0,01a	0,069±0,07b	0,71±0,02c
Porosidad (%)	31,43±0,61a	27,73±0,15b	24,03±0,08c

Fuente: DAGWA, I. M. and BHADODE, A. O. Some physical and mechanical properties of palm kernel shell (PKS). En: BOTSWANA JOURNAL OF TECHNOLOGY. -01-01.vol. 17, no. 2,

(SEM): Errores estándar de significancia, los errores con la misma letra no tienen error significativo ($p > 0,05$)

Tabla 7. Propiedades estructurales de la madera de haya.

Humedad %H	Haya		
	m ³	m ³ apilado	m ³ aparente
0	680	422	280
10	704	437	290
15	716	445	295
20	730	453	300
30	798	495	328
40	930	578	382
50	1117	694	454

Fuente: Valter Francescato, Eliseo Antonini – AIEL Italian Agriforestry Energy Association. Manual de combustibles de madera. [0]:2008.

En la Tabla 8 se presentan los datos para la conductividad térmica para algunas especies de maderos suaves y duros y en la Tabla 9 para el cuesco de palma.

Tabla 8. Conductividad térmica de maderos suaves y duros.

		Conductivity(W/mK (Btu.in/h.ft ² .°F))	
Species	Specific Gravity	Ovendry	12%MC
Hardwoods			
Aspen			
Big Tooth	0,41	0,10 (0,68)	0,12 (0,82)
Quaking	0,40	0,10 (0,67)	0,12 (0,80)
Basswood, American	0,38	0,092 (0,64)	0,11 (0,77)
Beech, American	0,68	0,15 (1,0)	0,18 (1,3)

Fuente: Forest Products Laboratory. Wood Handbook
Wood as an Engineering Material. USA: 2010. 4-13 p.

Tabla 9. Algunas propiedades físicas del cuesco de palma.

Propiedad	Cuesco de Palma
Gravedad específica aparente	1,14
Humedad (%)	21,3
Densidad a granel de pérdida (kg/m ³)	545
Densidad a granel compacta (kg/m ³)	595
Conductividad térmica (W/mK)	0,19
Porosidad (%)	37

Fuente: OKPALA, D. C. Palm kernel shell as a lightweight aggregate in concrete. [1]:1990. 291-296

Para el tamaño de grano es necesario calcular el número de Biot el cual permite identificar la ausencia de gradientes de temperatura al interior de las partículas de biomasa, para el cálculo de este número se tienen las siguientes ecuaciones.³⁴

Ecuación 2. Ecuación de Biot

$$Bi = \frac{h * L_{carac}}{\lambda}$$

$$L_{carac} = \frac{V}{A_{intercambio}} \rightarrow \begin{cases} \text{Pared plana } (e = 2L) \rightarrow L_{carac} = L \\ \text{Cilindro muy largo } (r_o) \rightarrow L_{carac} = \frac{r_o}{2} \\ \text{Esfera } (r_o) \rightarrow L_{carac} = \frac{r_o}{3} \end{cases}$$

Donde el número de Biot debe estar por debajo de los rangos a continuación para evitar los gradientes.

- Placas: $Bi < 0,1$
- Cilindro: $Bi < 0,05$
- Esféricas: $Bi < 0,03$

En este modelo se asumen partículas de biomasa esféricas, por lo tanto, el número de Biot calculado en la solución matemática debe estar por debajo de 0,03 para realizar la suposición, esto es necesario debido a que los gradientes de temperatura ocasionan que el material reaccione inicialmente en la superficie y de manera

³⁴ CORBERAN, J. M. y ROYO, R. Transmisión De Calor Multidireccional Y Transitoria

progresiva en el interior de la partícula, al aumentar la temperatura. Así, la fracción volátil proveniente del interior de la partícula cruza una capa de material ya carbonizado y con una temperatura mayor, lo que promueve las reacciones secundarias.

La identificación de los parámetros para el planteamiento del modelo requiere de un estudio completo del mismo, donde al haber reunido todos los conceptos anteriores se debe contextualizar el modelo.

2.1.2 Proceso. Se hace referencia a las especificaciones que se tienen para los procesos de pirólisis y gasificación que son los parámetros cinéticos y las reacciones que se tendrán en cuenta en cada uno de éstos.

La velocidad de una reacción se ve influenciada con la temperatura, la ecuación de Arrhenius describe esta influencia así que los parámetros cinéticos se refieren a los parámetros de la ecuación que se encuentra a continuación:

Ecuación 3. Ecuación de Arrhenius

$$k(T) = k_0 * e^{-Ea/R*T}$$

En la cual los datos que se deben tener de esta ecuación deben ser k_0 , que es el factor pre exponencial o factor de frecuencia, también escrito como A en la literatura el cual refleja la frecuencia de las colisiones de las moléculas y Ea que es la energía de activación, ésta es la energía necesaria para que la reacción se presente generada en las colisiones.

Ahora bien, la ecuación de la velocidad de reacción está basada en la teoría de las colisiones y por tal está descrita por la constante cinética planteada por Arrhenius y se describe a continuación:

Ecuación 4. Ecuación general de la cinética de reacción

$$r_i = k(T) * \prod C_{Reactivos}^n$$

Dependiendo del modelo en el cual se calcularon experimentalmente los parámetros cinéticos para la reacción se tiene como resultado el orden de la reacción (n) y una concentración de reactivo que depende del proceso en el que está enfocando la cinética, ya sea pirólisis o gasificación.

2.1.2.1 Pirólisis. Para el proceso de pirólisis no se tuvo en cuenta las reacciones secundarias que se puedan presentar en las cuales se presenta la descomposición de los alquitranes generados mediante las reacciones principales, estas reacciones

dependen de los gradientes de temperatura en la partícula entre otras condiciones de proceso que en el presente trabajo se controlan.

Ahora bien, como ya se ha mencionado anteriormente las reacciones principales del proceso de pirólisis de biomasa comprenden la descomposición de la celulosa, la hemicelulosa y la lignina en CO, CO₂, CH₄, H₂O, H₂ y alquitranes. Se pueden analizar mediante las cinéticas de reacción globales de la descomposición de los componentes principales o se puede analizar desde la generación de los componentes gaseosos ya mencionados, mediante un mecanismo de reacciones paralelas.

Para este trabajo se utilizará el modelo planteado por Rummer³⁵ según el cual la velocidad de reacción se modela por un esquema formal de reacción mostrado en la siguiente ecuación en la cual se emplea la ecuación de Arrhenius y un esquema de potencias³⁶. Este modelo no se basa en el consumo o degradación de la biomasa sino en la formación de los principales compuestos gaseosos durante el proceso de pirólisis, lo cual es bastante pertinente con este trabajo puesto que lo que se desea analizar es la distribución de productos y la composición final del gas de síntesis.

Ecuación 5. Cinética de reacción de la pirólisis

$$\frac{\partial y_i}{\partial t} = \sum_{k=1}^k k_{0,i,k} * \exp\left(\frac{-E_{a,i,k}}{R_u * T}\right) * (y_{0,i,k} - y_{i,k})^{n_{i,k}}$$

Donde $y_{0,i,k}$ muestra la máxima fracción másica que se puede alcanzar del componente i en el proceso de gasificación, y $y_{i,k}$ es la masa del componente i en un instante sobre la masa inicial de biomasa. En la Tabla 10 se encuentran los parámetros cinéticos para cada uno de los componentes gaseosos en donde se encuentran, como se mencionó anteriormente, el factor pre exponencial $k_{0,i,k}$, la energía de activación $E_{a,i,k}$ y el orden de la reacción $n_{i,k}$.

³⁵ RUMMER, Bernhard; PETEK, Josef y STAUDINGER, Gernot. Trocknung und Pyrolyse eines Einzelpartikels

- Modellrechnung und experimentelle Verifikation. En: VDI-Berichte. p. 265-276

³⁶ GARCIA PATIÑO, Harold Jhair. Modelación De La Gasificación De Biomasa En Un Reactor De Lecho Fijo; Universidad Nacional de Colombia, 2011.

Tabla 10. Parámetros cinéticos de los productos de la pirólisis de madera de haya

Gas	k_0 (1/s)	Ea (J/mol)	y_0	n
CO	$8,00 \cdot 10^8$	$1,31 \cdot 10^5$	0,0165	1
	$6,00 \cdot 10^1$	$4,00 \cdot 10^4$	0,0190	1
	$5,00 \cdot 10^0$	$7,10 \cdot 10^4$	0,0120	1
CO ₂	$5,00 \cdot 10^{14}$	$1,28 \cdot 10^5$	0,0200	2
	$1,00 \cdot 10^{16}$	$1,61 \cdot 10^5$	0,0360	2
	$2,00 \cdot 10^4$	$7,00 \cdot 10^4$	0,0080	2
H ₂	$4,00 \cdot 10^5$	$1,17 \cdot 10^5$	0,0043	2
H ₂ O	$5,00 \cdot 10^9$	$1,10 \cdot 10^5$	0,0210	2
	$7,00 \cdot 10^{16}$	$1,72 \cdot 10^5$	0,0260	2
	$2,00 \cdot 10^4$	$7,50 \cdot 10^4$	0,0190	2
CH ₄	$1,00 \cdot 10^{14}$	$1,40 \cdot 10^5$	0,0030	2
	$1,00 \cdot 10^6$	$1,00 \cdot 10^5$	0,0042	2
Alquitranes	$2,90 \cdot 10^6$	$9,30 \cdot 10^4$	0,1800	1
	$4,50 \cdot 10^8$	$1,29 \cdot 10^5$	0,4300	1
	$1,00 \cdot 10^8$	$1,30 \cdot 10^5$	0,0300	1

Fuente: RUMMER, Bernhard; PETEK, Josef and STAUDINGER, Gernot. Trocknung und Pyrolyse eines Einzelpartikels - Modellrechnung und experimentelle Verifikation. En: VDI-BERICHT. p. 265-276

2.1.2.2 Gasificación. La composición química del gas producido durante la gasificación la determinan las características físico - químicas de la biomasa y del carbonizado obtenido en el proceso de pirólisis, el agente de reacción, su concentración en la atmósfera reactiva, el tipo de reactor y sus condiciones de operación.

En la Tabla 11 se muestran los datos experimentales reportados para la cinética de gasificación por Gómez³⁷ de las biomásas que se trabajarán y los agentes de gasificación escogidos.

³⁷ RINCÓN, Sonia; GÓMEZ, Alexander y KLOSE, Wolfgang. Gasificación De Biomasa Residual De Procesamiento Agroindustrial. 2011.

Tabla 11. Parámetros cinéticos de la gasificación de carbonizados de biomasa.

Materia prima	Madera de Haya		Cuesco de Palma	
Agente de reacción	CO ₂	H ₂ O	CO ₂	H ₂ O
<i>n</i>	0,52	0,67	0,45	0,47
<i>Ea</i> (kJ/mol)	186	167	233	188
<i>k</i> ₀ (1/s)	1,3*10 ⁵	2,7*10 ⁴	4,7*10 ⁶	1,0*10 ⁷

Fuente: RINCÓN,Sonia; GÓMEZ,Alexánder andKLOSE,Wolfgang. Gasificación de biomasa residual de procesamiento agroindustrial. [0]:2011.

En donde la cinética de la reacción está dada por la siguiente ecuación, en donde se analiza la pérdida de masa del carbonizado debido a las reacciones de gasificación:

Ecuación 6. Cinética de reacción de la gasificación

$$\frac{-dW}{dt} = k(T) * C_{\text{Agente de reacción}}^n$$

Donde *W* es la masa del carbonizado en el tiempo *t*.

2.1.3 Equipo. Estos parámetros son los que se especifican directamente en el equipo con el objetivo que se lleven a cabo los procesos de interés, estos son los que se describen a continuación.

2.1.3.1 Temperatura. Como ya se mencionó anteriormente, en el proceso de gasificación se tiene que dar en primer lugar la pirólisis ya que el carbonizado, que es uno de los productos de dicho proceso, es la materia prima de la gasificación.

En el proceso de pirólisis se degradan principalmente tres componentes en diferentes rangos de temperatura. La celulosa se descompone en un rango de temperaturas entre 573 K (300 °C) a 703 K (430 °C), es el compuesto que más rápido se degrada y el que menor cantidad de carbonizado genera. Por otro lado, la lignina se descompone a un rango más amplio de temperatura comprendido entre 523K (250 °C) a 823K (550 °C). Y, por último, la hemicelulosa es el compuesto más inestable térmicamente y su descomposición comienza a temperaturas mucho más bajas entre 523K (250 °C) a 623K (350 °C)³⁸. En la Tabla 12 se encuentran estos datos consignados.

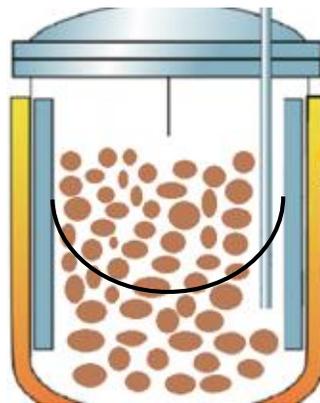
³⁸ RAVEENDRAN,K.; GANESH,Anuradda y KHILAR,Kartic C. Pyrolysis Characteristics of Biomass and Biomass Components. 1996. p. 987-9980016-2361

Tabla 12. Rango de temperaturas de descomposición de los compuestos en la pirólisis.

Compuesto	T mín (°C)	T máx (°C)
Celulosa	300	430
Lignina	250	550
Hemicelulosa	250	350

Ahora bien, el proceso de gasificación se da en un rango de temperaturas de 550°C a 1200°C. Debido a que la fuente de energía necesaria para que se lleven a cabo estos procesos será suministrada a través de una chaqueta, se generará un gradiente de temperatura en la cama, donde se encuentra la biomasa, la temperatura más alta será en las partículas junto a la pared y la temperatura más baja será en el centro del reactor, como se muestra en la Figura 13.

Figura 13. Perfil de temperatura en un reactor de lecho fijo con calentamiento indirecto



En el proceso se debe suministrar la energía suficiente a todas las partículas de la cama, pero como la cantidad de energía necesaria para cumplir lo anterior es desconocida la temperatura de la pared a lo largo del proceso será un *resultado del modelo matemático*.

2.1.3.2 Presión. Los reactores en los que se lleva a cabo el proceso de gasificación están equipados con una válvula que permite regular la presión que hay dentro del gasificador durante todo el proceso, por esta razón para este trabajo se asumió presión constante correspondiente a una atmósfera (1 atm). Un ejemplo de esta instrumentación es el gasificador de lecho fijo del Instituto de Ingeniería Térmica de la Universidad de Kassel en Alemania el cual está equipado con una bomba que succiona los gases del reactor manteniendo constante la presión.

2.1.3.3 Agente de gasificación. El agente de gasificación es un gas o una mezcla de gases que va a generar la oxidación del carbonizado producto de la pirólisis en el proceso de gasificación, los agentes de gasificación pueden ser oxígeno, hidrógeno, vapor de agua o aire y dependiendo del agente de gasificación que se utilice se producirá un gas de síntesis de mayor o menor poder calorífico.

En el siguiente trabajo se utilizó como agente de gasificación el vapor de agua, se descartan el oxígeno y el hidrógeno por su alto costo de obtención en comparación con el elegido. Por otro lado, el aire es altamente utilizado en la industria debido a su alta disponibilidad, aunque éste genera un gas con menor poder calorífico ya que al ser en mayor porcentaje nitrógeno (79%) lo que hace es diluir el gas de síntesis que se genera en el proceso³⁹ y por esta razón también es descartado. El vapor de agua promueve la producción de un gas de síntesis de mejor calidad con mayores porcentajes de H₂ y CO y es de fácil obtención.

2.1.3.4 Agente de arrastre. El gas de arrastre es un gas inerte que saca el gas de síntesis producido fuera del reactor o gasificador, el gas que se escogió fue el nitrógeno.

2.1.4 Suposiciones del modelo. En esta sección se buscó la interpretación del modelo teniendo en cuenta la descripción del mismo y la identificación de los parámetros predominantes en el modelo. Las suposiciones tenidas en cuenta se dividieron en dos diferentes categorías correspondientes a las consideraciones de tipo matemático y a las consideraciones de fenómenos.

Las consideraciones de tipo matemático se describen a continuación.

- Modelamiento a través de coordenadas cilíndricas, que permiten observar la variación de temperatura para un modelo bidimensional.
- Presión equivalente a 1 atmósfera.
- Tamaño de partícula equivalente a 2mm

Las consideraciones respecto a los fenómenos se describen a continuación.

- Proceso en estado estacionario, quiere decir que el comportamiento del sistema permanece inalterable con el tiempo en un punto determinado.
- Como el suministro energético corresponde a una chaqueta alrededor del reactor, se espera que al interior del mismo se origine un perfil de temperatura como se describe en la Figura 14, que ilustra que la biomasa reaccionará siguiendo el patrón del perfil, así que se puede asumir que en el centro del gasificador existirá la biomasa reaccionará con menor velocidad con respecto a otros puntos del reactor.

³⁹ Instituto para la Diversificación y Ahorro de la Energía. Biomasa: Gasificación. Madrid: 2007. p. 9-11

- Debido a la aparición del perfil de temperatura existe una barrera adiabática en el centro del gasificador, generando una simetría térmica ilustrada en la Figura 15.
- La presión se consideró constante basado en un gasificador que posee una válvula de escape en la zona inferior. A causa de esta condición y de las temperaturas que se manejan en el proceso el comportamiento de la fase volátil es de **gas ideal**.
- Las caídas de presión son despreciables.
- Flujo tipo tapón.
- Se consideró que las propiedades térmicas y estructurales para el sólido son constantes y no presentan alteración alguna cuando se varia la temperatura.
- Las partículas de biomasa se consideran esferas sin porosidad ni cambio de volumen.
- La temperatura de la pared es constante.
- Se asumió que no existen gradientes térmicos al interior de las partículas de biomasa.

De igual manera, a las consideraciones de tipo matemático como de fenómenos se toman las consideraciones explícitas, tanto para la transferencia de masa como para la transferencia de calor descritas a continuación.

- No es del interés del modelo matemático considerar todos los fenómenos de transferencia de masa que ocurren al interior del gasificador, es así como se realizó un balance de especies donde únicamente se desea conocer la distribución de productos por conversión al final del proceso, es por esta razón que los fenómenos de transporte convectivo y difusivo se desprecian.
- No se analizó la transferencia de masa respecto a la posición, sólo en cuanto a la cinética.

La Figura 14 a su vez expone los niveles del perfil, cuya finalidad es mostrar de manera gráfica el alcance que el suministro energético puede tener y su incidencia en la biomasa al interior del gasificador.

Figura 14. Perfil de temperatura que se forma al interior del gasificador.

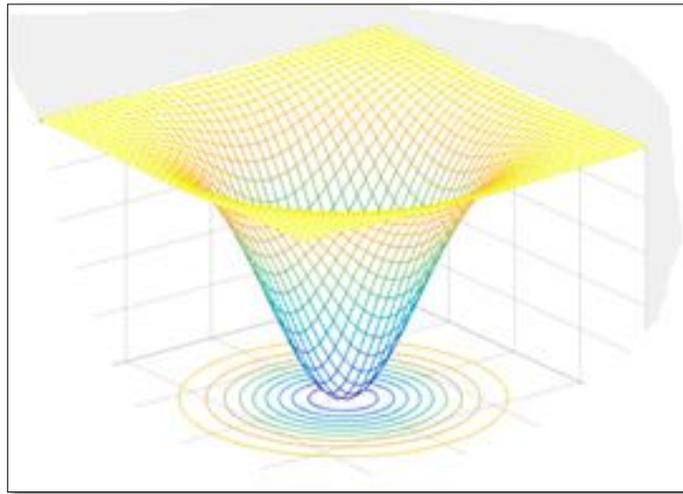
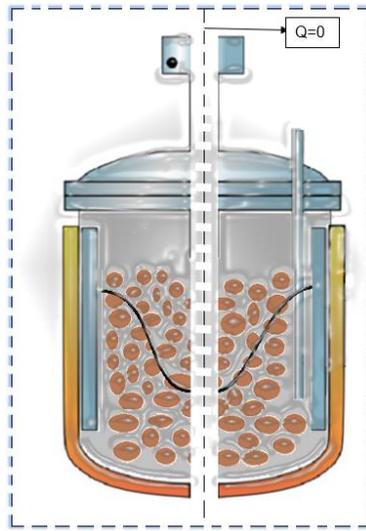


Figura 15. Simetría térmica al interior del gasificador.



Para el equipo se tienen las siguientes consideraciones, mostradas en el Cuadro 2 donde se hace una recopilación general de todos los parámetros generales del modelo.

Cuadro 2. Recopilación de parámetros del equipo y del proceso

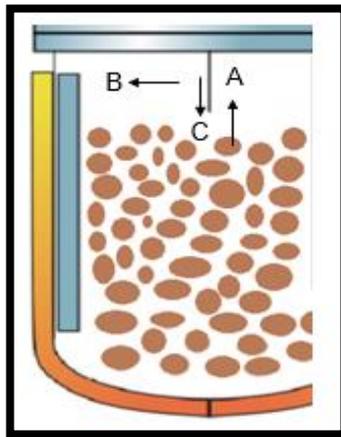
Parámetros equipo	
Agente de gasificación	H ₂ O
Concentración másica inicial del agente de gasificación	0,7
Presión	Constante = 1atm
Gas de arrastre	N ₂
Dimensiones	Diámetro = 8cm Longitud = 1,5m
Tipo de Reactor	Lecho fijo
Temperaturas de Operación	700 - 1200°C
Tipo de Calentamiento	Indirecto

2.2 ECUACIONES DE GOBIERNO

Teniendo en cuenta las condiciones y suposiciones propuestas para el modelo, se observaron los fenómenos de transferencia que tienen lugar al interior del gasificador, para las fases respectivas.

2.2.1 Balance de especies. En la Figura 16 se observan los fenómenos de transferencia de masa que ocurren al interior del gasificador.

Figura 16. Fenómenos de transferencia de masa al interior del gasificador.



Convección: Entre la partícula sólida y el gas (A) y en la misma fase gaseosa (B).
Difusión: En la fase gaseosa (C).

Para la fase **gaseosa** la ecuación de transferencia general está planteada de la siguiente forma:

Ecuación 7. Balance de masa para la fase gaseosa

$$\frac{1}{r} \frac{\delta}{\delta r} \left(r * Ky_{gas} \frac{\delta Ci^G}{\delta r} \right) + \frac{\delta}{\delta z} \left(Ky_{gas} \frac{\delta Ci^G}{\delta z} \right) - \frac{\beta_{gas} * A_p * (Ci^G - Ci^S)}{\varepsilon_b} - \frac{\delta(\omega_{ax}^G Ci)}{\delta z} = r_i^{(gasificación+pirolisis)}$$

(1) Difusión radial, donde r corresponde a la coordenada en la posición radial, Ci es a la concentración del componente i en la fase gaseosa y Ky se vincula a la constante de difusión másica en la fase gaseosa.

(2) Difusión axial, donde z corresponde a la coordenada en la posición axial.

(3) Transferencia de masa Gas-Partícula, donde β_{gas} es al coeficiente de transferencia de masa en la fase gaseosa, A_p corresponde al área de la pared y ε_b corresponde a la porosidad del lecho.

(4) Convección axial, donde ω_{ax} es la velocidad en la dirección axial.

(5) Degradación cinética, donde r_i corresponde a la velocidad de reacción componente i .

Para la ecuación 7 se realizaron las siguientes suposiciones con la intención de simplificar los balances:

- No se tendrán en cuenta ninguno de los tipos de transferencia de masa por convección ni difusión.
- No se analiza la transferencia de masa respecto a la posición.

Obteniendo un balance de la siguiente manera:

Ecuación 8. Balance de especies para la fase gaseosa

$$r_i^{(gasificación+pirolisis)} = \frac{dy}{dt}$$

$$\sum_{k=1}^k k_{0,i,k} * \exp\left(\frac{-Ea_{i,k}}{R_u * T}\right) * (y_{0,i,k} - y_{i,k})^{n_{i,k}} + \frac{k(T) * C_{Agente\ de\ reacción}^n}{W_0} = \frac{dy_i}{dt}$$

Para la fase **sólida** la ecuación de transferencia de masa por especies de plantea de la siguiente forma:

Ecuación 9. Balance de especies para la fase sólida

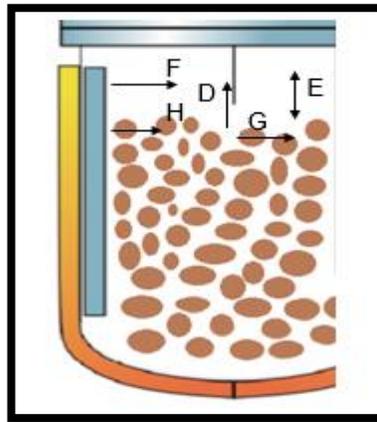
$$-r_i(\text{gasificación+pirolisis}) = \frac{dy}{dt}$$

Donde sólo se considera la degradación térmica por pirólisis y la oxidación parcial de la gasificación con las ecuaciones cinéticas expuestas en las secciones 2.1.2.1 y 2.1.2.2, como la fase sólida es la que está perdiendo masa en este caso la cinética será negativa correspondiendo a la descomposición de la biomasa.

A pesar que el sistema es estacionario, esta consideración se refiere a la variación de temperatura respecto al tiempo, mientras que la composición de las fases presenta un comportamiento durante el tiempo de residencia de la biomasa, que es lo que también se desea analizar, por tanto para los balances de especies, las concentraciones efectivamente varían no solo con la temperatura sino también respecto al tiempo de permanencia de la biomasa al interior del gasificador como se muestran en las ecuaciones 8 y 9.

2.2.2 Balance de energía. Para las ecuaciones de balance de energía se enumeran todos los fenómenos de transferencia de calor que ocurren al interior del como muestra la Figura 17.

Figura 17. Fenómenos de transferencia de calor al interior del gasificador.



Al interior del gasificador se pueden observar fenómenos como lo son:

- Convección: Entre el sólido y el gas (D), en el mismo gas (E) y entre la pared y el gas (F).

- Conducción: Entre la pared y el sólido (H) y entre las partículas (G).

Para la **fase gaseosa** la ecuación de transferencia de energía general está planteada de la siguiente forma:

Ecuación 10. Balance de energía general para la fase gaseosa

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{r} \frac{\delta}{\delta r} \left(r D_c \frac{\delta T^G}{\delta r} \right) + \frac{\delta}{\delta Z} \left(D_c \frac{\delta T^G}{\delta Z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\delta}{\delta r} \left(r \lambda_g \frac{\delta T^G}{\delta r} \right) - \frac{\delta}{\delta Z} \left(\lambda_g \frac{\delta T^G}{\delta Z} \right) + C_T C_{p_m} \omega_{rad} \frac{\delta T^G}{\delta r} \\
 & - C_T C_{p_m} \omega_{ax} \frac{\delta T^G}{\delta Z} + h A_p (T^{Pared} - T^{Gas}) - \frac{h A_{esp}}{\varepsilon_L} (T^G - T^S) \\
 & - (\Delta H^{rxn} r_i)^{pirolisis+gasificación} = C_T C_{p_m} \frac{\delta T^G}{\delta t}
 \end{aligned}$$

(1) Dispersión térmica radial, donde r corresponde a la coordenada radial y D_c es el coeficiente de difusión.

(2) Dispersión térmica axial

(3) Conducción radial, donde λ_g es la conductividad del gas

(4) Conducción axial

(5) Convección radial, donde C_T se vincula a la concentración total de la fase gaseosa, C_{p_m} corresponde a la capacidad calorífica del gas y ω_{rad} a la velocidad de la fase gaseosa en dirección axial.

(6) Convección axial

(7) Convección Pared-Gas, donde h corresponde al coeficiente de película y A_p al área de la pared.

(8) Transferencia de calor Gas-Partícula, donde A_{esp} es el área específica y ε_L es la porosidad del lecho.

(9) Consumo energético, donde ΔH^{rxn} es la entalpia de reacción de la fase gaseosa y r_i corresponde a la velocidad de reacción.

(10) Acumulación

Donde se realizan las siguientes suposiciones con el objetivo de simplificar el balance:

- Como el sistema se encuentra en estado estacionario, la acumulación, es decir, el término (10) de la Ecuación 10, en la ecuación general es cero.
- El flujo radial será despreciado, por lo tanto, los fenómenos dependientes de la velocidad del gas en dirección radial no se tendrán en cuenta.
- No se tuvo en cuenta la transferencia de calor por convección en una misma fase.

- No se tuvo cuenta los fenómenos de dispersión térmica al interior del gasificador, puesto que, en comparación con la transferencia de calor a través de conducción y convección, su valor es mínimo.
- Como es un reactor de longitud 0-L no se conoce el área de la pared a través de la cual se está dando el fenómeno de convección, así que se consideró que las partículas y la película de gas que se encuentran en contacto directo con la pared poseen la misma temperatura que esta y que no hay una convección entre la pared y el gas.
- Por la naturaleza de las reacciones que suceden al interior del gasificador para la pirólisis, se asumió que el consumo energético de la pirólisis es igual a cero, debido a que existe tanto consumo como generación de calor durante esta descomposición térmica.

Finalmente, luego de las suposiciones la ecuación queda reducida como se muestra a continuación:

Ecuación 11. Balance de energía para la especie gaseosa

$$\frac{1}{r} \frac{\delta}{\delta r} \left(r * \lambda_g \frac{\delta T^G}{\delta r} \right) - C_T * C_{p_m} * \omega_{ax} * \frac{\delta T^G}{\delta z} - \frac{h * A_{esp}}{\varepsilon_L} (T^G - T^S) - (\Delta H^{rxn} * r_i)_{gasificación} = 0$$

Para la **fase sólida** la ecuación de transferencia general está planteada de la siguiente forma:

Ecuación 12. Balance de energía general para la fase sólida

$$\begin{aligned} & \frac{1}{r} \frac{\delta}{\delta r} \left(r D_b \frac{\delta T^S}{\delta r} \right) + \frac{\delta}{\delta z} \left(D_b \frac{\delta T^S}{\delta z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\delta}{\delta r} \left(r \lambda_s \frac{\delta T^S}{\delta r} \right) + \frac{\delta}{\delta z} \left(\lambda_s \frac{\delta T^S}{\delta z} \right) + C_T C_{p_m} \omega_{rad} \frac{\delta T^S}{\delta r} \\ & - C_T C_{p_m} \omega_{ax} \frac{\delta T^G}{\delta z} + \frac{h A_{esp}}{1 - \varepsilon_L} (T^G - T^S) - (\Delta H^{rxn} r_i)_{pirólisis+gasificación} \\ & = C_T C_{p_m} \frac{\delta T^S}{\delta t} \end{aligned}$$

- (1) Difusión radial
- (2) Difusión axial
- (3) Conducción radial
- (4) Conducción axial
- (5) Convección radial
- (6) Convección axial
- (7) Transferencia de calor Gas-Partícula

- (8) Consumo energético
- (9) Acumulación

Donde se realizan las mismas suposiciones que en el caso de la fase gaseosa expuestas anteriormente, con el objetivo de simplificar el balance, pero a comparación con la fase gaseosa, la transferencia de calor en la misma fase, que sería la conducción, sí se tuvo en cuenta.

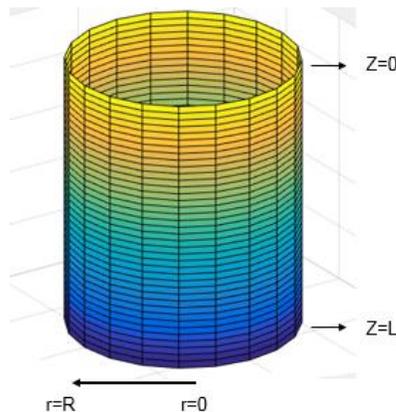
Finalmente, luego de las suposiciones la ecuación queda reducida como se muestra a continuación:

Ecuación 13. Balance de especies para la especie gaseosa

$$\frac{1}{r} \frac{\delta}{\delta r} \left(r \lambda_s \frac{\delta T^S}{\delta r} \right) + \frac{\delta}{\delta z} \left(\lambda_s \frac{\delta T^S}{\delta z} \right) - C_T C_{p_m} \omega_{ax} \frac{\delta T^G}{\delta z} + \frac{h A_{esp}}{1 - \epsilon_L} (T^G - T^S) - (\Delta H^{rxn} r_i)_{gasificación} = 0$$

2.2.2.1 Condiciones de frontera Para proponer unas condiciones de frontera apropiadas que consientan una aproximación conveniente para el modelo, es necesario ubicar un marco de referencia entendible y congruente en el momento de formular las condiciones de frontera, es así como al ser un modelo bidimensional para un reactor tubular se dimensiona la altura para fines axiales y el radio del gasificador para fines radiales, denotados como se indica en la Figura 18 donde 0 y L corresponden respectivamente a los valores mínimo y máximo que la condición en dirección axial puede tomar, mientras que en dirección radial 0 y R son las condiciones respectivamente mínima y máxima que la variable puede tomar.

Figura 18. Puntos de referencia del reactor



A partir de estas coordenadas, es posible establecer las condiciones de frontera que correspondan al modelo para ambos balances de energía, en el modelo se hizo uso

de las condiciones de frontera de tipo Dirichlet y Neumann, mostradas a continuación, pero antes es preciso definir estos tipos de condiciones para poder comprender su planteamiento, es así como ambos tipos de condiciones son usadas durante el desarrollo y solución de ecuaciones diferenciales, pero su descripción difiere una de la otra. Las condiciones tipo Dirichlet se refieren a variables cuyo valor está definido o es constante, lo que quiere decir que la magnitud que toma para la ecuación es conocida cuando se evalúa en un punto determinado^{40 41}.

Ahora bien, para las condiciones de frontera tipo Neumann son aquellas expresadas en cuanto a derivadas, estas se prefijan con la intención de evaluar el cambio de la variable en un punto determinado⁴².

- La coordenada radial que se encuentra en el punto medio del reactor y que coincide con la pared adiabática, la cual presenta una condición de frontera de tipo Neumann:

$$r = 0 ; \left. \frac{\delta T}{\delta r} \right|_{r=0} = 0$$

Considerando la simetría térmica en este punto no hay un cambio de temperatura, esto se traduce en que allí no hay transferencia de calor y su comportamiento es semejante a su opuesto, esto permite establecer tal condición en ese punto, además en la Figura 15 se evidencia que el perfil de temperatura describe una curva convexa, la cual para los fines requeridos en el planteamiento de las condiciones de frontera, representa un mínimo y la derivada de un mínimo siempre será cero.

- Para la coordenada que se encuentra en la pared reactor se estableció que presenta una condición de frontera de tipo Dirichlet, como se encuentra descrita a continuación:

$$r = R , T = T_{pared}$$

Donde la ubicación para la coordenada la temperatura será igual a la temperatura de pared que se establezca en el modelo, la cual corresponde a una variable de entrada y es necesario que su valor oscile entre 700 – 1200 °C, puesto que es importante que se genere pirólisis en el punto medio del gasificador, el cual corresponde a un punto crítico debido al tipo de calentamiento escogido y por esta razón en la pared la temperatura debe ser alta y corresponder a temperaturas

⁴⁰ SEPULVEDA SOTO, Alonso. Física Matemática. Colombia: Universidad de Antioquia, 2009. p. 78

⁴¹ STEPHENSON, G. Introducción a Las Ecuaciones En Derivadas Parciales. Londres, Inglaterra: Reverté SA, 1982. p. 25

⁴² SAFF, Edward B. y KENT, Nagle R. Ecuaciones Diferenciales Y Problemas Con Valores En La Frontera. Pearson, 2004. p. 639-642

propias de gasificación para mitigar el efecto del calentamiento en la posición donde se desea alcanzar conversión de biomasa.

- En la posición axial, para la parte superior del gasificador la coordenada será $z=0$, donde se presenta la siguiente condición de tipo Dirichlet:

$$z = 0 , T = T_{ambiente}$$

Esta suposición parte del hecho que la parte superior del reactor no posee una chaqueta que provea algún tipo de calentamiento, por consiguiente, la temperatura en esta zona equivale a la temperatura ambiente establecida como 25°C.

- En la parte inferior del reactor, donde la coordenada corresponde a $z=L$.

$$z = L , \left. \frac{\delta T}{\delta z} \right|_{z=L} = 0$$

Esta condición se establece con base a la presunción que en la longitud del reactor la chaqueta de calentamiento termina y allí no existe un intercambio de calor de algún suministro energético hacia el interior del gasificador, siendo así no hay una transferencia de calor al final del reactor ni un proceso de calentamiento, simplemente enfriamiento por la transferencia de calor del gas de síntesis con el ambiente al salir del reactor, pero este proceso es ajeno al modelo matemático aquí presentado y no se tendrá en cuenta.

2.2.3 Balance de momento. Es necesario ampliar la información y las consideraciones tenidas en cuenta para el momento de desprejar los balances de momento. Para un reactor en estado estacionario se considera el flujo tipo tapón, en la mecánica de fluidos este es un perfil de velocidades que permite el funcionamiento de las reacciones químicas en un sistema abierto, lo que indica que el reactor es de flujo continuo, la temperatura y la composición varían en consecuencia a la longitud del reactor.

Para el comportamiento ideal el transporte solo puede ser convectivo y en la dirección axial. Siendo así como se puede desprejar el balance de momento, puesto que las velocidades de flujo al interior del gasificador solo se dan a nivel axial y la velocidad a nivel radial es constante, asumiendo que el balance de momento no es necesario en este caso⁴³.

2.2.4 Calculo de grados de libertad. El cálculo de grados de libertad es una condición indispensable, pero no definitiva para la resolución del modelo matemático, se refieren al número de parámetros que puede tomar una variable

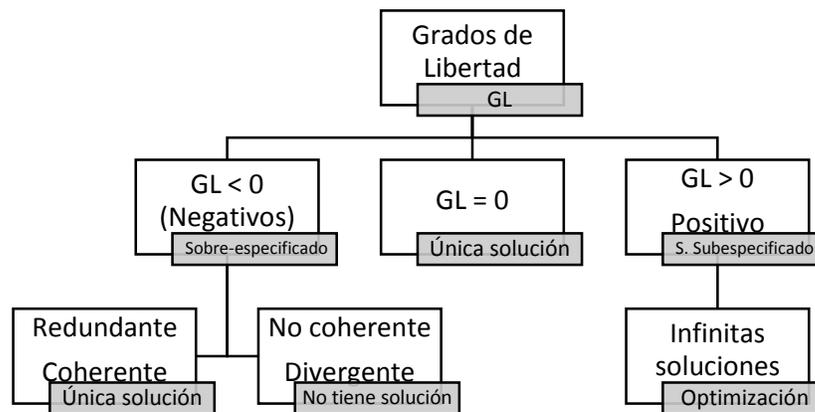
⁴³ FOGLER, H. Scott. Elements of Chemical Reaction Engineering. 4th ed., 1. print. ed. Upper Saddle River, NJ: Pearson Education Internat, 2006. 9780131278394

desconocida para su solución. Dependiendo de la cantidad de grados de libertad que se obtengan en un análisis para un sistema.

La Figura 19 expresa que proveer un sistema con 0 grados de libertad indica que el mismo cumple con las condiciones debidas para su resolución y que permite obtener un sistema con una única solución, pero que puede necesitar de otras condiciones para lograr el cometido deseado.

Puesto que el modelo está orientado a ser resuelto en términos de una sola variable, considerando la presión constante, la temperatura es la que determina el comportamiento del modelo matemático, donde las composiciones en las fases sólida y gaseosa y las propiedades estructurales y térmicas varían respecto a la temperatura al interior del gasificador.

Figura 19. Resultados posibles de los grados de libertad.



Fuente: FELDER, Richard M. and ROUSSEAU, Ronald W. Principios Elementales de los Procesos Químicos. Tercera ed. USA: Limusa Wiley, 2004. 100 p.

Para el cálculo apropiado de los grados de libertad se realizó un conteo riguroso de variables conocidas, desconocidas, ecuaciones de balance y relaciones especificadas como se muestra en la Tabla 13, la cual también realiza una división entre las variables dependientes y las independientes con la intención de solo tener en cuenta las independientes, esto a causa de que, al conocer las variables independientes del modelo, de manera inmediata se conocerán las variables dependientes.

Donde, como variables conocidas se tienen las propiedades del sólido que corresponden a la conductividad térmica, densidad y capacidad calorífica; la presión del sistema y la porosidad del lecho. Como variables desconocidas se tienen la temperatura y las propiedades de la fase gaseosa que corresponden a las mismas

que para el sólido, (capacidad calorífica, conductividad térmica y densidad), la velocidad del gas, el coeficiente de película y el área específica.

Tabla 13. Calculo de grados de libertad para el modelo.

	Variables Dependientes	Variables Independientes	Variables Totales
Variables Conocidas	1	5	6
Variables Desconocidas	4	1	5
Variables Totales	6	6	11
Ecuaciones de balance	/	/	4
Relaciones Especificadas	/	/	0
Ecuaciones Totales			4

Ahora es necesario explicar la dependencia o independencia de las variables enlistadas en la Tabla 13, como variables independientes se tienen la presión y la temperatura de un sistema, ya que, al ser variables intensivas, nunca serán dependientes para el modelo presentado; también las propiedades del sólido son independientes, debido a que únicamente dependen del material del sólido cuya condición no se evalúa en el presente modelo.

Como variables dependientes se presentan la entalpia de reacción de la fase gaseosa, las propiedades del gas, la velocidad del gas y el coeficiente de película, debido a que todos dependen del cálculo de la temperatura para poder conocer su valor.

Ahora bien, para obtener los grados de libertad del modelo se conoce la Ecuación 14, mostrada a continuación. Y a su vez se toman los datos para variables desconocidas y ecuaciones totales consignados en la Tabla 13.

Ecuación 14. Calculo de grados de libertad.

$$GL = \#Incógnitas - \#Balances de Energía Independientes$$

$$GL = 5 - 4$$

$$GL = 1$$

A partir de lo anterior se determinó que el modelo posee un grado de libertad, por consiguiente, este sistema se encuentra subespecificado, donde el sistema posee infinitas soluciones, siendo así como el modelo requiere de una suposición inicial para la temperatura, debido a que es necesario el cálculo de la misma para poder obtener las demás condiciones del modelo y a continuación realizar la cantidad de

iteraciones necesarias hasta que el modelo converja, por lo tanto la obtención de la solución final depende de la suposición inicial de temperatura realizada.

La realización de una suposición para una variable desconocida en un sistema con 1 grado de libertad reduce el mismo a 0 grados de libertad, llevando el modelo matemático a que posea una única solución y que cumpla con la condición básica que permite su resolución.

2.3 CALCULO DE PROPIEDADES FÍSICAS

Con el objetivo de solucionar las ecuaciones de balance presentadas en el numeral anterior es necesario definir propiedades físicas para la fase gaseosa ya que en la fase sólida estas propiedades las tomamos de la literatura de datos experimentales y se consideran constantes.

Para el cálculo de dichas propiedades se hicieron las siguientes suposiciones:

- La presión es contante en todo el reactor y es igual a la presión atmosférica como ya se mencionó en el literal 2.1.3.2.
- Los alquitranes se pueden clasificar por su formación o por su comportamiento químico, según su formación existen los alquitranes primarios, secundarios y terciarios. Los alquitranes primarios son compuestos productos de la descomposición de la celulosa, hemicelulosa y lignina, los secundarios son consisten principalmente de compuestos fenólicos y olefinas que son producidas por la conversión de alquitranes primarios y los alquitranes terciarios son los hidrocarburos poliaromaticos⁴⁴. Se seleccionó el Tolueno, el cual es un alquitrán secundario, ya que este tipo de alquitranes se forma cuando la temperatura y el tiempo se residencia de los alquitranes primarios son elevados lo que sucede en el proceso de gasificación.⁴⁵
- La fase gaseosa se comporta como un gas ideal debido a la baja presión de operación que se maneja y a las altas temperaturas que requiere el proceso.

2.3.1 Capacidad calorífica

2.3.1.1 De los componentes. El cálculo de la capacidad calorífica o calor específico de la mezcla de gases se realiza mediante el uso de una ecuación polinómica que está en función de la temperatura. Para el cálculo de esta propiedad del CO, CO₂, H₂, N₂, H₂O y CH₄ se utilizó la siguiente ecuación:

⁴⁴ KIEL, H. A., et al. Primary Measures to Reduce Tar Formation in Fluidised-Bed Biomass Gasifiers. Final SDE Project P1999-012. ECN, 2004.

⁴⁵ FERNANDEZ GONZALEZ, Jesus, et al. Tecnologías Para El Uso Y Transformación De Biomasa Energética. Ediciones Paraninfo, 2015.

Ecuación 15. Capacidad calorífica de cada especie

$$C_{p,i} = a + b * T + c * T^2 + d * T^3$$

Donde la temperatura, T , está en K y el C_p en $J/mol \cdot K$. Los coeficientes que se encuentran en la Tabla 14 los cuales tienen un rango de temperatura de 273K a 1800K.

Tabla 14. Coeficientes para la determinación de la capacidad calorífica.

Especie	a	b	c	d
CO	28,16	1,675E-03	5,372E-06	-2,222E-09
CO ₂	22,26	5,981E-02	-3,501E-05	7,469E-09
H ₂	29,11	-1,916E-03	4,003E-06	-8,704E-10
N ₂	28,9	-1,571E-03	8,081E-06	-2,873E-09
H ₂ O	32,24	1,923E-03	1,055E-05	-3,595E-09
CH ₄	19,89	5,021E-02	1,296E-05	-1,101E-09

Fuente: ÇENGEL, Yunus A. and BOLES, Michael A. Termodinámica (6a. ed.). Madrid: McGraw-Hill España, 2011.

Para los compuestos que hacen parte de los alquitranes que son el benceno y el tolueno se utiliza la función polinómica que se describe a continuación en donde Ru es la constante de los gases.

$$C_{p,i}/Ru = a + b * T + c * T^2 + d * T^3$$

Donde la temperatura se encuentra en K y el calor específico en $J/mol \cdot K$. En la tabla 15 se encuentra los coeficientes.

Tabla 15. Coeficientes para la determinación de la capacidad calorífica de los alquitranes.

Especie	a	b	C	d	e
Tolueno	3,866	3,558E-03	1,314E-04	-1,866E-07	7,690E-11

Fuente: POLING, Bruce E.; O'CONNELL, John P. and PRAUSNITZ, John M. The properties of gases and liquids. 5. ed ed. Boston: McGraw-Hill, 2001. ISBN 9780071189712

2.3.1.2 De la mezcla. La capacidad calorífica molar de una mezcla de gases a bajas presiones y temperaturas altas se calcula mediante la siguiente expresión.

Ecuación 16. Capacidad calorífica de la mezcla de gases

$$C_{P,mezcla} = \sum_{i=1}^n x_i * C_{P,i}$$

2.3.2 Viscosidad dinámica

2.3.2.1 De los componentes. El cálculo de la viscosidad dinámica es diferente para compuestos orgánicos que para compuestos inorgánicos y ambos métodos fueron tomados del Manual del Ingeniero Químico de Perry⁴⁶. En primer lugar, el cálculo de esta propiedad para compuestos inorgánicos (CO, CO₂, H₂, N₂, H₂O) puros a bajas temperaturas se realiza empleando las siguientes ecuaciones desarrolladas por Reichenberg.

Ecuación 17. Viscosidad de compuestos inorgánicos

$$\mu_i = \frac{A * T_r}{[1 + 0,36 * T_r * (T_r - 1)]^{1/6}}$$

Donde la viscosidad está expresada en Pa*s y A está en función de la masa molar, la temperatura crítica en K y la presión crítica en Pa

$$A = 1,6104 * 10^{-10} \left[\frac{M^{1/2} * P_c^{2/3}}{T_c^{1/6}} \right]$$

En la Tabla 16 se encuentran los datos necesarios para el cálculo de esta propiedad.

Por otro lado, para el cálculo de la viscosidad de los componentes orgánicos (CH₄, Benceno y Tolueno) a bajas presiones se utiliza el método planteado por Stiel y Thodos que se muestra a continuación.

⁴⁶ PERRY, Robert Howard. Perry's Chemical Engineers' Handbook. 8. ed. ed. New York: McGraw-Hill, 2008.

Tabla 16. Constantes básicas de los componentes volátiles

Especie	Masa molar (g/mol)	Pc (Pa)	Tc (K)
CO	28,01	3494000	132,85
CO ₂	44,01	7374000	304,12
H ₂	2,016	1293000	32,98
N ₂	28,02	3398000	126,2
H ₂ O	18,016	22064000	647,14
CH ₄	16,042	4599000	190,56
Tolueno	92,134	4108000	591,75

Fuente: POLING, Bruce E.; O'CONNELL, John P. and PRAUSNITZ, John M. The properties of gases and liquids. 5. ed. Boston: McGraw-Hill, 2001. ISBN 9780071189712

Ecuación 18. Viscosidad de compuestos orgánicos

$$\mu_i = 4,60 * 10^{-4} * \frac{N * M^{1/2} * P_c^{2/3}}{T_c^{1/6}}$$

$$N = 0,0003400 * T_r^{0,94} \quad T_r \leq 1,5$$

$$N = 0,0001778 * (4,58 * T_r - 1,67)^{0,625} \quad T_r > 1,5$$

Los datos para las ecuaciones anteriores también se encuentran en la Tabla 16, la viscosidad está expresada en Pa*s.

2.3.2.2 De la mezcla. Para la predicción de una mezcla gaseosa de compuestos orgánicos e inorgánicos a bajas presiones el método que se utiliza es el método de Bromley y Wilke⁴⁷ descrito en el Manual del Ingeniero Químico que tiene en cuenta la interacción entre componentes, el método se muestra a continuación.

Ecuación 19. Viscosidad de la mezcla de gases

$$\mu_G = \sum_{i=1}^n \frac{\mu_i}{1 + \sum_{j=1}^n \left(Q_{ij} \frac{x_j}{x_i} \right)}$$

⁴⁷ PERRY, Robert Howard. Perry's Chemical Engineers' Handbook. 8. ed. ed. New York: McGraw-Hill, 2008.

Ecuación 20. Ecuación de interacción entre componentes

$$Q_{ij} = \frac{1 + \left[\left(\frac{\mu_i}{\mu_j} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{M_j}{M_i} \right)^{\frac{1}{4}} \right]^2}{\sqrt{8} \left[1 + \frac{M_i}{M_j} \right]^{\frac{1}{2}}}$$

2.3.3 Densidad. La densidad de los componentes se calcula mediante la ecuación de los gases ideales como se muestra además la densidad de la mezcla se calcula al igual que la capacidad calorífica de la mezcla.

Ecuación 21. Densidad de cada componente

$$\rho_i = \frac{P * M}{Ru * T}$$

Ecuación 22. Densidad de la mezcla de gases

$$\rho_G = \sum_{i=1}^n x_i * \rho_i$$

2.3.4 Conductividad térmica

2.3.4.1 De los componentes. La conductividad térmica de cada especie de la mezcla de gases se calcula mediante una expresión polinómica en función de la temperatura en donde λ_i está en $W/m \cdot K$.

Ecuación 23. Conductividad de cada componente

$$\lambda_i = a + b * T + c * T^2 + d * T^3$$

Los coeficientes de la ecuación anteriormente mostrada se encuentran en la tabla 17.

Tabla 17. Coeficientes para el cálculo de la conductividad térmica.

Elemento	a	B	c	d
CO	5,067E-04	9,125E-05	-3,524E-08	8,199E-12
CO2	-7,215E-03	8,015E-05	5,477E-09	-1,053E-11
H2	8,099E-03	6,689E-04	-4,158E-07	1,562E-10
N2	3,919E-04	9,816E-05	-5,067E-08	1,504E-11
H2O	7,341E-03	-1,013E-05	1,801E-07	-9,100E-11
CH4	-1,869E-03	8,727E-05	1,179E-07	-3,614E-11
Tolueno	7,596E-03	-4,008E-05	2,370E-09	-9,305E-11

Fuente: POLING, Bruce E.; O'CONNELL, John P. and PRAUSNITZ, John M. The properties of gases and liquids. 5. ed ed. Boston: McGraw-Hill, 2001. ISBN 9780071189712

2.3.4.2 De la mezcla. El cálculo de la conductividad de la mezcla se realiza mediante la ecuación de Wassiljewa⁴⁸ que es análoga a la ecuación de la viscosidad dinámica de la mezcla.

Ecuación 24. Conductividad de la mezcla de gases

$$\lambda^g = \sum_{i=1}^n \frac{x_{i*} \lambda_i}{\sum_{j=1}^n x_{j*} A_{ij}}$$

En donde A_{ij} es igual a Q_{ij} cuya ecuación se encuentra en la sección del cálculo de la viscosidad dinámica.

2.3.5 Fase sólida. En la fase solida las propiedades se enlistan puesto que no se toman correlaciones para los cálculos, sino que se obtienen de artículos, cuya caracterización para la biomasa escogida en este trabajo se encuentra en ellos, considerando además el factor que las propiedades físicas de la biomasa solida no son función de la temperatura, su variación durante todo el proceso y al finalizar es nula, siendo así que estas propiedades permanecen constantes durante el desarrollo del modelo y se describen a continuación en el Cuadro 3.

⁴⁸ POLING, Bruce E.; O'CONNELL, John P. y PRAUSNITZ, John M. The Properties of Gases and Liquids. 5. ed ed. Boston: McGraw-Hill, 2001. 9780071189712

Cuadro 3. Propiedades térmicas y estructurales de la biomasa.

PROPIEDAD	CUESCO DE PALMA	MADERA DE HAYA
Densidad a granel (kg/m^3)	595	680
Conductividad térmica ($\text{W/m}^*\text{K}$)	0,19	0,18
Capacidad calorífica ($\text{kJ/kg}^*\text{K}$)		1,52
Porosidad del lecho		0,7

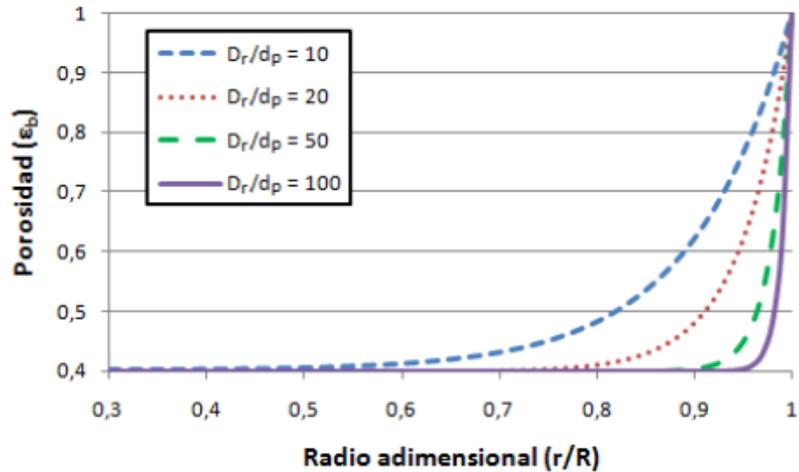
Como la biomasa es considerada un balín sólido sin porosidad, para efectos de simplicidad del modelo, no se tiene en cuenta para ninguna de las ecuaciones de gobierno la porosidad de la biomasa, pero sí la porosidad del lecho, la cual se obtuvo de un perfil de porosidad hecho por Vortmeyer y Haidegger⁴⁹. Allí se expone que la porosidad del lecho es directamente proporcional a la longitud del mismo, siendo así que una porosidad constante para un lecho es un suceso que se presenta para longitudes infinitas, de esta manera la longitud finita del diámetro de un reactor en un corte transversal muestra un perfil de porosidad que afecta las mediciones de porosidad para el lecho, por este motivo, debido al perfil que se produce, García⁵⁰ generó una aproximación donde a través de la Gráfica 1, expresa la porosidad de la cama mediante una relación de diámetros que da paso a un perfil, en el presente proyecto se realizó una aproximación geométrica o de promedio para concluir que la porosidad a utilizar para el modelo matemático será de 0,7.

Considerando que según la Gráfica 1 cuando la relación entre el diámetro del equipo y el diámetro de partícula aumenta, así también lo hace su porosidad, presentando un comportamiento que tiende a una porosidad correspondiente a 1, para lograr este comportamiento sería necesario tener un reactor con un diámetro muy grande y una partícula de diámetro muy pequeño, pero este comportamiento no se presenta en la realidad y en este caso en el modelo debe ser considerada, por esta razón se realizó la aproximación.

⁴⁹ VORTMEYER, D. y HAIDEGGER, E. Discrimination of three approaches to evaluate heat fluxes for wall-cooled fixed bed chemical reactors. En: Chemical Engineering Science. vol. 46, no. 10, p. 2651-2660

⁵⁰ GARCÍA PATIÑO, Harold Jhair. Modelación De La Gasificación De Biomasa En Un Reactor De Lecho Fijo. Universidad Nacional de Colombia, 2011.

Gráfica 1. Perfil de porosidad en función del radio adimensional.



Fuente: GARCIA PATIÑO, Harold Jhair. Modelación de la gasificación de biomasa en un reactor de lecho fijo; Universidad Nacional de Colombia, 2011.

2.4 CALCULO DE COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA DE CALOR

El coeficiente de transferencia de calor entre la fase sólida y la fase líquida o coeficiente de película se calcula para una cama de partículas según Shlünder y Tsotsas⁵¹ mediante las siguientes ecuaciones:

Ecuación 25. Coeficiente de película

$$h_G = \frac{Nu_G * \lambda^G}{d_p}$$

En donde λ^G se calcula mediante el método explicado en la sección 2.3.4 para la mezcla de gases.

Para el cálculo del número de Nusselt se realiza mediante la siguiente expresión:

$$Nu_G = K * f_{\epsilon b} * Nu_{EK}$$

Donde K es un factor de corrección para la temperatura y $f_{\epsilon b}$ es un factor de corrección que contiene la porosidad del lecho de la cama. La porosidad de la cama que se tomó para este trabajo es de 0,7 tomando la porosidad media de la cama en

⁵¹ SCHLÜNDER, Ernst-Ulrich y TSOTSAS, Evangelos. Wärmeübertragung in Festbetten, Durchmischten Schüttgütern Und Wirbelschichten. Stuttgart: Georg Thieme-Verlag, 1988.

el trabajo de García para la modelación de un reactor de lecho fijo para la madera de haya⁵² ya que no se tendrá en cuenta la variación de la porosidad.

$$K = \left(\frac{T^G}{T^S} \right)^{0.12}$$

$$f_{\varepsilon b} = 1 + 1.5(1 - \varepsilon_b)$$

El cálculo de Nu_{EK} se realiza usando el promedio del número de Nusselt para flujo laminar y para flujo turbulento mediante las siguientes expresiones:

$$Nu_{EK} = 2 + \sqrt{Nu_{lam}^2 + Nu_{turb}^2}$$

$$Nu_{lam} = 0.664 * Re_{eq}^{\frac{1}{2}} * Pr^{\frac{1}{3}}$$

$$Nu_{turb} = \frac{0.037 * Re_{eq}^{0.8} * Pr}{1 + 2.443 * Re_{eq}^{-0.1} * (Pr^{\frac{2}{3}} - 1)}$$

El número de Reynolds modificado teniendo en cuenta la influencia de la convección natural como se muestra a continuación:

$$Re_{eq} = \sqrt{Re_{\varepsilon b}^2 + \frac{5 * Re_{\varepsilon b}^2}{2}}$$

En donde el número de Reynolds está en función de las propiedades anteriormente calculadas y la velocidad como se muestra a continuación, en función del área transversal del reactor y del flujo másico de la fase volátil que está dado por la cinética de reacción partiendo de la ecuación de gas ideal.

$$Re_{\varepsilon b} = \frac{v * \rho * d_p}{\mu}$$

Para el cálculo de la velocidad del gas:

Ecuación 26. Velocidad del gas

$$v = \frac{Q}{A}$$

⁵² GARCÍA PATIÑO, Harold Jhair. Modelación De La Gasificación De Biomasa En Un Reactor De Lecho Fijo. Universidad Nacional de Colombia, 2011.

Donde Q es el flujo volumétrico del gas y se calcula de la siguiente manera:

$$Q = \frac{\dot{m}}{\rho}$$

3. SOLUCIÓN DEL MODELO MATEMÁTICO

Para la solución del modelo matemático se empleó el método numérico de diferencias finitas para una malla de nodos en dos dimensiones, para ecuaciones diferenciales parciales, el método de solución se describe a continuación.

3.1 ECUACIONES DEL SISTEMA

A continuación, se hace el resumen de las ecuaciones finales que se utilizaron en la programación de todo el sistema, clasificándolas con respecto al algoritmo de solución que se encuentra más adelante en este mismo capítulo.

3.1.1 Balance de energía

- Fase gaseosa

$$\frac{1}{r} \frac{\delta}{\delta r} \left(r * \lambda_g \frac{\delta T^G}{\delta r} \right) - C_T * C_{p_m} * \omega_{ax} * \frac{\delta T^G}{\delta z} - \frac{h * A_{esp*}}{\varepsilon_L} (T^G - T^S) - (\Delta H^{rxn} * r_i)_{gasificación} = 0$$

La discretización de la ecuación de balance de energía para la fase gaseosa se presenta desglosada a continuación.

Primer término de la ecuación: $P_{(r)} = \frac{\delta \lambda_g}{\delta r}$

$$\begin{aligned} \frac{1}{r} \frac{\delta}{\delta r} \left(r * \lambda_g \frac{\delta T^G}{\delta r} \right) &= \frac{1}{r} \frac{\delta}{\delta r} \left[(r * \lambda_g) \frac{\delta T^G}{\delta r} \right] = \frac{1}{r} \left[\frac{\delta}{\delta r} (r * \lambda_g) \frac{\delta T^G}{\delta r} + r * \lambda_g \frac{\delta^2 T^G}{\delta r^2} \right] \\ &= \frac{1}{r} \left[\left(\lambda_g + r \frac{\delta \lambda_g}{\delta r} \right) \frac{\delta T^G}{\delta r} + r * \lambda_g \frac{\delta^2 T^G}{\delta r^2} \right] = \frac{\lambda_g}{r} \frac{\delta T^G}{\delta r} + \frac{\delta \lambda_g}{\delta r} \frac{\delta T^G}{\delta r} + \lambda_g \frac{\delta^2 T^G}{\delta r^2} \end{aligned}$$

Segundo Término de la ecuación:

$$C_T * C_{p_m} * \omega_{ax} * \frac{\delta T^G}{\delta z}$$

Tercer término de la ecuación:

$$\frac{h * A_{esp}}{\varepsilon_L} (T^G - T^S)$$

Cuarto término de la ecuación:

$$(\Delta H^{rxn} * r_i)_{gasificación}$$

Luego aplicando el método de diferencias finitas para cada término y reuniéndolos, queda planteado como se muestra a continuación.

$$\begin{aligned} \frac{\lambda_g T_{m+1,n} - T_{m,n}}{r \Delta r} + P_{(T)} \left[\frac{T_{m+1,n} - T_{m,n}}{\Delta r} \right]^2 + \lambda_g \left[\frac{T_{m+1,n} - 2T_{m,n} + T_{m-1,n}}{\Delta r^2} \right]^2 \\ + \frac{T_{m-1,n} + T_{m,n}}{\Delta r} - C_T * C_{p_m} * \omega_{ax} \frac{T_{m,n+1} - T_{m,n}}{\Delta z} - \frac{h * A_{esp}}{\varepsilon_L} (T^G - T^S) \\ - \Delta H^{rxn} * r_i)_{gasificación} = 0 \end{aligned}$$

Ahora para la discretización se presenta el análisis dimensional, de la siguiente manera.

$$\begin{aligned} \frac{\lambda_g T_{m+1,n} - T_{m,n}}{r \Delta r} &= \frac{\frac{W}{mK}}{m} * \frac{K}{m} = \frac{W}{m^3} \\ P_{(T)} \left[\frac{T_{m+1,n} - T_{m,n}}{\Delta r} \right]^2 &= \frac{\frac{W}{mK}}{mK} * \left(\frac{K}{m} \right)^2 = \frac{W}{m^3} \\ \lambda_g \left[\frac{T_{m+1,n} - 2T_{m,n} + T_{m-1,n}}{\Delta r^2} \right]^2 &= \frac{\frac{W}{mK}}{K} * \left(\frac{K}{m^2} \right)^2 = \frac{W}{m^3} \\ C_T * C_{p_m} * \omega_{ax} \frac{T_{m,n+1} - T_{m,n}}{\Delta z} &= \frac{mol}{m^3} * \frac{J}{molK} * \frac{m}{s} * \frac{K}{m} = \frac{W}{m^3} \\ \frac{h * A_{esp}}{\varepsilon_L} (T^G - T^S) &= \frac{W}{m^2K} * \frac{1}{m} * K = \frac{W}{m^3} \\ (\Delta H^{rxn} * r_i)_{gasificación} &= \frac{J}{mol} * \frac{mol}{s m^3} = \frac{W}{m^3} \end{aligned}$$

- **Fase sólida**

$$\begin{aligned} \frac{1}{r} \frac{\delta}{\delta r} \left(r \lambda_s \frac{\delta T^S}{\delta r} \right) + \frac{\delta}{\delta z} \left(\lambda_s \frac{\delta T^S}{\delta z} \right) - C_T C_{p_m} \omega_{ax} \frac{\delta T^G}{\delta z} + \frac{h A_{esp}}{1 - \varepsilon_L} (T^G - T^S) \\ - (\Delta H^{rxn} r_i)_{gasificación} = 0 \end{aligned}$$

Debe reescribirse la ecuación de balance de energía para la fase sólida, la misma se presenta desglosada a continuación.

Primer término de la ecuación:

$$\frac{1}{r} \frac{\delta}{\delta r} \left(r \lambda_s \frac{\delta T^S}{\delta r} \right) = \frac{\lambda_s}{r} \frac{\delta T^S}{\delta r} + \frac{\delta \lambda_s^0}{\delta T} \left(\frac{\delta T^S}{\delta r} \right)^2 + \lambda_s \frac{\delta^2 T^S}{\delta r^2} = \frac{\lambda_s}{r} \frac{\delta T^S}{\delta r} + \lambda_s \frac{\delta^2 T^S}{\delta r^2}$$

Este término se cancela debido a que las propiedades del sólido se mantienen constantes respecto a la variación de la temperatura.

Segundo término de la ecuación:

$$\frac{\delta}{\delta z} \left(\lambda_s \frac{\delta T^S}{\delta z} \right) - C_T C p_m \omega_{ax} \frac{\delta T^G}{\delta z} = \lambda_s \frac{\delta^2 T^S}{\delta z^2} - C_T C p_m \omega_{ax} \frac{\delta T^G}{\delta z}$$

Tercer término de la ecuación:

$$\frac{h A_{esp}}{1 - \varepsilon_L} (T^G - T^S)$$

Cuarto término de la ecuación:

$$(\Delta H^{rxn} r_i)_{gasificación}$$

Prosiguiendo se discretiza cada término y se reúnen, la discretización queda planteada como se muestra a continuación.

$$\frac{\lambda_s}{r} \frac{T_{m+1,n} - T_{m,n}}{\Delta r} + \lambda_s \frac{T_{m+1,n} - 2T_{m,n} + T_{m,n-1}}{\Delta r^2} + \lambda_s \frac{T_{m,n+1} - 2T_{m,n} + T_{m,n-1}}{\Delta z^2} - C_T * C p_m * \omega_{ax} \frac{T_{m,n+1} - T_{m,n}}{\Delta z} - \frac{h * A_{esp}}{1 - \varepsilon_L} (T^G - T^S) - \Delta H^{rxn} * r_i)_{gasificación} = 0$$

Para la discretización obtenida se realiza un análisis dimensional descrito a continuación.

$$\begin{aligned} \frac{\lambda_s}{r} \frac{T_{m+1,n} - T_{m,n}}{\Delta r} &= \frac{W}{mK} * \frac{K}{m} = \frac{W}{m^3} \\ \lambda_s \frac{T_{m+1,n} - 2T_{m,n} + T_{m,n-1}}{\Delta r^2} &= \frac{W}{mK} * \frac{K}{m^2} = \frac{W}{m^3} \\ \lambda_s \frac{T_{m,n+1} - 2T_{m,n} + T_{m,n-1}}{\Delta z^2} &= \frac{W}{mK} * \frac{K}{m^2} = \frac{W}{m^3} \\ C_T * C p_m * \omega_{ax} \frac{T_{m,n+1} - T_{m,n}}{\Delta z} &= \frac{mol}{m^3} * \frac{J}{molK} * \frac{m}{s} * \frac{K}{m} = \frac{W}{m^3} \\ \frac{h * A_{esp}}{1 - \varepsilon_L} (T^G - T^S) &= \frac{W}{m^2K} * \frac{1}{m} * K = \frac{W}{m^3} \\ (\Delta H^{rxn} * r_i)_{gasificación} &= \frac{J}{mol} * \frac{mol}{s m^3} = \frac{W}{m^3} \end{aligned}$$

- **Condiciones de frontera**

Para la coordenada radial

$$r = 0 ; \quad \left. \frac{\delta T}{\delta r} \right|_{r=0} = 0$$

$$r = R , T = T_{pared}$$

Para la coordenada axial

$$z = 0 , T = T_{ambiente}$$

$$z = L , \quad \left. \frac{\delta T}{\delta z} \right|_{z=L} = 0$$

3.1.2 Balance de especies

- **Fase gaseosa**

$$r_i^{(gasificación+pirolisis)} = \frac{dy}{dt}$$

$$\sum_{k=1}^k k_{0,i,k} * \exp\left(\frac{-Ea_{i,k}}{R_u * T}\right) * (y_{0,i,k} - y_{i,k})^{n_{i,k}} + \frac{k(T) * C_{Agente\ de\ reacción}^n}{W_0} = \frac{dy_i}{dt}$$

3.1.3 Propiedades del gas

- **Capacidad calorífica**

Para cada compuesto

$$C_{p,i} = a + b * T + c * T^2 + d * T^3$$

Para la mezcla de gases

$$C_{P,mezcla} = \sum_{i=1}^n x_i * C_{P,i}$$

- **Viscosidad dinámica**

Para los compuestos inorgánicos

$$\mu_i = \frac{A * T_r}{[1 + 0,36 * T_r * (T_r - 1)]^{1/6}}$$

$$A = 1,6104 * 10^{-10} \left[\frac{M^{1/2} * P_c^{2/3}}{T_c^{1/6}} \right]$$

Para los compuestos orgánicos

$$\mu_i = 4,60 * 10^{-4} * \frac{N * M^{\frac{1}{2}} * P_c^{\frac{2}{3}}}{T_c^{\frac{1}{6}}}$$

$$N = 0,0003400 * T_r^{0,94} \quad T_r \leq 1,5$$

$$N = 0,0001778 * (4,58 * T_r - 1,67)^{0,625} \quad T_r > 1,5$$

Para la mezcla de gases

$$\mu_G = \sum_{i=1}^n \frac{\mu_i}{1 + \sum_{j=1}^n \left(Q_{ij} \frac{x_j}{x_i} \right)}$$

$$Q_{ij} = \frac{1 + \left[\left(\frac{\mu_i}{\mu_j} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{M_j}{M_i} \right)^{\frac{1}{4}} \right]^2}{\sqrt{8} \left[1 + \frac{M_i}{M_j} \right]^{\frac{1}{2}}}$$

- **Densidad**

Para cada compuesto

$$\rho_i = \frac{P * M}{R_u * T}$$

Para la mezcla de gases

$$\rho_G = \sum_{i=1}^n x_i * \rho_i$$

- **Conductividad térmica**

Para cada compuesto

$$\lambda_i = a + b * T + c * T^2 + d * T^3$$

Para la mezcla de gases

$$\lambda^g = \sum_{i=1}^n \frac{x_i * \lambda_i}{\sum_{j=1}^n x_j * A_{ij}}$$

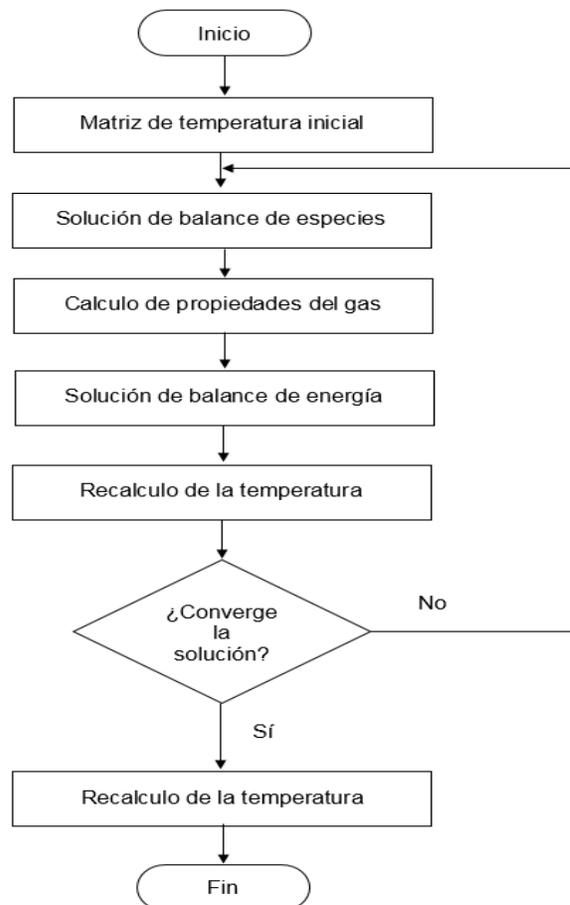
$$A_{ij} = Q_{ij}$$

3.2 ALGORITMO DE SOLUCIÓN

Para iniciar las iteraciones necesarias para resolver el modelo se genera una matriz sin tener en cuenta las propiedades ni la cinética de reacción con el fin de poder calcular la composición del gas en el nodo ya que las propiedades estructurales y térmicas son dependientes tanto de la temperatura como de la composición del gas como se muestra en la siguiente parte de este capítulo.

Posteriormente se calcula la matriz de temperatura en cada posición mediante las ecuaciones obtenidas en el balance de energía utilizando el método de diferencias finitas mostrado en el primer capítulo. Se realiza este procedimiento como se muestra en la Figura 20 y se analiza el cambio de la temperatura entre iteración e iteración hasta que la desviación está definida por una función de error y este debe ser menor al 0,001%, en este punto se deja iterar.

Figura 20. Algoritmo de solución



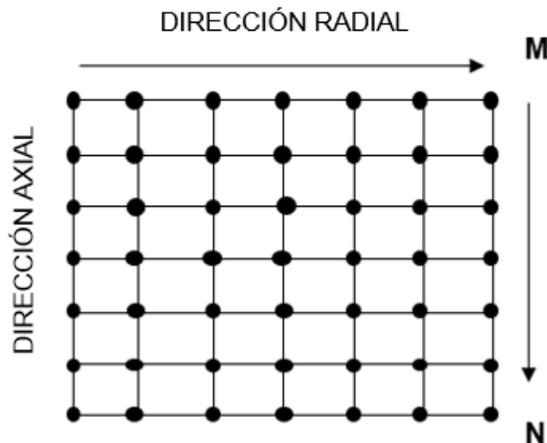
3.3 DESARROLLO DEL MÉTODO

El método de diferencias finitas es un método sencillo a nivel teórico, sin embargo, exige la resolución de diferentes dificultades, iniciando por la elección de la red de nodos, la manera de escribir las diferencias y el análisis de convergencia de la malla inicial y final. Teniendo en cuenta que actualmente las soluciones a los problemas que se dan en la matemática se hacen a través de programas computacionales, se hizo uso de un software libre con aplicaciones de este tipo para la resolución de diferencias finitas.

Ahora bien, como las dimensiones del gasificador fueron tomadas de las medidas que posee el reactor que se encuentra en la Universidad de Kassel en Alemania, una vez obtenidas se genera una malla de nodos de un tamaño correspondiente a $M \times N$ como lo muestra la Figura 21 donde M es el número de nodos en dirección radial, mientras que N es el número de nodos en la dirección axial.

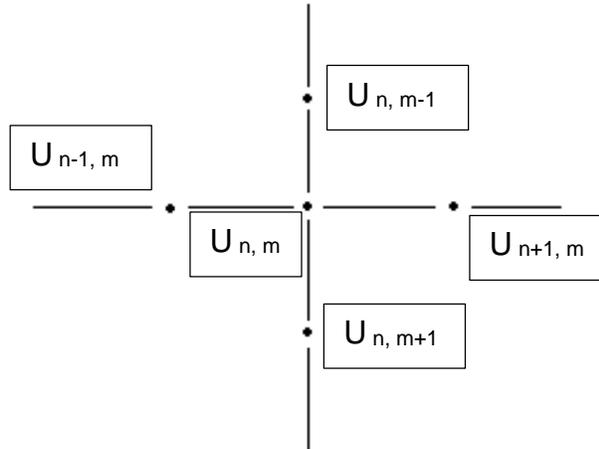
Por limitaciones del recurso informático y también en la búsqueda de obtener un comportamiento detallado y preciso de la variación de la temperatura, se escogió una malla de tamaño 100×100 .

Figura 21. Malla de nodos bidimensional para la solución del modelo por diferencias finitas.



En la Figura 22 se muestra la notación de la ubicación de cada uno de los nodos tomando el nodo del centro como el nodo de referencia y de esta manera describir la dirección en la que sucede los fenómenos a modelar.

Figura 22. Acercamiento a un nodo interno de la grilla.



Fuente: YARKO NIÑO,C. Clase10 FD 3. [0]. [Consultado el Nov 29,2017].
 Disponible en: <https://es.scribd.com/document/247978524/Clase10-FD-3>

De esta manera se empezó a modelar el reactor generando una malla de nodos inicial, permitiendo obtener una primera aproximación al modelo, tomando como valor semilla una matriz de ceros, la cual se muestra en la Figura 23 la cual luego de aplicar el método numérico guarda los valores de temperatura inicial para el modelo asumiendo que las demás propiedades y composiciones son constantes.

Figura 23. Matriz inicial o Matriz semilla

700	25	25	25	25	25	25	25	25
700	0	0	0	0	0	0	0	0
700	0	0	0	0	0	0	0	0
700	0	0	0	0	0	0	0	0
700	0	0	0	0	0	0	0	0
700	0	0	0	0	0	0	0	0
700	0	0	0	0	0	0	0	0
700	0	0	0	0	0	0	0	0

Esta matriz semilla se utilizó para encontrar los primeros valores de las ecuaciones que se encuentran al comienzo de este capítulo, que son la composición en cada punto de la malla en primer lugar y seguido las propiedades de la mezcla gaseosa que se va produciendo puesto que estas propiedades dependen tanto a la

temperatura como a la composición del nodo. De esta manera se solucionó el balance de energía encontrando otra malla de temperaturas asumiendo que tanto la composición como las propiedades son constantes y repitiendo el proceso iterativo como se mencionó en la sección anterior.

3.3.1 Gradientes de temperatura de las partículas. La elección del diámetro de partícula se hizo bajo la suposición que las partículas no presentan gradientes de temperatura, esta suposición es soportada por el número de Biot el cual para una esfera su valor debe ser de 0,03 o menor. A continuación, se muestra el cálculo del número de Biot realizando en primer lugar el cálculo del coeficiente de película ya que es necesario tanto para la transferencia de calor como para el número adimensional.

3.3.1.1 Coeficiente convectivo de transferencia de calor o de película. Se obtuvo el cálculo del coeficiente convectivo en dos puntos específicos del reactor con las coordenadas.

El cálculo del coeficiente se hace de manera longitudinal para el reactor, donde se calcula para dos posiciones, en la parte superior del reactor con su respectiva temperatura y composición inicial en esa área superior y en la parte inferior de la misma manera, con temperatura y composiciones finales, los resultados obtenidos de este cálculo se encuentran consignados en la Tabla 18.

Tabla 18. Coeficientes de convección a diferentes alturas del gasificador.

Longitud (Z)	h (W/m ² K)
0	9
L	8

La Tabla 19 refleja que los datos obtenidos para el cálculo de h, son congruentes y se aprecia que a medida que la temperatura no afecta de manera directa el coeficiente puesto que este depende la conductividad del gas y a pesar del aumento de la temperatura, la conductividad térmica de una mezcla de gases siempre será muy baja.

Tabla 19. Coeficientes convectivos para diferentes fluidos.

Tipo de fluido	h (W/m ² °C)
Gases en convección natural	5 - 100
Agua en convección natural	100 - 1.000
Gases dentro del tubo o en el exterior de tubos	10 – 5.000
Agua dentro de tubos	500 – 10.000
Ebullición del agua (nucleada)	2.000 – 40.000
Condensación pelicular del vapor de agua	4.000 – 15.000
Condensación en gotas del vapor de agua	3.000 – 14.000

Fuente: MÉTODO DE DIFERENCIAS FINITAS Y EL USO DE MATLAB PARA ECUACIONES ELÍPTICAS SOBRE CONDUCTIVIDAD TÉRMICA. [0]. Septiembre,. [Consultado el Noviembre 10,2017]. Disponible en: <https://www.uns.edu.pe/recursos/investigaciones/20.pdf>

3.3.1.2 Número de Biot. Para el Biot en un punto se observan los datos de la literatura y se asigna un diámetro de partícula aleatorio, de manera que su valor este por debajo de los 5mm de longitud de donde se escoge un diámetro de partícula equivalente a 2mm. Para una partícula esférica la longitud característica de la misma es equivalente a $r_0/3$ siendo así como la longitud característica de la biomasa al interior del reactor es 0,0006666m.

Para el cálculo del biot se tomará el coeficiente convectivo en el área correspondiente a $z=L$ debido a que en esta posición la partícula ya ha experimentado tanto el proceso de pirólisis como gasificación y se está dando un calentamiento que permite obtener resultados acordes. Donde la conductividad de la biomasa corresponde a 0,18 y 0,19 W/m*K.

$$Bi = \frac{8 * 0,00066}{0,19}$$

$$Bi = 0,028 < 0,03 \text{ para esferas}$$

El cálculo de Biot se hace con el motivo de confirmar la ausencia de gradientes térmicos al interior de la partícula considerando un calentamiento uniforme, como se puede observar en el cálculo de este número. Esto finalmente indica que las suposiciones tomadas para la resolución del modelo fueron acertadas.

3.3.2 Convergencia de malla. La convergencia de la malla debe realizarse, ya que es necesario un análisis que permita determinar qué tan eficiente es un tamaño de malla respecto a otro. Este análisis se da a partir de la comparación de los tamaños de malla y a su vez la comparación de los valores consignados en ellas que permite obtener un error; para el trabajo expuesto se realizó la comparación de una malla

nodal de tamaño 10x10 respecto a otra malla nodal de tamaño 100x100, esta última anteriormente mencionada.

De las dos mallas de nodos utilizadas para el balance de energía, se realizó el análisis de convergencia solo con la malla usada para la fase sólida y se realizó la comparación de resultados entre los obtenidos para cada uno de los tamaños de malla nodal.

Tomando la última fila de la malla y calculando el error se observó que la matriz de 10x10 nodos en comparación a la matriz de 100x100 nodos posee un error relativo equivalente a 0,026 lo que indica que, aunque la matriz de 10x10 nodos puede ser precisa es mejor utilizar una de 100x100 donde se puede observar mejor el comportamiento de las variaciones de temperatura.

Ecuación 27. Error relativo

$$\text{Error relativo} = \text{valor absoluto} \left(\frac{\text{Dato experimental} - \text{Dato teórico}}{\text{Dato teórico}} \right)$$

4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS

En el presente capítulo se exponen los resultados y el análisis de resultados que se obtuvieron para el modelo matemático planteado, a partir de todas las condiciones y las suposiciones realizadas previamente en el capítulo dos y el método de solución expuesto en el capítulo tres, donde se muestra el ajuste entre los procesos modelados en el presente trabajo, como lo fueron la pirólisis y la gasificación de la biomasa escogida, donde los balances de masa y energía se compenentran para arrojar los resultados presentados.

En cuanto a la comparación de resultados y la recolección de datos para la modelación matemática del gasificador, se obtuvieron de las mediciones realizadas a un gasificador de biomasa de lecho fijo con calentamiento indirecto que se encuentra en la Universidad de Kassel en Alemania, este hecho permitió el modelamiento de un gasificador real y comparar resultados teóricos con resultados experimentales para observar un paralelo y determinar qué tan cercano fue el modelo asumido con respecto a la realidad.

4.1 PERFIL DE TEMPERATURA

Para tener una mayor claridad respecto a los resultados obtenidos en el presente proyecto, es debido aclarar las mediciones y condiciones del gasificador experimental que se tomaron en cuenta aquí, es así como el gasificador posee una longitud correspondiente a 1,5m y un diámetro de 8cm⁵³ y se conoce el diámetro de partícula cuyo valor es 2mm debido a los cálculos realizados previamente en el capítulo tres.

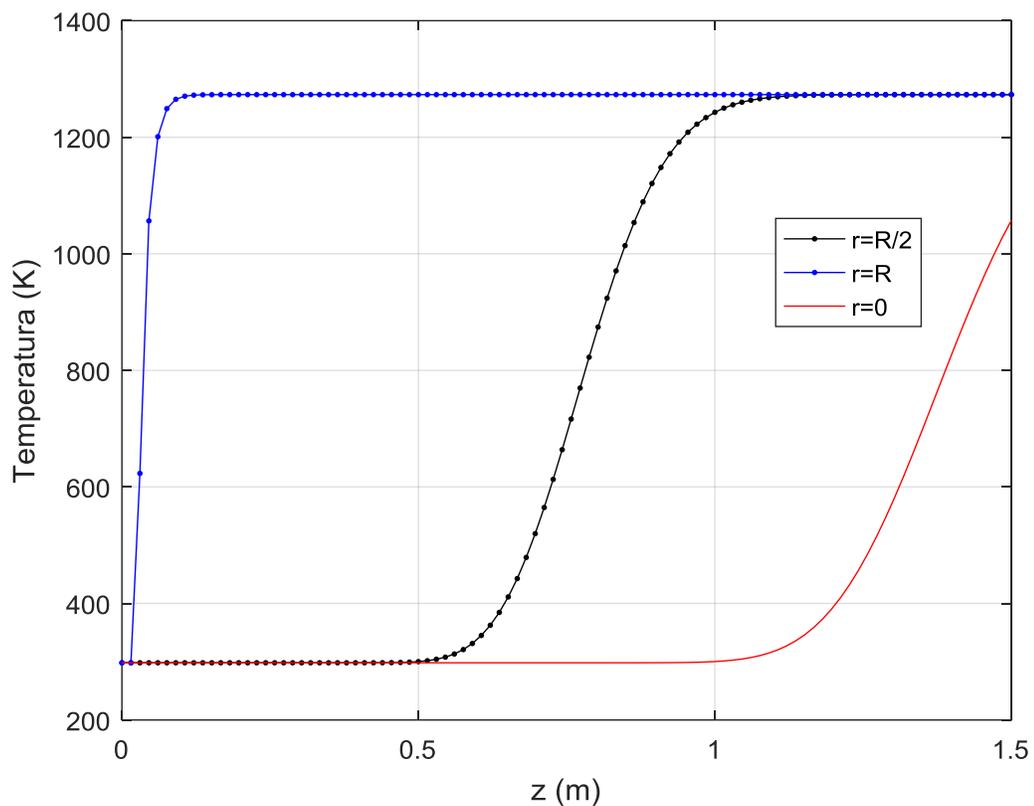
Ahora bien, se presentan los resultados relacionados con el perfil de temperaturas producido al interior del gasificador, para el cual se ilustra su comportamiento en la Gráfica 2, a continuación, presentada.

En esta gráfica se observan los perfiles de temperatura obtenidos para la cama de partículas en un determinado radio, donde se aprecia como la temperatura aumenta de manera directa respecto a la longitud, se evidencia el calentamiento indirecto en la Gráfica 2, ya que se observa el perfil de temperatura marcado y el cambio de las curvas desde la posición más cercana a la pared del reactor hasta la más alejada. Para la construcción de la gráfica se escogieron los radios 0, R/2 y R, a causa de que son los puntos críticos donde la variación de la temperatura muestra comportamientos distantes y para los cuales se puede realizar una comparación detallada, para la posición $r=0$ se observa que al ser la posición más alejada de la pared, ya que esta coordenada se encuentra ubicada justo en el centro del reactor,

⁵³ GARCÍA PATIÑO, Harold Jhair. Modelación De La Gasificación De Biomasa En Un Reactor De Lecho Fijo. Universidad Nacional de Colombia, 2011.

su perfil de temperatura es mucho más marcado que las posiciones equivalentes a $R/2$ y R y para que se produzca el proceso de pirólisis en esta posición alcanzando una temperatura de $473,15\text{K}$, según la Gráfica 2 se logra a una longitud aproximada de $1,3\text{m}$ en el gasificador, mientras que para $r=R/2$ la pirólisis se alcanza a una longitud de $0,7\text{m}$ en el reactor y para la posición $r=R$ la pirólisis se alcanza rápidamente incluso a una longitud del reactor menor a 10 cm .

Gráfica 2. Perfil de temperatura de la cama de partículas a una temperatura de pared de $973,15\text{ K}$.

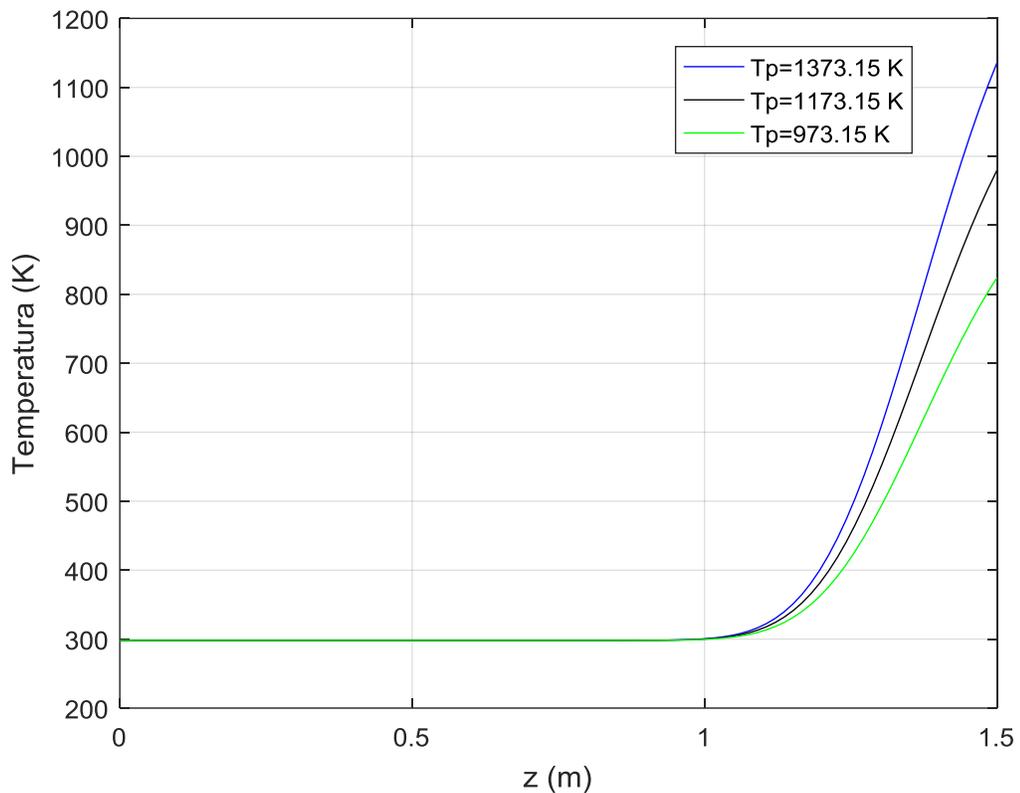


Los resultados obtenidos en la Gráfica 2 son coherentes y permiten confirmar que las suposiciones propuestas para el modelo fueron acertadas y permitieron describir un comportamiento de perfil deseado.

En la Gráfica 3 se muestra el comportamiento de la temperatura a medida que la longitud del gasificador aumenta, el perfil es muy marcado, puesto que se realizó este mismo procedimiento para tres diferentes temperaturas de pared correspondientes a 700°C , 900°C y 1100°C , en la Gráfica 3 se muestra su equivalente en kelvin, las partículas que se encuentran en la posición $r=0$, es decir,

en la mitad del reactor y en su distancia radial equivalente a 0,4m , reaccionarán hasta el instante que la longitud del reactor corresponda a 1,35m, puesto que antes permanecen a temperatura ambiente o incluso a una temperatura muy baja ya que no alcanza la temperatura equivalente a 473,15K la cual es la mínima necesaria para poder iniciar el proceso correspondiente a la pirólisis . Lo que quiere decir que cualquier partícula que se encuentre por encima de esa longitud en esa posición radial, no reaccionará, marcando el perfil de temperaturas.

Gráfica 3. Perfil de temperatura de la cama de partículas en la posición $r=0$ del reactor a diferentes temperaturas de pared.



De la Gráfica 3 también se puede deducir que si el reactor en lugar de 1,5m tuviera una longitud igual a 1m ninguna de las partículas que se encuentran situadas en la zona central del gasificador reaccionaría, como se evidencia en la gráfica, indistintamente de la temperatura de pared proporcionada al reactor este comportamiento se mantendría fijo para la longitud ya mencionada.

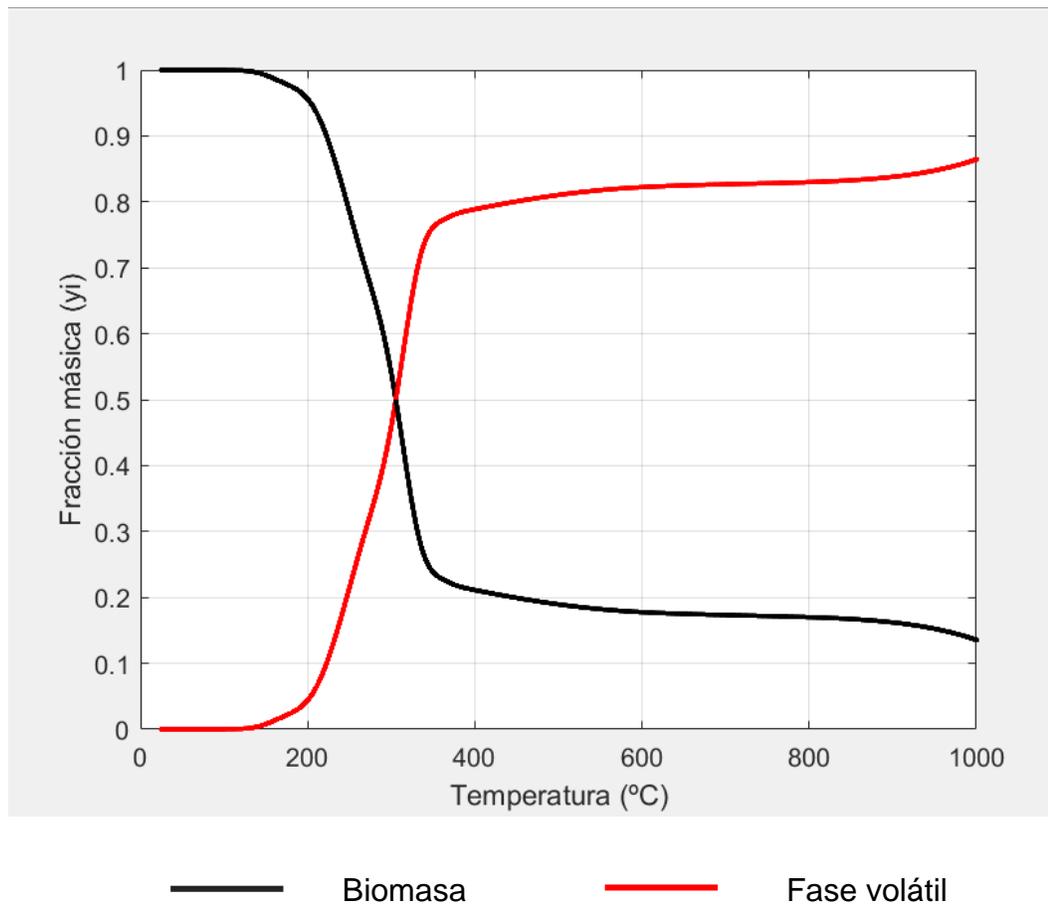
El comportamiento resultante de este fenómeno puede responder a la suposición hecha en el capítulo dos donde se propuso un comportamiento de tipo estacionario

para el gasificador, siendo así que la temperatura del mismo es constante con el tiempo, por consiguiente, de la misma manera lo será el perfil de temperatura, restringiendo el cambio drástico de los resultados obtenidos para el perfil de temperatura en la posición radial equivalente a $r=0$.

4.2 PERFIL DE CONCENTRACIONES

En la Gráfica 4 se encuentra el consumo de biomasa y la formación de fase volátil en donde se puede observar la influencia de la temperatura, se observa que a una temperatura de alrededor 350°C la velocidad de generación de la fase volátil disminuye y a medida que aumenta la temperatura ésta vuelve a aumentar, lo que significa que las altas temperaturas favorecen las reacciones de gasificación.

Gráfica 4. Composición másica de la biomasa y la fase volátil en función de la temperatura

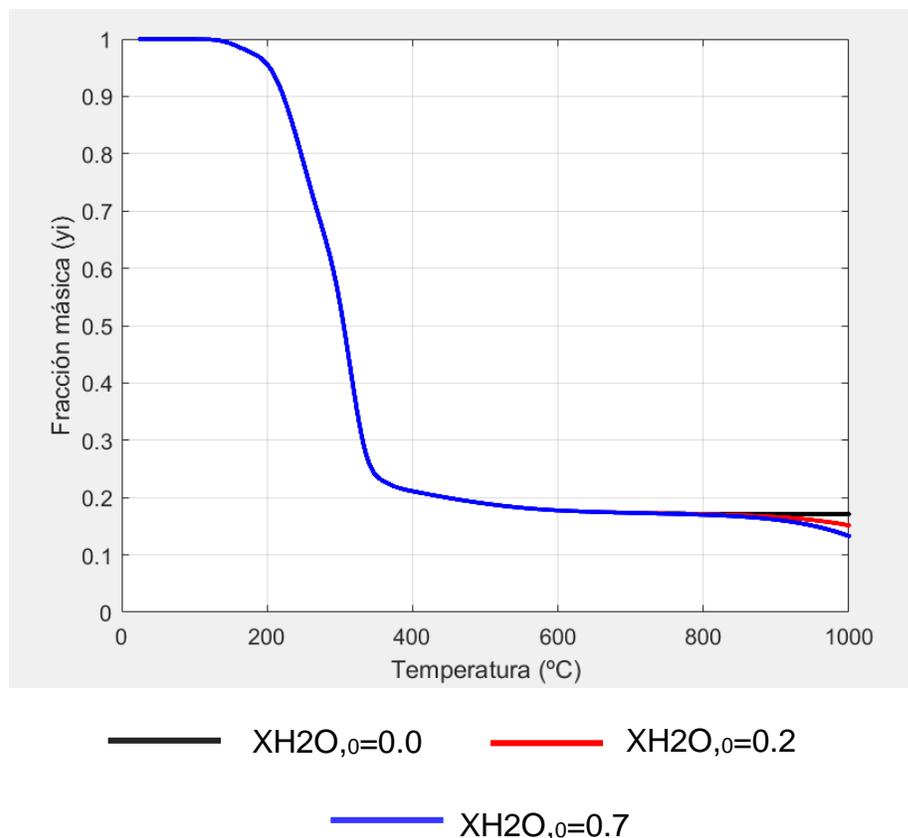


Aunque las altas temperaturas se relacionan directamente con la velocidad de reacción, cuando este proceso se lleva a cabo a temperaturas muy altas se pueden presentar problemas de aglomeración y con ello la disminución de la cantidad de gas combustible producido.⁵⁴

Por otro lado, las altas temperaturas desplazan las reacciones a la formación de CO e H₂ lo que significa que aumenta el poder calorífico del gas de síntesis producido y que la proporción de alquitranes, que es el contaminante, disminuye.⁵⁵

En la Gráfica 5 se muestra la influencia del agente de gasificación en la descomposición de la biomasa, en donde durante todo el proceso de pirólisis que se da hasta temperaturas de alrededor de 550°C. La línea negra muestra sólo el proceso de gasificación que se estabiliza a altas temperaturas pues las reacciones de pirólisis ya no se están dando.

Gráfica 5. Influencia del agente de gasificación en la descomposición de la biomasa.

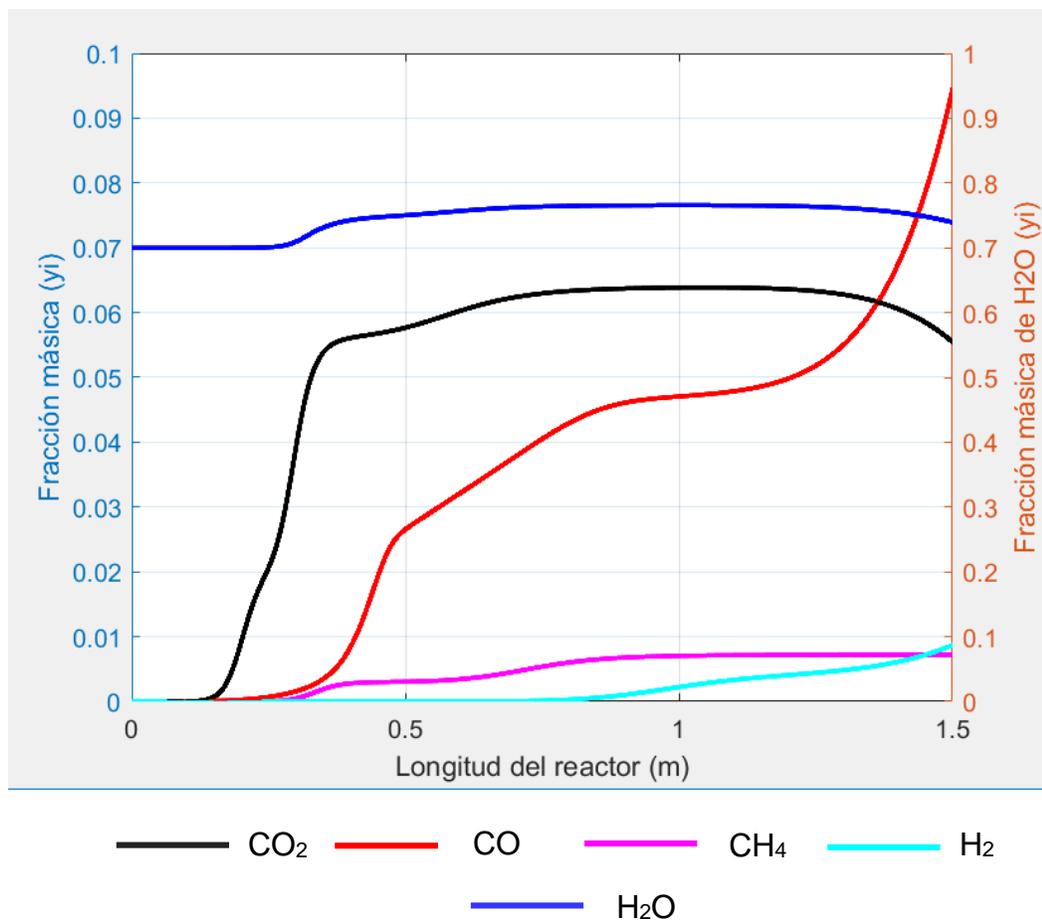


⁵⁴ RINCÓN, Sonia; GÓMEZ, Alexánder y KLOSE, Wolfgang. Gasificación De Biomasa Residual De Procesamiento Agroindustrial. 2011.

⁵⁵ FERNANDEZ GONZALEZ, Jesus, et al. Tecnologías Para El Uso Y Transformación De Biomasa Energética. Ediciones Paraninfo, 2015.

A medida que se aumenta la concentración de agente oxidante se puede ver que a 1000°C la fracción másica de la biomasa disminuye porque promueve que se den las reacciones de gasificación, lo que significa que la conversión de H₂ aumenta y de esta forma incrementando la concentración de hidrógeno en el gas de síntesis, esto producto de la reacción agua - biomasa, lo cual se puede ver en la Gráfica 6 en donde se muestra la fracción másica de los diferentes componentes gaseoso formados que son el CO, H₂O, CO₂, CH₄ e H₂.

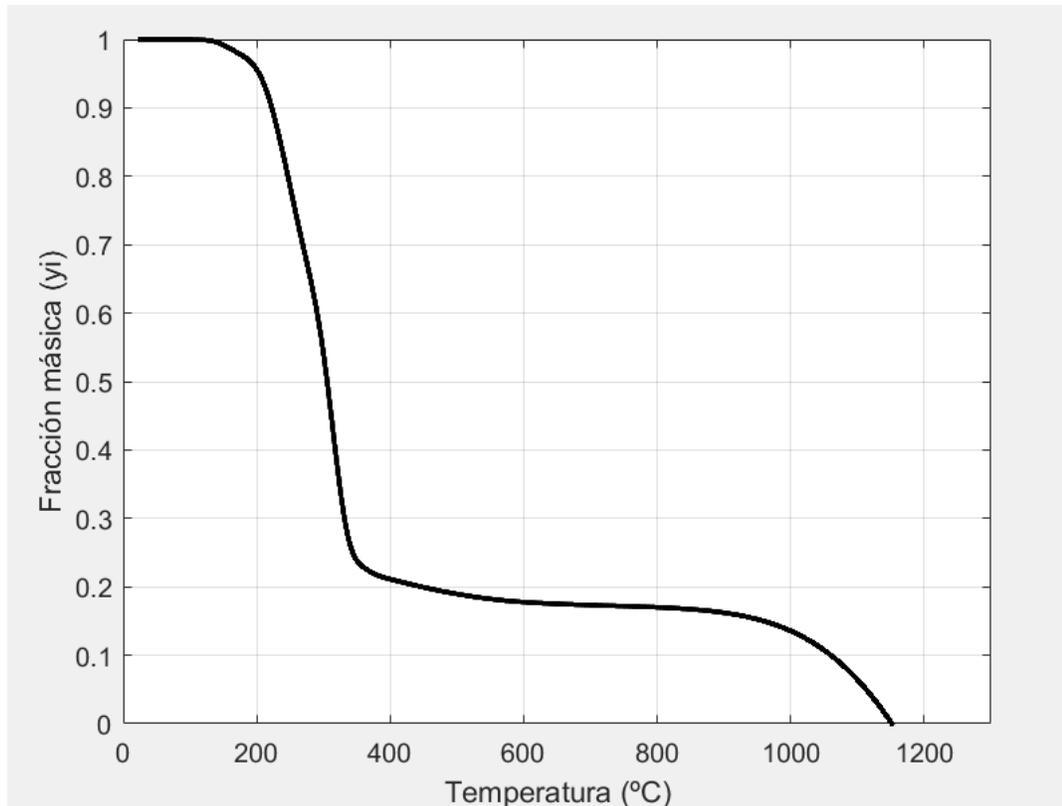
Gráfica 6. Composición másica del gas según la longitud del reactor para $r=R/4$ y $T_p=1000^\circ\text{C}$



Esta gráfica anterior está en función a la temperatura de las partículas en un radio de R/4 con el fin de observar cuál es a influencia en la concentración de CO y H₂ de las reacciones de gasificación que se estudiaron en donde se alcanzan temperaturas de hasta 1000 °C, en donde se puede concluir que a un metro en la longitud del reactor se empiezan a dar las reacciones de gasificación ya que se observa un consumo tanto de H₂O como de CO₂ y a su vez un crecimiento acelerado

de la conversión de los productos de interés de las reacciones de gasificación, el CO y H₂. Debido a que el metano sólo se forma durante el proceso de pirólisis su conversión se estabiliza cuando se alcanzan temperaturas de alrededor de 550°C, lo cual se concluye que se alcanza esta temperatura a una longitud de 0,7m en este radio.

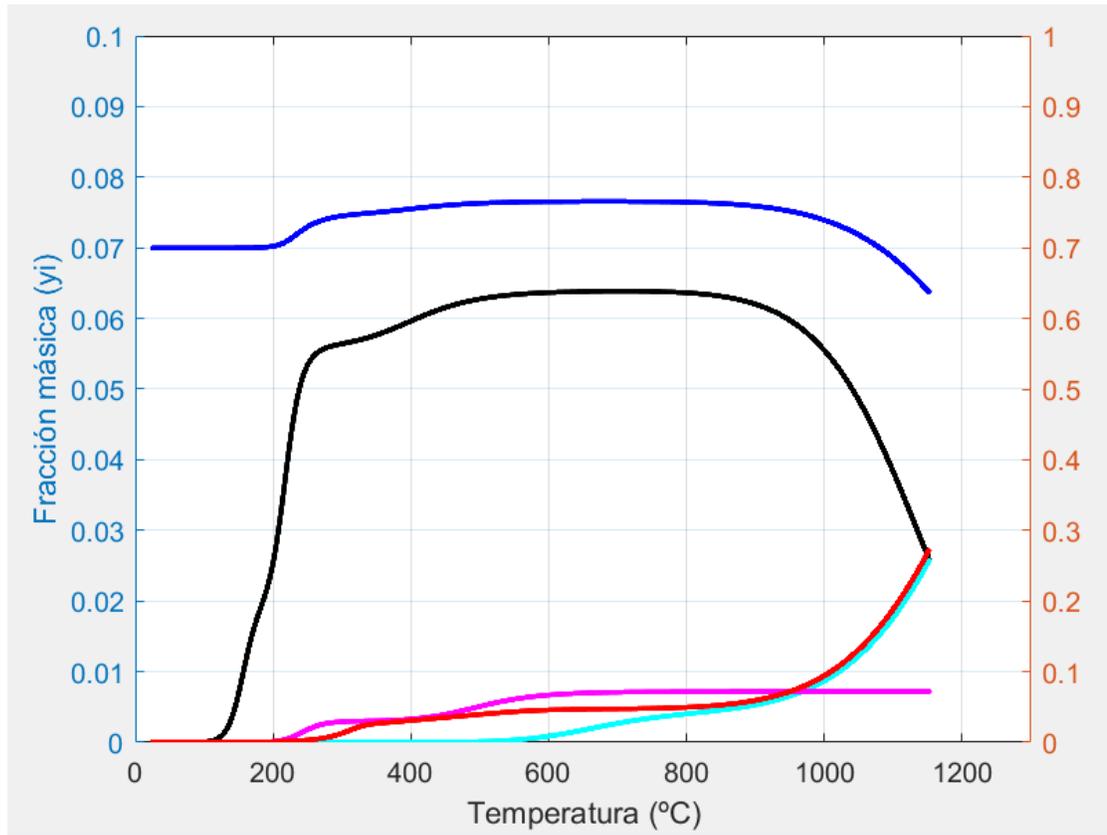
Gráfica 7. Descomposición completa de la biomasa



En la Gráfica 7 se analiza la temperatura requerida para el consumo total de la biomasa, en donde ya no se van a producir más reacciones heterogéneas pero se pueden llegar a producir reacciones homogéneas entre los compuestos, pero estas reacciones no se estudiaron en el presente trabajo.

Ahora bien, en la Gráfica 8 se muestra la conversión máxima de los componentes gaseosos a esta temperatura cuando ya se ha consumido por completo la biomasa, aunque no se consume todo el agente de gasificación esto puede deberse a que no se analizaron todas las reacciones tanto para pirólisis como para la gasificación lo que produce esta desviación con respecto a los datos experimentales.

Gráfica 8. Composición final del gas



4.3 COMPARACIÓN CON LA LITERATURA

Con el fin de validar los resultados obtenidos por el modelo planteado en este trabajo, los datos son comparados con trabajos experimentales de otros autores, esto permite observar que tan cercano el modelo matemático desarrollado es con lo que ocurre dentro de un reactor con calentamiento indirecto.

En esta sección del capítulo se comparan la composición final del gas de síntesis y el perfil de temperatura.

4.3.1 Composición del gas de síntesis. En la tabla 20 se encuentra la comparación de los datos experimentales que fueron obtenidos por Gómez⁵⁶ en el gasificador de lecho fijo con calentamiento indirecto de la Universidad de Kassel, en donde se recalcularon las fracciones del gas libre de agua, tanto el agente de gasificación como el agua que se produce en el proceso de pirólisis. Para el cálculo

⁵⁶ RINCÓN, Sonia; GÓMEZ, Alexander y KLOSE, Wolfgang. Gasificación De Biomasa Residual De Procesamiento Agroindustrial. 2011.

de dicha composición se escogió un radio de R/4, ya que en los puntos cercanos a la pared se dan las reacciones a una velocidad más alta.

Ahora bien, si bien los datos del modelo en esta posición se ajustan a los datos obtenidos experimentalmente existe una desviación que se debe a que, en primer lugar, no se tuvieron en cuenta todas las reacciones que se dan en el proceso de gasificación ya que el agua, el dióxido de carbono, el metano y el hidrógeno reaccionan y esto genera una desviación del método con respecto a los resultados experimentales.

En segundo lugar, no se tuvieron en cuenta las reacciones secundarias tanto del proceso de pirólisis en donde se da la degradación de los alquitranes generados en las reacciones primarias, estos compuestos pesados se degradan en compuestos más simples los cuales corresponden a los mismos gases que son generados, es decir a H₂, CO, CO₂ y CH₄

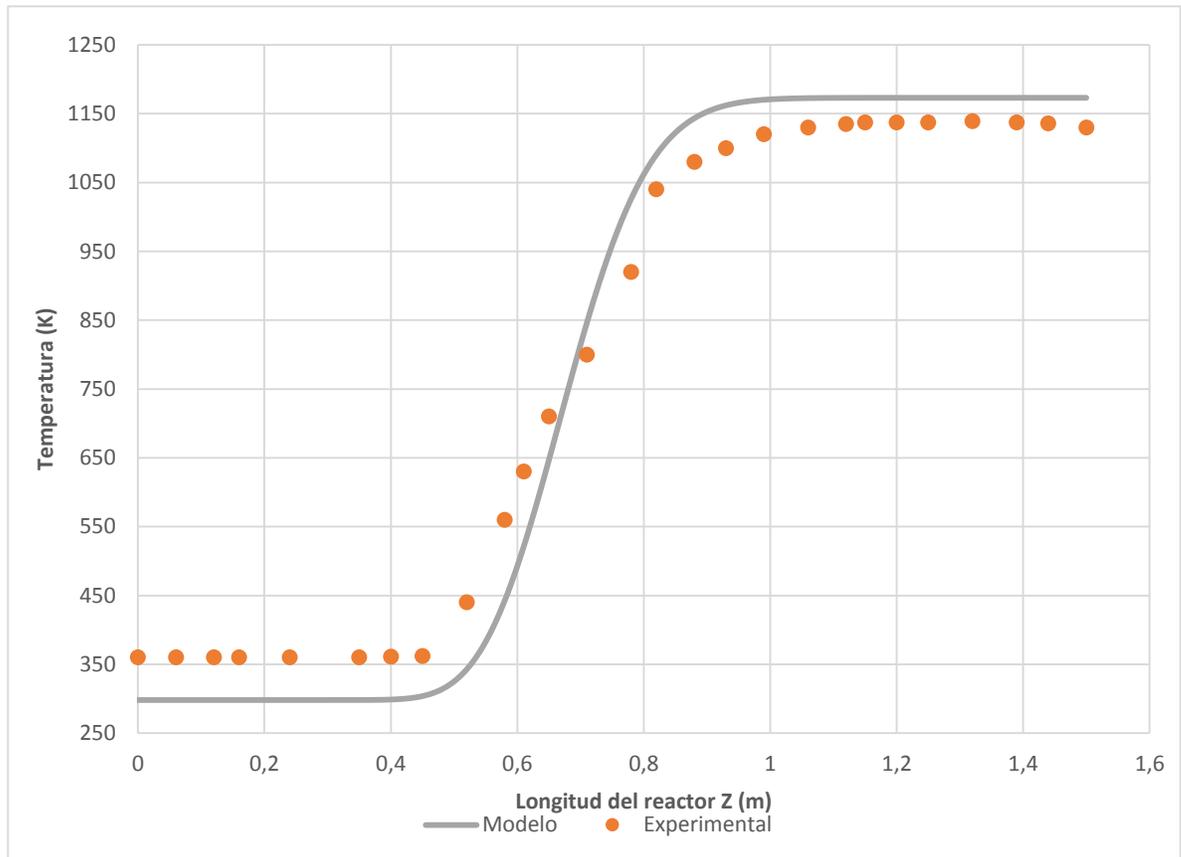
Por último, no se tuvo en cuenta la concentración de alquitranes ya que está disminuye por el efecto las reacciones secundarias, como se mencionó anteriormente, por lo tanto, la desviación es más grande.

Tabla 20. Comparación entre las composiciones experimentales y del modelo, libre de agua.

Especie	Experimental 1110 K	Modelo 1110K	Error (%)
H ₂	0,520	0,4999	3,8653
CO	0,390	0,4086	4,7692
CO ₂	0,065	0,0348	46,461
CH ₄	0,015	0,0567	278,00

4.3.2 Perfil de temperatura. En la literatura⁵⁷ podemos encontrar un perfil de temperatura experimental para un reactor de una longitud equivalente a 1,8 m donde solo se tienen en cuenta las temperaturas para poder obtener las reacciones de pirólisis para un determinado un radio cercano a la pared, la gráfica 9 muestra el perfil de temperatura obtenido donde a menos de 10 cm se generan las reacciones de pirólisis y luego gasificación hasta aproximadamente 800° C, luego se observa el descenso, cuando se llega a una longitud de reactor cercana a 1,2m.

Gráfica 9. Comparación de datos entre la distribución de temperatura axial y la distribución experimental para R/2 del reactor.



La Gráfica 9 corresponde a la comparación de perfil de temperatura del modelo obtenido en el presente trabajo respecto a un proyecto experimental donde se modela un gasificador de lecho fijo con calentamiento indirecto, realizado por Sandra Jensen en el año 2001, el gasificador, como ya se ha referido previamente se encuentra en la Universidad de Kassel en Alemania, en este proyecto se realiza la modelación para un gasificador⁵⁷, el cual incluye procesos tales como secado, pirólisis y gasificación, el modelo es bifásico y bidimensional y el proceso de gasificación que ocurre al interior del reactor es transitorio, además de lo anterior se tienen en cuenta fenómenos como lo son contracción de la partícula, movimiento del lecho resultante y además cambio de velocidad en el gas.

Los resultados del modelo proyectado en el presente escrito para una posición radial equivalente a R/2 y una temperatura de pared de 1000K, comparados con los resultados de la literatura para las mismas condiciones propuestas describen el

⁵⁷ JENSEN, Sandra. Zur Modellierung Eines Indirekt Beheizten Festbettbiomassevergaser. Kassel, 2001.

comportamiento presentado en la gráfica 9, donde el modelo no muestra una gran desviación respecto a la realidad, se señala que, mientras que el modelo para una longitud equivalente a 0m corresponde una temperatura ambiente de 298,15K, como se presentó anteriormente en las condiciones de frontera; la literatura en esta misma posición longitudinal tiene una temperatura de 350K, esto se puede deber al hecho que el modelo matemático está en estado estacionario mientras que en la literatura y en la realidad esto no ocurre, la temperatura cambia con el tiempo, siendo así que al ser un proceso en estado transitorio se va a presentar una acumulación de temperatura, a pesar que en esta posición solo existe intercambio de calor con el ambiente.

Para la zona superior de la Gráfica 9 se observa que la curva del modelo describe una desviación con respecto a la realidad donde se infiere que el modelo alcanza una mayor temperatura en comparación con los datos tomados de la literatura, este comportamiento radica en el hecho que, en el trabajo no se tuvo en cuenta ni se modelaron todos los fenómenos de transferencia de masa, además la naturaleza de las reacciones producidas al interior del gasificador requieren de energía térmica que toman del suministro energético del reactor, es preciso decir que al no tener en cuenta las reacciones secundarias para este modelo, incide en el comportamiento descrito y en la desviación de la gráfica 9.

Por lo demás es preciso decir que el modelo matemático es una primera aproximación a un proceso de gasificación, siendo así que los resultados mostrados aquí corresponden de manera satisfactoria con la realidad del mismo.

5. CONCLUSIONES

- En el presente trabajo se realizó la modelación del proceso de gasificación mediante el método de diferencias finitas con el objetivo de poder determinar los perfiles de temperatura y la composición del gas generado durante el proceso general teniendo en cuenta una serie de consideraciones, siendo así que este modelo responde a una primera aproximación al proceso estudiado, obteniendo resultados satisfactorios.
- El modelo aquí expuesto se puede validar para un reactor sencillo y abierto que opera en estado estable y puede ser utilizado para diferentes tipos de biomasa, que no sea hueso de palma o madera de haya, siempre y cuando se tengan datos cinéticos experimentales de estas biomásas, el modelo es congruente y arroja datos aproximados que permiten comprender los fenómenos ocurridos durante la gasificación.
- A nivel axial, se puede observar desviación al inicio que corresponde aproximadamente a 70K, mientras que al final de la curva el alcance de la temperatura en el reactor depende de la temperatura de pared inicial, presentándose una desviación de aproximadamente 40K, esto debido a la naturaleza de las reacciones que ocurren al interior del gasificador y al estado estacionario que el modelo presenta.
- La comparación de la composición de la fase gaseosa, libre de agua, a una temperatura dada muestra la desviación que se tiene con respecto a lo que se obtiene experimentalmente, encontrando errores para el H₂ de 3,87%, para el CO 4,77%, para el CO₂ 46,46% y para el CH₄ de 278%, este último porcentaje se debe a que en el modelo la producción de metano sólo se dio en el proceso de pirólisis por las reacciones primarias, pero en la experimentación el metano aumenta su concentración debido a las reacciones secundarias de la pirolisis y las reacciones homogéneas de la gasificación.
- El modelo permite verificar que la conversión al interior del gasificador se encuentra en función de la posición axial de la partícula, confirmando que la composición del flujo de gas varía en relación con su ubicación, comportamiento que se presenta debido a que la velocidad radial del gas es constante.

6. RECOMENDACIONES

De acuerdo con lo desarrollado en este proyecto, se genera la necesidad de nuevos aportes para la realización del modelo matemático y para la parte conceptual como se presenta a continuación, esto con motivo de continuar la línea de investigación y obtener mejores resultados en futuros proyectos referentes a este campo.

- Se recomienda hacer un modelo matemático en estado transitorio analizando la variación de la temperatura en la pared a través del tiempo, teniendo en cuenta la acumulación de calor al interior del gasificador.
- En cuanto a la presión, se considera que debe realizarse un modelo haciendo que esta variable no sea constante, de manera que se pueda calcular las caídas de presión y obtener un balance de momento.
- Se recomienda otro tipo de agente gasificante y gas de arrastre, de manera que se pueda realizar una comparación de resultados con el presente proyecto.
- Respecto a las cinéticas de los procesos de gasificación y pirólisis se recomienda hacer un proyecto experimental que permita determinar las cinéticas del proceso de pirólisis para otro tipo de biomasa residual como el cisco de café.
- Se recomienda realizar un proyecto con un gasificador de lecho fijo con calentamiento directo y observar las concentraciones de gas de síntesis obtenidas, además de la calidad del mismo.

BIBLIOGRAFÍA

BASU, Prabir. Biomass Gasification, Pyrolysis and Torrefaction : Practical Design and Theory. Amsterdam: Academic Press, 2013.

_____. Chapter 3 - Pyrolysis and Torrefaction. En: BASU,Prabir ed. Biomass Gasification and Pyrolysis. Boston: Academic Press, 2010. 65-96 p.

BRANDT, Jack C. and DONAHUE, Walker S. Pyrolysis : Types, Processes, and Industrial Sources and Products. New York: Nova Science Publishers, Inc, 2009.

BULL, Doug. Performance improvements to a fast internally circulating fluidized bed (FICFB) biomass gasifier for combined heat and power plants ; University of Canterbury, 2008. p. 56-58.

ÇENGEL, Yunus A. and BOLES, Michael A. Termodinámica (6a. ed.). Madrid, ES: McGraw-Hill España, 2011.

CORBERAN, J. M. and ROYO, R. Transmisión de calor multidireccional y transitoria ;

DAGWA, I. M. and IBHADODE, A. O. Some physical and mechanical properties of palm kernel shell (PKS). En: BOTSWANA JOURNAL OF TECHNOLOGY. -01-01.vol. 17, no. 2,

DRAPCHO, Caye; NHUAN, Nghiem Phu and WALKER, Terry H. Biofuels engineering process technology. New York [u.a.]: McGraw-Hill, 2008. 160-180 p.

ELIAS CASTELLS, Xavier. Aprovechamiento De Residuos Agrícolas Y Forestales. En: AnonymousReciclaje de residuos industriales. Madrid: Ediciones Díaz de Santos, 2012a. 702 p.

_____. Biomasa y bioenergía. Madrid, ES: Ediciones Díaz de Santos, 2012.

_____. Tratamiento y valorización energética de residuos. Madrid, ES: Ediciones Díaz de Santos, 2012b. ISBN 9788499691411

ELÍAS CASTELLS, Xavier and VELO, Enric. La gasificación. Madrid, ES: Ediciones Díaz de Santos, 2012. ISBN 9788499691305

FELDER, Richard M. and ROUSSEAU, Ronald W. Principios Elementales de los Procesos Químicos. Tercera ed. USA: Limusa Wiley, 2004. 100 p.

FERNANDEZ GONZALEZ, Jesus, *et al.* Tecnologías para el uso y transformación de biomasa energética. Ediciones Paraninfo, 2015.

FOGLER, H. Scott. Elements of chemical reaction engineering. 4th ed., 1. print. ed. Upper Saddle River, NJ: Pearson Education Internat, 2006. ISBN 9780131278394

Forest Products Laboratory. Wood Handbook
Wood as an Engineering Material. USA: 2010. 4-13 p.

Fortalecimiento de la Capacidad en Energía Renovable para América Central. Manuales sobre energía renovable: Biomasa/ Biomass. 2002.

GARCIA PATIÑO, Harold Jhair. Modelación de la gasificación de biomasa en un reactor de lecho fijo; Universidad Nacional de Colombia, 2011.

GOLDSTEIN, R. J., *et al.* Heat transfer—A review of 2005 literature. En: INTERNATIONAL JOURNAL OF HEAT AND MASS TRANSFER. vol. 53, no. 21, p. 4397-4447

GÓMEZ, Alexánder; KLOSE, Wolfgang and RINCÓN, Sonia. Pirólisis de Biomasa. Cuesco de palma de aceite. Kassel: Kassel university press, 2008.

Green Facts. Consenso científico sobre el cambio climático. [Consultado el Noviembre 27,2017]. Disponible en: <https://www.greenfacts.org/es/cambio-climatico-ie3/cambio-climatico-ie3-greenfacts.pdf>

INSTITUTO COLOMBIANO DE NORMAS TÉCNICAS Y CERTIFICACIÓN. Referencias bibliográficas. Contenido, forma y estructura. NTC 5613. Bogotá D.C. El instituto 2008. 33p. c.

_____. Documentación. Presentación de tesis, trabajos de grado y otros trabajos de investigación. NTC 1486. Bogotá D.C.: El instituto 2008, 2008. 36

_____. Referencias documentales para fuentes de información electrónicas. NTC 4490. Bogotá D.C.: El instituto, 1998. 23

Instituto para la Diversificación y Ahorro de la Energía. Biomasa: Gasificación. Madrid: 2007. 9-11 p.

JENSEN, Sandra. Zur Modellierung eines indirekt beheizten Festbettbiomassevergasers. Kassel, 2001.

KIEL, H. A., *et al.* Primary measures to reduce tar formation in fluidised-bed biomass gasifiers. Final SDE project P1999-012. ECN, 2004.

MÉTODO DE DIFERENCIAS FINITAS Y EL USO DE MATLAB PARA ECUACIONES ELÍPTICAS SOBRE CONDUCTIVIDAD TÉRMICA. Septiembre,. [Consultado el Noviembre 10,2017]. Disponible en: <https://www.uns.edu.pe/recursos/investigaciones/20.pdf>

METROLOGY AND TESTING CZECH OFFICE FOR STANDARDS. Surface active agents - Determination of amide nitrogen content - Potentiometric titration; Amendment AC. Apr 25,.

MONTOYA CAMPUZANO, Maria Isabel. Modelación Matemática del Transporte y Transformaciones del Nitrógeno Procedente de la Aplicación Agrícola de Purines en la Zona No Saturada del Suelo. Influencia de las Variables Relacionadas con la Estructura del Terreno. Universidad Politécnica de Valencia, 2008. p. 8.

NOGUES, Fernando Sebastian; GARCIA-GALINDO, Daniel and REZEU, Adeline. Energía de la biomasa (volumen I). Zaragoza: Pressas Universitarias de Zaragoza, 2010. 77 p.

OJEDA, Jorge B. Uso del Cuesco de la Palma Africana en la fabricación de Adoquines y Bloques de Mampostería. En: SEVENTH LACCEI LATIN AMERICAN AND CARIBBEAN CONFERENCE FOR ENGINEERING AND TECHNOLOGY. Jun 5,.

OKPALA,D. C. Palm kernel shell as a lightweight aggregate in concrete. 1990. 291-296

PEÑA MONTAÑO, Ivonne Vanessa and REYES FONSECA, Maria Camila. Diseño conceptual de un proceso de gasificación de biomasa residual lignocelulósica en reactores de lecho fluidizado. Fundación Universidad de América, 2016.

PERRY, Robert Howard. Perry's chemical engineers' handbook. 8. ed. ed. New York: McGraw-Hill, 2008.

POLING, Bruce E.; O'CONNELL, John P. and PRAUSNITZ, John M. The properties of gases and liquids. 5. ed ed. Boston: McGraw-Hill, 2001. ISBN 9780071189712

RAVEENDRAN, K.; GANESH, Anuradda and KHILAR, Kartic C. Pyrolysis characteristics of biomass and biomass components. 1996. 987-998

RIERA, Pere, *et al.* Manual de economía ambiental y de los recursos naturales. Tercera ed. 2016.

RINCON MARTINEZ, Jose Maria and SILVA LORA, Electro Eduardo. Bioenergía: Fuentes, conversión y sustentabilidad. La red iberoamericana de aprovechamiento de residuos orgánicos en producción de energía, 2014. 58-60 p.

RINCÓN, Sonia; GÓMEZ, Alexander and KLOSE, Wolfgang. Gasificación de biomasa residual de procesamiento agroindustrial. 2011.

RODRIGUEZ E, Miguel. Diseño de un módulo de medición de cilindros para una fresadora vertical CNC. Instituto Tecnológico de Costa Rica, 2012. p. 21.

RUMMER, Bernhard; PETEK, Josef and STAUDINGER, Gernot. Trocknung und Pyrolyse eines Einzelpartikels - Modellrechnung und experimentelle Verifikation. En: VDI-BERICHT. p. 265-276

SAFF, Edward B. and KENT, Nagle R. Ecuaciones diferenciales y problemas con valores en la frontera. Pearson, 2004. 639-642 p.

SANCHEZ BRAVO, Alvaro. Ciudades, medio ambiente y sostenibilidad. España: ArCiBel Editores, 2007.

SANCHEZ LOPEZ, Ismael. Análisis comparativo de las tecnologías de valorización de residuos basadas en la gasificación. España: 2014. 14-16

SCHLÜNDER, Ernst-Ulrich and TSOTSAS, Evangelos. Wärmeübertragung in Festbetten, durchmischten Schüttgütern und Wirbelschichten. Stuttgart: Georg Thieme-Verlag, 1988.

SEPULVEDA SOTO, Alonso. Física Matemática. Colombia: Universidad de Antioquia, 2009. 78 p.

STEPHENSON, G. Introducción a las ecuaciones en derivadas parciales. Londres, Inglaterra: Reverté SA, 1982. 25 p.

Unidad de Planeación Minero Energética. Integración de las energías renovables no convencionales en Colombia; Bogotá: La Imprenta Editores S.A., 2015. 43-47 p.

Valter Francescato, Eliseo Antonini – AIEL Italian Agriforestry Energy Association. Manual de combustibles de madera. 2008.

VORTMEYER, D. and HAIDEGGER, E. Discrimination of three approaches to evaluate heat fluxes for wall-cooled fixed bed chemical reactors. En: CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE. vol. 46, no. 10, p. 2651-2660

YARKO NIÑO, C. Clase10 FD 3. [Consultado el Nov 29,2017]. Disponible en:
<https://es.scribd.com/document/247978524/Clase10-FD-3>

	FUNDACIÓN UNIVERSIDAD DE AMÉRICA	Código:
	PROCESO: GESTIÓN DE BIBLIOTECA	Versión 0
	Autorización para Publicación en el Repositorio Digital Institucional – Lumieres	Julio - 2016

AUTORIZACIÓN PARA PUBLICACIÓN EN EL REPOSITORIO DIGITAL INSTITUCIONAL LUMIERES

Nosotras, **Paula Alejandra Acosta Camargo** y **Laura Alejandra Chipatecua Hernández** en calidad de titulares de la obra **Modelación del proceso de gasificación de biomasa en un reactor de lecho fijo con calentamiento indirecto**, elaborada en el año 2017, autorizamos al **Sistema de Bibliotecas de la Fundación Universidad América** para que incluya una copia, indexe y divulgue en el Repositorio Digital Institucional – Lumieres, la obra mencionada con el fin de facilitar los procesos de visibilidad e impacto de la misma, conforme a los derechos patrimoniales que nos corresponden y que incluyen: la reproducción, comunicación pública, distribución al público, transformación, en conformidad con la normatividad vigente sobre derechos de autor y derechos conexos (Ley 23 de 1982, Ley 44 de 1993, Decisión Andina 351 de 1993, entre otras).

Al respecto como Autores manifestamos conocer que:

- La autorización es de carácter no exclusiva y limitada, esto implica que la licencia tiene una vigencia, que no es perpetua y que los autores pueden publicar o difundir su obra en cualquier otro medio, así como llevar a cabo cualquier tipo de acción sobre el documento.
- La autorización tendrá una vigencia de cinco años a partir del momento de la inclusión de la obra en el repositorio, prorrogable indefinidamente por el tiempo de duración de los derechos patrimoniales de los autores y podrá darse por terminada una vez los autores lo manifiesten por escrito a la institución, con la salvedad de que la obra es difundida globalmente y cosechada por diferentes buscadores y/o repositorios en Internet, lo que no garantiza que la obra pueda ser retirada de manera inmediata de otros sistemas de información en los que se haya indexado, diferentes al Repositorio Digital Institucional – Lumieres de la Fundación Universidad América.
- La autorización de publicación comprende el formato original de la obra y todos los demás que se requiera, para su publicación en el repositorio. Igualmente, la autorización permite a la institución el cambio de soporte de la obra con fines de preservación (impreso, electrónico, digital, Internet, intranet, o cualquier otro formato conocido o por conocer).
- La autorización es gratuita y se renuncia a recibir cualquier remuneración por los usos de la obra, de acuerdo con la licencia establecida en esta autorización.
- Al firmar esta autorización, se manifiesta que la obra es original y no existe en ella ninguna violación a los derechos de autor de terceros. En caso de que el trabajo haya sido financiado por terceros, los autores asumen la responsabilidad del cumplimiento de los acuerdos establecidos sobre los derechos patrimoniales de la obra.
- Frente a cualquier reclamación por terceros, los autores serán los responsables. En ningún caso la responsabilidad será asumida por la Fundación Universidad de América.
- Con la autorización, la Universidad puede difundir la obra en índices, buscadores y otros sistemas de información que favorezcan su visibilidad.

Conforme a las condiciones anteriormente expuestas, como autores establecemos las siguientes condiciones de uso de nuestra obra de acuerdo con la **licencia Creative Commons** que se señala a continuación:

 Fundación Universidad de América	FUNDACIÓN UNIVERSIDAD DE AMÉRICA	Código:
	PROCESO: GESTIÓN DE BIBLIOTECA	Versión 0
	Autorización para Publicación en el Repositorio Digital Institucional – Lumieres	Julio - 2016

	Atribución- no comercial- sin derivar: permite distribuir, sin fines comerciales, sin obras derivadas, con reconocimiento del autor.	X
	Atribución – no comercial: permite distribuir, crear obras derivadas, sin fines comerciales con reconocimiento del autor.	
	Atribución – no comercial – compartir igual: permite distribuir, modificar, crear obras derivadas, sin fines económicos, siempre y cuando las obras derivadas estén licenciadas de la misma forma.	

Licencias completas: http://co.creativecommons.org/?page_id=13

Siempre y cuando se haga alusión de alguna parte o nota del trabajo, se debe tener en cuenta la correspondiente citación bibliográfica para darle crédito al trabajo y a sus autores.

De igual forma como autores autorizamos la consulta de los medios físicos del presente trabajo de grado así:

AUTORIZAMOS	SI	NO
La consulta física (sólo en las instalaciones de la Biblioteca) del CD-ROM y/o Impreso	X	
La reproducción por cualquier formato conocido o por conocer para efectos de preservación	X	

Información Confidencial: este Trabajo de Grado contiene información privilegiada, estratégica o secreta o se ha pedido su confidencialidad por parte del tercero, sobre quien se desarrolló la investigación. En caso afirmativo expresamente indicaremos, en carta adjunta, tal situación con el fin de que se respete la restricción de acceso.	SI	NO
		X

Para constancia se firma el presente documento en Bogotá, a los 8 días del mes de febrero del año 2018.

LOS AUTORES:

Autor 1

Nombres	Apellidos
Paula Alejandra	Acosta Camargo
Documento de identificación No	Firma
1015456600	

Autor 2

Nombres	Apellidos
Laura Alejandra	Chipatecua Hernández
Documento de identificación No	Firma
1018477300	