

**MODELO MATEMÁTICO DE UN REACTOR DE LECHO FIJO PARA EL
PROCESO DE PIRÓLISIS DEL CUESCO DE PALMA ACEITERA**

**JUANITA CAROLINA CONTRERAS IZQUIERDO
JOSE LUIS TATIS ARRIETA**

**Proyecto de investigación para optar el título de
INGENIERO QUÍMICO**

Director

**Libardo Mendoza Geney
Ingeniero Mecánico**

Codirector

**Juan Camilo Cely Garzón
Ingeniero Químico**

**FUNDACIÓN UNIVERSIDAD DE AMÉRICA
FACULTAD DE INGENIERÍAS
PROGRAMA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BOGOTA D.C**

2022

NOTA DE ACEPTACIÓN

Nombre
Firma del presidente Jurado

Nombre
Firma del Jurado

Nombre
Firma del Jurado

DIRECTIVOS DE LA UNIVERSIDAD

Presidente de la Universidad y Rector del claustro

Dr. MARIO POSADA GARCÍA PEÑA

Consejo Institucional

Dr. LUIS JAIME POSADA GARCÍA PEÑA

Vicerrectora Académica y de Investigaciones

Dra. ALEXANDRA MEJÍA GUZMÁN

Vicerrector Administrativo y Financiero

Dr. RICARDO ALFONSO PEÑARANDA CASTRO

Secretario General

Dr. JOSÉ LUIS MASÍAS RODRÍGUEZ

Decana Facultad de Ingeniería

Dra. NALINY PATRICIA GUERRA PRIETO

Directora Programa Ingeniería Química

Ing. NUBIA LILIANA BECERRA OSPINA

AGRADECIMIENTOS

Quiero agradecer en primer lugar a mi familia, amigos y pareja que estuvieron incondicionalmente al lado de este proyecto.

A mi director Libardo Mendoza y al co-director Juan Cely, quienes ayudaron a pesar de los inconvenientes y siempre estuvieron al frente de este proyecto.

A mi compañero de trabajo Jose Tatis quien ha puesto su empeño y motivación para alcanzar esta meta tan importante y apoyarnos mutuamente en los momentos más difíciles, también agradecer al Ing. Santiago Giraldo quien ayudó hasta al final brindando apoyo y fuerza con su gran conocimiento en programación.

y por último a todos aquellos que brindaron tiempo, palabras y fuerzas para seguir adelante.

AGRADECIMIENTOS

Quiero agradecer en primer lugar a Dios por permitirme desarrollar y finalizar este trabajo de grado con éxito.

También quiero agradecer a mi familia, aquellos egresados y compañeros de la Universidad De América por brindar su apoyo, sugerencias y recomendaciones en el proyecto.

A mi director Libardo Mendoza y al codirector Juan Cely, quienes nos han brindado su atención y orientación en el desarrollo de este trabajo.

A mi compañera de trabajo Juanita Contreras quien ha puesto su empeño y motivación para lograr esta meta, convirtiéndose en el complemento perfecto para poder llevar a cabo este trabajo de grado, con sus capacidades y habilidades me ayudó a superar cualquier adversidad presentada.

Al Ing. Luis Ángel Quiroz Guzmán, quien nos dio ese aporte incondicional en el desarrollo de la programación para las ecuaciones hasta el final.

Y por último a todos aquellos que nos han brindado aliento y palabras de fuerza para seguir luchando por este objetivo alcanzado.

Las directivas de la Universidad de América, los jurados calificadores y el cuerpo docente, no son responsables por los criterios e ideas expuestas en el presente documento, estos corresponden únicamente a los autores

TABLA DE CONTENIDO

	pág.
RESUMEN	16
INTRODUCCIÓN	17
OBJETIVOS	19
1. FUNDAMENTOS TEÓRICOS	20
1.1. Biomasa	21
<i>1.1.1. Lignina</i>	<i>21</i>
<i>1.1.2. Hemicelulosa</i>	<i>22</i>
<i>1.1.3. Celulosa</i>	<i>23</i>
<i>1.1.4. Lignocelulosa</i>	<i>24</i>
1.2. Torrefacción	25
1.3. Pirólisis	26
<i>1.3.1. Parámetros del proceso de pirólisis</i>	<i>27</i>
1.4. Equipos de reacción para la conversión de la biomasa	28
<i>1.4.1. Reactor de lecho fijo</i>	<i>28</i>
<i>1.4.2. Reactor de lecho fluidizado</i>	<i>29</i>
<i>1.4.3. Horno rotatorio</i>	<i>30</i>
1.5. Sistema de calentamiento	31
<i>1.5.1. Calentamiento directo</i>	<i>31</i>
<i>1.5.2. Calentamiento indirecto</i>	<i>32</i>
<i>1.5.3. Calentamiento con biomasa</i>	<i>33</i>
1.6. Sector palmicultor en Colombia	34
1.7. Conclusiones parciales del capítulo No. 1	38
2. CARACTERIZACIÓN FISICOQUÍMICA DE LA BIOMASA	39
2.1. Cuesco de palma	39
2.2. Características fisicoquímicas	43
2.3. Conclusiones parciales del capítulo No. 2	46

3. FORMULACIÓN DE LAS ECUACIONES DE MASA Y ENERGÍA DE LAS ESPECIES EN EL PROCESO DE PIRÓLISIS EN UN REACTOR DE LECHO FIJO	48
3.1. Solución del modelo matemático	48
3.2. Interfaz de python	48
3.3. Cinética de reacción	51
3.4. Balance de energía general	58
3.5. Dispersión	59
3.5.1. <i>Conducción de calor</i>	59
3.5.2. <i>Convección de calor</i>	60
3.6. Descripción del proceso	61
3.6.1. <i>Fase gaseosa</i>	62
3.6.2. <i>Fase sólida</i>	64
3.7. Balance por especie	66
3.8. Condiciones de frontera	70
3.9. Conclusiones parciales del capítulo No. 3	71
4. SOLUCIONAR LAS ECUACIONES DE GOBIERNO DEL PROCESO DE PIRÓLISIS EN EL REACTOR DE LECHO FIJO	73
4.1. Ecuaciones Auxiliares	73
4.2. Fase gaseosa	73
4.2.1. <i>Capacidad Calorífica</i>	74
4.2.2. <i>Viscosidad dinámica</i>	75
4.2.3. <i>Conductividad Térmica</i>	77
4.2.4. <i>Densidad</i>	78
4.3. Fase Sólida	78
4.4. Conductividad térmica efectiva	79
4.5. Transferencia de masa y calor	79
4.5.1. <i>Coeficiente de transferencia de masa y calor entre las fases presentes:</i>	79
4.6. Método de diferencias finitas	81

4.6.1. <i>Esquema de diferencias finitas</i>	81
4.6.2. <i>Discretización de la cinética de reacción para las especies</i>	85
4.6.3. <i>Discretización para el balance de energía</i>	87
4.7. Grados de libertad	93
4.9. Conclusiones parciales del capítulo No. 4	93
5.1. Perfil de temperatura bidimensional	95
5.2. Análisis de compuestos generados para la mezcla de biomasa	97
5.2.1. <i>Alquitranes</i>	98
5.2.2. <i>Hidrógeno</i>	99
5.2.3. <i>Dióxido de carbono</i>	101
5.2.4. <i>Monóxido de carbono</i>	102
5.2.5. <i>Agua</i>	103
5.2.6. <i>Metano</i>	104
5.3. Perfiles de fracciones másicas para la mezcla con respecto a longitud y tiempo	105
5.4. Comparación de resultados	107
6. CONCLUSIONES	117
BIBLIOGRAFÍA	119

LISTA DE FIGURAS

	pág.
Figura 1. Procesos de transformación de biomasa	21
Figura 2. Ejemplo de una molécula de lignina	22
Figura 3. Ejemplo de una molécula de Hemicelulosa	23
Figura 4. Ejemplo de una molécula de Celulosa	24
Figura 5 Esquema de la lignocelulosa	25
Figura 6. Productos de pirólisis	27
Figura 7. Estructura de un Reactor de lecho fijo	29
Figura 8. Estructura de un Reactor de Lecho Fluidizado	30
Figura 9. Esquema de horno rotatorio	31
Figura 10. Sistema de calentamiento directo	32
Figura 11. Sistema de calentamiento indirecto	33
Figura 12. Distribución geográfica de la producción de aceite de palma en Colombia	35
Figura 13. Fruta de la palma aceitera y el racimo	40
Figura 14. Diagrama de bloque del proceso de extracción de aceite	41
Figura 15. Tendencia de Python en comparación a Java	49
Figura 16. Notebook de colabarity	50
Figura 17. Esquema del proceso de pirólisis	53
Figura 18. Comparación elemental para diferentes biomosas.	56
Figura 19. Flujo de corrientes de entrada y salida para el esquema del reactor de lecho fijo	59
Figura 20. Interacción de partículas dentro del reactor de lecho fijo	60
Figura 21. Esquema del proceso de producción	62
Figura 22. Corte del reactor tubular y condiciones de frontera	71
Figura 23. Secuencia lógica para el desarrollo del modelo matemático	84
Figura 24. Malla bidimensional para los nodos del balance de energía	87
Figura 25. Perfil de temperatura para el modelo bidimensional con las temperaturas del gas y sólido con respecto a las dimensiones	96
Figura 26. Progresión de alquitranes en el reactor (Tolueno)	99
Figura 27. Progresión de Hidrógeno en el reactor	100
Figura 28. Progresión de dióxido de carbono en el reactor	102
Figura 29. Progresión de monóxido de carbono en el reactor	103
Figura 30. Progresión de agua en el reactor	104

Figura 31. Progresión de metano en el reactor	105
Figura 32. Progresión de componentes en el reactor con respecto al tiempo.	106
Figura 33. Progresión de componentes en el reactor con respecto a la longitud del reactor.	107
Figura 34. Comparación de modelos de acuerdo la degradación de biomasa	110
Figura 35. Comparación de alquitranes frente a otros modelos en un rango de temperatura	111
Figura 36. Comportamiento del hidrógeno frente a la temperatura y otros modelos	112
Figura 37. Comportamiento de metano frente a la temperatura y otros modelos	113
Figura 38. Comportamiento del agua de frente a la temperatura y otros modelos	114
Figura 39. Comportamiento del dióxido de carbono frente a la temperatura y otros modelos	115
Figura 40. Comportamiento del monóxido de carbono frente a la temperatura y otros modelos	116

LISTA DE TABLAS

	pág.
Tabla 1. Área sembrada y producción en Colombia (miles de hectáreas) 2017 y 2018	35
Tabla 2. Costo de producción por hectárea del sector palmero para los años 2016, 2017 y 2018	36
Tabla 3. Estudio de los referentes de la biomasa con respecto al proceso de pirolisis y propiedades fisicoquímicas (cuesco de palma de aceite)	41
Tabla 4. Características fisicoquímicas del cuesco de la palma aceitera	43
Tabla 5. Características del reactor de lecho fijo para el proceso de pirolisis	45
Tabla 6. Propiedades físicas estructurales de la biomasa	46
Tabla 7. Parámetros para la cinética de reacción en el proceso termoquímico de madera de haya	54
Tabla 8. Comparación de la energía de activación de la degradación de lignina, celulosa y hemicelulosa de la madera con respecto al cuesco de palma	57
Tabla 9. Coeficientes para la capacidad calorífica	74
Tabla 10. Coeficientes para la capacidad calorífica tolueno	75
Tabla 11. Constantes para componentes volátiles	76
Tabla 12. Coeficientes para la conductividad térmica.	77
Tabla 13. Fórmulas para las derivadas de diferencias finitas de primer orden paso hacia adelante.	82
Tabla 14. Valores de las fracciones másicas según el número de iteraciones	101
Tabla 15. Comparación de modelos con respecto a datos obtenidos	116

LISTA DE ABREVIACIONES

Símbolo

A	Área
A_{esp}	Área específica
$L_{cilindro}$	Longitud característica
λ^g	Conductividad térmica del gas
λ^s	Conductividad térmica del sólido
λ_e	Conductividad térmica específica
B_i	Biot
ΔH	Delta de entalpía
CO_2	Dióxido de carbono
CO	Monóxido de carbono
H_2O	Agua
C	Carbono
H_2	Hidrógeno
CH_4	Metano
$k(T)$	Constante de Velocidad de reacción
K_0	Factor de frecuencia
R	Constante de gases ideales
T^g	Temperatura del gas
T^s	Temperatura del sólido
$n_{i,k}$	Factor pre-exponencial
$y_{o,i,k}$	Fracción másica máxima
$y_{i,k}$	Fracción másica del componente
c	Concentración
C_p	Capacidad Calorífica
C_{pm}	Capacidad Calorífica Molar
d_p	Diametro de particula
D^g_r	Coficiente de difusión radial
D^g_{ax}	Coficiente de difusión axial
ω^g_r	Velocidad de reacción radial
ω^g_{ax}	Velocidad de reacción axial

ε_b	Porosidad
E_a	Energía de activación
q_{th}^g	Generación
h	Coefficiente de película
h_{fg}°	Entalpía de formación molar
h_{fg}	Entalpía de vaporización específica
$\Delta h_{r,m}$	Entalpía de reacción estándar
GL	Grados de libertad
L	Longitud
V_{total}	Volumen total
M	Peso molecular
T_c	Temperatura Crítica
P_c	Presión crítica
A_{ij}	Coefficiente de interacción molecular
ρ_i	Densidad
r	Tortuosidad
Pe_0	Factor del número de pecllet
Pe_f	Factor del número de pecllet en función de reynolds.
k	Factor de peso
Nu	Número de Nusselt
K	Factor de corrección de la temperatura
$f_{\varepsilon b}$	Factor de corrección de la porosidad
Nu_{EK}	Número de nusselt equivalente.
Nu_{Lam}	Número de nusselt Laminar
Nu_{turb}	Número de nusselt turbulento
Re_q	Reynolds equivalente
$Re_{\varepsilon b}$	Reynolds entre el lecho
v	Velocidad
Q	Caudal
β	Coefficiente de transferencia de masa
m	Eje radial en la discretización
n	Eje axial en la discretización

μ_i	Viscosidad dinámica
T_r	Temperatura reducida
r	Coordenadas Radiales
z	Coordenadas Axiales
s	Fase Sólida
g	Fase Gaseosa
t	Tiempo
α	Constante para componentes
b	Constante para componentes
c	Constante para componentes
d	Constante para componentes
dy_i	Derivada por componente
Δx	Segmentos presentados para un eje

RESUMEN

En el presente trabajo de grado se realizó un modelo matemático donde se estimó los perfiles de temperatura y concentración para la biomasa, el estudio que se desarrolló a lo largo del documento es en base al cuesco de palma aceite, este es un subproducto con pocos usos a nivel industrial por lo tanto se planteó el proceso de pirólisis con el fin de aportar un valor agregado y disminuyendo emisiones generadas por diferentes procesos alternativos de esta materia.

Este subproducto se obtiene de la extracción directa del aceite de palma. En primera instancia, se llevó a cabo un estudio bibliográfico con el objetivo de obtener información del proceso termoquímico en la investigación, además de realizar una búsqueda enfocada en las ecuaciones de gobierno y modelos cinéticos que se adapten al proceso, de esta forma se analizó que la biomasa más cercana con respecto a la composición estructural que corresponde a su contenido de celulosa, lignina, hemicelulosa, y a su composición elemental que es hidrógeno, carbono, oxígeno, nitrógeno y azufre, es la madera de haya, debido a que presentó similitudes con el cuesco de palma de aceite [63].

Para el desarrollo del modelo se tomaron una serie de ecuaciones auxiliares con el fin de determinar los perfiles de temperatura y concentración másica a través de un software, el cual su lenguaje de programación está basado en Python. Los resultados obtenidos para el perfil de concentraciones se presentaron en términos de fracción másica para cada componente, donde se obtuvieron: Alquitrans (Tolueno): 0.224, agua (H₂O): 0.034, dióxido de carbono (CO₂): 0.018, monóxido de carbono (CO): 0.017, Metano (CH₄): 0.003 e Hidrógeno (H₂): 3.111e⁻⁵. Por otra parte, el perfil de temperatura muestra que el punto más frío dentro del reactor en este caso es el centro y entre más cerca la biomasa este de la pared mayor es la temperatura, alcanzando los 700 K, de esta forma identificando el tipo de pirólisis que rige el modelo cinético. Finalmente se concluye con los análisis y comparaciones que los resultados frente a otras investigaciones satisfacen el modelo presentado.

Palabras clave: Simulación, Pirólisis, Cuesco, Reactor de lecho fijo.

INTRODUCCIÓN

La producción y el aumento de los residuos agroindustriales son unos de los principales problemas que presentan las industrias, debido a su almacenamiento, tratamiento, control, normatividad ambiental, costos asociados y su impacto ambiental. A medida que la demanda aumenta se obtienen cantidades enormes del remanente que corresponde a 2.1 ton/ racimo de fruta fresca, complicando cada vez más la situación para un buen manejo, además de la utilidad y el valor de estos no han sido explotados para darle un propósito útil y eficaz en las diferentes agroindustrias. [61]

Para el manejo de residuos sólidos se identifica que existen posibles alternativas de aprovechamiento con el fin de evitar la posible contaminación emitida por los mismos[61], ya que dichos subproductos pueden contribuir en la contaminación de la atmósfera con gases de efecto invernadero, contaminación de fuentes hídricas y alteración de los ecosistemas; debido a que los efectos negativos en el ambiente no fueron notorios en los cortos lapsos de tiempo, sino con el pasar de los años hasta verse reflejado en el incremento de la temperatura global, destrucción del medio ambiente, aporte de gases de efecto invernadero que llegan hasta la capa de ozono [62]. Por esta razón el hombre ha buscado estrategias de desarrollo sostenible y abrirse paso a la economía circular.

En el transcurso de los años se han realizado investigaciones para la determinación del comportamiento cinético de las reacciones de pirólisis mediante biomásas generadas en empresas agroindustriales. Dependiendo de las propiedades fisicoquímicas del subproducto, equipos y las condiciones en el proceso los parámetros cinéticos varían, como se estudia en la Modelación de la gasificación de biomasa en un reactor de lecho fijo presentado por Harold García, donde se obtienen cinéticas a partir de diferentes modelos y plantean ecuaciones para la elaboración del modelo matemático [12], Modelación de la gasificación de biomasa en un reactor de lecho fijo por S. Sechage y L. Gomez, la cual busca proponer un modelo matemático para el comportamiento del cuesco de palma africana en el proceso de pirólisis y en un estudio posterior para la gasificación en un reactor de lecho fijo tubular para ambos procesos [9], Research Paper A study of pyrolysis kinetics of palm shell and empty fruit bunches via thermogravimetric analysis por A. A. Safana, N. Abdullah, F. Sulaiman, utiliza el análisis termogravimétrico (TGA) para estudiar propiedades térmicas y cinética de pirólisis de racimos de frutos vacíos (EFB) y cáscara de palma, la biomasa se calienta y es sometida a una

atmósfera de nitrógeno dentro de un rango de temperatura de 30 a 800 °C con tres tasas de calentamiento (velocidad de calentamiento) distintas y estas son 5, 10 y 20 °C/min [18], Characterization of Bio-oil and Bio-char from Pyrolysis of Palm Oil Wastes por F. Abnisa and A. Arami-niya, en este estudio los desechos de palma como la cáscara, racimos de frutos vacíos y fibra de mesocarpio se caracterizaron y posteriormente se introducen en un reactor de lecho fijo a una temperatura de 500 °C, un flujo de nitrógeno de 2 L/min y un tiempo de reacción de 60 min. Después de la pirólisis se caracterizan los productos con énfasis en el bioaceite y el biocarbón llevando a cabo varios enfoques, incluidas las pruebas de contenido de agua de Karl Fischer, FTIR, SEM, TGA y análisis de CNH/O [19] y entre otros estudios.

El objetivo de este proyecto es elaborar un modelo matemático de un reactor de lecho fijo con el fin de identificar el comportamiento del cuesco de palma de aceite frente a la descomposición termoquímica de la biomasa para el proceso de pirólisis, esto con el fin de identificar el perfil de temperatura con respecto a la producción del gas y la degradación del sólido. Primero se tuvo que realizar un estudio bibliográfico para así poder establecer los modelos cinéticos, las reacciones, ecuaciones de balance y energía, parámetros termodinámicos y características fisicoquímicas acorde a la biomasa de interés (Cuesco de palma). Una vez determinadas las variables se desarrollaron ecuaciones de gobierno que rigen el proceso termoquímico y el diseño del código matemático con la ayuda de un software especializado para el modelamiento de procesos.

OBJETIVOS

Objetivo general

Modelar el proceso de pirólisis de cuesco de palma de aceite en un reactor de lecho fijo de calentamiento indirecto y de flujos paralelos a través del uso de las ecuaciones de balance de masa y energía.

Objetivos específicos

- Identificar las características fisicoquímicas del cuesco de palma de aceite generado en el sector palmicultor de Colombia.
- Formular las ecuaciones de masa y de energía de las especies en el proceso de pirólisis de cuesco de palma en un reactor de lecho fijo de calentamiento indirecto y de flujos paralelos.
- Solucionar las ecuaciones de gobierno del proceso de pirólisis en el reactor de lecho fijo mediante el uso de métodos numéricos y la implementación de una herramienta informática.
- Comparar los resultados teóricos obtenidos en el modelo desarrollado con resultados experimentales obtenidos de la literatura.

1. FUNDAMENTOS TEÓRICOS

La contextualización hacia el sector palmicultor, la industria aceitera, conceptos y procesos, es clave en la comprensión de este estudio para poder entrar en materia. Por esta razón este capítulo es una guía donde se hace énfasis a ciertos aspectos para poder abarcar con toda la temática. “Las industrias extractoras de aceites encargadas de la producción y comercialización del aceite para los diferentes usos, generan grandes cantidades de subproductos sólidos y líquidos como torta de palmiste; cuesco; fibra y efluentes.” [1] Los residuos generados en las plantas extractoras de aceite en su mayoría no tienen un adecuado manejo para su aprovechamiento, generalmente quedan esparcidos contaminando aguas subterráneas y la descomposición de estos residuos traen emisiones de gases de efecto invernadero (GEI) que a largo plazo generan un impacto significativo en el calentamiento global [1].

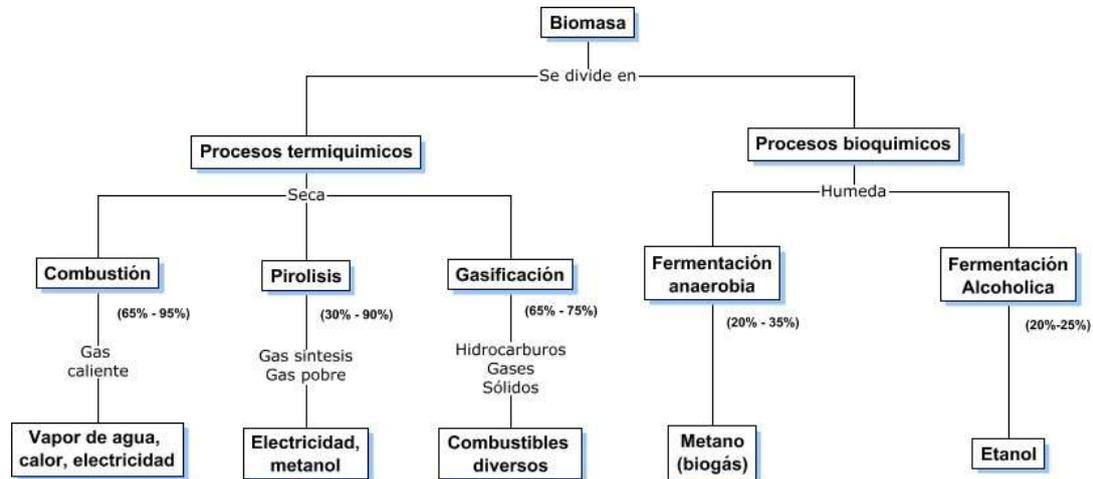
“Para la extracción de aceite de palma se generan alrededor de 2.1 toneladas de residuos aproximadamente por tonelada de racimo de fruta fresca” [2], los cuales causan problemáticas ambientales ya que la degradación y asimilación es lenta, por esto se dificulta el manejo de estos residuos obtenidos directamente del proceso debido a la falta de tecnologías para dicho aprovechamiento. La extracción de aceite de palma satisface necesidades para el consumo humano y además se emplea como materia prima a nivel industrial, presentando un aumento en la demanda y la generación de los subproductos que no son aprovechados en su mayoría [3], por ende, es necesario acoplar procesos para aprovechar al máximo la biomasa.

El cuesco es el residuo con mayor dificultad para su aprovechamiento y utilidad debido a su alto contenido de lignina, esto se debe a que refuerza y aporta una resistencia mecánica a los tejidos y paredes celulares [5], por esa razón presenta problemas para su incorporación al suelo, sin embargo, una de las aplicaciones donde actualmente este residuo se utiliza es en las calderas en forma de combustible. El tipo de ceniza que se produce obstruye las tuberías y ductos de las calderas de la planta por su contenido rico en sodio y potasio en forma de óxidos [2].

Inicialmente, se propone identificar procesos de transformación los cuales ayuden a obtener diferentes productos como combustibles, carbón vegetal, gas de síntesis o incluso energía a partir de desechos sólidos o subproductos como el cuesco de palma aceitera. El proceso de

conversión de biomasa consta de procesos termoquímicos y bioquímicos estos serán descritos en la figura 1

Figura 1.
Procesos de transformación de biomasa



Nota. Procesos a los que se puede someter la biomasa, en este caso se presentan los procesos termoquímicos y bioquímicos. Tomado de: Las energías, “Transformaciones energéticas”, [En línea]. <https://sites.google.com/site/lasenergiaass/7energias-renovables/7-4-biomasa/7-4-2-procesos-termoquimicos-y-bioquimicos> [Acceso: Septiembre 11, 2021]

1.1. Biomasa

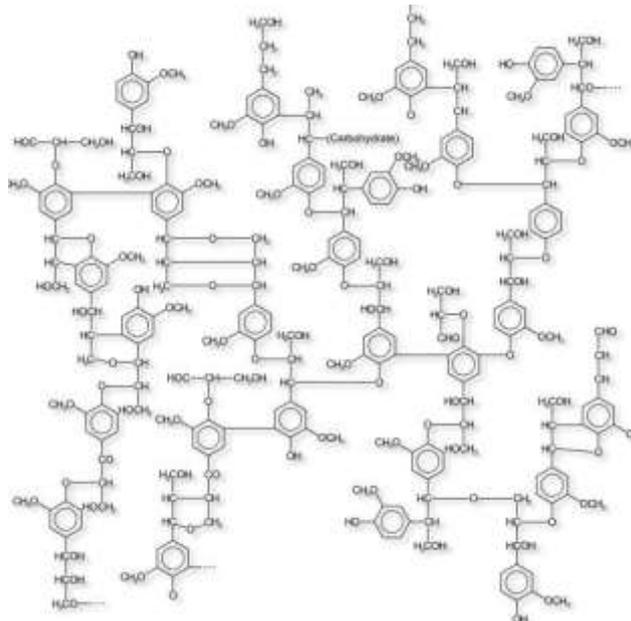
Es todo material orgánico de origen vegetal, animal o la que es producto de la transformación natural o artificial de las anteriores excluyendo a la materia que está englobada en formaciones geológicas que han sufrido de mineralización [4].

1.1.1. Lignina

Es un polímero poli fenólico que se deposita en las paredes celulares secundarias y en algunas ocasiones en las paredes celulares primarias de las plantas. Este polímero es una sustancia hidrofóbica que elimina el agua de las paredes celulares, además limita la difusión lateral permitiendo un fácil transporte longitudinal y refuerzo de la resistencia mecánica de los tejidos, incluyendo la resistencia ante los ataques bacterianos. En conclusión, la lignina brinda un gran aporte a la resistencia mecánica de la pared celular y es muy abundante en las plantas de tipo leñoso, siendo el segundo polímero en la naturaleza más abundante después de la celulosa. Los árboles tienden a tener entre un 20 y un 30 % de lignina, en cuanto a las hierbas tienen por debajo del 20 % en su composición, cabe mencionar que la lignina es el único

polímero carbonado de la pared celular que no está formado por monómeros de carbohidratos y por ende lo hace más impermeable al agua [5]. A Continuación, la figura 2 muestra la estructura de una molécula de lignina:

Figura 2.
Ejemplo de una molécula de lignina

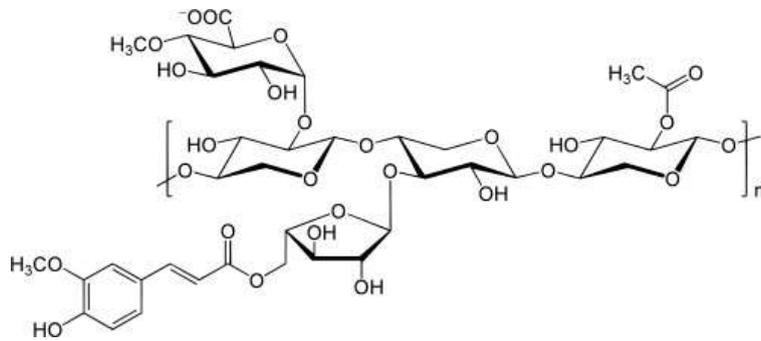


Nota. Es una representación de la proyección de Haworth de la estructura de la lignina. Hemicelulosa Tomado de: Clasificación, estructura, biosíntesis, funciones, “Lignina”, [En línea]. <https://www.lifeder.com/hemicelulosa/> [Acceso: Octubre 1, 2021]

1.1.2. Hemicelulosa

La Hemicelulosa es un polisacárido que se encuentra en las paredes celulares de una gran variedad de planta, la cual representa más de un tercio de la masa que conforma su estructura y estas están formadas por enlaces β -1,4 que poseen diferentes sustituyentes glicosilados y que son capaces de interactuar entre sí y con las fibras de celulosa a través de puentes de hidrógeno (interacciones no covalentes), permitiendo formar estructuras amorfas y estas son solubles en soluciones acuosas [6]. En la figura 3 se tiene un bosquejo de la proyección de Haworth para la molécula de hemicelulosa:

Figura 3.
Ejemplo de una molécula de Hemicelulosa

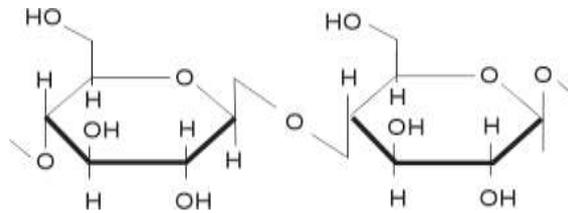


Nota. Es una representación de la proyección de Haworth de la estructura de la hemicelulosa a partir de la estructura del Xilano. Tomado de: Hemicelulosa: clasificación, estructura, biosíntesis, funciones, “Lignina”, [En línea]. <https://www.lifeder.com/hemicelulosa/> [Acceso: Octubre 1, 2021]

1.1.3. Celulosa

La celulosa es un polisacárido compuesto únicamente de glucosa, es decir, es un homopolisacárido (formado solo por un tipo de monosacárido). Este polímero es rígido, insoluble en agua y contiene desde varios cientos hasta varios miles de unidades de β -glucosa. La celulosa es el polímero y la biomolécula orgánica más abundante en la tierra debido a que forma la mayor parte de biomasa existente, esta molécula se genera al unirse las moléculas de β -glucosa mediante enlaces β -1,4-O-glucosídicos por hidrólisis de glucosa [7]. De acuerdo a lo anterior la celulosa se representa según la figura 4

Figura 4.
Ejemplo de una molécula de Celulosa

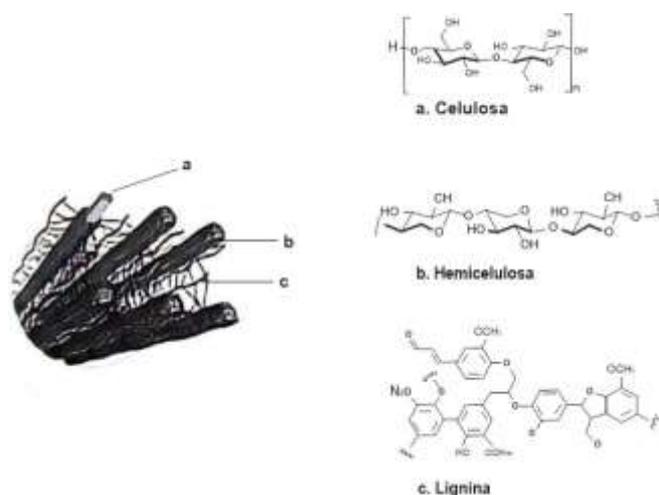


Nota. Es una representación de la proyección de Haworth de la estructura de la celulosa a partir de la glucosa. Tomado de: Wikipedia [En línea]. Disponible en: <https://cutt.ly/uR05nFD> . [1 de octubre 2021]

1.1.4. Lignocelulosa

La lignocelulosa es una biomasa que se encuentra disponible y abundante en el medio ambiente, cuyos constituyentes son la lignina, celulosa y hemicelulosa, los cuales le brindan características de dureza, resistencia, estructura sólida y rígida. Otras propiedades de esta biomasa como la volatilidad, contenido de ceniza, humedad, contenido y composición de lignocelulósico varía dependiendo de la procedencia y la proporción de sus componentes las cuales cambian de la siguiente manera: 20-55% de celulosa, 16-85% de hemicelulosa y de 15 a 40% de lignina y estos se combinan en una matriz molecular [8]. La figura 5 muestra ejemplo gráfico estructural de la lignocelulosa:

Figura 5
Esquema de la lignocelulosa



Nota. Es una representación de la lignocelulosa a partir de la glucosa, lignina y hemicelulosa. Tomado de: E. Lériida Martínez, *Mejora de fermentabilidad de hidrolizados de hoja de olivo*, tesis pre. Facultad de ingenierías, Universidad de Jaén, Jienense, España, 2018. [En línea]. Disponible en: http://tauja.ujaen.es/bitstream/10953.1/8242/1/Trabajo_Fin_d_e_Grado_EMILIO_LRIDA.pdf

1.2. Torrefacción

La torrefacción es un pirólisis tenue mediante la cual la biomasa se pone en contacto con un medio de calentamiento que eleva su temperatura gradualmente (<50°C/min) hasta 200 – 300°C [29]. En este proceso la biomasa en parte (principalmente la hemicelulosa) se descompone, emitiendo varios tipos de compuestos volátiles (Metano, metano, furfural, fenol y otros) [29][64]. La biomasa torrefactada sólida o también conocida restante (Biomasa torrefactada) contiene aproximadamente un 30% más de capacidad energética por unidad de masa. La biomasa torrefactada tiene excelentes características de combustión, la cual la hace favorable para este proceso térmico; el combustible puede cocerse fácilmente con carbón, gasificarse más o alimentarse a unidades de pirólisis. La biomasa es típicamente inestable en el sentido térmico, lo que generalmente conduce a la formación de alquitranes condensables en los gasificadores, ocasionando problemas en los equipos aguas abajo, como asfixia y bloqueo de las tuberías. La torrefacción mejora las propiedades combustibles de la biomasa la cual también es hidrófoba, lo que significa que se puede almacenar a la intemperie durante largos períodos sin absorber agua, similar a las infraestructuras utilizadas para el carbón. La

biomasa torrefactada requiere menos energía para triturar, moler o pulverizar y se pueden emplear las mismas herramientas para triturar carbón, logrando una simplificación en la selección de equipos adecuados para la etapa de molienda. [29]

La torrefacción es un proceso adaptado previamente al pirólisis, puesto a que los diferentes tipos de biomasa varían en su contenido de humedad y generación de alquitranes, por ende, es necesario adaptar la materia orgánica antes de introducirla al pirolizador que en este caso es el cuesco de palma de aceite, porque el equipo puede dañarse sufriendo un taponamiento como se mencionó en el párrafo anterior ya sea parcial o total, afectando los rendimientos y resultados esperados.

1.3. Pirólisis

La pirólisis es un proceso anterior a la gasificación que se basa en la descomposición o degradación térmica de una sustancia ya sea biomasa de origen agroindustrial y polímeros, que en ocasiones dependiendo de la cantidad se realiza en una atmósfera inerte es decir en ausencia de oxígeno. En este procedimiento ocurren una serie de reacciones químicas, fenómenos de transferencia de masa y calor, generando productos sólidos, líquidos y gaseosos, este proceso se lleva a cabo a altas temperaturas dependiendo de la materia a utilizar, el tipo de pirólisis y el equipo empleado. [30]

Los productos que se forman en la fase gaseosa con respecto a la biomasa rica en lignina, hemicelulosa y celulosa como el cuesco y la madera de haya son gases como el CO, CO₂, CH₄ e H₂ (Monóxido de carbono, dióxido de carbono, metano e hidrógeno) respectivamente [12]; Para la parte líquida se generan alquitranes o bioaceites y agua condensada, por último se tiene la fase sólida donde se obtiene el carbonizado [3], más conocido como carbón vegetal o biochar el cual puede usarse en la industria como combustible para la elaboración de carbón activado que se implementa para la producción de filtros[65] debido a sus características adsorbentes, productos estéticos o como fertilizante.

De esta manera se adquieren diferentes porcentajes de obtención de los diferentes productos (sólidos, líquidos y gaseosos), de acuerdo a cada producto mencionado anteriormente, la pirólisis es efectiva en los siguientes rangos de temperatura incluyendo todo tipo de materia prima iniciando con una pirólisis flash (1050-1300 °C) donde la cinética de reacción juega un papel importante junto con los fenómenos de transferencia de masa y energía, se evidencia la

producción en su mayoría de gases y cierta cantidad de material carbonizado, por otra parte las que corresponden a una temperatura media es decir temperaturas alrededor de los 850 °C el producto con mayor porcentaje es el líquido y finalmente a bajas temperaturas que entran en un rango de 550-950 °C las velocidades de calentamiento son bajas con respecto a los otros tipos de pirólisis, siendo este el más convencional, de esta manera se obtienen porcentajes relativamente cercanos en cuanto a los productos generados [31].

En la figura 6 se evidencia los productos obtenidos del proceso de pirólisis los cuales son generados de reacciones primarias.

Figura 6.
Productos de pirólisis



Nota. Se presentan los productos obtenidos de las reacciones primarias los cuales se generan a partir de la degradación de lignina, hemicelulosa y celulosa. a partir de la biomasa (cuesco de palma de aceite).

1.3.1. Parámetros del proceso de pirólisis

Dentro de los parámetros del proceso de pirólisis se tiene la temperatura y el tiempo de residencia. Dependiendo de la temperatura la pirólisis puede adquirir mayores porcentajes del producto, en este caso se desea obtener mayor cantidad de gases es decir que el proceso ocurre a bajas temperaturas, en cuanto a la cinética se ve afectada el tiempo de residencia, ya que las interacciones entre moléculas pueden variar entre mayor o menor dependiendo de un tiempo determinado de la biomasa dentro del reactor. [23]

Se deben tener en cuenta el dimensionamiento de reactor como el diámetro y la longitud, por otra parte la presión de mencionado reactor, en este caso la presión del reactor será constante, ya que se asume por literatura[12] que este dispositivo cuenta con una válvula de salida donde se regula la presión -, los fenómenos de transferencia de calor y de masa también estarán presentes dentro de los parámetros que afecten este tipo de reacciones, entre ellos está la dispersión y la convección en un plano bidimensional, esto quiere decir que el modelo movimiento axial y radial de la interacción entre las partículas y las paredes del reactor.

- **Temperatura:** La temperatura de pirólisis es importante para generar el producto de interés final, para esto se debe controlar alrededor de 500°C con el fin de maximizar la producción de gases de síntesis y líquidos. [31]
- **Tiempo de residencia:** El tiempo de residencia de la materia prima dentro del reactor es una variable relevante dentro de los parámetros de diseño para dicho reactor y los costos que pueden asociarse a dicho equipo, además de afectar el proceso de pirólisis con la producción de reacciones tanto primarias como secundarias. [66]
- **Flujo de gasificación:** En este proceso se realiza en atmósfera rica en nitrógeno la cual toma una base de cálculo con respecto al flujo volumétrico 2 L/h. [12]

1.4. Equipos de reacción para la conversión de la biomasa

Para llevar a cabo el proceso de pirólisis se utilizan equipos los cuales son llamados “Pirolizadores” para elegir el mejor se tiene que tener en cuenta las características fisicoquímicas de la biomasa y el producto que se desea obtener, además de los parámetros que pueden afectar este tipo de reacciones como los que se mencionaron anteriormente.

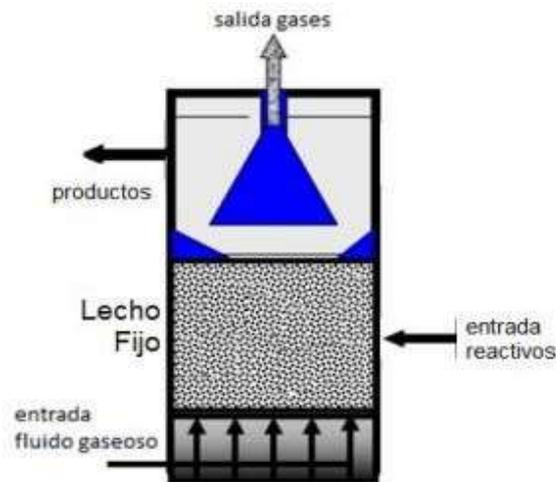
Algunos equipos que suelen utilizarse según las investigaciones consultadas son:

1.4.1. Reactor de lecho fijo

Es un tipo de reactor diferencial que se emplea generalmente para determinar la velocidad de reacción en función de la concentración o de la presión parcial. Consta de un tubo que puede tener una cantidad muy pequeña de catalizador, por lo regular se dispone en forma de disco delgado como se muestra en la figura 7. El criterio para que un reactor sea diferencial es que la conversión de reactivos en el lecho es muy baja, al igual que el cambio de la temperatura y

la concentración de reactivo en todo el lecho. “Este tipo de reactor presenta resultados buenos para tomar muestras, su isothermicidad es regular, el contacto de fluido con sólido es aceptable, el catalizador se desactiva constantemente por ende toca reemplazarlo en ciertos periodos de tiempo y su facilidad de construcción y operación es sencilla.” [32]

Figura 7.
Estructura de un Reactor de lecho fijo

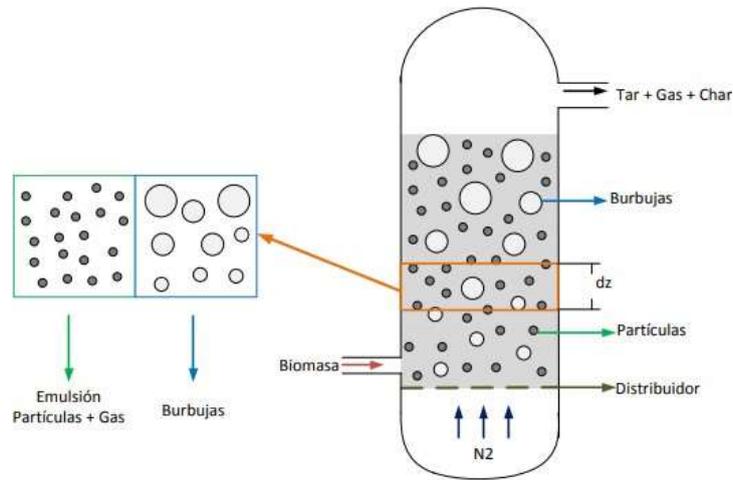


Nota. Estructura de un reactor de lecho fijo. Tomado de: G. A. Obando, *Condiciones de diseño de un reactor de pirólisis a escala laboratorio para la obtención de biocarbón a partir de (ROS)*. Tesis mast. Facultad de ciencias económicas y administrativas, Universidad de Manizales, Manizales, Colombia, 2015. [En línea]. Disponible en: <https://cutt.ly/snHNT3J>

1.4.2. Reactor de lecho fluidizado

Este tipo de modelo de reactor es implementado generalmente para obtener combustible (gasolina) a través de la desintegración catalítica de fracciones pesadas de petróleo para poder tener compuestos más simples y de cadena carbonada más corta, en el cual la coquización de partícula en el catalizador ocurre muy rápido se puede observar el esquema en la figura 8. En este tipo de reactor las partículas de catalizador y alimentación de reactivos entran a la vez y se transportan con rapidez en el reactor. La densidad del lecho de partículas de catalizador en el reactor de lecho fluidizado es significativamente más baja que en los reactores de lecho móvil y a menudo las partículas viajan a la misma velocidad del gas. El reactor de lecho fluidizado también se conoce como reactor de transporte de paso directo (RTPD). [33]

Figura 8.
Estructura de un Reactor de Lecho Fluidizado

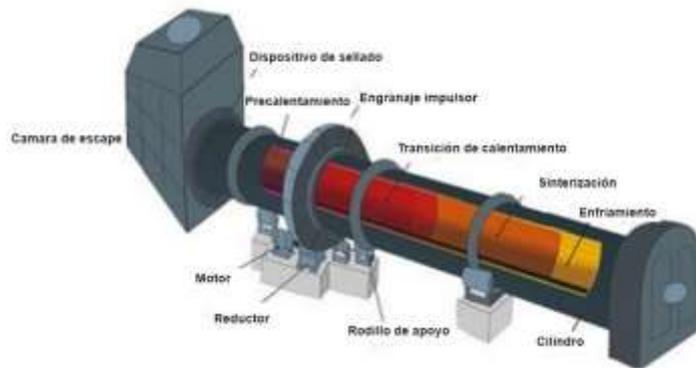


Nota. Estructura de un reactor de lecho fluidizado. Tomado de: L. A. Blanco Leal, *Modelado y simulación del proceso de pirólisis rápida de biomasa en un reactor de lecho fluidizado*, tesis Mag. Facultad de minas, Universidad Nacional, Medellín, Colombia, 2014. [En línea]. Disponible en: http://tauja.ujaen.es/bitstream/10953.1/8242/1/Trabajo_Fin_de_Grado_EMILIO_LRIDA.pdf

1.4.3. Horno rotatorio

Un horno rotatorio es un equipo que consta de una cámara cilíndrica en rotación sobre su propio eje y levemente inclinada. Se emplea para gasificar residuos sólidos, lodos o líquidos viscosos y también biomasa. Tiene una llama en la parte superior y está revestido con refractario. Los residuos se introducen en la parte superior del equipo y se someten a oxidación térmica en rotación dentro del horno como se puede observar el esquema de este equipo en la figura 9. Los aislamientos y el sistema mecánico permiten temperaturas de funcionamiento comparables y similares al horno estático, este puede funcionar con temperaturas superiores a 1000°C. El tiempo de permanencia puede ajustarse en función de la aplicación durante el proceso térmico, modificando la velocidad de rotación para generar un efecto y poder manipular las variables que influyen en la formación de los productos.[33]

Figura 9.
Esquema de horno rotatorio



Nota. Estructura de un horno rotatorio. Tomado de: Directindustry. (s.f.), “Comment fonctionne un four rotatif?”. [En línea]. <https://trends.directindustry.fr/xinxiang-great-wall-machinery-co-ltd/project-201653-1115555.html>. [Acceso: octubre 10, 2021]

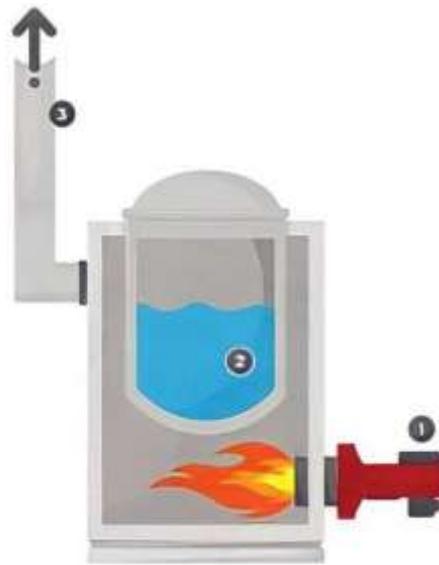
1.5. Sistema de calentamiento

“Consisten en un circuito o sistema que combina las tecnologías necesarias para poder suministrar calor de forma eficaz a un determinado proceso de producción industrial o proceso termoquímico, que puede ser intercambiadores de calor, chaquetas de calentamiento para reactores, procesos de templado térmico y demás, garantizando la calidad del producto final, la maximización de la productividad y la minimización de los costes energéticos.” [34]

1.5.1. Calentamiento directo

Para el proceso de calentamiento directo el medio o sistema que se va a calentar entra en contacto directo con una resistencia eléctrica o con los productos de la combustión como se muestra en la figura 10. [34] Cuando el calentamiento directo se emplea la combustión este procede a la quema y una fracción del producto hace parte de esta, cuya parte proviene del gasificador o reactor especializado para generar la reacción, de tal modo que la combustión libere energía. La energía obtenida o liberada debe cubrir la exigencia térmica y pueda satisfacer el sistema, además esta modalidad de calentamiento directo por combustión hace que el agente gasificante y la reacción tengan un contacto directo durante la etapa de calentamiento. En los procesos como la pirólisis y la gasificación es muy útil, donde se asegura que toda la biomasa que se encuentra al interior del reactor reaccione debido a la ignición. [13]

Figura 10.
Sistema de calentamiento directo



Nota. Sistema de calentamiento directo.
Tomado de: Pirobloc. (2021), “Sistemas de fluido térmico:Guia completa”, [En línea].<https://www.pirobloc.com/sistemas-de-fluido-termico-la-guia-completa/>
[Acceso: Octubre 13, 2021]

1.5.2. Calentamiento indirecto

“En este tipo de calentamiento se utiliza un medio o fluido de transferencia de calor para distribuir el calor en el sistema” [33], también se utilizan chaquetas de calentamiento que están ubicadas alrededor del reactor. En algunas 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 del calentamiento directo como se muestra en la figura 11. [33].

Cuando el calentamiento indirecto se realiza a través de una chaqueta de calentamiento, lo tiene que suministrar es el calor al fluido térmico de la chaqueta y este se lo transmita a la superficie de las paredes exteriores del reactor a través de una transferencia por convección

y de está se transfiera a través del grosor o espesor de la pared por conducción y después este calor será entregado al interior del reactor. [13]

Figura 11.
Sistema de calentamiento indirecto



Nota. Sistema de calentamiento indirecto. Tomado de: Pirobloc. (2021), “Sistemas de fluido térmico:Guia completa”, [En línea].<https://www.pirobloc.com/sistemas-de-fluido-termico-la-guia-completa/> [Acceso: Octubre 13, 2021]

1.5.3. Calentamiento con biomasa

Durante el proceso termoquímico se llevan a cabo varias reacciones dentro del reactor de lecho fijo, estas se caracterizan en dos grupos de reacciones que son las heterogéneas y homogéneas. La descomposición de la biomasa ocurre entre un rango de temperatura entre 200 y 550 °C en ausencia de aire, pero utilizando como agente gasificante el nitrógeno y obteniéndose carbonizado o también denominado pirolizado [68].

- **Reacciones heterogéneas:** Se producen en más de una fase. El tipo de reacción más común tiene una rapidez que depende del área de la superficie expuesta a la mezcla de reacción. Esta superficie puede ser la pared interna del reactor o superficie de reacción,

catalizador sólido y el lecho fijo del reactor. Si la reacción es homogénea no se ve afectada por el área de superficie expuesta a la mezcla de reacción [13].

1.6. Sector palmicultor en Colombia

Bajo la premisa de la sostenibilidad, en el sector palmero se ha venido desarrollando un encadenamiento productivo bastante importante para la economía colombiana, puesto que es uno de los subsectores que más aporta al PIB del agro colombiano produciendo alrededor de 1.630.413 miles de toneladas en cada zona evidenciada en la figura 12 , en ese sentido, las empresas que pertenecen al sector palmero pueden ser plantaciones, empresas comercializadoras internacionales (CI) o empresas manufactureras o de transformación de materias primas; pero, también se pueden clasificar por el tipo de mercado en el que se mueven: empresas procesadoras de aceites y grasas, fabricantes de alimentos balanceados, biodiésel y otros. [14]

Los departamentos con más de 60.000 hectáreas sembradas son el Meta, Santander y Cesar, seguido por los departamentos del Casanare y Bolívar con un promedio de entre 35.001 y 60.000 ha y en una menor medida los departamentos de Nariño y Norte de Santander con un área de siembra promedio entre 7.501 y 35.000 ha, para esta distribución se puede evidenciar la figura 6, donde se puede identificar los departamentos y las regiones donde hay mayor producción de aceite de palma. [14]

Figura 12.
*Distribución geográfica de la
 producción de aceite de palma en
 Colombia*



Nota. Esquema de la distribución geográfica de la producción de aceite de palma en Colombia. Tomado de: V. H. Ramírez, “Características del sector palmero en Colombia y retos para el sindicalismo”, ENS, 2020, [En línea]. Disponible: <https://ail.ens.org.co/informe-especial/caracteristicas-del-sector-palmero-en-colombia-y-retos-para-el-sindicalismo/> . [Acceso Nov. 2, 2020] [13 oct 2021]

Para los años 2017 y 2018 se evidencia el área sembrada con palma de aceite en Colombia (miles de hectáreas) en la siguiente tabla proporcionada por Fedepalma.

Tabla 1.
Área sembrada y producción en Colombia (miles de hectáreas) 2017 y 2018

Información técnica		
Año	2017	2018

Desarrollo (miles de hectáreas)	92.477	76.022
Producción (miles de hectáreas)	431.383	464.666
Total de siembras (miles de hectáreas)	523.86	540.688

Nota. En la tabla se evidencia la siembra y la producción en los años 2017 y 2018. Tomado de: “El palmicultor.” no. 552, 2018, p 28. <https://web.fedepalma.org/sites/default/files/files/Fedepalma/semanario-palmero/publicaciones/Boletin-El-Palmicultor-de-febrero-de-2018.pdf>.

En la producción de aceite se tienen costos laborales según los parámetros establecidos por los empresarios o administradores de la palma y por el DANE, estableciendo los costos globales por unidad de producción. Las personas que manejan el sector productivo del aceite de palma denominados palmeros utilizan diferentes factores para establecer los costos de producción como: «costos de establecimiento, que se refieren a la preparación del terreno, vías, puentes, alcantarillas, canales, vivero, siembra de palma, sistema de riego y establecimiento de coberturas; costos de mantenimiento, fertilización, control de malezas, manejo sanitario, costo de riego, polinización asistida; costo de cosecha y transporte, cosecha, y transporte; y otros costos de cultivo, costos de oportunidad de la tierra, asistencia técnica y gastos administrativos» [14]. Según lo anterior la Escuela Nacional Sindical a partir de la información de los costos promedios por hectáreas establecidos por Fedepalma logró establecer los costos de producción por hectárea para el sector palmero para los años 2016, 2017 y 2018[14]

Tabla 2.

Costo de producción por hectárea del sector palmero para los años 2016, 2017 y 2018

IPC / Año	2016	2017	2018
Tasa (%)	5.75	4.09	3.18
Estimación de costos de producción por hectárea (\$)	69.458.340	72.299.186	74.598.300

Nota. La información fue extraída de Características del sector palmero en Colombia y retos para el sindicalismo. Tomado de: V. H. Ramírez, “Características del sector palmero en Colombia y retos para el sindicalismo”, *Escuela Nacional Sindical*, Mar, 2020, [En línea] <https://ail.ens.org.co/informe-especial/caracteristicas-del-sector-palmero-en-colombia-y-retos-para-el-sindicalismo/> . [Acceso Nov. 2, 2020] [19 oct 2021]

La información de la estimación de los costos de producción por hectárea del sector palmero para estos últimos años no se ha publicado debido a que se están realizando estudios de las evaluaciones y consideraciones teniendo presente la actual pandemia debido a su influencia en el sectores productivos y económicos.

En cuanto a la producción de aceite de palma crudo en el año 2020 está alrededor de 1.528.739 toneladas y respecto a la almendra tuvo una producción de 305.715 toneladas, estos valores con respecto a los datos reportados en los últimos años en cuanto a la producción de aceite crudo disminuyó un 6,3% y en cuanto a la producción de almendra disminuyó un 7,0% por parte de los cultivos de palma aceitera, las zonas que más resaltan en la producción de aceite crudo y siembra de la palma aceitera, abarcan las regiones centrales, del norte y orientales, donde en su mayoría están en la región oriental con los departamentos del Meta y Casanare [15]. En el mundo se producen diez o quince millones de toneladas al año, pero en Colombia la producción de cascarilla o cuesco de palma aceitera cuenta con un valor de 200.000 a 300.000 toneladas generadas por cada zona que produce aceite de palma [17].

Teniendo en cuenta que la mayor producción se encuentra en la zona Oriental, se identificó empresas las cuales se dedican a la extracción de aceite de palma crudo y torta de palmiste como lo es la empresa Extractora Cusiana S.A.S [16] donde tienen plantas en el departamento de Casanare en el municipio de Tauramena y Maní, el subproducto (cuesco de palma de aceite) es utilizado como combustible de calderas[3], ya que esta biomasa tiene un alto poder calorífico, sin embargo esto puede traer efectos adversos al cuidado del medio ambiente como generación de gases de efecto invernadero y la obstrucción de tuberías en los equipos, lo cual pueden ocasionar costos de mantenimiento, para ello se realiza el proyecto como alternativa sustentable según los objetivos de desarrollo sostenible.

Esta investigación presenta una relación con los objetivos de desarrollo sostenible (Objetivo 9 Industria, innovación e infraestructura, Objetivo 12: Garantizar modalidades de consumo y producción sostenibles y Objetivo 13: Adoptar medidas urgentes para combatir el cambio climático y sus efectos) [26]. Debido a que se plantean alternativas y soluciones a una parte de los residuos producidos en la empresa y el impacto ambiental, por esta razón se busca desempeñar un papel clave a la hora de introducir y promover nuevas tecnologías, para facilitar y permitir el uso eficiente de los residuos y recursos. Sin embargo, todavía queda un

largo camino que recorrer para que se pueda aprovechar al máximo su potencial y aumentar la inversión en investigaciones e innovación del proceso

1.7. Conclusiones parciales del capítulo No. 1

Según lo establecido a lo largo de este capítulo, se evidencia que las propiedades fisicoquímicas de la biomasa varían en cuanto a su composición elemental, estructural y próxima de acuerdo al lugar de procedencia debido a las condiciones climáticas y el estado del suelo, ya que esto afecta a los cultivos de palma aceitera y la forma de desarrollo del cultivo de palma de aceite.

El tipo de calentamiento influye en la velocidad y distribución de calor, debido a que si la transferencia es por contacto indirecto va desde la pared hacia el centro del equipo lo cual requiere de más tiempo durante la reacción, en cambio la transferencia de calor por calentamiento directo es más efectivo el intercambio de calor y la biomasa adquiere la energía en un menor tiempo.

La clase de equipo tiene repercusión en los resultados del proceso de pirólisis, ya que la adaptación de la materia dentro del instrumento se ve afectada por este, como la presión en el sistema, el diseño y arreglo interior, rangos de temperaturas alcanzados, dimensiones y otros factores.

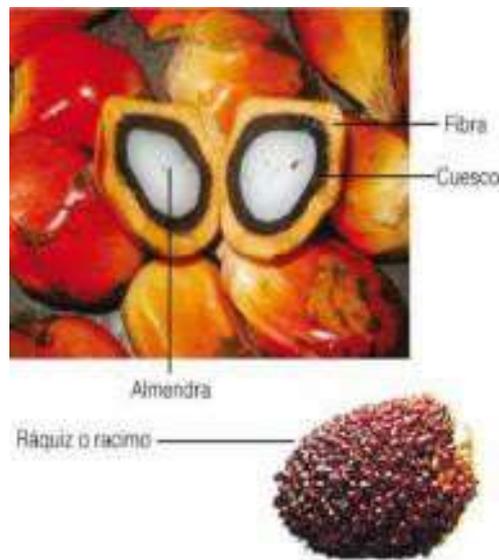
2. CARACTERIZACIÓN FÍSICOQUÍMICA DE LA BIOMASA

Para el capítulo dos se estudia la composición, estructura y propiedades del cuesco de palma, con el fin de identificar las principales características de la biomasa a partir de las diferentes fuentes bibliográficas que se utilizarán posteriormente a lo largo del trabajo, con el fin de obtener información acerca de los parámetros y criterios utilizados para modelo matemático, permitiendo reconocer las variaciones dependiendo de su zona de cultivo y similitudes con que puede tener con otro tipo de biomasa.

2.1. Cuesco de palma

El cuesco de palma de aceite cultivado en Colombia es un residuo de la producción de aceite de palma como se muestra en la figura 13. Del 100% en masa que constituyen los racimos de fruta fresca, apenas un 10% es de la humedad, un 67% es de fruta fresca y un 23% en racimos vacíos; en donde la fruta fresca se pueden obtener tres productos; fibra, nueces y aceite crudo, con un porcentaje de (15, 11 y 41) % respectivamente; las nueces contienen el 4,5 % de almendra, 0,5% de impurezas y entre el 5 y 6% de cuesco. Los racimos y los cuescos vacíos corresponden aproximadamente un 42% de biomasa en proceso de extracción. [9]

Figura 13.
Fruta de la palma aceitera y el racimo



Nota. Esquema del fruto de la palma aceitera con sus partes y el racimo. Tomado de:

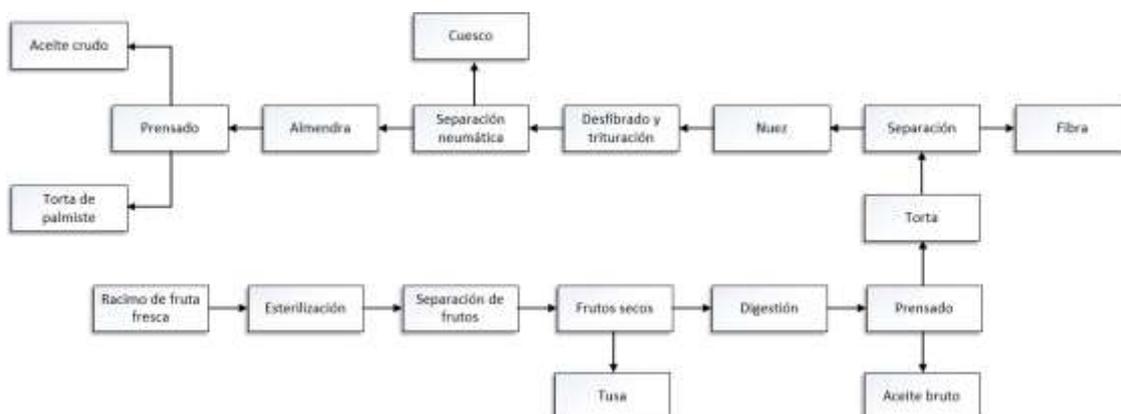
Paucar W. Caracterización físico química del cuesco y fibra obtenidos del procesamiento de palma africana para un aprovechamiento eficiente de la energía térmica en calderas [Diapositiva de PowerPoint]. Universidad Nacional SEK Ser Mejores <https://cutt.ly/JR07Q4p>

[19 oct 2021]

El cuesco de palma aceitera se obtiene durante el proceso de extracción mecánica del fruto, esta etapa se realiza a través de prensas de tornillo sinfín. [10] “En la extracción se produce una pasta homogénea y blanda, que contiene aceite y la denominada torta que está formada por la fibra y nueces” [11]. A continuación, se mostrará en la figura 14, un diagrama de bloques general y básico del proceso de extracción de aceite, que permite identificar las etapas del proceso de producción y donde se obtiene el cuesco de palma.

Figura 14.

Diagrama de bloque del proceso de extracción de aceite



Nota. Diagrama de bloques del proceso de extracción de aceite de palma. Tomado de: Alarcón Soto S. E. Proceso de extracción de aceite de palma. [Diapositiva de PowerPoint]. Educaplay. https://es.educaplay.com/recursos-educativos/901747-proceso_de_extraccion_de_aceite_de_palma.html [20 Oct 2021]

Para la elaboración de este proyecto se realizó una búsqueda detallada de soportes bibliográficos donde los objetivos de las investigaciones están relacionados con los presentados en este proyecto, en la tabla 3 se muestran las investigaciones donde emplean herramientas informáticas para la elaboración de modelos matemáticos y tienen similitudes frente a las ecuaciones establecidas.

Tabla 3.

Estudio de los referentes de la biomasa con respecto al proceso de pirólisis y propiedades fisicoquímicas (cuesco de palma de aceite)

Nº	Nombre	Autores	Descripción	Ref
1	Modelación de la gasificación de biomasa en un reactor de lecho fijo	H. J. García Patiño	Modelación de un reactor de lecho fijo con volúmenes finitos para la madera de haya y cuesco de palma, realizándose el planteamiento de las ecuaciones de balance de masa, de energía y de especie para un sistema heterogéneo de dos fases sólida y gaseosa).	[12]

2	Modelación del proceso de gasificación de biomasa en un reactor de lecho fijo con calentamiento indirecto	P. A. Acosta Camargo, L. A. Chipatecua Hernández	Modelamiento del proceso de gasificación de biomasa residual (Cuesco de palma aceitera y madera de haya) a través de calentamiento indirecto en un reactor de lecho fijo	[13]
3	Modelamiento matemático para la pirólisis del cuesco de palma aceitera	J. S. Sechage Cortes, D. L. Gomez Sandoval, A. G. Rodriguez Meléndez y M. A. Mayorga Betancourt	En esta investigación se realiza una descripción del proceso en un reactor de lecho	[9]
4	Análisis comparativo de la carbonización de cuesco de palma de aceite en reactores de lecho fijo	D. F. Flórez Ramos, J. Barco Burgos, S. I. Rincón Prat	En este trabajo se evalúa el proceso de carbonización de cuesco de palma de aceite en diferentes reactores con miras a su aprovechamiento como fuente de energía renovable. La carbonización se realiza en un montaje con retorta a escala laboratorio y en dos reactores de lecho fijo a escala semi-piloto. Se comparan los rendimientos máxicos y las características fisicoquímicas de los productos utilizando la misma tasa de calentamiento y aumentando el tamaño del reactor y se estudia la influencia de la velocidad de calentamiento para la retorta	[36]

Nota. En esta tabla se presentan los referentes más importantes, los cuales son artículos bases para la elaboración del modelo matemático teniendo en cuenta que los objetivos son afines a los presentados en este documento.

En la tabla se tienen referencias bibliográficas que describen y estudian la modelación sobre la pirólisis, gasificación y generación de biochar o carbón vegetal, en un reactor de lecho fijo y también en una planta piloto. También estas investigaciones hablan sobre las propiedades fisicoquímicas de la biomasa.

2.2. Características fisicoquímicas

Las características fisicoquímicas del cuesco de cuesco de palma de aceite son factores importantes dentro del proyecto, ya que brindan información acerca del comportamiento de la biomasa, en la tabla 4. Se evidencia la composición elemental, estructural, y próximas, que se tomaron de diferentes referentes teóricos, donde se evalúan las composiciones mencionadas anteriormente con el fin de identificar las diferencias de esta biomasa en diferentes países. Allí se encontrarán referencias claves para la elaboración del proyecto, debido a que la biomasa de estudio será el cuesco de palma de aceite proveniente de Colombia.

La composición elemental para la madera de haya en carbono (50 % aprox.), hidrógeno (6 % aprox.), oxígeno (43 % aprox.) y nitrógeno (1) [57][58][59][60], es similar a la del cuesco de palma aceitera como se muestra en la tabla 4, por ende presenta un parecido considerable tanto en su estructura como en la composición química, de acuerdo a esta semejanza es posible hacer la suposición para tomar ciertas propiedades de la madera de haya y tenerlas presente para los futuros cálculos y análisis para la biomasa de estudio (cuesco) posteriormente.

Tabla 4.

Características fisicoquímicas del cuesco de la palma aceitera

Propiedades fisicoquímicas													
País de origen	Composición elemental					Composición estructural				Composición próxima			
	C	H	N	S	O	Celulosa	Hemicelulosa	Lignina	Extractivos	Humedad	Materia volátil	Ceniza	Carbón fijo
	%	%	%	%	%	%	%	%	%	%	%	%	%
Nigeria [18]	50.29	6.35	0.48	0.08	42.82	20.71	23.30	49.50	6.50	4.90	75.40	8.70	15.90
Colombia [68]	52.80	5.70	<1	---	40.50	20.80	22.70	50.70	4.80	11.20	79.00	1.40	---

Malasia [19]	52.05	5.37	0.49	---	42.10	27.70	21.60	44.00	---	4.70	73.50	8.60	13.20
Malasia [20]	49.65	6.13	0.41	0.48	43.33	20.80	22.70	50.70	---	7.73	81.03	4.10	14.87
Colombia [17]	---	---	0.60	---	---	20.80	22.70	50.70	4.70	---	---	1.00	---
Colombia [23]	47.57	6.59	0.58	---	45.25	---	---	---	---	---	69.80	1.71	19.68
Malasia [22]	46.68	5.86	1.01	---	42.01	22.17	23.77	54.05	---	21.40	---	4.38	---
Colombia [24]	---	---	---	---	---	---	---	---	---	11.54	68.32	1.68	18.46
Colombia [25]	48.75	5.55	0.8	0.1	35.33	---	---	---	---	5.91	76.21	3.56	13.71
Promedio	38.64	4.62	0.49	0.07	32.37	14.78	15.20	33.29	1.78	7.49	58.21	3.90	10.65

Nota. En esta tabla se evidencia las propiedades fisicoquímicas del cuesco de palma de aceite, obtenidas en diferentes países.

A partir de lo mencionado anteriormente, se identifican los datos del equipo por medio de investigaciones previas, de esta forma obtenemos los parámetros del reactor [13] los cuales son:

Tabla 5.*Características del reactor de lecho fijo para el proceso de pirólisis*

Características del reactor		
Presión	1	atm
Longitud	1.5	m
Diámetro	0.008	m
Temperaturas de operación	700	K

Nota. En la siguiente tabla se obtienen los parámetros del reactor junto a las propiedades de la cama de biomasa. Tomado de: P. A. Acosta., L. A. Chipatecua, MODELACIÓN DEL PROCESO DE GASIFICACIÓN DE BIOMASA EN UN REACTOR DE LECHO FIJO CON CALENTAMIENTO INDIRECTO, 2018. [23 oct 2021]

Además de las propiedades fisicoquímicas, también se presentan propiedades importantes para la caracterización de la biomasa y el desarrollo del modelo matemático, ya que entre ellas se encuentran la porosidad, densidad y conductividad térmica para la biomasa, los cuales se evidencian en la tabla 6, este estudio se realizó en Nigeria, sin embargo, el análisis posterior con respecto a la composición estructural en la tabla 6. Se identifica que el contenido de celulosa, hemicelulosa y lignina son similares a los de Colombia.

Tabla 6.

Propiedades físicas estructurales de la biomasa

Característica	Valor	Unidades
Gravedad específica aparente	1.14	Adimensional
Humedad	21.3	%
Conductividad térmica	545	kg/m^3
Conductividad térmica	0.19	W/mK
Porosidad	37	%

Nota. En la siguiente tabla se representan las propiedades de la biomasa. Tomado de: D.C. Okpala, “Palm kernel shell as a lightweight aggregate in concrete”, *ScienceDirect*, vol. 25, no. 4, pp. 291-296, 1990, [En línea] [https://doi.org/10.1016/0360-1323\(90\)90002-9](https://doi.org/10.1016/0360-1323(90)90002-9), [Acceso oct. 20, 2021]

Sin embargo se identifica que este estudio se realiza Para calcular algunas características físicas de las partículas y poder realizar suposiciones se aplican ecuaciones como “Biot” donde se puede evidenciar la forma de las partículas a partir de unas restricciones dependiendo de la superficie donde incide el gas, de esta manera si el número de Biot es menor a 0.1 se refiere a placas, si es menor a 0.05 corresponde a un cilindro y finalmente si es menor a 0.03 la forma de las partículas es de manera esférica, para calcular este respectivo número se realiza la siguiente ecuación. [27]

Ecuación 1. Número de Biot

$$Bi = \frac{hL_{cilindro}}{\lambda}$$

Donde:

Ecuación 2. Longitud para un cilindro

$$L_{cilindro} = \frac{r_{particula}}{3}$$

2.3. Conclusiones parciales del capítulo No. 2

El cálculo del número de biot se realiza de manera consecutiva con las ecuaciones de gobierno establecidas, por medio de este método se logra identificar qué tipo de partícula ingresa al reactor, es decir si se puede tomar de tipo esférica para la simplificación del modelo, por otra

parte, se identifica que el radio de partículas que se toma desde los referentes teóricos, oscila entre 2mm a 5mm [12]

Este capítulo se desarrolló en base al primer objetivo específico, el cual menciona la actualidad sobre las propiedades fisicoquímicas del cusco de palma aceitera y las condiciones más importantes para el dimensionamiento del reactor de lecho fijo. Para la siguiente sección que se titula: Formulación de las ecuaciones de masa y de energía de las especies en el proceso de pirólisis en un reactor de lecho fijo, se tendrá presente todo el parámetro establecido durante el primer capítulo, en el planteamiento de las ecuaciones de balance de masa y energía que abarca el segundo objetivo. Según los fenómenos de interacción entre las partículas y su entorno presentados dentro del reactor.

3. FORMULACIÓN DE LAS ECUACIONES DE MASA Y ENERGÍA DE LAS ESPECIES EN EL PROCESO DE PIRÓLISIS EN UN REACTOR DE LECHO FIJO

El alcance del actual trabajo de grado se basa en la pirólisis en un reactor de lecho fijo y se encuentra descrito en el desarrollo de este capítulo a partir de ecuaciones de gobierno y correlaciones estudiadas desde fundamentos teóricos e investigaciones, además se realizará una breve descripción de la herramienta informática la cual se utilizará en el proyecto, evidenciando los beneficios de este software ya que es libre y tiene la facilidad de edición de código por parte de varios usuarios, de esta manera se puede trabajar en línea por medio de un link compartido por el propietario del notebook.

3.1. Solución del modelo matemático

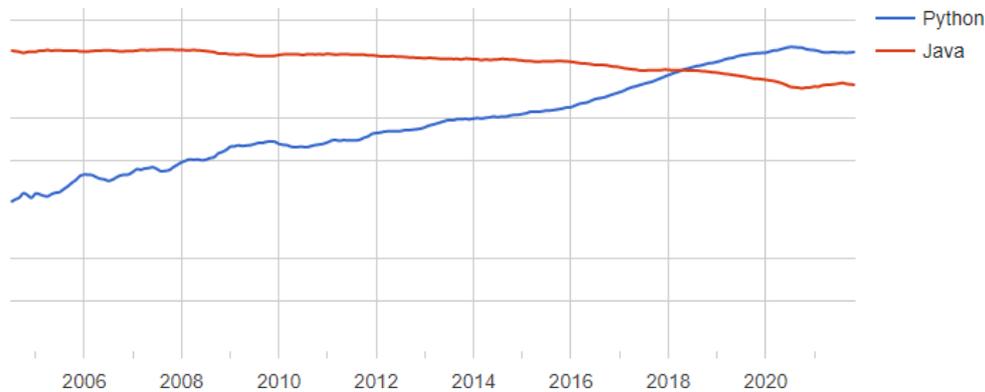
La solución de este modelo matemático se tiene en cuenta el método para la solución de ecuaciones diferenciales por diferencias finitas, identificando que las ecuaciones tienen derivadas parciales de forma unidimensional de tal forma que genere vectores en el eje radial y en el eje axial con ayuda del software matemático.

3.2. Interfaz de python

Python es un lenguaje de programación el cual se caracteriza por ser multiplataforma y de código libre el cual tiene muchas utilidades en cuanto a los diferentes tipos de código, pueden establecerse para el desarrollo web, creación del software y procesamiento de datos, este software es demasiado versátil frente a su lenguaje, siendo el más popular a nivel mundial como anteriormente se mencionó [48], para recalcar un poco de la historia de python, este tuvo una edición en 1991 por Guido Van Rossum, el creador de python, se considera que este se realizó a partir de lenguajes como C y C++. [48]

Además, en la actualidad además de encontrarse en la primera posición del índice de popularidad en PYPL (Popularity of Programming Language Index) a nivel mundial como se representa en la siguiente figura 15. [39]

Figura 15.
Tendencia de Python en comparación a Java



Nota. En esta gráfica se representa la popularidad del software Python en la actualidad.

Tomado de: Emprendimiento/Negocios. La internacionalización, en la mira del sector gráfico del país | Emprendimiento | Negocios | Portafolio. Portafolio.
<https://www.portafolio.co/negocios/emprendimiento/la-internacionalizacion-en-la-mira-del-sector-grafico-del-pais-522659>[10 Nov 2021]

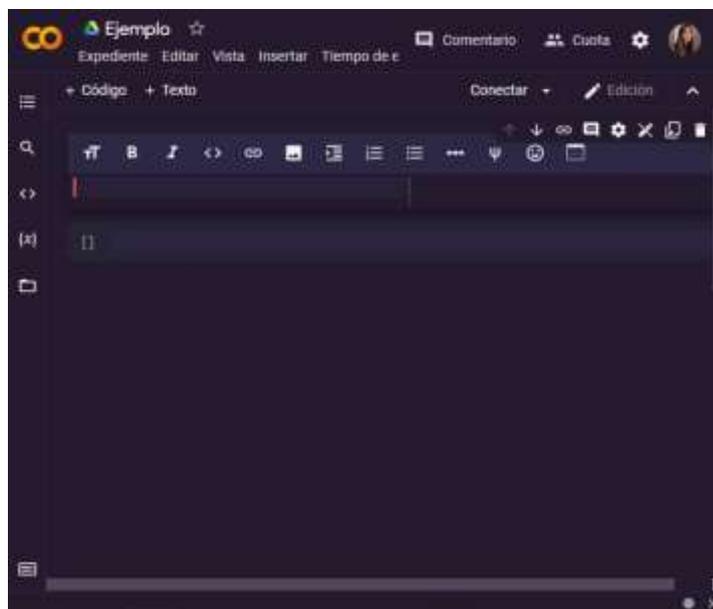
Este software además de ser libre, cuenta con facilidades en su programación debido a que se puede variar la plataforma, como las de Anaconda Navigator, las cuales son interfaces gráficas, sin embargo, como se mencionó anteriormente también tiene como beneficio la plataforma de colabory ya que deja que varios usuarios puedan interactuar en el mismo código.

De acuerdo a las características que presenta python tenemos que la plataforma es “multiparadigma (con sentencias de bucle, módulos y funciones), lenguaje interpretado, multiplataforma (Unix, Linux, Windows y sistemas Mac Os), es de tipado dinámico (si es int, string, float, etc.), libre distribución, gran soporte en el número de usuarios, facilidad de uso y etc” [49]. Debido a las comodidades que ofrece Python, hace que la interacción con el programador sea amigable y la estructura del código dependa de la creatividad del diseñador del código. En este lenguaje de programación se han desarrollado programas exitosos como lo son “Calibre: el mejor gestor de e-books para todos los usuarios, GNU MailMan: un programa para manejar listas de correo, BitTorrent: Programa para compartir ficheros de tipo torrent estándar, Odoo (antes OpenERP): Un ERP y mucho más para la gestión de empresas, de software libre y también usado en Webs como youtube y software hechos por Google”[49].

Ya que python es uno de los lenguajes más usados en la actualidad debido a su versatilidad frente a la programación, se considera un programador con variedad de usos, además de proporcionar estabilidad en los proyectos sin importar el alcance de los mismos en donde se pueden crear diferentes tipos de proyectos como de código abierto y diversas aplicaciones web.[50] además de contar con librerías que ayudan con el diferente desarrollo de los programas con el fin de crear una interfaz independiente, este lenguaje de programación cuenta con una gran cantidad de librerías que constan de diferentes módulos, Python maneja diferentes tipos de librerías de programación como de visualización, cálculo numérico. machine learning y deep learning.[51]

Para el desarrollo del proyecto se programó en Colabority, el cual permite ejecutar códigos y programar con el lenguaje de python desde un navegador, en este pueden editar diferentes usuarios y no requiere de configuraciones externas y da acceso gratuito a GPUs [52], en la figura 16 se evidencia el notebook de colab con sus respectivas herramientas básicas

Figura 16.
Notebook de colabority



Nota. En esta figura representa el notebook en blanco con sus herramientas básicas, existen dos líneas, una de texto y otra de código para programar en el lenguaje de python.

Como se puede observar en la figura en la parte superior izquierda se presentan comandos como + Código, + Texto, de esta manera hace más dinámica la elaboración de códigos ya que

se pueden agregar tablas o agregar fórmulas en el comando de textos, estas se elaboran con el mismo lenguaje de LaTeX.

3.3. Cinética de reacción

La velocidad de reacción depende de la temperatura, por ende, la variación de esta afecta el comportamiento de la reacción, ya sea para favorecer la formación de ciertos productos o la velocidad con la que ocurre el proceso termoquímico. [36] La ecuación de Arrhenius demuestra que la velocidad de una reacción química incrementa al aumentar la temperatura y experimentalmente se ha demostrado, la siguiente expresión que corresponde a la ecuación de Arrhenius:

Ecuación 3. Ecuación de Arrhenius

$$k(T) = k_0 * e^{\frac{-E_a}{RT}}$$

En esta ecuación los parámetros que se tienen presente son los siguientes:

- **k(T)**= Es la constante de velocidad de la reacción y sus unidades dependen del orden global de reacción. [36]
- **k₀**= Corresponde y representa al factor de frecuencia o también conocido como factor pre-exponencial, en la literatura se puede encontrar representado como **A**, indicando la frecuencia de las colisiones entre las moléculas.[36]
- **E_a**= Es la energía de activación y esta es la energía mínima necesaria para que se produzca una reacción química dada. Para que ocurra una reacción entre dos moléculas, éstas deben colisionar en la orientación correcta y poseer una cantidad de energía mínima. [36]
- **R**= Es la constante universal de los gases ideales, Si **E_a** viene dada en kJ*mol⁻¹, su valor es 8,31*10⁻³ kJ·mol⁻¹·K o se busca una equivalencia entre las unidades para que haya concordancia. [36]
- **T**= Corresponde a la temperatura (K). [36]

La velocidad de reacción está entrelazada con la teoría de las colisiones, por tanto está basada por la constante cinética establecida por Svante Arrhenius, como se muestra a continuación:

Ecuación 4. Cinética de reacción.

$$Y_i = k(T) * \prod C_{reactivos}^n$$

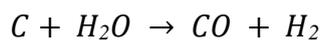
De acuerdo el modelo utilizado para determinar experimentalmente los parámetros cinéticos para la reacción se obtienen el orden de la reacción (n) para la reacción en específico y la concentración de reactivo a la que depende el proceso en el que se centra la cinética, ya sea el proceso termoquímico una gasificación o pirolisis. [13]

Para este modelamiento no se tuvo presente todas las reacciones que ocurren en la pirólisis del cuesco de palma aceitera, por ende, las reacciones de formación de CO, H₂ y CH₄ tuvieron mayor relevancia debido a su formación como se muestra a continuación: [13], [36], [68]

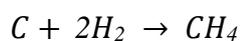
- **Reacción Boudouard**



- **Reacción biomasa - agua**



- **Reacción de formación de metano**



Las reacciones secundarias dependen del gradiente de temperatura en la partícula y entre otras condiciones que son manipuladas durante el proceso en este trabajo de grado para así garantizar la mayor cantidad de alquitranes posible [13].

Las reacciones principales son las que rigen el proceso de pirolisis de la biomasa (Cuesco de palma aceitera) están abarcan la descomposición de la lignina, la hemicelulosa y celulosa, para la formación y obtención de CO₂, CO, CH₄, H₂O, H₂ y alquitranes. Las generaciones de estos componentes se pueden estudiar a partir de las cinéticas de reacción globales de la

descomposición de las especies químicas principales que componen al cuesco, por otro lado también se puede analizar desde la generación de las especies gaseosas, mediante mecanismos de reacciones paralelas. [13]

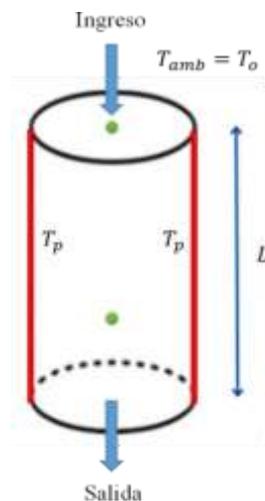
La cinética de reacción describe la variación de la concentración respecto el tiempo de reacción, por lo tanto, se parte de la siguiente relación:

Ecuación 5. Expresión de cinética de reacción respecto a la variación de concentración.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = k \exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right) C$$

A continuación, se muestra un esquema en la figura 17 donde se plantea el proceso termoquímico el cual indica la descomposición de biomasa, de esta manera se puede identificar el comportamiento de partículas dentro del reactor, para la zona específica donde ocurre el proceso de pirólisis:

Figura 17.
Esquema del proceso de pirólisis



Nota. Los puntos verdes representan la biomasa o la partícula que está reaccionando a lo largo del reactor.

Donde:

L = Longitud del pirolizador (También llamada Z)

T_p = Temperatura de la pared

T_0 = Temperatura ambiente o inicial de la biomasa (para cada partícula), también denominada T_{amb}

De acuerdo a la imagen se logra identificar que la biomasa entra por la parte superior del pirolizador, recibiendo calor a través de las paredes y a medida que la partícula reacciona se va desplazando a lo largo del equipo. Cabe resaltar que entre más cerca la biomasa esté de las paredes mayor será la temperatura debido a que el calor suministrado para que ocurra la reacción química es transferido por medio de las mismas con un mecanismo de flujos paralelos, de esta manera el centro del reactor tendrá temperaturas inferiores.

El modelo cinético empleado es el de Rummer el cual está basado en la velocidad de reacción modelada por un esquema de reacciones haciendo uso de la ecuación de Arrhenius y un esquema de potencias siendo uno de los modelos más actuales para el proceso de pirólisis, además esta expresión no se basa en el consumo o degradación de la biomasa sino en la formación de los principales compuestos gaseosos [13], este esquema cinético de reacción se utiliza gracias los objetivos que se encaminan a la formación de compuestos dentro del reactor lo cual es bastante pertinente con este trabajo puesto que lo que se desea analizar es la distribución de productos mayoritarios.

A continuación se muestra una tabla que contiene los parámetros cinéticos de la madera de haya los cuales serán los mismos para cada una de las especies del cuesco de palma aceitera debido a la similitud que hay entre estas dos biomasa como se mencionó en el capítulo 1, además las variaciones en composición y estructura son pequeñas permitiendo que el comportamiento sea similar en ambas y se pueda llevar esta estimación, donde se tiene el factor pre-exponencial $k_{o,i,k}$, la energía de activación $E_{a i,k}$ y el orden de la reacción $n_{i,k}$, en la tabla 7 se encuentra lo anterior.

Tabla 7.

Parámetros para la cinética de reacción en el proceso termoquímico de madera de haya

Gas	$k_0 / (1/s)$	$E_a / (J/mol)$	y_0	N
CO	$8.00 \cdot 10^8$	$1.31 \cdot 10^5$	0.0165	1

	6.00*10 ¹	4.00*10 ⁴	0.0190	1
	5.00*10 ⁰	7.10*10 ⁴	0.0120	1
CO ₂	5.00*10 ¹⁴	1.28*10 ⁵	0.0200	2
	1.00*10 ¹⁶	1.61*10 ⁵	0.0360	2
	2.00*10 ⁴	7.00*10 ⁴	0.0080	2
H ₂ O	5.00*10 ⁹	1.10*10 ⁵	0.0210	2
	7.00*10 ¹⁶	1.72*10 ⁵	0.0260	2
	2.00*10 ⁴	7.50*10 ⁴	0.0190	2
H ₂	4.00*10 ⁵	1.17*10 ⁵	0.0043	2
CH ₄	1.00*10 ¹⁴	1.40*10 ⁵	0.0030	2
	1.00*10 ⁶	1.00*10 ⁵	0.0042	2
Alquitranes	2.90*10 ⁶	9.30*10 ⁴	0.1800	1
	4.50*10 ⁸	1.29*10 ⁵	0.4300	1
	1.00*10 ⁸	1.30*10 ⁵	0.0300	1

Nota: Parámetros de la cinética de reacción. Tomado de: B. Rummer, J. Petek and G. Staudinger. H. J. García Patiño, *Modelación de la gasificación de biomasa en un reactor de lecho fijo*, tesis mast. Facultad de Ingenierías, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, 2011. [En línea]. Consultado:<https://repositorio.unal.edu.co/bitstream/handle/unal/7563/291499.2011.pdf?sequence=1&isAllowed=y>. [10 nov 2021]

Para demostrar que los parámetros cinéticos de la madera de haya son aptos para utilizar como si fueran los del cuesco de palma se realiza un análisis con respecto a la composición elemental tanto entre la madera de haya y el cuesco de palma, así mismo se muestra estos valores en la figura 18.

Figura 18.
Comparación elemental para diferentes biomásas.

Composición Elemental						
	C	H	O	N	S	
	52.8%	5.7%	40.5%	<1%	<1%	Cuesco de palma
	C	H	O	N	S	
	48.9%	5%	45.9%	<1%	<1%	Madera de haya

Nota. Composición elemental del cuesco de palma de aceite frente a la composición elemental de la madera de haya, evidenciando que los valores son muy similares.

Se calcula la variación y el porcentaje de error para todos los componentes elementales, teniendo en cuenta que los valores no se toman en porcentajes en las siguientes expresiones:

Ecuación 6. Variación de la composición elemental

$$\text{Var. elemental} = |\text{Comp. del elemento de madera de haya} \dots - \text{Comp. del elemento de cuesco}|$$

Aplicando la ecuación 6 se obtuvieron las variaciones elementales: C (0.039), H (0.007), O (0), N (aprox. 0) y S (aprox. 0).

Ecuación 7. Porcentaje de error elemental

$$\% \text{Error elemental} = \frac{\text{Var. del elemental}}{\text{Comp. del elemento de cuesco}} * 100$$

Utilizando la ecuación 7 se obtuvieron los porcentajes de errores elementales: C (0.74%), H (12.28%), O (12.34%), N (aprox. 0 %) y S (aprox. 0 %). Demostrando que para el carbono, nitrógeno y azufre los errores son mínimos en cambio para el contenido de oxígeno e hidrógeno varía considerablemente, aun así hay una semejanza considerable entre las dos biomásas.

Otra forma demostrar el uso de los parámetros cinéticos de la madera de haya se debe a la proximidad que hay en las energías de activación como se muestra en la tabla 8.

Tabla 8.

Comparación de la energía de activación de la degradación de lignina, celulosa y hemicelulosa de la madera con respecto al cuesco de palma

Madera de haya	
Composición estructural	E_a / J/mol
Lignina	45000-140000
Celulosa	86000-286000
Hemicelulosa	40000-19000
Cuesco de palma	
Composición estructural	E_a / J/mol
Lignina	186000
Celulosa	251000
Hemicelulosa	41000

Nota. Comparación entre diferentes biomásas. Tomado de: C. O. Quesada González, M. A. Cantos Macías, W. L. Duharte, D. M. Pozo González & L. C. Bigñot Favier, “Efecto de la velocidad de calentamiento y la biomasa en la cinética de su pirólisis”, *SCIELO*, vol. 31, no. 3, sept-dic, 2019, [En línea], http://scielo.sld.cu/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S2224-54212019000300478, J. A. Caballero Suarez, *Estudio cinético de la pirólisis de lignina. Diseño de un reactor para el estudio de las reacciones secundarias*, tesis doct., Facultad de Ingenierías, Universidad de Alicante, Alicante, España, 1995. [En línea] Disponible: <file:///C:/Users/USUARIO/Downloads/Caballero-Suarez-Jose-Antonio.pdf>, M. A. Cantos Macías, I. O. Quesada González, A. Ross Mesa, A. L. Brito Soubanell, A. Casanova Gómez, “Cinética de la pirólisis de residuos madereros”, *Química*, vol. 30, no. 3, mzo, pp. 400-422, 2018, [En línea], <https://www.redalyc.org/journal/4435/443557797003/html/> [Acceso Feb. 17, 2022], E. Orrego Restrepo, *Cambios estructurales fisicoquímicos de la biomasa durante la pirólisis lenta.*, tesis mast., Facultad de Ingenierías, Universidad Nacional, Medellín, Colombia, 2021. [En línea] Disponible: <https://repositorio.unal.edu.co/bitstream/handle/unal/79780/1036944138.2021.pdf?sequence=4&isAllowed=y>

A partir de la tabla 8 se calcula la variación y el error porcentual para la composición estructural a partir de las siguientes ecuaciones.

Ecuación 8. Variación de la energía de activación para la composición estructural

$$Var. Ea = |Ea\ madera\ de\ haya - Ea\ cuesco|$$

Empleando la ecuación 8 se logra identificar que la lignina presenta una variación en la energía de activación de 4600, en cambio la hemicelulosa y la celulosa no presentan variación.

Ecuación 9. Porcentaje de error de la energía de activación para la composición estructural.

$$\%Error\ Ea\ estructural = \frac{Var. Ea}{Ea\ cuesco} * 100$$

Aplicando la ecuación 8 se obtuvieron los siguientes errores porcentuales para las energías de activación: Lignina 2.47 %, celulosa 0.00 % y hemicelulosa 0.00%, estos resultados dan a entender que la similitud es muy buena entre el cuesco de palma y la madera de haya por ende la consideración de usar los parámetros cinéticos de la madera de haya es aceptable.

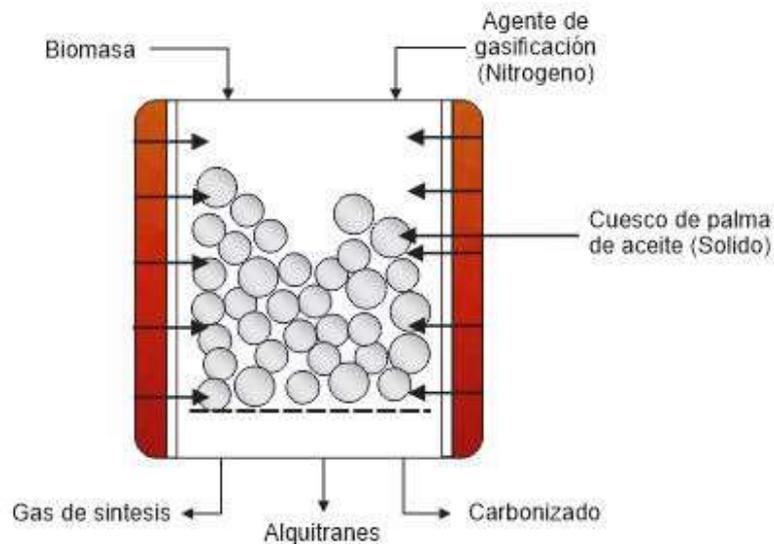
3.4. Balance de energía general

Para los balances generales de masa y energía se debe tener en cuenta los fenómenos ocurridos dentro del reactor de lecho fijo, en la siguiente figura se evidencia la conducción y la convección entre, el sólido, el gas y la pared.

Teniendo en cuenta que el modelamiento se realizará dentro de un reactor de lecho fijo, se obtiene la figura 19, donde se evidencia el volumen de control junto a sus corrientes de entrada y salida.

Figura 19.

Flujo de corrientes de entrada y salida para el esquema del reactor de lecho fijo



Nota. Reactor de lecho fijo con sus respectivas corrientes de entrada y salida para el proceso en específico de la pirólisis de hueso de palma.

Para definir los fenómenos de transporte de masa y energía se debe tener claridad de las interacciones entre la pared y las partículas de la biomasa dentro del reactor, para esto se definen los siguientes términos:

3.5. Dispersión

La dispersión o más conocida como transferencia de calor se puede transmitir por diferentes medios como lo es la convección y la conducción entre el entorno de las moléculas y diferentes agentes como gases o flujos de calor que afecten el equipo. [37]

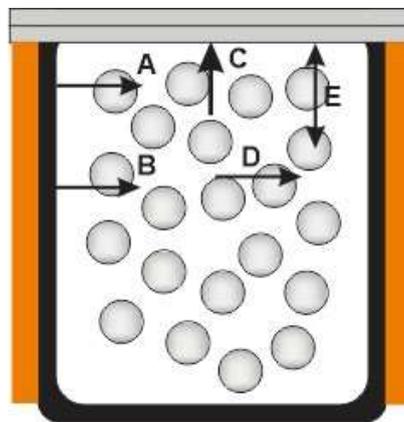
3.5.1. Conducción de calor

La conducción de calor es un sistema de transferencia de energía en forma de calor, este se basa en el principio del cual entre dos cuerpos existe un contacto con el fin de regular la energía entre los dos objetos, en donde el parámetro más importante es la conductividad térmica del material, la cual es una propiedad física y única de cada material que mide la conducción de calor en forma de movimiento cinético de las moléculas. [37]

3.5.2. Convección de calor

Es una forma de transferencia de calor, básicamente se caracteriza porque se produce en un medio como un fluido el cual transfiere calor en zonas con diferentes temperaturas, donde implica que la energía térmica recorre un volumen y le puede transferir calor a otras moléculas ya sea para calentarlas o enfriarlas, la convección cuenta con el parámetro convectivo de los fluidos, lo cual es una propiedad única de la mezcla de compuestos implícitos dentro del equipo. [37]

Figura 20.
Interacción de partículas dentro del reactor de lecho fijo



Nota. En la ilustración se identifican las interacciones entre el balance masa y energía en cuanto a las partículas con el gas y las partículas con la pared. Tomado de: H. J. García Patiño, *Modelación de la gasificación de biomasa en un reactor de lecho fijo*, tesis mast. Facultad de Ingenierías, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá , 2011. [En línea]. Consultado:<https://repositorio.unal.edu.co/bitstream/handle/unal/7563/291499.2011.pdf?sequence=1&isAllowed=y>[10 nov 2021]

Las letras que denotan el fenómeno de la convección son las letras C, E, A, identificando las interacciones entre el sólido y el gas, además representan las interacciones que existen entre

la pared y el gas respectivamente, por otro lado, se puede evidenciar el fenómeno de conducción el cual se encuentra la letra B y D, las cuales representan las interacciones entre la pared, el sólido y entre partículas, respectivamente. [13]

3.6. Descripción del proceso

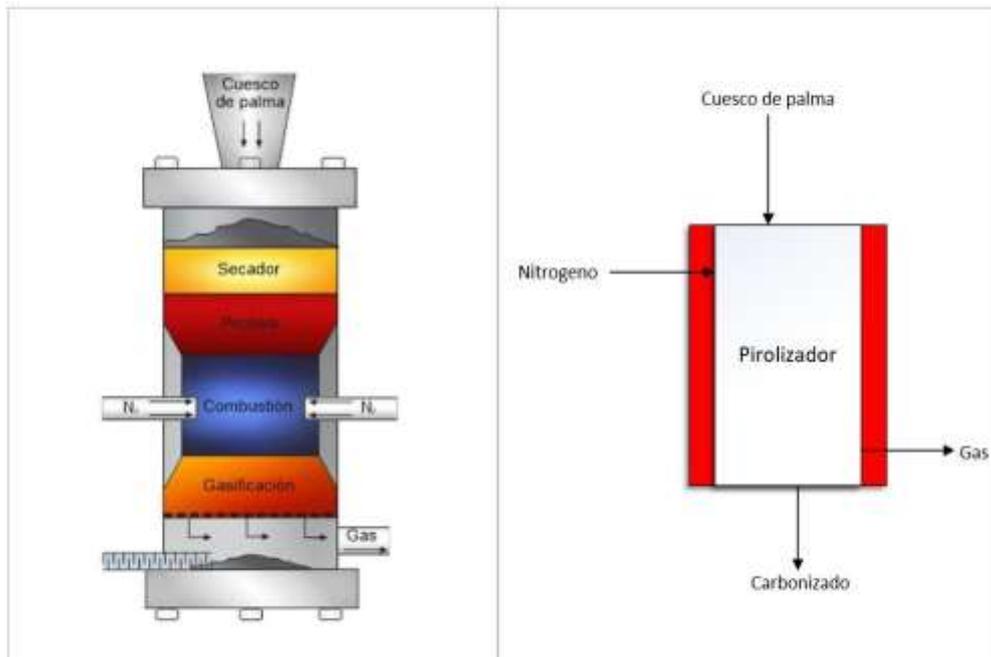
Para este proceso se tiene en cuenta un estudio dentro de un gasificador de tipo downdraft realizado por Harold García [12], donde se evaluará la zona de pirólisis, de esta manera la reacción ocurre cuando el nitrógeno ingresa al equipo con un caudal de 2 L/h [13] y tiene contacto con la biomasa a una temperatura determinada, formando diferentes compuestos como hidrógeno, monóxido de carbono, dióxido de carbono, agua, metano y alquitranes.

El este equipo cuenta con una chaqueta la cual transfiere calor desde las paredes al centro del reactor donde se encuentra la cama de partículas, también tiene con un sistema de calentamiento con flujos paralelos, es decir que por medio de una chaqueta pasa un fluido de forma paralela a la biomasa y gases que ingresan en el reactor, este fluido no tiene contacto directo con la biomasa evitando la contaminación o afectaciones a la hora de evaluar el modelo matemático.

Partiendo de que este proceso ingresa la biomasa totalmente seca, con un porcentaje de humedad menor al 4%, dentro del reactor ocurren procesos de transferencia de calor y de masa donde se van a tener en cuenta ecuaciones y correlaciones para identificar el valor de los mismos a medida que el fluido avanza por el eje axial y hacia el eje radial.

En la figura 21 se muestra un diagrama de bloques y de flujo de proceso que abarca el volumen de control, con el fin de demostrar el funcionamiento y la zona que se estudiará dentro del gasificador a lo largo de este proyecto.

Figura 21.
Esquema del proceso de producción



Nota. En la ilustración se identifica la zona a estudiar con el fin de demostrar el equipo y la zona roja donde se estudiará.

De esta manera se obtendrán gráficas con el perfil de temperatura del reactor que corresponde al hueso de palma aceitera, los resultados esperados se representarán de manera bidimensional para la temperatura con el balance de energía, por otro lado el balance de materia se realizará de forma axial.

3.6.1. Fase gaseosa

Inicialmente, se analiza la fase gaseosa, de esta manera el equipo cuenta con una tecnología de bomba de salida que succiona los gases generados en el interior del reactor, esta bomba se encuentra ubicada al final del reactor para estabilizar la presión y poder tomar un valor constante en esta variable, es decir, que la presión dentro del reactor es igual a la presión atmosférica. [12]

Para el balance de energía en la fase gaseosa se tiene en cuenta la dispersión y convección tanto axial como radial, de este modo se obtendrá la siguiente ecuación

Ecuación 10. Ecuación general de balance de masa

$$Entrada - Salida + Generación = Acumulación$$

Se obtiene la ecuación general del balance de energía para la fase gaseosa, de esta manera se incluyen términos de concentraciones, calores específicos, difusión, velocidad y temperatura que afecten dicha fase:

Ecuación 11. Balance de energía para la fase gaseosa.

$$\begin{aligned}
 (cC_p)_g \frac{\partial T^g}{\partial r} &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial t} (r D^g_r \frac{\partial T^g}{\partial r}) + \frac{\partial}{\partial z} (D^g_{ax} \frac{\partial T^g}{\partial z}) + (cC_p)_g \omega^g_r \frac{\partial T^g}{\partial r} \dots \\
 &\dots - (cC_p)_g \omega^g_{ax} \frac{\partial T^g}{\partial z} - \frac{h A_{esp}}{\varepsilon_b} (T^g - T^s) - q^g_{th}
 \end{aligned}$$

Sabiendo que:

1. Acumulación
2. Dispersión radial
3. Dispersión axial
4. Convección radial
5. Convección axial
6. Transferencia de calor entre gas-sólido
7. Generación

Con el fin de simplificar el balance de energía se toman unas suposiciones, de esta manera se evaluará en los resultados frente a diferentes investigaciones.

- Se considera un flujo estacionario, es decir que la acumulación se aproxima a cero.
- La velocidad del flujo radial se aproxima a cero, ya que este parámetro se considera mínimo en comparación a la velocidad del flujo axial, además de que su valor final es muy pequeño para considerar dichos cambios en sentido radial. [12]
- Teniendo en cuenta que la transferencia de calor por convección tiene un flujo alto, la dispersión axial se puede tomar aproximada a cero. [12]

- La generación se aproxima a cero, debido a las numerosas reacciones tanto endotérmicas como exotérmicas que se presentan en el proceso. [13]

De esta manera Ecuación 7 se simplifica a:

Ecuación 12. Balance de energía para la fase gaseosa.

$$(cC_p)_g \frac{\partial T^g}{\partial r} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r D_g \frac{\partial T^g}{\partial r}) + \frac{\partial}{\partial z} (D_{ax}^g \frac{\partial T^g}{\partial z}) + (cC_p)_g \omega_g \frac{\partial T^g}{\partial r} \dots$$

$$\dots - (cC_p)_g \omega_g \frac{\partial T^g}{\partial z} - \frac{h A_{esp}}{\epsilon_b} (T^g - T^s) - q^g$$

Obteniendo:

Ecuación 13. Balance de energía final para la fase gaseosa.

$$0 = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r D_g \frac{\partial T^g}{\partial r}) - (cC_p)_g \omega_{ax} \frac{\partial T^g}{\partial z} - \frac{h A_{esp}}{\epsilon_b} (T^g - T^s)$$

3.6.2. Fase sólida

Como anteriormente se mencionó, en la fase gaseosa, la fase sólida cuenta con la misma suposición inicial, es decir que la presión dentro del reactor es igual a la presión atmosférica, gracias a la bomba de succión.

Desde el balance general

Ecuación 14. Ecuación general de balance de masa

$$\text{Entrada} - \text{Salida} + \text{Generación} = \text{Acumulación}$$

Se obtiene la ecuación general del balance de energía para la fase sólida, de esta manera se incluyen términos de concentraciones, calores específicos, difusión, velocidad y temperatura que afecten dicha fase:

Ecuación 15. Ecuación general de balance de energía para la fase sólida.

$$(cC_p)_s \frac{\partial T^s}{\partial r} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\lambda^s \frac{\partial T^s}{\partial r}) + \frac{\partial}{\partial z} (\lambda^s \frac{\partial T^s}{\partial z}) + (cC_p)_s \omega_s \frac{\partial T^s}{\partial r} \dots$$

1
2
3
4

$$\dots - (cC_p)^s \omega^s \frac{\partial T^s}{\partial z} - \frac{h A_{esp}}{\varepsilon_b} (T^g - T^s) - q^s_{th}$$

Sabiendo que:

1. Acumulación
2. Conducción radial efectiva
3. Conducción axial efectiva
4. Convección radial
5. Convección axial
6. Transferencia de Calor entre el gas y el sólido
7. Generación

En el mismo orden de ideas se simplifican las ecuaciones para facilitar el manejo de las mismas, para este caso se tienen las siguientes suposiciones:

- Se tomará el sistema en un estado estacionario, es decir que el término de acumulación será igual a cero.
- La generación se aproxima a cero, debido a las numerosas reacciones tanto endotérmicas como exotérmicas. [13]
- La velocidad del flujo radial se aproxima a cero, ya que este parámetro se considera mínimo en comparación a la velocidad del flujo axial, además de que su valor final es muy pequeño para considerar dichos cambios en sentido radial. [12]

Es decir que se obtiene la ecuación de balance general

Ecuación 16. Ecuación general de balance de energía para la fase sólida.

$$(cC_p)^s \frac{\partial T^s}{\partial r} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \lambda^s \frac{\partial T^g}{\partial r}) + \frac{\partial}{\partial z} (\omega^s \frac{\partial T^s}{\partial z}) + (cC_p)^s \omega^s_r \frac{\partial T^s}{\partial r} \dots$$

$$\dots - (cC_p)^s \omega^s \frac{\partial T^s}{\partial z} + \frac{h A_{esp}}{\varepsilon_b} (T^g - T^s) - q^s_{th}$$

De esta manera se obtiene

Ecuación 17. Ecuación general de balance de energía final para la fase sólida.

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \lambda_s \frac{\partial T^g}{\partial r}) - (c C_p) \omega_s \frac{\partial T^s}{\partial z} + \frac{h A_{esp}}{\varepsilon_b} (T^g - T^s) = 0$$

3.7. Balance por especie

Se plantean las ecuaciones de balance por especie con el fin de identificar las concentraciones en cada nodo, en este caso se obtendrán a partir de la cinética de reacción, esta se estudiará según los parámetros cinéticos anteriormente mencionados en la tabla 7, donde se presentan las principales reacciones de degradación de lignina, celulosa y hemicelulosa, sin embargo, este modelo tiene limitaciones frente a la temperatura y la fracción másica máxima que pueden tener los compuestos gaseosos dentro del reactor, ya que esta depende de la masa inicial del subproducto es decir que el término $y_{i,k} = \left(\frac{m_{i,k}}{m_s} \right)$ [12]

Ecuación 18. Cinética de reacción para el proceso de pirólisis - Modelo de Rummer.

$$\frac{\partial y_i}{\partial t} = \sum_{k=1}^k k_{0,i,k} \left(\frac{-E_a}{RT} \right) \left(y_{0,i,k} - y_{i,k} \right)^{n_{i,k}}$$

Donde:

- $E_{a,i,k}$ = Es la energía de activación del componente **i** en la reacción **k** (J/mol)
- R_u = Constante de los gases ideales (J/mol*K).
- $n_{i,k}$ = Orden de reacción para el componente **i** en la reacción **k**.
- $k_{0,i,k}$ = Factor pre-exponencial (1/s o s⁻¹)
- **T** = Temperatura en kelvin (K)
- $y_{0,i,k}$ = Es la máxima fracción másica que se puede alcanzar del componente **i** en la reacción **k** dentro del reactor de lecho fijo.
- $y_{i,k}$ = Es la fracción másica del componente **i** en un instante sobre la masa inicial de la biomasa.

Por otro lado, por medio de la ecuación 15 se realiza un cambio de variables para obtener la longitud del reactor con respecto al tiempo en que ocurre la pirólisis, de esta manera se toma la siguiente ecuación del libro de J.M. Smith [54]

Donde

Ecuación 19. Paso de tiempo a longitud la cinética de reacción

$$dt = \frac{\varepsilon_s \rho_s}{G_s} dz$$

Sabiendo que

$\varepsilon_s =$ Retención fraccionaria de sólidos

$\rho_s =$ Densidad de la cama del sólido

$G_s =$ Velocidad axial del sólido en el reactor

De esta manera se despeja el término dz con el fin de reemplazarlo en la fórmula inicial de la cinética de reacción para la pirólisis.

Ecuación 20. Despeje para la longitud

$$dt \frac{G_s}{\varepsilon_s \rho_s} = dz$$

Este término se reemplaza en la ecuación 5 con el fin de obtener la cinética de reacción en términos de la longitud del reactor.

Ecuación 21. Cinética de reacción con respecto a la longitud del reactor

$$\frac{\partial y_i}{\partial z} = \left(\frac{\varepsilon_s \rho_s}{G_s} \right) \sum_{k=1}^k k_{0,i,k} \left(\frac{-Ea}{RT} \right) \left(y_{0,i,k} - y_{i,k} \right)^{n_{i,k}}$$

Con respecto a la ecuación 18 y 21 se plantean sumatorias de los respectivos compuestos presentes en la mezcla de gases, la cual se genera por la degradación de biomasa de la siguiente manera

- **Componente CO**

Ecuación 18. Velocidad de reacción para el Monóxido de carbono con respecto al tiempo

$$\frac{\partial y_i}{\partial t} = k_{o,1,CO} \exp\left(\frac{-E_{a1,CO}}{R_u T}\right) (y_{o,1,CO} - y_{i,k})^{n_{1,k}} + k_{o,2,CO} \exp\left(\frac{-E_{a2,CO}}{R_u T}\right) (y_{o,2,CO} - y_{i,k})^{n_{2,k}} \dots$$

$$\dots + k_{o,3,CO} \exp\left(\frac{-E_{a3,CO}}{R_u T}\right) (y_{o,3,CO} - y_{i,k})^{n_{3,k}}$$

Ecuación 19. Velocidad de reacción para el Monóxido de carbono con respecto a la longitud

$$\frac{\partial y_i}{\partial z} = \left(\frac{\epsilon_s \rho_s}{G_s}\right) (k_{o,1,CO} \exp\left(\frac{-E_{a1,CO}}{R_u T}\right) (y_{o,1,CO} - y_{i,k})^{n_{1,k}} \dots$$

$$\dots + k_{o,2,CO} \exp\left(\frac{-E_{a2,CO}}{R_u T}\right) (y_{o,2,CO} - y_{i,k})^{n_{2,k}} + k_{o,3,CO} \exp\left(\frac{-E_{a3,CO}}{R_u T}\right) (y_{o,3,CO} - y_{i,k})^{n_{3,k}})$$

- **Componente CO₂**

Ecuación 20. Velocidad de reacción para el dióxido de carbono con respecto al tiempo

$$\frac{\partial y_i}{\partial t} = k_{o,1,CO_2} \exp\left(\frac{-E_{a1,CO_2}}{R_u T}\right) (y_{o,1,CO_2} - y_{i,k})^{n_{1,k}} \dots$$

$$\dots + k_{o,2,CO_2} \exp\left(\frac{-E_{a2,CO_2}}{R_u T}\right) (y_{o,2,CO_2} - y_{i,k})^{n_{2,k}} + k_{o,3,CO_2} \exp\left(\frac{-E_{a3,CO_2}}{R_u T}\right) (y_{o,3,CO_2} - y_{i,k})^{n_{3,k}}$$

Ecuación 21. Velocidad de reacción para el dióxido de carbono con respecto a la longitud

$$\frac{\partial y_i}{\partial z} = \left(\frac{\epsilon_s \rho_s}{G_s}\right) (k_{o,1,CO_2} \exp\left(\frac{-E_{a1,CO_2}}{R_u T}\right) (y_{o,1,CO_2} - y_{i,k})^{n_{1,k}} \dots$$

$$\dots + k_{o,2,CO_2} \exp\left(\frac{-E_{a2,CO_2}}{R_u T}\right) (y_{o,2,CO_2} - y_{i,k})^{n_{2,k}} + k_{o,3,CO_2} \exp\left(\frac{-E_{a3,CO_2}}{R_u T}\right) (y_{o,3,CO_2} - y_{i,k})^{n_{3,k}})$$

- **Componente H₂O**

Ecuación 22. Velocidad de reacción para el agua con respecto al tiempo

$$\frac{\partial y_i}{\partial t} = k_{o,1,H_2O} \exp\left(\frac{-E_{a1,H_2O}}{R_u T}\right) (y_{o,1,H_2O} - y_{i,k})^{n_{1,k}} \dots$$

$$\dots + k_{o,2,H_2O} \exp\left(\frac{-E_{a2,H_2O}}{R_u T}\right) (y_{o,2,H_2O} - y_{i,k})^{n_{2,k}} + k_{o,3,H_2O} \exp\left(\frac{-E_{a3,H_2O}}{R_u T}\right) (y_{o,3,H_2O} - y_{i,k})^{n_{3,k}}$$

Ecuación 23. Velocidad de reacción para el agua con respecto a la longitud

$$\frac{\partial y_i}{\partial z} = \left(\frac{\epsilon_s \rho_s}{G_s}\right) (k_{o,1,H_2O} \exp\left(\frac{-E_{a1,H_2O}}{R_u T}\right) (y_{o,1,H_2O} - y_{i,k})^{n_{1,k}} \dots$$

$$\dots + k_{o,2,H_2O} \exp\left(\frac{-E_{a2,H_2O}}{R_u T}\right) (y_{o,2,H_2O} - y_{i,k})^{n_{2,k}} + k_{o,3,H_2O} \exp\left(\frac{-E_{a3,H_2O}}{R_u T}\right) (y_{o,3,H_2O} - y_{i,k})^{n_{3,k}})$$

- **Componente H₂**

Ecuación 24. Velocidad de reacción para el hidrógeno con respecto al tiempo.

$$\frac{\partial y_i}{\partial t} = k_{o,H_2} \exp\left(\frac{-E_{a,H_2}}{R_u T}\right) (y_{o,H_2} - y_{i,k})^{n_k}$$

Ecuación 25. Velocidad de reacción para el hidrógeno con respecto al tiempo.

$$\frac{\partial y_i}{\partial z} = \left(\frac{\varepsilon_s \rho_s}{G_s}\right) \left(k_{o,H_2} \exp\left(\frac{-E_{a,H_2}}{R_u T}\right) (y_{o,H_2} - y_{i,k})^{n_k} \right)$$

- **Componente CH₄**

Ecuación 26. Velocidad de reacción para el metano con respecto al tiempo.

$$\frac{\partial y_i}{\partial t} = k_{o,1,CH_4} \exp\left(\frac{-E_{a,1,CH_4}}{R_u T}\right) (y_{o,1,CH_4} - y_{i,k})^{n_{1,k}} + k_{o,1,CH_4} \exp\left(\frac{-E_{a,1,CH_4}}{R_u T}\right) (y_{o,1,CH_4} - y_{i,k})^{n_{1,k}}$$

Ecuación 27. Velocidad de reacción para el metano con respecto a la longitud

$$\begin{aligned} \frac{\partial y_i}{\partial z} &= \left(\frac{\varepsilon_s \rho_s}{G_s}\right) \left(k_{o,1,CH_4} \exp\left(\frac{-E_{a,1,CH_4}}{R_u T}\right) (y_{o,1,CH_4} - y_{i,k})^{n_{1,k}} \right) \dots \\ &\dots + k_{o,1,CH_4} \exp\left(\frac{-E_{a,1,CH_4}}{R_u T}\right) (y_{o,1,CH_4} - y_{i,k})^{n_{1,k}} \end{aligned}$$

- **Alquitranes**

Ecuación 28. Velocidad de reacción para el tolueno al tiempo

$$\begin{aligned} \frac{\partial y_i}{\partial t} &= k_{o,1,Alquit.} \exp\left(\frac{-E_{a,1,Alquit.}}{R_u T}\right) (y_{o,1,Alquit.} - y_{i,k})^{n_{1,k}} \dots \\ &\dots + k_{o,2,Alquit.} \exp\left(\frac{-E_{a,2,Alquit.}}{R_u T}\right) (y_{o,2,Alquit.} - y_{i,k})^{n_{2,k}} \dots \\ &\dots + k_{o,3,Alquit.} \exp\left(\frac{-E_{a,3,Alquit.}}{R_u T}\right) (y_{o,3,Alquit.} - y_{i,k})^{n_{3,k}} \end{aligned}$$

Ecuación 29. Velocidad de reacción para el tolueno a la longitud

$$\begin{aligned} \frac{\partial y_i}{\partial z} &= \left(\frac{\varepsilon_s \rho_s}{G_s}\right) \left(k_{o,1,Alquit.} \exp\left(\frac{-E_{a,1,Alquit.}}{R_u T}\right) (y_{o,1,Alquit.} - y_{i,k})^{n_{1,k}} \right) \dots \\ &\dots + k_{o,2,Alquit.} \exp\left(\frac{-E_{a,2,Alquit.}}{R_u T}\right) (y_{o,2,Alquit.} - y_{i,k})^{n_{2,k}} \dots \\ &\dots + k_{o,3,Alquit.} \exp\left(\frac{-E_{a,3,Alquit.}}{R_u T}\right) (y_{o,3,Alquit.} - y_{i,k})^{n_{3,k}} \end{aligned}$$

3.8. Condiciones de frontera

Las condiciones de frontera son restricciones que ayudan con el correcto desarrollo del modelo matemático, abarcan tanto la fase gaseosa como la fase sólida, para realizarlas es necesario entender el dimensionamiento del equipo, en este caso se habla de un modelo bidimensional de un reactor tubular donde la biomasa atravesará el reactor de forma axial, sin embargo, se tiene en cuenta los fenómenos presentes en este modelo los cuales modifican directamente el comportamiento de los perfiles de temperatura y concentración.

Por otro lado, se debe tener en cuenta que el reactor cuenta con una altura desde $z=0$ y $z=L$ con respecto al movimiento axial, donde el valor de la longitud final se comprueba a partir de la fórmula adquirida en la cinética, en cuanto al movimiento radial se tiene en cuenta $r=0$ y $r=R$, este dato final da lugar a la bibliografía investigada.

Las condiciones de frontera son valores que se deben conocer en el sistema, en este caso se refiere a las temperaturas presentes en las paredes del reactor y las zonas abiertas donde tiene contacto con la temperatura del medio ambiente, la ecuación que se presenta del modelo matemático es de tipo elíptico, lo cual quiere decir que las restricciones se establecen en cuanto a sus direcciones, a continuación se presentan las condiciones de frontera de tipo Newman y Dirichlet para dicho modelo matemático:

- Se considera simetría en el equipo, es decir, que la coordenada radial que se puede ubicar en la mitad del reactor, para este punto se considera que hay un mínimo en el valor de la temperatura por tanto el diferencial de temperatura es cero.[12]

$$r = 0 ; \frac{\partial T}{\partial r} = 0$$

- Cuando se llega al valor final del radio, es decir a la pared, la temperatura del sistema será igual a la temperatura de la pared, de este modo oscila alrededor de los 700 K, donde ocurre el proceso de pirólisis.[12]

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

- Cuando la biomasa ingresa al reactor se considera en un z igual a cero, es decir que esta frontera tiene contacto con la temperatura exterior ya que es un sistema abierto. [12]

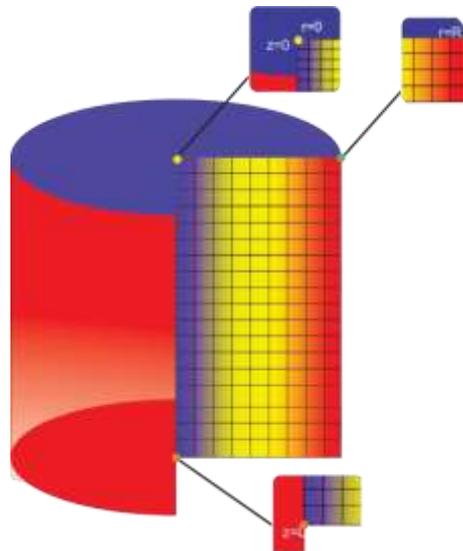
$$z = 0 ; T = T_{ambiente}$$

- Por último, se tiene una condición de frontera para la parte inferior del reactor, la cual indica que a una longitud L no existe transferencia de calor. [12]

$$z = L ; \frac{\partial T}{\partial z} = 0$$

En la figura 22 se observa las condiciones de frontera para este proceso, aquí se ilustran las coordenadas punto a punto para eje radial (r) y axial. (z)

Figura 22.
Corte del reactor tubular y condiciones de frontera



Nota. En la ilustración se identifica el corte que se le realizará al reactor tubular y sus respectivas condiciones de frontera.

3.9. Conclusiones parciales del capítulo No. 3

Como el diseño del reactor es cilíndrico se considera la simetría dentro para el planteamiento del problema con el fin de simplificar los cálculos y ahorrar costo computacional, ya que no es necesario modelar todo el comportamiento de dicho reactor debido a que sus mitades parten de los mismos fenómenos y se comportan como un espejo.

Dependiendo de la posición dentro del reactor la concentración, temperatura varían por cada punto, debido a que entre más cerca esté la biomasa de la pared mayor será la temperatura y por ende la cinética se ve afectada por el cambio. La temperatura en el centro del equipo de reacción es menor, ya que la transferencia de calor se da desde la pared hacia el interior.

En este capítulo se desarrollaron las ecuaciones que abarcan el comportamiento durante el proceso termoquímico y a la vez las suposiciones que ayudan a comprender y solucionar estas expresiones. En el siguiente capítulo se plantean las correspondientes discretizaciones y ecuaciones auxiliares para el correspondiente desarrollo de las ecuaciones de gobierno según sus variaciones tanto de eje y las temperaturas presentes en el sistema como la temperatura del gas y la temperatura de la cama del lecho.

4. SOLUCIONAR LAS ECUACIONES DE GOBIERNO DEL PROCESO DE PIRÓLISIS EN EL REACTOR DE LECHO FIJO

En este capítulo se muestran las ecuaciones auxiliares y correlaciones matemáticas para calcular diferentes propiedades térmicas y de transporte, las cuales abarcan los parámetros que se necesitan para resolver los balances de masa y energía, también se desarrollan las respectivas discretizaciones para dichas ecuaciones, teniendo en cuenta el método numérico de diferencias finitas.

Para algunas correlaciones que están en función de la temperatura, lo cual significa que existen cambios dentro de las mismas con respecto a la solución de los balances de energía se realiza por medio de un software capacitado para tratamiento de almacenamiento de datos como lo es la interfaz de Python, la cual se desarrollara con una serie de iteraciones a partir de un ciclo donde calcula todos estos parámetros para los cambios de temperatura.

4.1. Ecuaciones Auxiliares

En este capítulo se resolverán una serie de ecuaciones auxiliares las cuales se implementarán en los balances de masa y energía para poder determinar las incógnitas en los respectivos nodos, cabe recalcar que los datos usados en este capítulo parten de datos experimentales, aquí se hallarán las propiedades físicas de las especies y la mezclas además de encontrar el coeficiente de transferencia de calor y de masa en función de la temperatura y de la concentración.

4.2. Fase gaseosa

Para esta fase se tendrán en cuenta los componentes CO_2 , H_2 , CH_4 , H_2O , CO , N_2 , y C_7H_8 como alquitranes, cabe recalcar que la operación de este equipo como anteriormente se mencionó se realiza bajo 1 atm de presión, es decir que para las propiedades específicas de estos gases se puede asumir como gases ideales, además de esto se tendrá un gas de barrido el cual ingresa al reactor de lecho fijo, este es el nitrógeno, Para el desarrollo de esta fase se tendrán en cuenta unas ecuaciones y correlaciones que ayudan a identificar las diferentes propiedades de cada especie y su mezcla.

4.2.1. Capacidad Calorífica

La función de capacidad calorífica está dada por una ecuación la cual depende de la temperatura en este caso es una ecuación polinómica, en donde se encuentran coeficientes de cada especie para su correcto desarrollo

Ecuación 30. Capacidad calorífica para los gases.

$$C_{p,i} = a + bT + cT^2 + dT^3$$

El valor de la capacidad calorífica estará dado en J/mol K, es decir que la temperatura tiene unidades de K, para el desarrollo de de esta ecuación se buscaron los coeficientes de cada especie entre unas temperaturas específicas en este caso las temperaturas están entre 273 K a 1800 K. [40]

Tabla 9.
Coefficientes para la capacidad calorífica

Especies	a	B	C	D	Rangos de Temp
CO	28.16	1.68E-03	5.37E-06	-2.22E-09	273-1800 k
CO2	22.26	5.98E-02	-3.50E-05	7.47E-09	273-1800 k
H2	29.11	-1.92E-03	4.00E-06	-8.70E-10	273-1800 k
N2	28.9	-1.57E-03	8.08E-06	-2.87E-09	273-1800 k
H2O	32.24	1.92E-03	1.06E-05	-3.60E-09	273-1800 k
CH4	19.89	5.02E-02	1.30E-05	-1.10E-09	273-1800 k

Nota: Con respecto a la conductividad térmica se utilizan constantes para el desarrollo de ecuaciones en cuanto a la mezcla de los gases como para cada componente. Tomado de: B. E. Poling, O. Connell, J. Perry & J. M. Prausnitz, *The properties of gases and liquids*. 5ª. Ed. Boston: McGraw-Hill, 201 [10 nov 2021]

Existen tres tipos de alquitranes, donde se toman alquitranes primarios, secundarios y terciarios, los cuales se producen de la degradación de celulosa, hemicelulosa y lignina, de esta manera se escogió el tolueno el cual es un alquitrán secundario, de esta forma favorece lo favorece el tiempo de operación del reactor y la temperatura del mismo[67]

Tabla 10.
Coefficientes para la capacidad calorífica tolueno

Especies	a	B	c	D	E
C7H8	3.866	3.558E-03	1.314E-04	-1.866E-07	7.690E-11

Nota: Con respecto a la conductividad térmica se utilizan constantes para el desarrollo de ecuaciones en cuanto a la mezcla de los gases como para cada componente. Tomado de: B. E. Poling, O. Connell, J. Perry & J. M. Prausnitz, *The properties of gases and liquids*. 5ª. Ed. Boston: McGraw-Hill, 201 [11 nov 2021]

Se aplica una fórmula para obtener la mezcla de la capacidad calorífica para la mezcla, sin embargo, para hallar este término se debe determinar la fracción molar con los respectivos pesos molares de cada especie

Ecuación 31. Mezcla de calor calorífica de los gases.

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

4.2.2. Viscosidad dinámica

Para hallar este valor se debe tener en cuenta que la viscosidad dinámica para los orgánicos e inorgánicos cambian, para hallar esta viscosidad para cada uno se tomó las relaciones que están presentes en el Manual del Ingeniero Químico de Perry [41], las correlaciones para este término fueron desarrolladas por Reichenberg, cumpliendo con las suposiciones iniciales donde se estableció que se realizarán los cálculos bajo presiones bajas.[13]

Ecuación 32. Viscosidad dinámica para los componentes inorgánicos.

$$\mu_i = \frac{AT_r}{[1+0.36T_r(T_r-1)]^{1/6}}$$

Donde el término **A** el cual está en masa molar lo rige la siguiente ecuación:

Ecuación 33. Término A para compuestos inorgánicos.

$$A = 1.6104 \times 10^{-10} \left[\frac{M^{1/2} P_c^{2/3}}{T_c^{1/6}} \right]$$

Para los componentes **orgánicos**, se realiza mediante la siguiente ecuación:

Ecuación 34. Término A para compuestos orgánicos.

$$A = 4.60 \times 10^{-4} \frac{NM^{1/2}P_c^{2/3}}{T_c^{1/6}}$$

Sin embargo, esta ecuación tiene unos valores para **N** los cuales dependen de la Temperatura reducida de las especies orgánicas:

Ecuación 35. Valores de N dependiendo la temperatura reducida.

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

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

Para cada término se buscaron los términos y se organizaron en la Tabla 3, de esta manera ayuda a determinar los cálculos de las viscosidades

Tabla 11.
Constantes para componentes volátiles

Especies	Masa Molar (g/mol)	Pc (Pa)	Tc (K)
CO	28,01	3,49E+06	1,33E+02
CO ₂	44,01	7,37E+06	3,04E+02
H ₂	2,016	1,29E+06	3,30E+01
N ₂	28,02	3,40E+06	1,26E+02
H ₂ O	18,016	2,21E+07	6,47E+02
CH ₄	16,042	4,60E+06	1,91E+02
C ₇ H ₈	92,134	4108000	591,75

Nota. En esta tabla se encuentran las constantes para los componentes volátiles, los cuales se utilizaran en el desarrollo de las ecuaciones auxiliares. Tomado de: B. E. Poling, O. Connell, J. Perry & J. M. Prausnitz, *The properties of gases and liquids*. 5^a. Ed. Boston: McGraw-Hill, 201 [11 nov 2021]

Se aplica una fórmula para la mezcla en cuanto a viscosidades en para aplicarla en el balance general de la fase sólida.

Ecuación 36. Viscosidad dinámica mezcla de compuestos.

$$\mu_g = \sum_{i=1}^n \frac{\mu_i}{1 + \sum_{ij} \frac{A_{ij} x_j}{\mu_i}}$$

El término A_{ij} representa las interacciones frente a la mezcla de los componentes, de esta manera se debe realizar las diferentes combinaciones entre las especies, para hallar ese término se presenta la siguiente ecuación

Ecuación 37. Interacciones entre moléculas.

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

4.2.3. Conductividad Térmica

Igual que la capacidad calorífica se realiza mediante una fórmula polinómica donde se sacarán de literatura las constantes que dependen de la temperatura, en este caso se tomarán entre las temperaturas de 273 K a 1800 K, dando su resultado en unidades de W/mK.

Ecuación 38. Conductividad térmica para compuestos gaseosos.

$$\lambda_i = a + bT + cT^2 + dT^3$$

En la tabla 4 se presentan los coeficientes para determinar la conductividad térmica de cada especie.

Tabla 12.

Coefficientes para la conductividad térmica.

Especies	A	B	C	D
CO	5.07E-04	9.13E-05	-3.52E-08	8.20E-12
CO ₂	-7.22E-03	8.02E-05	5.48E-09	-1.05E-11
H ₂	8.10E-03	6.69E-04	-4.16E-07	1.56E-10
N ₂	3.92E-04	9.82E-05	-5.07E-08	1.50E-11
H ₂ O	7.34E-03	-1.01E-05	1.80E-07	-9.10E-11
CH ₄	-1.87E-03	8.73E-05	1.18E-07	-3.61E-11

C ₇ H ₈	7.60E-03	-4.01E-05	2.37E-09	-9.31E-11
-------------------------------	----------	-----------	----------	-----------

Nota. Con respecto a la conductividad térmica se utilizan constantes para el desarrollo de ecuaciones en cuanto a la mezcla de los gases como para cada componente. Tomado de: B. E. Poling, O. Connell, J. Perry & J. M. Prausnitz, *The properties of gases and liquids*. 5ª. Ed. Boston: McGraw-Hill, 201

En cuanto a la mezcla de conductividades térmicas se establece la siguiente ecuación:

Ecuación 39. Conductividad térmica mezcla entre compuestos.

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

4.2.4. Densidad

Como anteriormente se mencionó, se pueden tomar como gases ideales, ya que se está manejando una presión baja, de esta manera para hallar la densidad se usa la fórmula de gases ideales.

Ecuación 40. Ecuación de los gases ideales.

$$PV = nRuT$$

Realizando los respectivos cambios

$$PM = \rho RuT$$

Entonces

Ecuación 41. Densidad de los gases ideales.

$$\rho_i = \frac{PM}{RuT}$$

Para la mezcla de gases se realiza la siguiente ecuación

Ecuación 42. Mezcla de densidades de los gases ideales.

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

4.3. Fase Sólida

Para esta fase se tendrá en cuenta el cuesco de palma aceitera para esta fase, de esta manera se obtendrán la degradación del mismo con respecto a la temperatura y la velocidad de axial

de esta biomasa, cabe recalcar que la operación de este equipo como anteriormente se mencionó se realiza bajo 1 atm de presión.

Para el desarrollo de esta fase se tendrán en cuenta unas ecuaciones y correlaciones que ayudan a identificar las diferentes propiedades de cada especie y su mezcla.

4.4. Conductividad térmica efectiva

Esta fase se encuentra en un estado homogéneo, para realizar este cálculo se revisan respectivas bibliografías donde utilizan el modelo de celda de missenard en diferentes artículos bases Vervuert [44][45][46][12]

Ecuación 43. Conductividad térmica efectiva para el sólido.

$$\lambda_e^s = (1 - k) \lambda^s \left(1 + \frac{\varepsilon_b (\lambda^g - \lambda^s)}{\lambda - \varepsilon_b} \right) + k \lambda^g \left(1 + \frac{(1 - \varepsilon_b) (\lambda^g - \lambda^s)}{\lambda - (1 - \varepsilon_b)} \right)$$

Para el término k donde se identifica el factor de peso el cual es dependiente de la dispersión por parte del sólido o la dispersión en la fase gaseosa en el lecho fijo este valor debe oscilar entre cero “0” y uno “1” para este caso el cálculo del factor de peso será cero, ya que la fase gaseosa es dispersa [12], de esta manera la ecuación cuarenta se transforma en:

$$\lambda_e^s = (1 - k) \lambda^s \left(1 + \frac{\varepsilon_b (\lambda^g - \lambda^s)}{\lambda - \varepsilon_b} \right) + k \lambda^g \left(1 + \frac{(1 - \varepsilon_b) (\lambda^g - \lambda^s)}{\lambda - (1 - \varepsilon_b)} \right)$$

Obteniéndose

Ecuación 44. Conductividad térmica final efectiva para el sólido.

$$\lambda_e^s = (1 - k) \lambda^s \left(1 + \frac{\varepsilon_b (\lambda^g - \lambda^s)}{\lambda - \varepsilon_b} \right)$$

4.5. Transferencia de masa y calor

En la siguiente sección se determinarán las ecuaciones que se desarrollan por literatura para calcular la masa y el calor que se transfiera dentro del reactor.

4.5.1. Coeficiente de transferencia de masa y calor entre las fases presentes

El coeficiente de película para estas fases se presenta de la siguiente manera [12]:

Ecuación 45. Coeficiente de película

$$h = \frac{Nu\lambda^g}{d_p}$$

Para determinar el número de Nusselt para el lecho fijo se define como [46]

Ecuación 46. Número de Nusselt

$$Nu = K f_{\varepsilon b} Nu_{EK}$$

“Para hallar los términos de la ecuación de Nusselt se requiere determinar K el cual es el factor de corrección para la temperatura, el término $f_{\varepsilon b}$ Es un factor de corrección que requiere la porosidad de la cama, en este caso se evalúa como 0,7 tomado desde la literatura”. [12]

Para la corrección de la temperatura se define la siguiente ecuación:

Ecuación 47. Factor de corrección de temperatura.

$$K = \left(\frac{T_g}{T_s}\right)^{0.12}$$

“Este factor tiene presente el efecto de la dirección del flujo de calor ya sea por enfriamiento o calentamiento con respecto al coeficiente de transferencia de calor en función de la temperatura de la masa cuando el fluido es un gas conforme Schlünder y Tsotsas”. [12]

Ecuación 48. Factor de corrección de la porosidad del lecho

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

En cuanto al cálculo de Nu_{EK} se realiza un promedio entre el flujo laminar y flujo turbulento

Ecuación 49. Número de nusselt equivalente.

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

Ecuación 50. Número de nusselt laminar.

$$Nu_{lam} = 0.664 Re_q^{1/2} Pr^{1/3}$$

Ecuación 51. Número de nusselt turbulento.

$$Nu_{turb} = \frac{0.037 Re_b^2}{1 + 2.443 Re_b^{-0.1} (Pr^{2/3} - 1)}$$

Es necesario hacer el número de reynolds modificado y el número de reynolds en función del área transversal, lo cual quiere decir que este reynolds será para el lecho fijo [12].

Ecuación 52. Reynolds equivalente.

$$Re_q = \sqrt{Re^2 + \frac{5Re_p^2}{2}}$$

Ecuación 53. Reynolds entre el lecho.

$$Re_{\varepsilon b} = \frac{\nu \rho dp}{\mu}$$

4.6. Método de diferencias finitas

Para el método de diferencias finitas se caracteriza por ser un modelo análogo que se utiliza en su mayoría en modelamientos de tipo multidimensional en estados estacionarios [53] para la elaboración se debe crear una malla con un respectivo número de nodos donde en este caso se determinará la temperatura de las fases presentes en cada uno, por medio de ecuaciones diferenciales las cuales tienen un análisis de convergencia tanto inicial como final, se puede realizar un ajuste en las mallas discretizando las ecuaciones en torno a sus ejes, donde se represente la transferencia de calor.

El dimensionamiento de dicho reactor se tomó de datos bibliográficos obtenidos en la universidad de Kassel en Alemania, en este capítulo se desarrollará el paso a paso de la discretización de las ecuaciones de gobierno.

4.6.1. Esquema de diferencias finitas

Para el desarrollo de este modelo se tendrán en cuenta diferentes órdenes de truncamiento, en primera instancia se manejan ecuaciones de primer orden con el fin de identificar valores y poder corregirlos con un cuarto orden de truncamiento, así los datos serán más exactos con respecto a los resultados esperados, este método se aplicará tanto para los balances por especie y de energía.

Para la discretización de las ecuaciones de balance para las dos fases se tiene en cuenta que las diferencias finitas las rigen por derivadas tanto de primer orden como de segundo orden, consiguiente a esto se plantean las ecuaciones que ayuden a desarrollar de manera bidimensional este tipo de problemas

En la Tabla 12 se observa las respectivas ecuaciones para la discretización y posterior desarrollo de las ecuaciones de gobierno, donde se aplicará dicha fórmula para las derivadas parciales de la temperatura con respecto a los ejes presentantes en este modelo, como lo es el eje radial (r) y el eje axial (z).

Tabla 13.
Fórmulas para las derivadas de diferencias finitas de primer orden paso hacia adelante.

Derivada	Método de diferencias finitas
$\frac{\partial y}{\partial x}$	$\frac{y_{i+1} - y_i}{\Delta x}$
$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2}$	$\frac{y_{i+2} - 2y_{i+1} + y_i}{\Delta x^2}$

Nota: Se muestran las fórmulas de las diferencias finitas hacia adelante las cuales son utilizadas para la discretización de la ecuación de balance de masa, energía y la cinética de reacción. Tomado de: “LUDA UAM-Azc.” http://aniei.org.mx/paginas/uam/CursoMN/curso_mn_19.html (accessed Apr. 09, 2022). [25 nov 2021]

Por otra parte, se deducen las ecuaciones de diferencias finitas para un cuarto orden de truncamiento, para el desarrollo del modelo se tendrán en cuenta tanto la primera derivada como la segunda derivada, estas se obtuvieron desde el navegador de Wolfram, donde se encontró un simulador para los esquemas de diferencias finitas [55] de esta forma se obtienen las siguientes ecuaciones:

Ecuación 54. Cuarto orden paso hacia adelante.

$$\frac{dI}{dx} = \left(-\frac{25}{12}f_i + \frac{1}{3}f_{i+1} - 3f_{i+2} + \frac{4}{3}f_{i+3} - \frac{1}{4}f_{i+4} \right) \frac{1}{\Delta x}$$

Ecuación 55. Cuarto orden centradas.

$$\frac{dI}{dx} = \left(\frac{1}{12}f_{i-2} - \frac{2}{3}f_{i-1} + \frac{2}{3}f_{i+1} - \frac{1}{12}f_{i+2} \right) \frac{1}{\Delta x}$$

Ecuación 56. Cuarto orden hacia atrás.

$$\frac{d_i}{dx} = \left(\frac{1}{4} f_{i-4} - \frac{4}{3} f_{i-3} + 3 f_{i-2} - \frac{4}{3} f_{i-1} + \frac{25}{12} f_i \right) \frac{1}{\Delta x}$$

Ecuación 57. Cuarto orden segunda derivada hacia adelante.

$$\frac{d_L^2}{dx^2} = \left(\frac{45T_i - 154T_{i+1} + 214T_{i+2} - 156T_{i+3} + 61T_{i+4} - 10T_{i+5}}{12} \right) \frac{1}{\Delta x^2}$$

Ecuación 58. Cuarto orden segunda derivada bandeada hacia adelante.

$$\frac{d_L^2}{dx^2} = \left(\frac{10T_{i-1} - 15T_i - 4T_{i+1} + 14T_{i+2} - 6T_{i+3} + T_{i+4}}{12h^2} \right) \frac{1}{\Delta x^2}$$

Ecuación 59. Cuarto orden y segunda derivada centradas.

$$\frac{d_L^2}{dx^2} = \left(\frac{10T_{i-1} - 15T_i - 4T_{i+1} + 14T_{i+2} - 6T_{i+3} + T_{i+4}}{12} \right) \frac{1}{\Delta x^2}$$

Ecuación 60. Cuarto orden y segunda derivada bandeada hacia atrás.

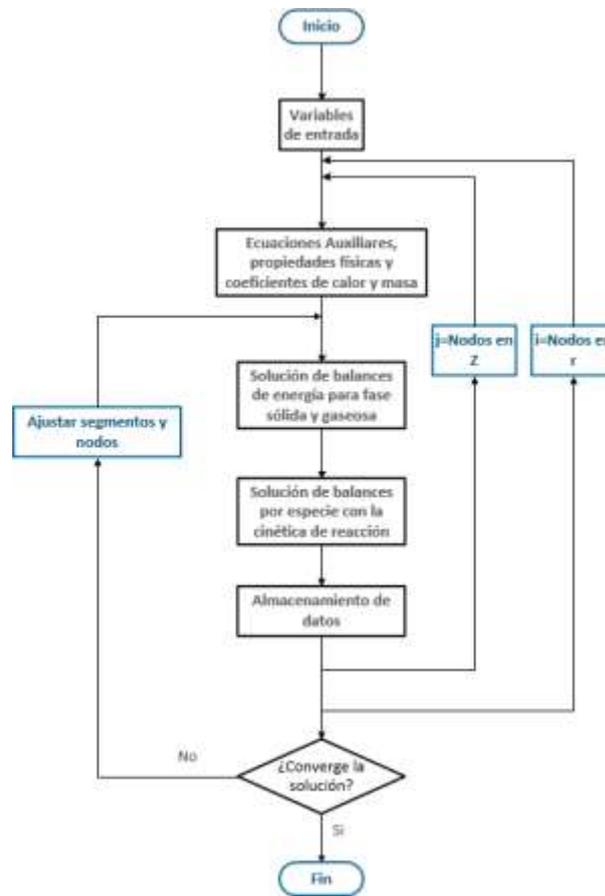
$$\frac{d_L^2}{dx^2} = \left(\frac{T_{i-4} - 6T_{i-3} + 14T_{i-2} - 4T_{i-1} - 15T_i + 10T_{i+1}}{12} \right) \frac{1}{\Delta x^2}$$

Ecuación 61. Cuarto orden y segunda derivada hacia atrás.

$$\frac{d_L^2}{dx^2} = \left(\frac{-10T_{i-5} + 61T_{i-4} - 156T_{i-3} + 214T_{i-2} - 154T_{i-1} + 45T_i}{12} \right) \frac{1}{\Delta x^2}$$

Para identificar la secuencia lógica que se llevará a cabo en este proyecto se elaboró un diagrama representativo figura 23, donde se muestra los pasos en breve para el posterior desarrollo de las ecuaciones con respecto a las ecuaciones auxiliares que posteriormente se mencionan para el desarrollo del modelo matemático.

Figura 23.
Secuencia lógica para el desarrollo del modelo matemático



Nota. En la figura se presenta la secuencia lógica para desarrollar el modelo matemático con sus respectivos ciclos y condicionales según las decisiones.

En primer lugar, se comenzó a digitar las variables para las constantes de cada componente en el cálculo de las capacidades caloríficas (C_p), conductividad térmica (λ), viscosidad dinámica (μ). Una vez introducida las constantes se procede a calcular los términos utilizando sus respectivas ecuaciones para ciertas temperaturas, teniendo presente las unidades y las suposiciones correspondientes. A continuación se comienza a introducir la ecuación de balance de energía con su respectiva discretización (a partir de diferencias finitas) y a la vez diseñar el ciclo para determinar las temperaturas para los nodos e incluir en el ciclo las ecuaciones que están en función de la temperatura como la capacidad calorífica (C_p) y conductividad térmica (λ) para nuevamente calcular estas propiedades para las temperaturas de cada nodo y obtener un mejor resultado, comportamiento y modelamiento del proceso termoquímico.

4.6.2. Discretización de la cinética de reacción para las especies

La discretización de la cinética de reacción corresponde a balance de materia, el cual se realiza por especie presente en las reacciones de descomposición de la biomasa las cuales generan CH₄, CO₂, CO, H₂O, Alquitranses (C₇H₈) e H₂, de esta manera se utiliza la ecuación 5, presentada en el capítulo dos.

Para el desarrollo de las ecuaciones se utiliza el método de diferencias finitas, donde se elige un truncamiento de cuarto orden para obtener exactitud en los resultados, sin embargo para facilitar el manejo de dichas ecuaciones se plantea primer orden con paso hacia adelante con el fin de hallar el término “Gamma” (Γ_i) el cual se compone de $\alpha(y)$ y $p(y)$. De esta manera se corregirá el término de Gamma obteniendo un resultado más cercano a las fracciones máximas presentadas anteriormente.

Para realizar un ejemplo con el fin de explicar la elaboración del modelo se realizó una malla con 10 nodos para representar el manejo de las ecuaciones de la siguiente forma:

Ecuación 62. Sustitución de términos

$$\omega = \left(\frac{\varepsilon_s \rho_s}{G_s} \right)$$
$$k_o e^{\frac{-Ea}{RT}} * \omega = \alpha(y)$$
$$(y_{max} - y_i)^n = p(y)$$

1. **Hacia adelante** $\rightarrow y_0 = y_0$
2. **Hacia adelante** $\rightarrow y_1 = \alpha(y_0)p(y_0) * \Delta z + y_0 = \Gamma_0 * \Delta z + y_0$
3. **Hacia adelante** $\rightarrow \alpha(y_1)p(y_1) * \Delta z + y_1 = \Gamma_1 * \Delta z + y_1$
4. **Hacia adelante** $\rightarrow y_3 = \Gamma_2 * \Delta z + y_2$
5. **Hacia adelante** $\rightarrow y_4 = \Gamma_3 * \Delta z + y_3$
6. **Hacia adelante** $\rightarrow y_5 = \Gamma_4 * \Delta z + y_4$
7. **Hacia adelante** $\rightarrow y_6 = \Gamma_5 * \Delta z + y_5$
8. **Hacia adelante** $\rightarrow y_7 = \Gamma_6 * \Delta z + y_6$
9. **Hacia adelante** $\rightarrow y_8 = \Gamma_7 * \Delta z + y_7$
10. **Hacia adelante** $\rightarrow y_9 = y_9$

Se procede con las correcciones de cuarto orden, donde estas se plantean hacia adelante, centradas y hacia atrás, esto con ayuda de las siguientes fórmulas adquiridas desde Wolfram Alpha [55]

1. **El nodo 0 se conoce**

2. **Hacia adelante** $\rightarrow (-\frac{25}{12\Delta z}y_1 + \frac{4}{\Delta z}y_2 - \frac{3}{\Delta z}y_3 + \frac{4}{3\Delta z}y_4 - \frac{1}{4\Delta z}y_5) = \Gamma_1^{primerorden}$

3. **Centrada** $\rightarrow ((-\frac{2}{3\Delta z}y_1 + \frac{2}{3\Delta z}y_3 - \frac{1}{12\Delta z}y_4) = \Gamma_2^{primerorden} - \frac{1}{12\Delta z}$

4. **Centrada** $\rightarrow (\frac{1}{12\Delta z}y_1 - \frac{2}{3\Delta z}y_2 + \frac{2}{3\Delta z}y_4 - \frac{1}{12\Delta z}y_5) = \Gamma_3^{primerorden}$

5. **Centrada** $\rightarrow (\frac{1}{12\Delta z}y_2 - \frac{2}{3\Delta z}y_3 + \frac{2}{3\Delta z}y_5 - \frac{1}{12\Delta z}y_6) = \Gamma_4^{primerorden}$

6. **Centrada** $\rightarrow (\frac{1}{12\Delta z}y_3 - \frac{2}{3\Delta z}y_4 + \frac{2}{3\Delta z}y_6 - \frac{1}{12\Delta z}y_7) = \Gamma_5^{primerorden}$

7. **Centrada** $\rightarrow ((\frac{1}{12\Delta z}y_4 - \frac{2}{3\Delta z}y_5 + \frac{2}{3\Delta z}y_7 - \frac{1}{12\Delta z}y_8) = \Gamma_6^{primerorden}$

8. **Centrada** $\rightarrow (\frac{1}{12\Delta z}y_5 - \frac{2}{3\Delta z}y_6 + \frac{2}{3\Delta z}y_8 - \frac{1}{12\Delta z}y_9) = \Gamma_7^{primerorden}$

9. **Hacia atrás** $\rightarrow (\frac{1}{4\Delta z}y_4 - \frac{4}{3\Delta z}y_5 + \frac{3}{\Delta z}y_6 - \frac{4}{\Delta z}y_7 + \frac{25}{12\Delta z}y_8) = \Gamma_8^{primerorden}$

10. **Hacia atrás** $\rightarrow (\frac{1}{4\Delta z}y_5 - \frac{4}{3\Delta z}y_6 + \frac{3}{\Delta z}y_7 - \frac{4}{\Delta z}y_8 + \frac{25}{12\Delta z}y_9) = \Gamma_8^{primerorden}$

De esta manera se obtiene una matriz nodal de la siguiente forma

$$\begin{vmatrix} -\frac{25}{12\Delta z} & \frac{4}{\Delta z} & -\frac{3}{\Delta z} & \frac{4}{3\Delta z} & -\frac{1}{4\Delta z} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{2}{3\Delta z} & 0 & \frac{2}{3\Delta z} & -\frac{1}{12\Delta z} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{12\Delta z} & -\frac{2}{3\Delta z} & 0 & \frac{2}{3\Delta z} & -\frac{1}{12\Delta z} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{12\Delta z} & -\frac{2}{3\Delta z} & 0 & \frac{2}{3} & -\frac{1}{12} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{12\Delta z} & -\frac{2}{3\Delta z} & 0 & -\frac{2}{3\Delta z} & -\frac{1}{12\Delta z} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{12\Delta z} & -\frac{2}{3\Delta z} & 0 & \frac{2}{3\Delta z} & -\frac{1}{12\Delta z} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{12\Delta z} & -\frac{2}{3\Delta z} & 0 & \frac{2}{3\Delta z} & -\frac{1}{12\Delta z} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{12\Delta z} & -\frac{2}{3\Delta z} & 0 & \frac{2}{3\Delta z} & -\frac{1}{12\Delta z} \end{vmatrix}$$

$$\begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4\Delta z} & -\frac{4}{3\Delta z} & \frac{3}{\Delta z} & -\frac{4}{\Delta z} & \frac{25}{12\Delta z} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4\Delta z} & -\frac{4}{3\Delta z} & \frac{3}{\Delta z} & -\frac{4}{\Delta z} & \frac{25}{12\Delta z} \end{vmatrix}$$

Ecuación 63. Operación de la matriz para obtener el factor gamma

$$A \cdot y = \Gamma^{\text{Primer orden}}$$

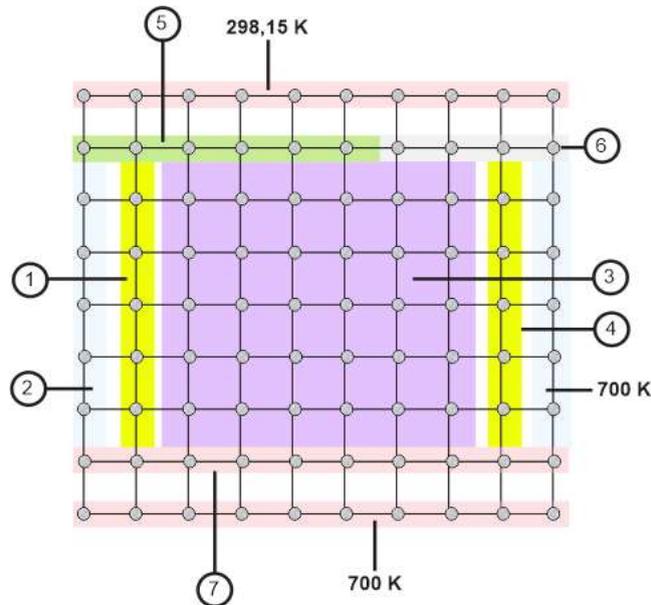
Ecuación 64. Operación de la matriz para obtener el factor gamma corregido

$$y^{\text{Cuarto orden}} = A^{-1} \cdot \Gamma^{\text{Cuarto orden}}$$

4.6.3. Discretización para el balance de energía

Para la discretización de los nodos se tuvo en cuenta una corrección de cuarto orden con el fin de identificar los valores más cercanos de las temperaturas reales, de esta manera se realizaron una serie de ecuaciones que satisfacen el sistema, así mismo se presenta la figura 24 con el fin de identificar las ecuaciones que serán utilizadas en el desarrollo del mismo

Figura 24.
Malla bidimensional para los nodos del balance de energía



Nota. Malla bidimensional para hallar la temperatura en cada nodo.

La figura 16 representa las discretizaciones que se tendrán en cuenta para el modelo bidimensional de temperaturas, para ello se realiza un resumen de ecuaciones donde el número corresponde al tipo de tratamiento que se usó en cada grupo de nodos:

Ecuación 65. Discretizaciones para la malla figura 17

1. Centradas primera derivada y bandeadas hacia adelante segunda derivada

$$T_{i,j} = A_1(10T_{i-1,j} - 4T_{i+1,j} + 14T_{i+2,j} - 6T_{i+3,j} + T_{i+4,j}) \dots \\ - B_1(T_{i,j-2} - 8T_{i,j-1} + 8T_{i,j+1} + T_{i,j+2}) - C_1(-T^s)$$

2. Centradas primera derivada y hacia adelante segunda derivada

$$T_{i,j} = A_2(-154T_{i+1,j} + 214T_{i+2,j} - 156T_{i+3,j} + 61T_{i+4,j} - 10T_{i+5,j}) \dots \\ - B_2(T_{i,j-2} - 8T_{i,j-1} + 8T_{i,j+1} - T_{i,j+2}) - C_2(-T^s)$$

3. Centradas

$$T_{i,j} = A_3(-T_{i-2,j} + 16T_{i-1,j} + 16T_{i+1,j} - T_{i+2,j}) - B_3(T_{i,j-2} - 8T_{i,j-1} + 8T_{i,j+1} - T_{i,j+2}) \dots \\ - C_3(-T^s)$$

4. Bandeada hacia atrás

$$T_{i,j} = A_4(T_{i-4,j} - 6T_{i-3,j} + 14T_{i-2,j} - 4T_{i-1,j} + 10T_{i+1,j}) - \dots \\ \dots B_4(-T_{i,j-3} + 6T_{i,j-2} - 18T_{i,j-1} + 3T_{i,j+1}) - C_4(-T^s)$$

5. Centradas primera derivada y bandeadas hacia atrás segunda derivada

$$T_{i,j} = A_5(T_{i-4,j} - 6T_{i-3,j} + 14T_{i-2,j} - 4T_{i-1,j} + 10T_{i+1,j}) - \dots \\ \dots B_5(T_{i,j-2} - 8T_{i,j-1} + 8T_{i,j+1} - T_{i,j+2}) - C_5(-T^s)$$

6. Bandeadas hacia Adelante primera derivada y hacia Adelante segunda derivada

$$T_{i,j} = A_6(-154T_{i+1,j} + 214T_{i+2,j} - 156T_{i+3,j} + 61T_{i+4,j} - 10T_{i+5,j}) - \dots \\ \dots B_6(-3T_{i,j-1} + 18T_{i,j+1} - 6T_{i,j+2} + T_{i,j+3}) - C_6(-T^s)$$

7. Bandeadas Hacia Adelante primera derivada y bandeadas hacia atrás segunda derivada

$$T_{i,j} = A_7(T_{i-4,j} - 6T_{i-3,j} + 14T_{i-2,j} - 4T_{i+1,j} - 10T_{i+1,j}) - \dots \\ \dots B_7(-3T_{i,j-1} + 18T_{i,j+1} - 6T_{i,j+2} + T_{i,j+3}) - C_7(-T^s)$$

4.5.3 a. Fase gaseosa. Identificando la ecuación anteriormente establecida en el capítulo dos, se obtiene que esta se realizará un desarrollo previo para introducir en el software

Ecuación 66. Balance de energía final para la fase gaseosa.

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r D_r^g \frac{\partial T^g}{\partial r}) - (c_p)^g \omega_{\alpha}^g \frac{\partial T^g}{\partial z} - \frac{h A_{esp}}{\varepsilon_b} (T^g - T^s) = 0$$

Primer término

$$\begin{aligned} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r D_r^g \frac{\partial T^g}{\partial r}) &= \frac{1}{r} \left[\frac{\partial}{\partial r} (r D_r^g) \frac{\partial T^g}{\partial r} + r D_r^g \frac{\partial^2 T^g}{\partial r^2} \right] \\ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r D_r^g \frac{\partial T^g}{\partial r}) &= \frac{1}{r} \left[\left(\frac{\partial D_r^g}{\partial r} r + D_r^g \right) \frac{\partial T^g}{\partial r} + r D_r^g \frac{\partial^2 T^g}{\partial r^2} \right] \\ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r D_r^g \frac{\partial T^g}{\partial r}) &= \frac{1}{r} \left[\frac{\partial D_r^g}{\partial r} r \frac{\partial T^g}{\partial r} + D_r^g \frac{\partial T^g}{\partial r} + r D_r^g \frac{\partial^2 T^g}{\partial r^2} \right] \end{aligned}$$

Obteniendo finalmente la siguiente ecuación para el primer término:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r D_r^g \frac{\partial T^g}{\partial r}) = \frac{\partial D_r^g}{\partial r} \frac{\partial T^g}{\partial r} + \frac{D_r^g}{r} \frac{\partial T^g}{\partial r} + D_r^g \frac{\partial^2 T^g}{\partial r^2}$$

Segundo término

$$(c_p)^g \omega_r \frac{\partial T^g}{\partial z}$$

Tercer término

$$\frac{h A_{esp}}{\varepsilon_b} (T^g - T^s)$$

Reemplazando

$$\frac{\partial D_r^g}{\partial r} \frac{\partial T^g}{\partial r} + \frac{D_r^g}{r} \frac{\partial T^g}{\partial r} + D_r^g \frac{\partial^2 T^g}{\partial r^2} - (c_p)^g \omega_{\alpha}^g \frac{\partial T^g}{\partial z} - \frac{h A_{esp}}{\varepsilon_b} (T^g - T^s) = 0$$

Se obtiene

Ecuación 67. Balance de energía final resuelta fase gaseosa.

$$\frac{D_r^g}{r} \frac{\partial T^g}{\partial r} + D_r^g \frac{\partial^2 T^g}{\partial r^2} - (c_p)^g \omega_{\alpha}^g \frac{\partial T^g}{\partial z} - \frac{h A_{esp}}{\varepsilon_b} (T^g - T^s) = 0$$

Para el desarrollo del balance de energía en la fase gaseosa se realizan las discretizaciones mencionadas anteriormente, de esta manera se realiza una sustitución de términos para facilitar el manejo de dichas ecuaciones

Sustituyendo términos en la ecuación 68:

$$0 = D_{r\text{ prom}}(y_i, T_{go}, T_{gf}) * \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} - (cC_p)^g \omega_{ax}^g \frac{\partial T}{\partial z} - \frac{hA_{esp}}{\varepsilon_b} (T^g - T^s)$$

Se operan los términos para obtener:

$$0 = \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} - \frac{(cC_p)^g \omega_{ax}^g}{D_{r\text{ prom}}(y_i, T_{go}, T_{gf})} \frac{\partial T}{\partial z} - \frac{hA_{esp}}{\varepsilon_b D_{r\text{ prom}}(y_i, T_{go}, T_{gf})} (T^g - T^s)$$

Entonces aparecen los términos de Theta y Omega los cuales tienen los valores constantes de la ecuación:

$$\frac{(cC_p)^g \omega_{ax}^g}{D_{r\text{ prom}}(y_i, T_{go}, T_{gf})} = \Theta(y_i, T_{go}, T_{gf})$$

$$\frac{hA_{esp}}{\varepsilon_b D_{r\text{ prom}}(y_i, T_{go}, T_{gf})} = \Omega(y_i, T_{go}, T_{gf})$$

De esta manera se reemplaza en la fórmula 69 obteniéndose la siguiente ecuación:

Ecuación 68. Balance de energía final resuelta fase gaseosa.

$$0 = \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} - \Theta \frac{\partial T}{\partial z} - \Omega (T^g - T^s)$$

4.5.3 b. Análisis dimensional para la fase gaseosa. Se realiza un análisis dimensional de los términos de la ecuación de la siguiente manera, demostrando que los términos tienen como resultado la temperatura con respecto a una unidad de distancia.

$$\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} = \frac{K^2}{m^2} = \frac{K^2}{m^4}$$

$$\frac{(cC_p)^g \omega_{ax}^g}{D_{r\text{ prom}}} \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{\frac{mol}{m^3} \frac{J}{molK} \frac{m}{s}}{mK} \left(\frac{K}{m} \right) = \left(\frac{K}{m^2} \right)$$

$$\frac{hA}{b r \text{ prom}} (T^g - T^s) = \left(\frac{\frac{w}{m^2 K_w}}{m} \right) K = \left(\frac{K}{m} \right)$$

4.5.3 c. Fase sólida. Identificando la ecuación tres **Ecuación 16** de la fase sólida, para el desarrollo de las respectivas derivadas presentes en la ecuación por cada término:

Ecuación 16. Ecuación general de balance de energía para la fase sólida.

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \lambda^s \frac{\partial T^s}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda^s \frac{\partial T^s}{\partial z} \right) - (cC_p)^s \omega^s \frac{\partial T^s}{\partial z} \dots$$

$$\dots + \frac{h_{GP} A_{esp}}{l - \varepsilon_b} (T^g - T^s)_{sup} = 0$$

Primer término:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \lambda^s \frac{\partial T^s}{\partial r} \right) = \frac{1}{r} \left[\frac{\partial}{\partial r} (r \lambda^s) \frac{\partial T^s}{\partial r} + r \lambda^s \frac{\partial^2 T^s}{\partial r^2} \right]$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \lambda^s \frac{\partial T^s}{\partial r} \right) = \frac{1}{r} \left[\left(\frac{\partial \lambda^s}{\partial r} r + \lambda^s \right) \frac{\partial T^s}{\partial r} + r \lambda^s \frac{\partial^2 T^s}{\partial r^2} \right]$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \lambda^s \frac{\partial T^s}{\partial r} \right) = \frac{1}{r} \frac{\partial \lambda^s}{\partial r} r \frac{\partial T^s}{\partial r} + \lambda^s \frac{\partial T^s}{\partial r} + r \lambda^s \frac{\partial^2 T^s}{\partial r^2}$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \lambda^s \frac{\partial T^s}{\partial r} \right) = \frac{\partial \lambda^s}{\partial r} \frac{\partial T^s}{\partial r} + \lambda^s \frac{\partial T^s}{\partial r} + r \lambda^s \frac{\partial^2 T^s}{\partial r^2}$$

Obteniendo finalmente la siguiente ecuación para el primer término:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \lambda^s \frac{\partial T^s}{\partial r} \right) = \frac{\partial \lambda^s}{\partial r} \frac{\partial T^s}{\partial r} + \lambda^s \frac{\partial T^s}{\partial r} + r \lambda^s \frac{\partial^2 T^s}{\partial r^2}$$

Segundo término:

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda^s \frac{\partial T^s}{\partial z} \right) = \lambda^s \frac{\partial^2 T^s}{\partial z^2}$$

Tercer término:

$$(cC_p)^s \omega^s \frac{\partial T^s}{\partial z}$$

Cuarto término:

$$\frac{h A}{l - \varepsilon_b} (T^g - T^s)$$

Reemplazando

Ecuación 69. Balance de energía final resuelta fase gaseosa.

$$\frac{\lambda^s}{r} \frac{\partial T^s}{\partial r} + \lambda^s \frac{\partial^2 T^s}{\partial^2} - (cC_p)^s \omega^s \frac{\partial T^s}{\partial z} + \frac{h A_{esp}}{1-\phi} (T^g - T^s_{sup}) = 0$$

Para el desarrollo del balance de energía en la fase sólida se realizan las discretizaciones mencionadas anteriormente, de esta manera se realiza una sustitución de términos para facilitar el manejo de dichas ecuaciones

Sustituyendo términos en la ecuación 73:

$$0 = \lambda^s_{prom}(y_i, T_{go}, T_{gf}) * \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} - (cC_p)^g \omega_{ax} \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{hA_{esp}}{\epsilon_b} (T^g - T^s)$$

Así mismo se realiza el mismo análisis para dicha ecuación donde se toman los valores constantes con Theta y Omega

$$\frac{(cC_p)^g \omega_{ax}}{\lambda^s_{prom}(y_i, T_g, T_{gf})} = \Theta(y_i, T_{so}, T_{sf})$$

$$\frac{hA_{esp}}{\epsilon_b \lambda^s_{prom}(y_i, T_g, T_{gf})} = \Omega(y_i, T_{so}, T_{sf})$$

De esta manera se obtiene la siguiente ecuación para el sólido

Ecuación 70. Balance de energía final resuelta fase gaseosa.

$$0 = \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} - \Theta \frac{\partial T}{\partial z} - \Omega (T^g - T^s)$$

4.5.3. d. Análisis dimensional para la fase sólida. Se realiza un análisis dimensional de los términos de la ecuación de la siguiente manera, demostrando que los términos tienen como resultado la temperatura con respecto a una unidad de distancia.

$$\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} = \left(\frac{K}{m^2} \right) = \left(\frac{K^2}{m^4} \right)$$

$$\frac{(cC_p)^g \omega_{ax} \partial T}{\lambda^s_{prom} \partial z} = \left(\frac{\frac{mol}{m^3} \frac{J}{molK} \frac{m}{s}}{mK} \right) \left(\frac{K}{m} \right) = \left(\frac{K}{m^2} \right)$$

$$\frac{hA}{\epsilon \lambda_s^{esp}} (T_g - T_s) = \left(\frac{\frac{w}{m^2 K_w}}{m} \right) \left(\frac{l}{m} \right) K = \left(\frac{K}{m} \right)$$

Una vez se establezcan las temperaturas para los nodos se determina la composición para estos a partir de la cinética de reacción, donde se establecerá un algoritmo en Python para calcular las composiciones en cada nodo con respecto a los perfiles de temperatura obtenidos a partir del anterior desarrollo matemático.

4.7. Grados de libertad

En términos teóricos los grados de libertad se realizan para determinar el estado del modelo matemático, de esta forma se identifica si se encuentra especificado, sobre especificado o si por el contrario le faltan variables para poder desarrollar dicho modelo. [13]

Para determinar si el sistema tiene una única solución, el cálculo de los grados de libertad tienen que ser iguales a cero, por medio de la ecuación 30 se evidencian las incógnitas y los balances presentes en el sistema.

Ecuación 30. Grados de libertad para un sistema

$$GL = \#Incognitas - \#Balances .$$

El número de incógnitas que establece el problema son cuatro considerándose la velocidad del sólido constante a lo largo del reactor y por ser un modelo bidimensional se determina que el número de balances son cuatro, si reemplazamos estos valores en la ecuación 30:

$$GL = 4 - 4 .$$

$$GL = 0 .$$

Se obtiene un valor de cero, es decir que este modelo se encuentra especificado, indicando que si hay una solución para las ecuaciones establecidas y poder cumplir con la complejidad del modelo para llegar a la solución. [13]

4.9. Conclusiones parciales del capítulo No. 4

En este capítulo se evidencia el desarrollo para el modelo, por términos generales de la malla se manejó de manera unidimensional y con una discretización de los nodos en con diferencias

finitas con paso hacia adelante, las cuales se tomaron para la zona radial y la zona axial del reactor de lecho fijo.

El método de diferencias finitas presenta un margen de error diferente para cada uno de los tipos, donde las más recomendadas son la diferencia finita centrada debido a que su margen de error es menor en comparación a las diferencias finitas paso hacia adelante y paso hacia atrás. En la discretización se empleó las diferencias finitas paso hacia adelante ya que se tienen las condiciones iniciales y estas se adaptan para el desarrollo del modelo matemático, en cambio las centradas necesitan condiciones centrales (en el punto medio) y condiciones laterales (iniciales o finales) y las paso hacia atrás requieren condiciones finales.

A partir de las suposiciones realizadas en el capítulo tres se elabora una interfaz de python por medio de un notebook de colabity con el respectivo código para definir los perfiles de temperatura y concentración los cuales dependen del radio y la longitud axial del reactor, en el capítulo cuatro se evidenciaron los resultados obtenidos, donde se realiza un análisis previo de las gráficas desarrolladas por otros autores con objetivos similares presentados en este trabajo.

5. RESULTADOS TEÓRICOS OBTENIDOS EN EL MODELO DESARROLLADO EN COMPARACIÓN CON RESULTADOS EXPERIMENTALES OBTENIDOS DE LA LITERATURA

En el actual capítulo se presentan los respectivos análisis, comparaciones con otros trabajos de investigación y conclusiones respecto al modelamiento de la pirólisis en el reactor de lecho fijo, a partir de todas las expresiones matemáticas planteadas, discretizadas, suposiciones y las ecuaciones auxiliares mencionadas durante los capítulos 2 y 3, teniendo en cuenta las propiedades fisicoquímicas establecidas en el capítulo 1.

De acuerdo a los datos obtenidos se realiza una comparación respecto a los parámetros y resultados en la elaboración del modelo matemático para el reactor del proceso de pirólisis, permitiendo determinar las condiciones de operación con este tipo de parámetros para la biomasa dentro de un reactor de lecho fijo con calentamiento indirecto, de esta forma se plantea un enmallado con el fin de obtener los resultados tanto de temperatura como de concentración. El método de diferencias finitas se eligió ya que se obtienen funciones que son dependientes de la misma solución del balance de energía, en comparación con un método de refinamiento implícito aumentaría la complejidad con respecto a la solución de las ecuaciones.

5.1. Perfil de temperatura bidimensional

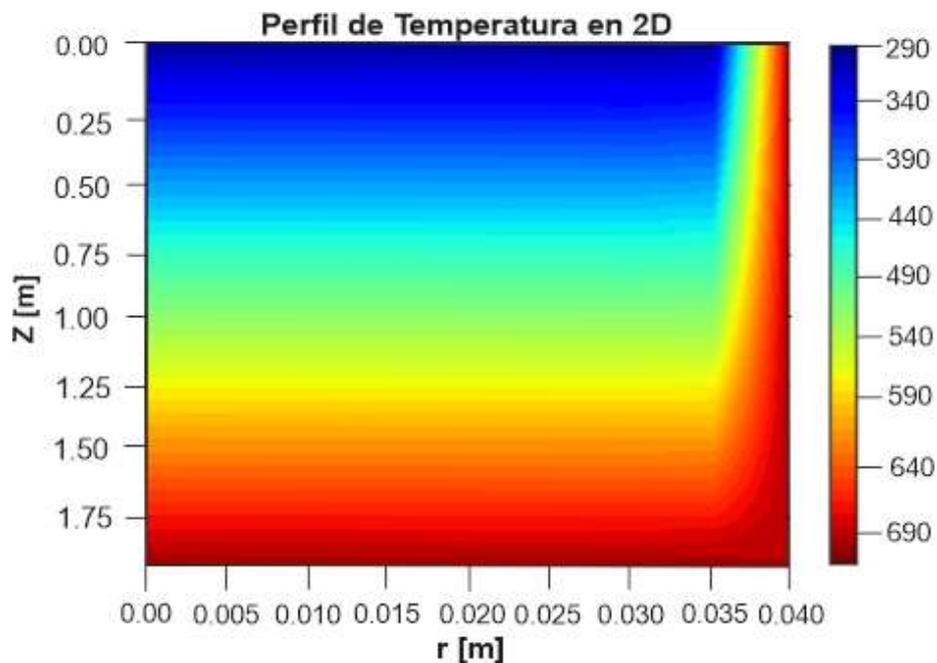
Para el modelamiento del reactor de lecho fijo se obtiene el perfil de temperatura en las dimensiones establecidas por la teoría, en este caso el radio llega a un valor de 0,04 m y lo largo del reactor es de 2,00 m, este valor se halla a través de la cinética de reacción, para el desarrollo de este modelo se tienen en cuenta los fenómenos de dispersión y convección mencionados en el capítulo anterior.

La malla se realizó manera uniforme respecto a la posición axial (z) y radial (r), tomando un resultado de 102 nodos para cada eje, se llegó a este valor con una serie de ensayos donde se variaba el valor de los nodos en el perfil de temperatura y concentración, ya que estos resultados están relacionados entre sí, por otra parte para refinar la malla de temperatura se realizaron 100 iteraciones con el fin de obtener resultados más precisos sin generar difusividad numérica, es decir que el modelo evite resultados incoherentes y fuera del comportamiento esperado.

En la figura 25 se evidencia el comportamiento del perfil de temperatura tanto para la fase sólida como la fase gaseosa, con respecto a la cinética de reacción, teniendo en cuenta que el tiempo de reacción es de ocho horas, sin embargo, el balance de energía se realizó de forma estacionaria, por el contrario, al realizar el análisis dimensional presentados en los anteriores capítulos se identificó que esta ecuación tiene unidades de temperatura con respecto a la posición de los nodos.

Figura 25.

Perfil de temperatura para el modelo bidimensional con las temperaturas del gas y sólido con respecto a las dimensiones



Nota. Perfil de temperatura para la pirólisis de hueso de palma aceitera.

Se identifica que el reactor cuenta con un sistema de calentamiento indirecto con flujos paralelos en las paredes del mismo, de esta manera la transferencia de calor se da desde las paredes del reactor hacia el centro del equipo, además la escala abarca valores desde 290K hasta 700K, en el desarrollo se obtienen condiciones de frontera para realizar el perfil de temperatura, se encuentran en la arista superior, inferior y lateral derecha, las cuales consisten en valores supuestos para la solución del sistema conforme a las derivadas obtenidas en las discretizaciones.

Se establece que la entrada del reactor se encuentra en el punto 0.00, tanto para el eje radial (r) y axial (z), aquí se presenta la primer condición de frontera ya que la biomasa ingresa por la parte superior del reactor y esta se encuentra en contacto con la temperatura del exterior con un valor aproximado a los 298.15 K, entre los puntos 0.50 del eje axial y 0.037 del eje radial se analiza qué biomasa aún se encuentra a bajas temperaturas, sin embargo se puede identificar que las paredes desde el punto 0.04 hasta el punto 0.037 genera un cambio de temperatura para la degradación de la cama de partículas.

Por otra parte como era de esperarse en las deducciones previas, se analiza que a lo largo del reactor se encuentra mayor transferencia de calor desde las paredes hacia la cama de partícula llegando a la temperatura máxima de degradación con respecto a la biomasa la cual tiene un valor de 700 K, estos valores se obtienen a partir de las condiciones en la arista al final de reactor la cual se identifica como el carbonizado de la cama de partículas, esa temperatura se considera la más alta del sistema.

5.2. Análisis de compuestos generados para la mezcla de biomasa

A continuación, se muestran las gráficas obtenidas para cada componente respecto a cinética de reacción donde se analizan a partir de la longitud y la temperatura, el sistema inicia con una temperatura de 298.15 K hasta alcanzar los 700 K para formar los productos de interés del proceso de pirólisis, esta temperatura es la máxima alcanzada por balance de energía

Se debe tener en cuenta que se genera una mezcla de gases por reacciones primarias de la pirólisis de cuesco de palma donde los valores que influyen son los parámetros cinéticos los cuales se encuentran en el capítulo dos, además el fluido es técnicamente incompresible y el flujo volumétrico es constante, es decir que caudal de entrada será equivalente al caudal del proceso conservando la continuidad del fluido con respecto a este balance por especies.

Por otra parte, se realiza el cálculo con respecto al porcentaje de formación de la siguiente manera

Ecuación 72. Fracción másica respecto al flujo másico del sólido

$$y_i = \frac{m_i}{m_s}$$

Donde

y_i = Fracción másica con respecto al flujo másico del sólido

m_i = Flujo másico de la especie

m_s = Flujo másico del sólido

Así mismo se realizó el despeje de la ecuación 72 identificando que el valor de m_s es igual a $1.2 \frac{Kg}{h}$ obteniendo.

Ecuación 73. Despeje de la ecuación 72

$$y_i m_s = m_i$$

Se aplica esta ecuación para cada compuesto con el fin de identificar el flujo másico que reaccionó, aplicando una sumatoria entre los compuestos, de los cuales se obtiene:

$$m_{H_2} = 3.734E-05 \frac{Kg}{h}$$

$$m_{CO_2} = 0.022 \frac{Kg}{h}$$

$$m_{CO} = 0.021 \frac{Kg}{h}$$

$$m_{H_2O} = 0.028 \frac{Kg}{h}$$

$$m_{CH_4} = 0.003 \frac{Kg}{h}$$

$$m_{Alq} = 0.269 \frac{Kg}{h}$$

$$\sum m_i = 0.3430 \frac{Kg}{h}$$

Finalmente, el porcentaje de formación para cada compuesto corresponde a la división del flujo másico de cada especie sobre la sumatoria obtenida.

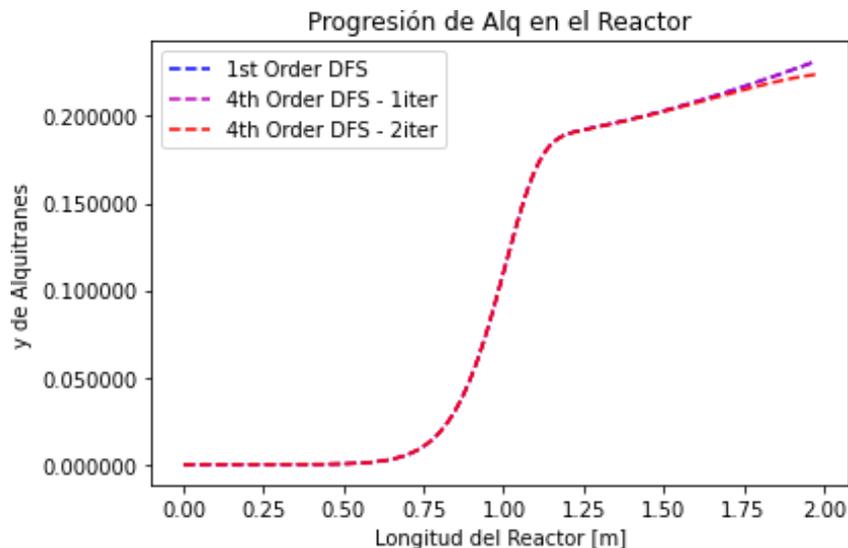
5.2.1. Alquitranses

La figura 26 representa la progresión de los alquitranses dentro del reactor, donde se puede evidenciar que la fracción másica de dichos compuestos, aumenta linealmente desde los 0.75 m aproximadamente hasta 1.15 m aproximadamente. Una vez que se alcanza una fracción másica de 0.18, la pendiente de la recta disminuye, lo que significa que, entre 1.15 m y 2 m, la generación de alquitrán se verá reducida.

Cabe resaltar que la generación de alquitranes se da a los 0.75 m aproximadamente, siendo estos los compuestos que más rápido se generan dentro del reactor. Por último, se puede evidenciar una pequeña variación al final del reactor comparado con las iteraciones para el refinamiento de la malla, de esta manera se identifica que al ajustar el modelo en cuarto orden esta iteración toma un valor aproximado de 0.2500 (línea morada) mostrando que la primera corrección de cuarto orden es muy cercana a la del modelo de primer orden, sin embargo cuando se vuelve a iterar enésimas veces este valor se encuentra por debajo obteniendo un valor de 0.245 (línea roja).

Así mismo el porcentaje de formación obtenido con respecto a los alquitranes alcanzó un valor de 78.327 %, de esta manera se identifica que es el producto mayoritario con respecto a los demás, así mismo trae beneficios con respecto a las aplicaciones de este compuesto en otras industrias.

Figura 26.
Progresión de alquitranes en el reactor (Tolueno)



Nota. Esta gráfica demuestra la producción de tolueno que genera la biomasa por degradación térmica dentro del reactor para la mezcla de gases.

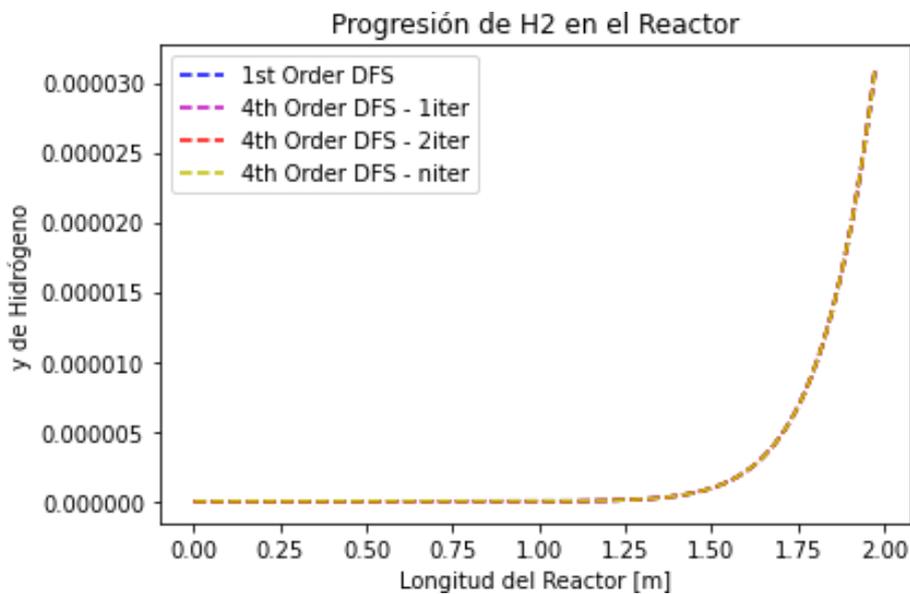
5.2.2. Hidrógeno

En la figura 27 se puede observar que la producción de hidrógeno tiene un valor $3.0E10^{-5}$ indicando que el compuesto se produce en cantidades muy bajas respecto a los demás componentes, incluso cuando el sistema alcanza la temperatura máxima, por esta razón se logra identificar que este compuesto en específico se produce a altas temperaturas. A partir de

los 1.5 m de longitud hasta los 2 m, se evidencia el crecimiento hasta llegar al punto máximo de la fracción másica, lo cual es coherente teniendo en cuenta la temperatura a la que se encuentran las paredes del reactor.

Por otra parte, se realiza el cálculo para obtener el porcentaje de formación con respecto a la biomasa donde se evidencio un valor de aproximadamente 0.010%, siendo uno de los productos más bajos, ya que la temperatura también afecta la cinética de reacción se puede identificar que este tipo de pirólisis a bajas temperaturas tienen más afinidad hacia productos líquidos y sólidos.

Figura 27.
Progresión de Hidrógeno en el reactor



Nota. Esta gráfica demuestra la producción de hidrógeno que genera la biomasa por degradación térmica dentro del reactor para la mezcla de gases.

Se realizó el cálculo de primer orden de truncamiento y cuarto orden de truncamiento con el fin de identificar los valores más cercanos a los esperados, sin embargo en el caso del hidrógeno se logra identificar que este cálculo no tiene diferencias para así refinar la malla con n ésimas iteraciones que se realizaron dentro del modelo matemático por medio del software, de esta manera se llegó a la conclusión que las iteraciones máximas son 6 ya que después de este valor se presenta difusividad numérica en los valores generados por la cinética de reacción como se muestra en la siguiente tabla, de esta manera el error absoluto se calculó con base a los datos experimentales que corresponde al valor de la fracción másica máxima

(0.0043) alcanzada por parte de la cinética por medio de un ciclo donde realiza el refinamiento de la malla para este compuesto en específico.

Tabla 14.

Valores de las fracciones másicas según el número de iteraciones

Iteraciones	Valores	Errores absolutos (%)
4	4E-3	3.7E-3
6	3.9E-3	4.6E-3
8	4E-3	1.45E-5

Nota. En la tabla se presentan los valores absolutos de los resultados de varias iteraciones para el hidrógeno.

5.2.3. Dióxido de carbono

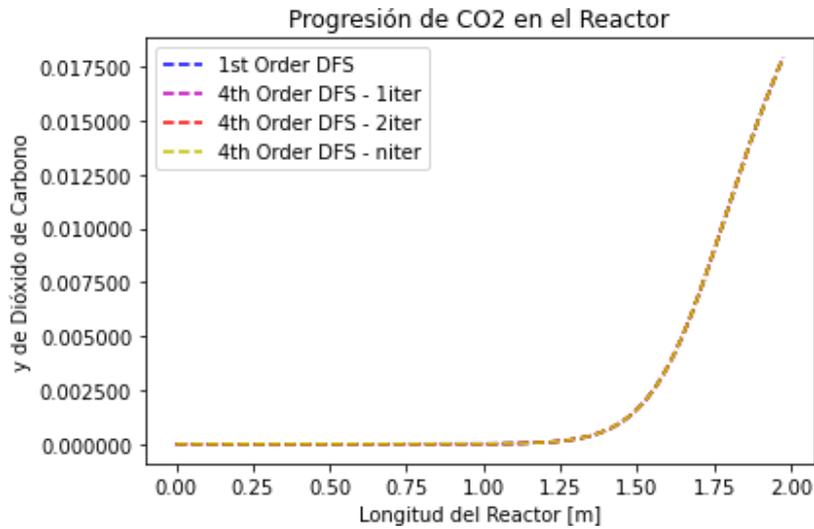
A partir de la figura 28 se evidencia que la fracción másica que alcanza es de 0.0175, la zona de producción se sitúa a partir de los 1.25 m con respecto a la longitud del reactor. Adicionalmente, se puede evidenciar que, entre 1.50 m y 1.75 m, la fracción másica asciende linealmente con respecto a la longitud del reactor.

Al realizar el análisis correspondiente con respecto a la fracción másica máxima obtenida y comparando los datos teóricos planteados con los datos experimentales que es 0.064, se identifica que el error absoluto es de 4.65% lo que quiere decir que es una buena aproximación del modelo matemático planteado con la experimentación realizada por los autores.

Realizando un análisis detallado con respecto a otros resultados de figura 19 los cuales se obtuvieron con los mismos parámetros cinéticos de la figura 28 se evidencia que en ambas son satisfactorios, sin embargo, en dicha figura los valores son mayores dando nuevamente a entender que la temperatura influye en los resultados. El dióxido de carbono cuenta con un porcentaje de formación de 6.275% lo cual se considera un valor intermedio frente a los demás compuestos, resaltando que se genera casi al final del reactor sin embargo llega a una fracción másica similar a la del monóxido de carbono.

Figura 28.

Progresión de dióxido de carbono en el reactor



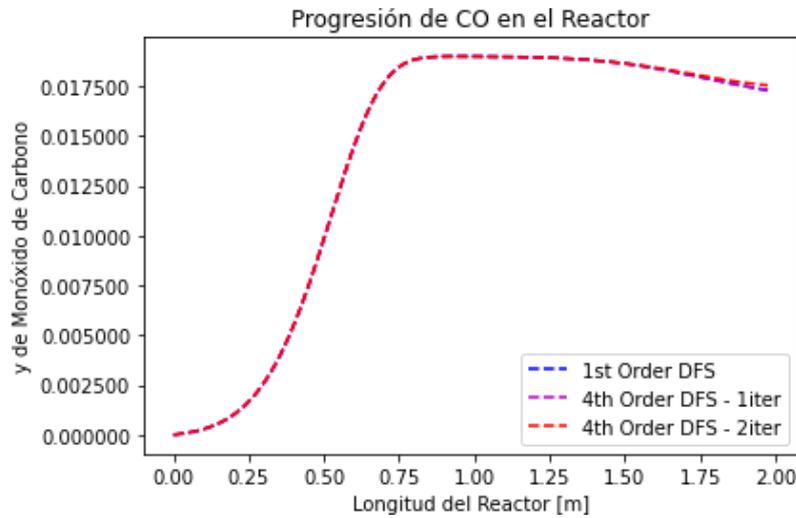
Nota. Esta gráfica demuestra la producción de dióxido de carbono que genera la biomasa por degradación térmica dentro del reactor para la mezcla de gases.

5.2.4. Monóxido de carbono

En la figura 29 se observa que en la zona donde ocurre la pirólisis abarca se encuentra entre la distancia 0.50m y 0.75 m y llega a un punto máximo en 0.75, de esta manera se llega satisfactoriamente al valor de la fracción másica obtenido experimentalmente, de la misma manera se aplica el método de diferencias finitas tanto de primer como cuarto orden evidenciando que existe una pequeña diferencia al final de esta curva, demostrando que truncamiento de cuarto orden se acerca más a la respuesta, sin embargo el número de iteraciones para refinar la malla es de alrededor 7, los nodos a los que se evalúan dichas fracciones másicas corresponden a 102.

Para el monóxido de carbono se evidencia un aumento significativo en un tiempo bajo, esto se debe a que este compuesto puede producirse a bajas temperaturas de reacción a diferencia del hidrógeno y otros compuestos presentes en la mezcla de gases generada por la biomasa. Teniendo un porcentaje de formación de 6.136% ubicándose en un rango intermedio frente a los otros compuestos

Figura 29.
Progresión de monóxido de carbono en el reactor



Nota. Esta gráfica demuestra la producción de monóxido de carbono que genera la biomasa por degradación térmica dentro del reactor para la mezcla de gases.

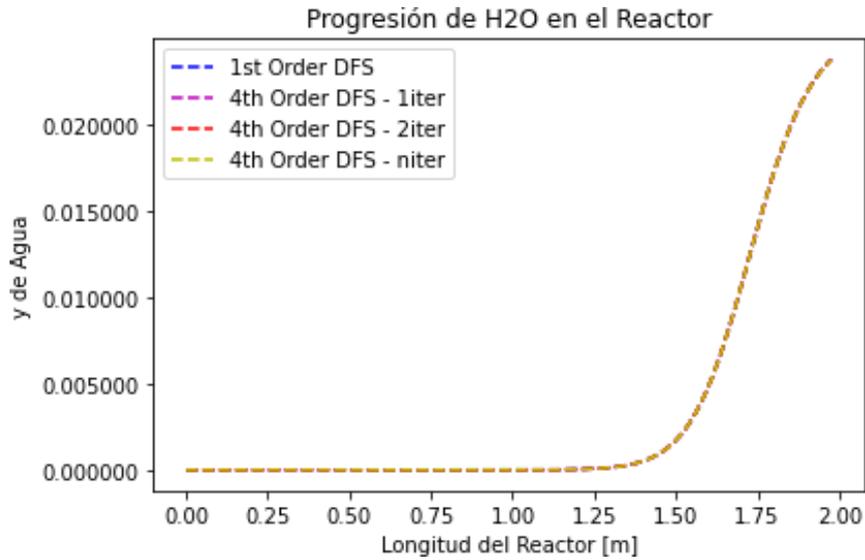
5.2.5. Agua

Según la figura 30 se logra identificar que la fracción másica obtenida es mayor que la presentada en los datos obtenidos experimentalmente por la bibliografía consultada, esto debido a la manipulación de las ecuaciones para el balance de masa donde se realiza un análisis con respecto a la cama de partículas. De igual manera, se identifica que este compuesto se produce cercano al punto final del reactor; donde su fracción másica es máxima.

Comparando las fracciones másicas obtenidas con el modelo matemático planteado, se tiene que la fracción molar de agua dentro del reactor es uno de los compuestos (junto con los alquitranes) de mayor presencia. Al realizar las correspondientes iteraciones, se evidencia que el error relativo entre una y otra es muy bajo, no obstante, para una mayor exactitud, se realizan 4 iteraciones para corroborar los datos obtenidos.

El agua es el segundo componente que presenta mayor formación y su porcentaje es de 8.294%. Al comparar el porcentaje de agua con el porcentaje de alquitrán (78.327%) se tiene una diferencia porcentual de 70.033 % la cual es alta, sin embargo el porcentaje de formación de este es cercano al de CO (6.136%) y CO₂ (6.275%).

Figura 30.
Progresión de agua en el reactor



Nota. Esta gráfica demuestra la producción de agua que genera la biomasa por degradación térmica dentro del reactor para la mezcla de gases.

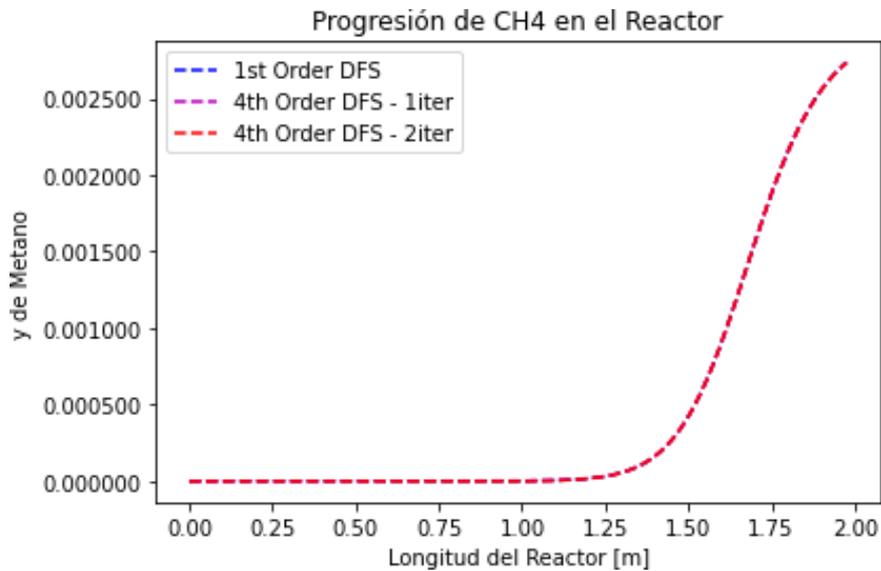
5.2.6. Metano

Como se puede observar en la figura 31, se presenta el aumento de la fracción másica con respecto al metano, el cual tiene un valor similar al crecimiento en el comportamiento del agua, por lo que da a suponer que tanto la generación de metano como la generación de agua son proporcionales. Sin embargo, a diferencia del agua, la fracción másica de metano es mayor en cuanto a magnitud.

Adicionalmente, se puede evidenciar que el número de iteraciones es bajo, esto debido a que el modelo matemático se aproxima con gran exactitud a los valores experimentales obtenido por los autores en la bibliografía

Esta especie tiene un valor de porcentaje de formación aproximado a 0.956% identificando que tiene un valor mínimo frente a este tipo de pirolisis, se debe a que los compuestos gaseosos no son un producto mayoritario, por el contrario, si se quisiera obtener este tipo de productos se debe sumar la cinética de gasificación.

Figura 31.
Progresión de metano en el reactor



Nota. Esta gráfica demuestra la producción de metano que genera la biomasa por degradación térmica dentro del reactor para la mezcla de gases.

5.3. Perfiles de fracciones másicas para la mezcla con respecto a longitud y tiempo

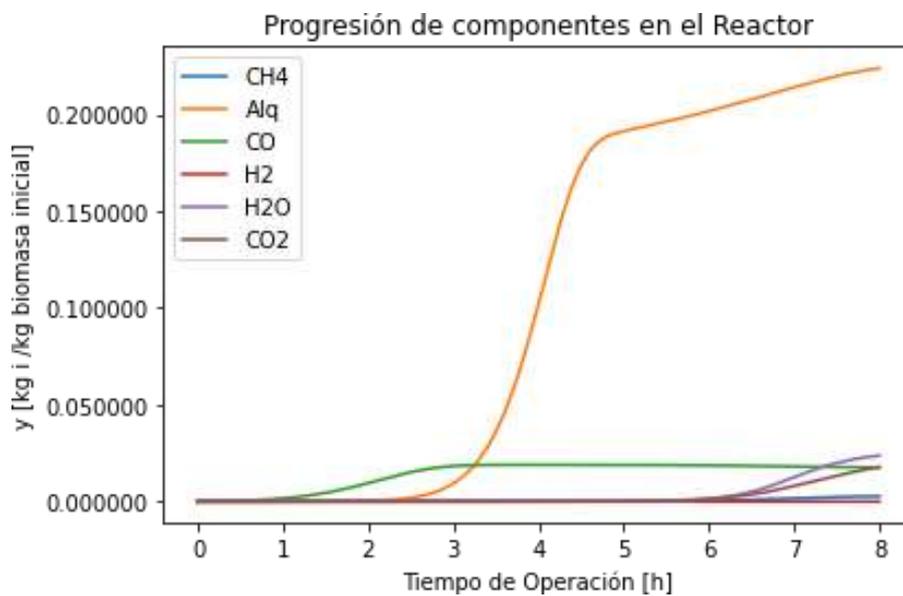
Para los perfiles de fracciones másicas se obtienen curvas, este modelo se logra graficar de esta manera ya que a la hora de realizar las discretizaciones se realizan en torno a una dirección la cual corresponde a la axial, de esta manera los resultados que se obtienen se analizan a lo largo del reactor, por otra parte, las reacciones en el sentido radial son muy pequeñas ya que la distancia de dicho reactor desde el centro hasta la pared es de 0.04 m.

Dentro de los resultados generados en la figura 32 y 33 se evidencia que el alquitrán tiene una mayor concentración a lo largo del tiempo de operación en el reactor, esto puede ser muestra de una mayor reactividad a nivel cinético y se puede expresar con la constante de velocidad que tiene valores altos frente a los otros componentes, de esta manera k_0 toma valores de $2.90E6$, $4.50E8$ y $1.00E8$ 1/s, por otra parte la energía de activación tiene valores de $9.30E4$, $1.29E5$ y $1.30E5$ J/mol para las reacciones. En términos físicos se puede decir que este en altas concentraciones y determinadas temperaturas es un reactivo de tipo sólido que puede generar altos niveles de volátiles, lo que le hace extremadamente delicado en un reactor si lo que se busca es obtenerlo puro y sin la producción de componentes no deseados que puedan contaminar o envenenar la reacción dada.

Por otra parte, se identifica que el hidrógeno y el metano se generan en pequeñas cantidades. lo cual se puede determinar que estos productos se generan a temperaturas altas, sin embargo el monóxido de carbono es el componente que alcanza su máxima tracción en menor tiempo y longitud con respecto a los demás componentes, en estas gráficas se puede observar que los compuestos tienen tendencias a estabilizarse después de determinados tiempos y longitudes, lo cual demuestra que el proceso de pirólisis se encuentra en las zonas donde la curva alcanza su fracción máxima.

Figura 32.

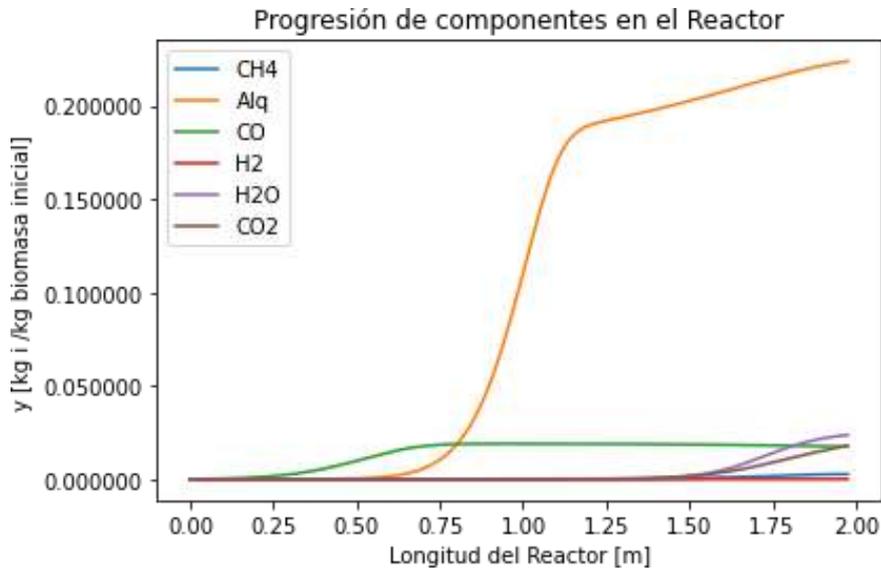
Progresión de componentes en el reactor con respecto al tiempo.



Nota. Esta gráfica demuestra la producción de compuestos que genera la biomasa por degradación térmica dentro del reactor para la mezcla de gases. Elaboración propia

Figura 33.

Progresión de componentes en el reactor con respecto a la longitud del reactor.



Nota. Esta gráfica demuestra la producción de compuestos que genera la biomasa por degradación térmica dentro del reactor para la mezcla de gases.

5.4. Comparación de resultados

Para la comparación de datos se eligieron seis modelos matemáticos de pirólisis de cuesco de palma, con el objetivo de identificar la degradación de biomasa según sus parámetros cinéticos y la formación de gases dentro del reactor, para ello se replicaron los datos experimentales donde se pueden contrastar con los valores obtenidos en este modelo, las gráficas se comparan a partir de la fracción másica máxima y la temperatura de reacción, donde la cinética del cuesco de palma llega aproximadamente a 425 °C, identificando que es una pirólisis a baja temperatura donde sus productos mayoritarios es la fase líquida donde está el alquitrán y el carbonizado.

Para la parte del carbonizado se realizó un análisis con respecto al flujo másico del sólido, de esta manera se calcula el valor de consumo para la formación de gases y alquitranes que se evidencia anteriormente, obteniendo un valor de $0.3430 \frac{kg}{h}$, por otro lado, se resta el flujo másico de la biomasa inicial el cual corresponde a un valor de $1.2 \frac{kg}{h}$ para obtener un valor de $0.857 \frac{kg}{h}$ que corresponde al carbonizado.

Los modelos que se presentan en la gráfica se nombran de la siguiente manera, así mismo tomará el nombre de la investigación consultada a partir de los referentes teóricos del proyecto.

Modelo 0 → Modelación del proceso de gasificación de biomasa en un reactor de lecho fijo con calentamiento indirecto, autores: P. A. Acosta., L. A. Chipatecua [13]

Modelo 1 → Efecto de la temperatura en el potencial de aprovechamiento energético de los productos de la pirólisis del cuesco de palma.,autores: L. M. Romero Millán, M. A. Cruz Domínguez [69]

Modelo 2 → Modelo matemático de un reactor de lecho fijo para el proceso de pirólisis del cuesco de palma aceitera, autores: J. C. Contreras., J. L. Tatis (**Presente trabajo**)

Modelo 3 → Modelación de la gasificación de biomasa en un reactor de lecho fijo., autor: H. J. García Patiño [12]

Modelo 4 → Pirólisis de Biomasa: Cuesco de palma de aceite., autores: A. Gómez,W. Klose, S. Rincón. [63]

Modelo 5 → Transformación termoquímica de la biomasa residual del proceso de extracción del aceite de palma: tecnologías y perspectivas.,autores: A. Gómez, W. Klose, S. L. Rincón & W. Wiest [70]

La figura 34 describe el efecto térmico respecto a la degradación de la biomasa, es decir, a medida que aumenta la temperatura mayor será el consumo del cuesco de palma, esto se debe a que la celulosa, lignina y la hemicelulosa comienzan a perder su estabilidad estructural y las reacciones durante la pirólisis comienzan a verse favorecidas por el incremento energético.

Se presentan cuatro modelos donde el modelo 0 corresponde a la gasificación de la madera de haya, donde se evaluaron los parámetros cinéticos con respecto a los del cuesco de palma en él como modelo 2, 3 y 5 estos modelos presentan un comportamiento similar hasta alcanzar aproximadamente los 0.79 con respecto a su composición de biomasa, después de disminuir

su fracción másica se observa que el modelo 0 y 3 mantienen un comportamiento lineal a medida que aumenta la temperatura, a diferencia del modelo 2, requiriendo una temperatura mayor en la degradación de la biomasa.

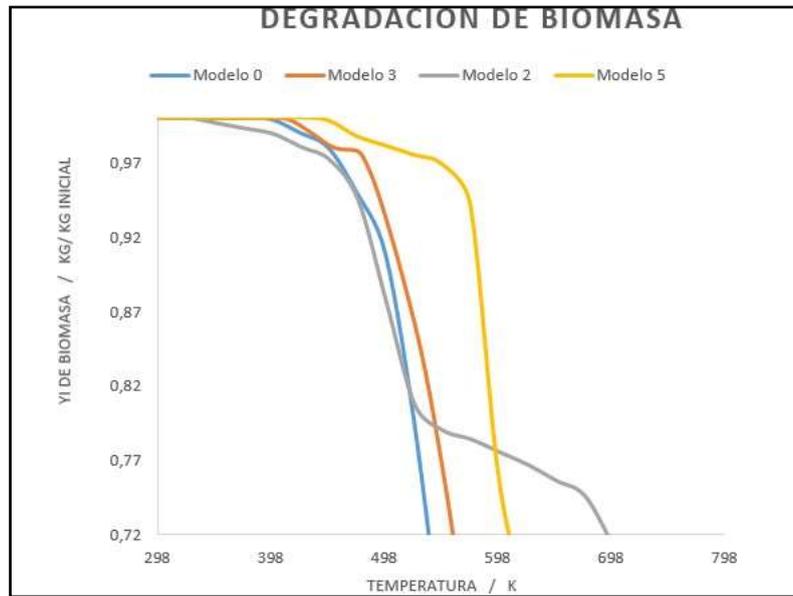
Al comparar los modelos presentados en la gráfica, se identifica que el modelo 5 es el que tiene menos similitud al modelo 2, en cambio el modelo 0 y 3 presentan afinidad con el modelo 2. Por otra parte, el modelo 0 es el que presenta mayor acercamiento en la degradación del cuesco de palma del modelo 2.

De acuerdo a las temperaturas los modelos llegan hasta los 700 K, pero la variación de la degradación de su biomasa se hace notoria hasta cierto punto. El modelo 0 hasta los 540 K la degradación de la biomasa se hace distintiva, por otra parte, el modelo 2 hasta los 700 K el consumo del cuesco es significativo, así mismo el modelo 3 alrededor de los 560 K, finalmente el modelo 5 aproximadamente de los 610 K presenta la degradación de biomasa.

Realizando la desviación estándar para cada modelo se tienen los siguientes resultados: Modelo 0: 0.340; modelo 2: 0.108; modelo 3: 0.320 y modelo 5: 0.215. Estos valores indican que los resultados obtenidos de la degradación de la biomasa están alejados de la media.

Figura 34.

Comparación de modelos de acuerdo la degradación de biomasa



Nota. La gráfica muestra la degradación del cuesco de palma de aceite con otros modelos matemáticos con variación en el tiempo.

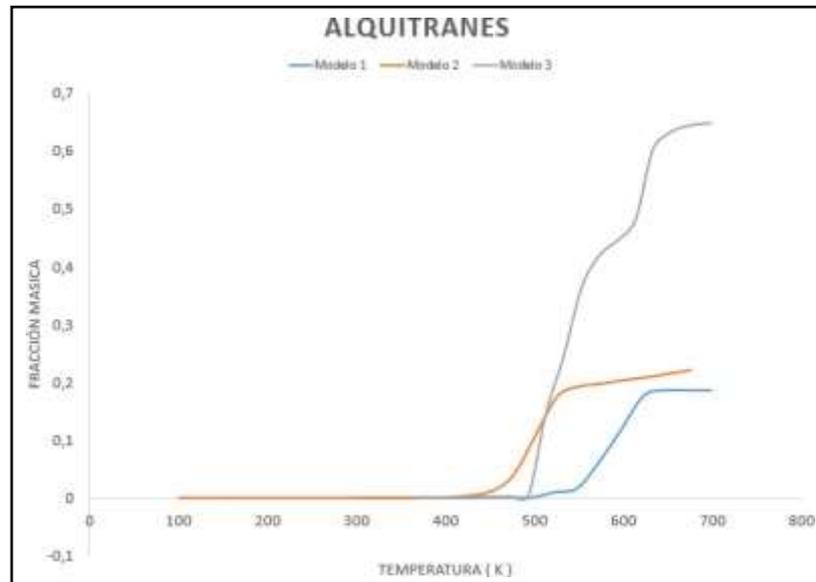
Para la figura 35 se establecen una serie de modelos los cuales tienen una pirólisis a baja temperatura y mostrando los productos mayoritarios de la pirólisis los cuales son los alquitranes. En cuanto al modelo 1 se evalúa el efecto de la temperatura para el aprovechamiento del cuesco de palma y también se encuentra el modelo 3 el cual es un modelo crítico para el desarrollo de este proyecto, ya que las decisiones tomadas con respecto a los parámetros cinéticos y ecuaciones de gobierno con sus respectivas ecuaciones auxiliares se evaluaron a partir de la experimentación realizada por el autor, finalmente se encuentra el modelo 2 el cual corresponde al presente proyecto, donde se puede analizar que tiene datos por debajo de la producción del modelo 3, esto se debe al tipo de alquitrán que presenta cada modelo, ya que pueden ser alquitranes de tipo primario, secundario o terciario, los cuales dependen del tipo de reacción tomadas por cada autor, donde también lo afecta el tiempo de residencia y la temperatura en cada modelo.

Comparando el modelo 2 frente a los modelos 1 y 3, se observa que el modelo 1 es el que más se acerca a los resultados obtenidos ya que se tomaron las propiedades fisicoquímicas del cuesco de palma de aceite y los parámetros cinéticos están dentro del rango, si la tasa de calentamiento es menor a 10 K/min, en cuanto al modelo 3 cabe recalcar que se tomaron en

cuenta parámetros cinéticos y propiedades diferentes a la biomasa que se desea estudiar, es decir que afecta la cinética de reacción en cuanto a este tipo de producción.

Figura 35.

Comparación de alquitranes frente a otros modelos en un rango de temperatura



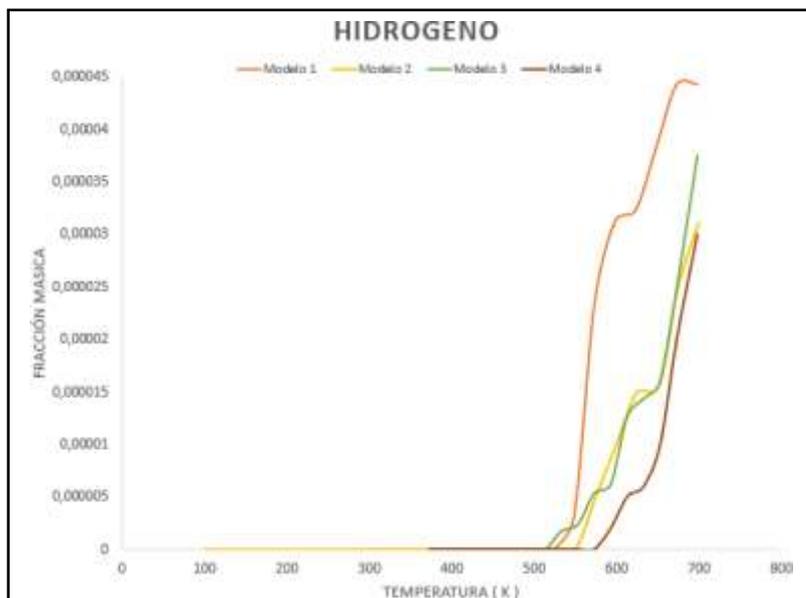
Nota. La gráfica muestra la producción de alquitrán con otros modelos de pirólisis.

Para el análisis de la figura 36 se tuvieron en cuenta cuatro modelos los cuales producen hidrógeno dentro de su proceso de pirólisis, para el modelo 1 se evalúa el efecto de la temperatura para el aprovechamiento del cuesco de palma y también se encuentra el modelo 3 el cual es un modelo crítico para el desarrollo de este proyecto, ya que las decisiones tomadas con respecto a los parámetros cinéticos y ecuaciones de gobierno con sus respectivas ecuaciones auxiliares se evaluaron a partir de la experimentación realizada por el autor y finalmente para el modelo 4 se obtiene datos de la universidad de Kassel en Alemania, la cual están basados la mayoría de proyectos acerca de pirólisis de cuesco de palma.

El modelo 2 representa los resultados obtenidos por el proyecto de esta forma se evidencia que los datos experimentales reportados por los investigadores del modelo 3 y el modelo 4 están muy cercanos, esto quiere decir que las aproximaciones y suposiciones realizadas fueron apropiadas para este tipo de comportamiento, la producción de hidrógeno por otro lado se ve un incremento significativo a medida que aumenta la temperatura entre los 500 K y 590 K.

Figura 36.

Comportamiento del hidrógeno frente a la temperatura y otros modelos



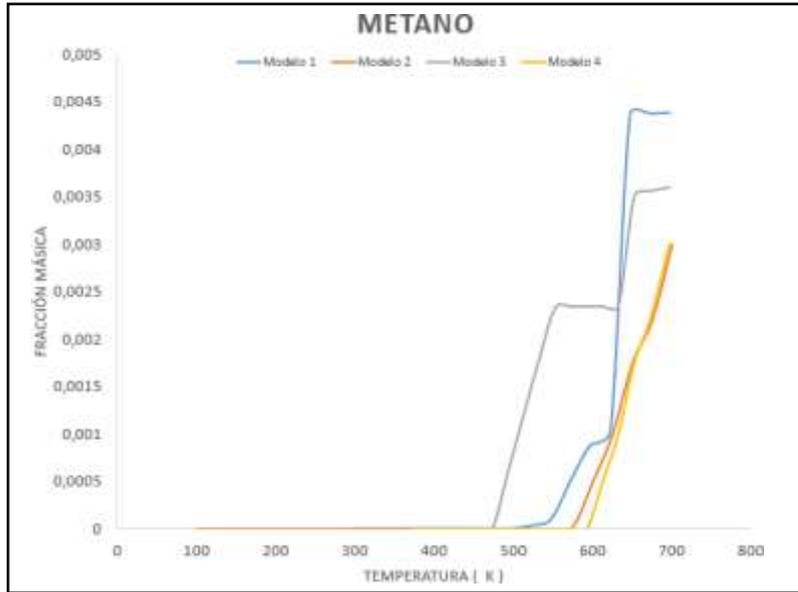
Nota. La gráfica muestra la producción de hidrógeno con otros modelos de pirólisis.

En la figura 37 se comparan cuatro modelos, el modelo 2 es el presente trabajo con sus respectivos datos obtenidos y el modelo 4 representa un estudio de la pirólisis detallada de cuesco de palma de aceite, estas curvas muestran similitud en su comportamiento de manera que se obtienen en ambos una fracción másica final de 0.003 aproximadamente indicando que los resultados obtenidos frente al modelo 4 el cual es experimental son óptimos. En cambio, los modelos 1 y 3 presentan variación entre sí, además de obtener datos diferentes en cuanto a la composición final de metano.

Los modelos 1 y 2 alcanzan su máxima fracción másica a temperaturas que se encuentran alrededor de los 633 K por otra parte los modelos 2 y 4 necesitan estar a la temperatura de los 700 K para alcanzar su máxima conversión.

Figura 37.

Comportamiento de metano frente a la temperatura y otros modelos

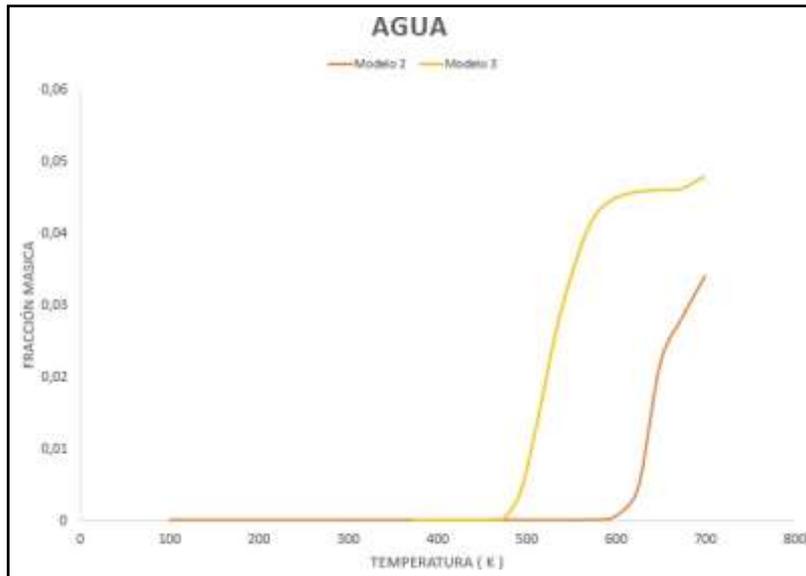


Nota. La gráfica muestra la producción de metano con otros modelos de pirólisis.

De acuerdo a la figura 38 se tiene una comparación entre dos modelos, donde el modelo 3 es el que alcanza la mayor fracción másica de 0.0478 a una temperatura de 700 K en cambio el modelo 2 logra llegar 0.0340 a la misma temperatura. La diferencia entre sus composiciones másicas máxima es de 0.013 dando a entender que la variación entre los datos es considerable y además la formación de agua es superior al del modelo 3 frente al modelo 1.

Figura 38.

Comportamiento del agua de frente a la temperatura y otros modelos

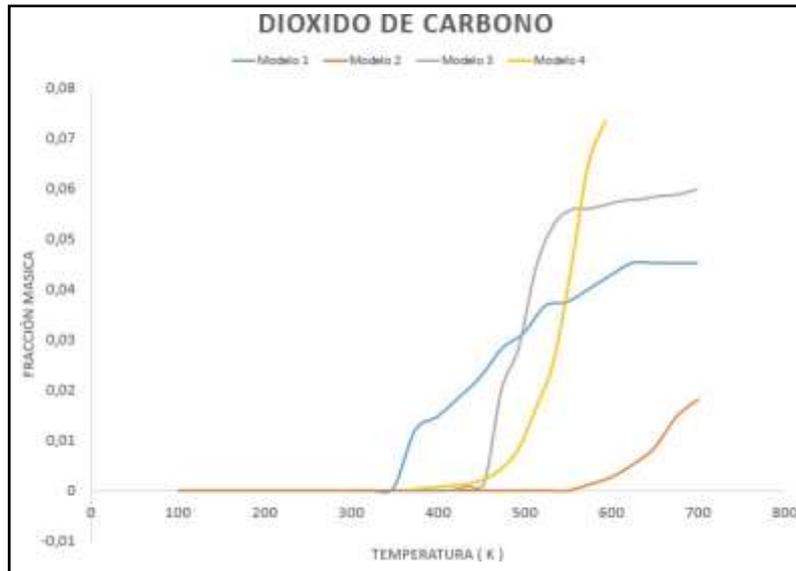


Nota. La gráfica muestra la producción de agua con otros modelos de pirólisis.

Al contrastar los resultados de las fracciones másicas de los modelos presentes en la figura 39 se tiene que el modelo 4 presenta los mayores resultados en la obtención de dióxido de carbono, sin embargo, el modelo 1 es el que más se aproxima a los datos obtenidos del modelo 2 a pesar de la variación presente. Por otra parte el modelo 2 es el que genera la menor fracción másica posible. La máxima conversión alcanzada para cada modelo es: Modelo 1: 0.045, modelo 2: 0.018, modelo 3: 0.0598 y modelo 4: 0.0733 a 700K cada uno. Además, el efecto de la temperatura influye de manera distinta en la formación de dióxido de carbono en cada modelamiento

Figura 39.

Comportamiento del dióxido de carbono frente a la temperatura y otros modelos

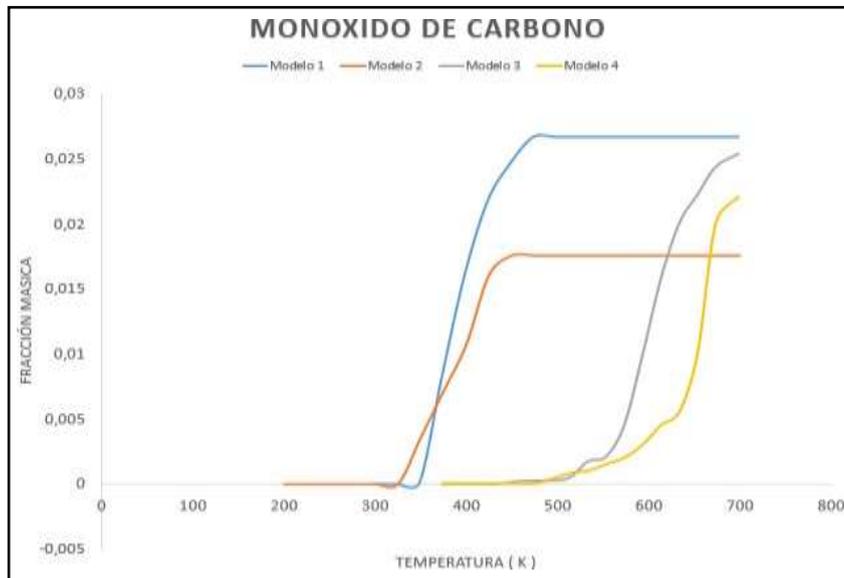


Nota. La gráfica muestra la producción de dióxido de carbono con otros modelos de pirólisis.

En la figura 40 se muestran y comparan 4 modelos. El modelo 1 es el que alcanza la mayor fracción máfica posible con un valor de 0.0266 a los 423.15K y a partir de esta temperatura toma un comportamiento constante, luego sigue el modelo 3 con 0.0253 a 700 K al igual que el modelo 4 con 0.0175 y por último el modelo 2 con 0.0733 a los 400 K sin tener variaciones hasta llegar los 700 K. Por otra parte, el modelo 1 es el que más se asemeja al comportamiento de la curva del modelo 2 hasta los 400 K, en cambio el modelo 3 y 4 no presentan una buena afinidad al modelo 2.

Figura 40.

Comportamiento del monóxido de carbono frente a la temperatura y otros modelos



Nota. La gráfica muestra la producción de monóxido de carbono con otros modelos de pirólisis.

A Continuación, en la tabla 15 se muestran los datos obtenidos numéricamente en cada uno de los modelos, donde algunos modelos no tuvieron en cuenta en la modelación ciertos componentes debido a que buscaban otro producto de interés.

Tabla 15.

Comparación de modelos con respecto a datos obtenidos

	Modelo 0	Modelo 1	Modelo 2	Modelo 3	Modelo 4	Modelo 5
Alquitranes	-	0.185	0.224	0.647	0.477	-
H₂	0.011	4.43E-05	3.11E-5	3.75E-05	3.00E-05	-
CO	0.099	0.027	0.018	0.025	0.022	-
CO₂	0.0655	0.045	0.018	0.060	0.073	-
CH₄	0.009	0.004	0.003	0.004	0.003	-
H₂O	0.078	-	0.034	0.048	-	-
Carbonizado	0.210	0.739	0.713	0.211	0.425	0.425

Nota. Datos obtenidos por gráficas de diferentes modelos

6. CONCLUSIONES

Con respecto al modelo se determinó que el desarrollo es apropiado frente a los resultados obtenidos, de esta manera se logró satisfactoriamente llegar a los resultados esperados en comparación a referentes teóricos en cuanto a la temperatura y composición de los gases dentro del reactor, lo cual puede ser un punto de partida para seguir estudiando el comportamiento de este tipo de procesos, ya que permite pasar de un comportamiento ideal hacia una adaptación más cercana a la realidad.

Como se evidencia en la tabla 4, la propiedad fisicoquímica de la biomasa depende directamente de la zona de cultivo, ya que el suelo es un factor importante a la hora de identificar las cantidades por componentes disponible en la materia prima y que determina los rendimientos y conversión total en el reactor de pirólisis.

El modelo permite identificar la temperatura de a la cual opera el reactor con respecto a la cinética de operación, evidenciando el perfil que se forma desde las paredes hasta el centro del reactor, además identifica que tipo de pirólisis que rige la cinética de reacción, en este caso la pirólisis se da a bajas temperaturas donde tiene formación de compuestos líquidos y de carbonizado, por otro lado, se puede obtener el tiempo de operación y la distancia de dicha zona de pirólisis.

Según los resultados obtenidos se identifica que las correlaciones y reglas de mezclas utilizadas en el modelo son apropiadas para la solución del modelo matemático, como se puede observar en las gráficas presentadas para la formación de compuestos el hidrógeno y el metano se ven favorecidos por altas temperaturas, mientras que las demás especies tienen una temperatura límite, si se quiere llegar a la formación de los compuestos como lo es el hidrógeno y el metano se debe agregar la cinética de reacción de gasificación de esta manera aumenta el rendimiento en cuanto a los gases.

En cuanto al tiempo de residencia se encontraron satisfactoriamente entre un rango de 5 a 8 horas con respecto a los datos obtenidos en las referencias bibliográficas, en el caso de este proyecto se llegó al valor de 8 horas.

Este modelo tiene un error de predicción mínimo con respecto a la temperatura, se demostró en el capítulo 5 ya que las pirolisis de cuesco de palma de aceite están alrededor de los 400°C por otra parte se calculó el error de predicción para cada compuesto iniciando con el metano con un 5.98E-04, alquitranes 4.23E-01, monóxido de carbono 7.79E-03, dióxido de carbono 4.18E-02, hidrógeno 6.35E-06, agua 1.38E-02, obteniendo buenas aproximaciones frente a datos experimentales.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] S. Coba., A. J., and L. Tarelho, “*Simultaneous production of biochar and thermal energy using palm oil residual biomass as feedstock in an auto-thermal prototype reactor.*” 2019.
- [2] “El palmicultor.” no. 552, 2018, p 28.
<https://web.fedepalma.org/sites/default/files/files/Fedepalma/semanario-palmero/publicaciones/Boletin-El-Palmicultor-de-febrero-de-2018.pdf>.
- [3] E. L. Becerra, E. L. Becerra. *Caracterización del desecho agroindustrial de la palma de aceite "Cuesco" para mejoramientos de las capas granulares de la estructura de pavimento.* 2017.
- [4] E. Castells, *Biomasa Y Bioenergía: Energía, Agua, Medioambiente, Territorialidad y Sostenibilidad*, 1^{era}. Ed. Barcelona: Ediciones Díaz de Santos, 2012
- [5] Pesquet, E. (2020, 20 de julio). Órganos vegetales. Ampliaciones. Lignina. Atlas de Histología Vegetal y Animal. Inicio. Atlas de histología Vegetal y Animal. <https://mmegias.webs.uvigo.es/2-organos-v/ampliaciones/lignina.php>
- [6] R. Parada Puig. "Hemicelulosa: clasificación, estructura, biosíntesis, funciones". Lifeder. <https://www.lifeder.com/hemicelulosa/> [Acceso 1 de octubre de 2021].
- [7] Celulosa. (s. f.). quimica.es – el portal informativo químico, desde el laboratorio hasta los procesos. <https://www.quimica.es/enciclopedia/Celulosa.html>
- [8] J. A. Zumárraga Pech, *Efecto de los pre tratamientos hidrotérmicos en la composición química y la sacarificación del bagazo de Agave Tequilana.* Tesis en Maestría en Ciencias en Energía Renovable. Centro de investigación científica Yucatán. Mérida, Yucatán, 2012. [En línea]. Disponible: https://cicy.repositorioinstitucional.mx/jspui/bitstream/1003/676/1/PCER_M_Tesis_2012_Jose_Alberto_Zumarraga_Pech.pdf

- [9] J. S. Sechage Cortes, D. L. Gomez Sandoval, A. G. Rodriguez Meléndez y M. A. Mayorga Betancourt, Modelamiento matemático para la pirólisis del cuesco de palma de aceite, “*INGENIUM*”, 40, no. pp. 44–56, 2017. [Acceso oct. 2, 2021]
- [10] Proceso Productivo | Aceites De Palma. (2014). INDUAGRO S.A., nov. 14, 2021. [En línea] consultado:
<http://www.induagro.com.mx/HOMEAP/ProcProductAP/ProcProductAP.html>
- [11] F. Soler. "Aceite de palma: Cultivo, proceso de obtención, refinación y transformación". LSLIPSA. [En línea]
<http://www.aiqs.es/uploads/managearticle/7/2018/03/16/20180316120421-0559.pdf>
 (Accedido nov. 14, 2021).
- [12] H. J. García Patiño, *Modelación de la gasificación de biomasa en un reactor de lecho fijo*, tesis mast. Facultad de Ingenierías, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá , 2011. [En línea].
 Consultado: <https://repositorio.unal.edu.co/bitstream/handle/unal/7563/291499.2011.pdf?sequence=1&isAllowed=y>
- [13] P. A. Acosta., L. A. Chipatecua, *Modelación del proceso de gasificación de biomasa en un reactor de lecho fijo con calentamiento indirecto*, tesis pre. Facultad de Ingenierías, Fundación Universidad de América, Bogotá, Colombia , 2018.
- [14] V. H. Ramírez, “Características del sector palmero en Colombia y retos para el sindicalismo”, *Escuela Nacional Sindical*”, Mar, 2020, [En línea]
<https://ail.ens.org.co/informe-especial/caracteristicas-del-sector-palmero-en-colombia-y-retos-para-el-sindicalismo/> . [Acceso Nov. 2, 2020]
- [15] E. G. Girón Amaya, L. E. Castro Zmudio, J. C. Espinosa Camacho, et al., "Vista de Anuario Estadístico". Fedepalma.
<https://publicaciones.fedepalma.org/index.php/anuario/article/view/13235/13024>.
 [Accedido el 4 de noviembre de 2021].

- [16] “Extractora Cusiana SAS | Nosotros | Colombia.” <https://www.extractoracusiana.net> (Accedido Nov. 03, 2021).
- [17] J. Van Dam, “Subproductos de la palma de aceite como materias primas de Biomasa *,” vol. 37, pp. 149–156, 2016, [Online]. Available: http://web.fedepalma.org/sites/default/files/files/Fedepalma/Memorias de la XVIII Conferencia Internacional sobre Palma de aceite/M_2_15_Subproductos de la palma.pdf.
- [18] A. A. Safana, N. Abdullah, F. Sulaiman, “Research Paper A study of pyrolysis kinetics of palm shell and empty fruit bunches via thermogravimetric analysis (TGA),” vol. 7, no. February, pp. 155–162, 2019, doi: 10.15413/ajsr.2018.0163.
- [19] F. Abnisa and A. Arami-niya, “Characterization of Bio-oil and Bio-char from Pyrolysis of Palm Oil Wastes,” pp. 830–840, 2013, doi: 10.1007/s12155-013-9313-8.
- [20] B. S. Iskandar, “Thermogravimetric Analysis of Palm Oil Wastes Decomposition,” pp. 205–208, 2011.
- [21] R. Millán, L. María, C. Domínguez, M. Alejandra, S. Vargas, and F. Emiro, “Análisis comparativo de la carbonización de cuesco de palma de aceite en reactores de lecho fijo”, *Tecnura*, vol. 20, no. 49, pp. 45-57, abr, 2016, [En línea] doi: 10.14483/udistrital.jour.tecnura.2016.2.a06. [Acceso Oct. 15, 2021]
- [22] Uemura Y., Omar, W. N., Tsutsui, T. y Yusup, S. B., “Torrefaction of oil palm wastes”, *Fuel*, vol. 90, no. 8, pp. 2585-2591, ago. 2011.
- [23] L. M. Romero Millán, M. A. Cruz Dominguez, F. E. Siera Vargas, “Efecto de la temperatura en el potencial de aprovechamiento energético de los productos de la pirólisis del cuesco de palma”, *Tecnura*, vol. 20, no. 48, pp. 89-99, abr, jun, 2016, [En línea], <https://revistas.udistrital.edu.co/index.php/Tecnura/issue/view/650>. [Acceso ago. 1, 2021]

- [24] L. A. Q. L and C. I. Torres, “*Análisis de residuos sólidos de palma africana , como alternativa de aprovechamiento de energías renovables en el departamento del Cesar,*” vol. 10, pp. 8–18, 2019, doi: 10.21500/20275846.3662.
- [25] M. S. Juan Carlos Urueta, I. José Urbina, P. Alex Weber, Qco Antonio Bula Silvera, Ms. Marco Enrique Sanjuán, PhD Arnaldo Verdeza Alvarez, MSc Yuhan Arley Lenis, and I. M. Ingrid Natalia Hernandez, MSc. José David Pérez, “*valoración energética de los residuos del proceso de extracción de aceite de palma africana mediante gasificación,*” pp. 1–18.
- [26] Organización De Las Naciones Unidas, “Objetivos de Desarrollo Sostenible”, 2015-2021, [En línea], <https://www.un.org/sustainabledevelopment/es/objetivos-de-desarrollo-sostenible/https://hemeroteca.unad.edu.co/index.php/publicaciones-e-investigacion/article/view/3467/3697>, [Acceso oct, 2, 2021].
- [27] J. M. Corberán, R. Royo, Transmisión de calor multidireccional y transitoria. [En línea] <http://www.upv.es/upl/U0296618.pdf>, [Acceso nov. 6, 2021]
- [28] L. E. Arteaga Pérez, C. Segura, K. Diéguez Santana, Procesos de torrefacción para valorización de residuos lignocelulósicos. Análisis de posibles tecnologías de aplicación en Sudamérica, *CORE*, pp. 60-67, En, 2015, [En línea] <https://core.ac.uk/download/pdf/39151848.pdf>. [Acceso nov. 6,2020]
- [29] "Torrefaction – A New Process In Biomass and Biofuels". New Energy and Fuel | News and Views for Making and Saving Money in New Energy and Fuel. <https://newenergyandfuel.com/http://newenergyandfuel.com/200811//19/torrefaction---a-new-process-in-biomass-and-biofuels/> (accedido el 6 de noviembre de 2021).
- [30] “Sistemas de tratamiento.” <https://www.miteco.gob.es/es/calidad-y-evaluacion-ambiental/temas/prevencion-y-gestion-residuos/flujos/domesticos/gestion/sistema-tratamiento/Pirolisis.aspx> [Acceso Oct. 21, 2021].

- [31] M. Uddin et al., "An Overview of Recent Developments in Biomass Pyrolysis Technologies", *Energies*, Vol. 11, no. 11, pp. 1-24. 2018. [En línea] <https://www.mdpi.com/1996-1073/11/11/3115>. [Acceso Sep 30].
- [32] D.C. Okpala, "Palm kernel shell as a lightweight aggregate in concrete", *ScienceDirect*, vol. 25, no. 4, pp. 291-296, 1990, [En línea] [https://doi.org/10.1016/0360-1323\(90\)90002-9](https://doi.org/10.1016/0360-1323(90)90002-9), [Acceso oct. 20, 2021]
- [33] H.S. Fogler, *Elementos de ingeniería de las reacciones químicas*, 4ª. Ed. México: Pearson Educación S.A, 2008
- [34] "Horno Rotativo | The Vichem Group – Su entorno, nuestra misión". The Vichem Group | Your environment, Our mission. <https://www.vichemgroup.com/es/product/tratamiento-de-residuos/horno-rotativo> [Acceso oct. 26, 2021]
- [35] Pirobloc S.A. "Sistemas de calentamiento industrial - Pirobloc". Pirobloc. <https://www.pirobloc.com/sistemas-de-calentamiento-industrial/> [Acceso nov. 6, 2021]
- [36] D. F. Flórez Ramos, J. Barco Burgos, S. I. Rincón Prat, "Análisis comparativo de la carbonización de cuesco de palma de aceite en reactores de lecho fijo", *Tecnura*, vol. 20, no. 49, pp. 45-58, 2016, [En línea] <http://dx.doi.org/10.14483/udistrital.jour.tecnura.2016.3.a03>, [Acceso oct. 21, 2021]
- [37] Quimitube. "Ecuación de Arrhenius: velocidad de reacción y temperatura | Quimitube". Quimitube toda la Química de 2º de Bachillerato y Selectividad. <https://www.quimitube.com/videos/cinetica-quimica-teoria-8-ecuacion-de-arrhenius/> [Acceso nov. 14, 2021].
- [38] G. García. "Transferencia o dispersión del calor". esiatecamachalco.foroactivo.com. Ago. 26, 2009. [En línea] <https://esiatecamachalco.foroactivo.com/t53-transferencia-o-dispersion-del-calor>. [acceso oct. 12, 2021].

- [39] Popularity of Programming Language Index. "PYPL Popularidad del lenguaje de programación". *Page Redirection*. 2021. [En línea] <https://pypl.github.io/PYPL.html> [acceso nov. 14, 2021].
- [40] Y. A. Cengel & M. A. Boles, *Termodinámica*, 7^a. Ed. México: Mc Graw - Hill Interamericana Editores, S.A. DE C.V, 2011
- [41] J. H. Perry, D. W. Green & M. Z. Southard, *Manual Del Ingeniero Químico*, 7^a. Ed. México: Mc Graw - Hill Interamericana Editores, S.A. DE C.V, 2019
- [42] Gunn, D. J. Gunn, Theory of axial and radial dispersion in packed beds. En: Trans. Instn. Chem. Engrs. 47 (1969)
- [43] B. E. Poling, O. Connell, J. Perry & J. M. Prausnitz, *The properties of gases and liquids*. 5^a. Ed. Boston: McGraw-Hill, 201
- [44] JENSEN, Sandra. Zur Modellierung eines indirekt beheizten Festbett Biomasse Vergasers. Kassel, 2001.
- [45] Wiest, W.: Zur Pyrolyse von Biomasse im Drehrohrreaktor, Universität Gh Kassel, Tesis de Doctorado, 1998
- [46] Vervuert, M.: Zur modell massigen Erfassung der Kammer Verkokung als warme transport bestimmte Reaktion, Der Technischen Universität at Berlin, Tesis de Doctorado, 1985
- [47] U. E. Schlunder, E. Tsotsas, *Wärmeübertragung in Festbetten, durchmischten Schüttgutern und Wirbelschichten*. Georg Thieme-Verlag, Stuttgart, 1988
- [48] Platzi team, "Qué es Python y por qué empezar a programar con este lenguaje", Platzi, [En línea] https://platzi.com/blog/python/?utm_source=google&utm_medium=cpc&utm_campaign=12915366154&utm_adgroup=&utm_content=&gclid=CjwKCAjw_L6LBhBbEiwA4c46unDBR5sqm-

tCRIw2HEjA1RTILSnMfHhjs4HRvyk82Dowli_UtX1URoCUM0QAvD_BwE&gclid=aw.ds.[Acceso oct. 20, 2021]

[49] "Lenguaje de programación Python 【 aprende a programar 】 ". Lenguajes de programación. <https://lenguajesdeprogramacion.net/python/> [accedido oct. 24, 2021].

[50] edX, "R vs. Python para la ciencia de datos: Explicación y consejos de aprendizaje". *edX Blog: Stories, Insights, and News*. May. 25, 2021. [En línea] <https://blog.edx.org/es/r-vs-python-para-la-ciencia-de-datos-explicacion-y-consejos-de-aprendizaje> [acceso nov. 15, 2021].

[51] A. Flores. Lista de las mejores librerías de Python para el 2022, Nov. 4, 2021. [En línea] <https://www.crehana.com>. <https://www.crehana.com/co/blog/desarrollo-web/librerias-python/> [Acceso nov. 15, 2021].

[52] Google, ¿Que es Colabority? [En línea] <https://colab.research.google.com/notebooks/welcome.ipynb?hl=es>. [Acceso nov. 14, 2021]

[53] C. E. Sandoval Ruíz, "Métodos numéricos en diferencias finitas para la estimación de recursos de Hardware FPGA en arquitecturas LFSR(n,k) fractales", *Ingeniería Investigación y Tecnología*, vol. 20, no. 3, pp. 1-10, sep, 2019, [En línea] <https://www.revistaingenieria.unam.mx/numeros/v20n3-08.php>. [Acceso nov. 15, 2021]

[54] J. M. Smith. (1991). Ingeniería de la cinética química. (1^{era}). [En línea]. Disponible: https://www.academia.edu/31609531/Ingenieria_de_la_cinetica_quimica_J_M_SMITH

[55] Tecnologías Wolfram. Proyecto de demostraciones de Wolfram. Wolfram. [En línea]. Disponible: <https://demonstrations.wolfram.com/FiniteDifferenceSchemesOfOneVariable/>

[56] E.M. Carranza Rojas, *Pirólisis de la fibra de la palma africana de aceite*, Tesis de mast. en ingeniería mecánica, Facultad de ingenierías, Universidad De

- Los Andes, Bogotá, Colombia, 2015. [En línea]. Disponible: <https://repositorio.uniandes.edu.co/bitstream/handle/1992/12984/u713639.pdf?sequence=1>
- [57] B. Ruxanda, C. A. Teaca, L. Spiridon, “Chemical modification of beech wood: Effect on thermal stability”, *ResearchGate*, vol. 3, pp. 789-800, may, 2008, [En línea], [https://www.researchgate.net/figure/Chemical-Composition-of-Beech-Wood_tbl1_26526501#:~:text=From%20a%20chemical%20point%20of,oak\)%20\(Pouwels%20et%20al,](https://www.researchgate.net/figure/Chemical-Composition-of-Beech-Wood_tbl1_26526501#:~:text=From%20a%20chemical%20point%20of,oak)%20(Pouwels%20et%20al,) [Acceso En. 01, 2022]
- [58] A. Szczepkowski ,D. Nicewicz, P. Koezón, “The Relationship Between TreeHealth And Chemical Composition Of Beech (Fagus Sylvatica L.)And Oak (Quercus Robur L.) Wood Of Polish Provenances”,*ResearchGate*, vol. 6, pp. 77-88, may, 2008, [En línea], https://www.researchgate.net/figure/Chemical-composition-of-beech-and-oak-wood-according-to-various-authors-Tabela-3-Sklad_tbl2_228775073, [Acceso En. 01, 2022]
- [59] A. P. Singh, J. Ribera, N. Yilgor, K. Ohno, J. J. Morrell, A. Pizzi, M. A. Tajick Ghanbary, Caracterización de la descomposición fúngica de la madera de haya: potencial para aplicaciones biotecnológicas <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC7910982/>
- [60] R. M. Rowell, R. Pettersen , M. A. Tshabalala. (2012). Manual de química de la madera y compuestos de madera. (2ª. Ed.). [En línea]. Disponible: <https://www.routledgehandbooks.com/doi/10.1201/b12487-5>
- [61] Y. A. Vargas Corredor, L. I. Pérez Pérez. “Aprovechamiento de residuos agroindustriales para el mejoramiento de la calidad del ambiente”, *Facultad de Ciencias Básicas*, vol. 14, pp. 59-72, mzo, 2018, [En línea] homepage: <http://revistas.unimilitar.edu.co/index.php/rfcb> [Acceso En. 15, 2022]
- [62] L. Riverí Samé, M. Ginarte Durán. El cambio climático: sus efectos a nivel mundial y su regulación en el Derecho Internacional. *ESTUDIOS*, [En línea] https://huespedes.cica.es/gimadus/33/03_el_cambio_climatico.html [Acceso En. 15, 2022]

- [63] A. Gómez, W. Klose, S. Rincón. (2008). Pirólisis de Biomasa: Cuesco de palma de aceite. [En línea]. Disponible: <http://www.uni-kassel.de/upress/online/frei/978-3-89958-457-8.volltext.frei.pdf>
- [64] V. Bustamante García, A. Carrillo Parra, J. Á. Prieto Ruíz, J. J. Corral Rivas, J. C. Hernández Díaz, “Química de la biomasa vegetal y su efecto en el rendimiento durante la torrefacción: revisión”, *SCIELO*, vol. 7, no. 38, pp. 5-23, dic, 2016, [En línea], http://www.scielo.org.mx/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S2007-11322016000600005 [Acceso En. 15, 2022]
- [65] L. G. Torres Rodríguez, A. M. Zamudio Sánchez, “Evaluación de adsorción de Pb (II) en biocarbones obtenidos a partir de cuesco de la palma de aceite y su aplicación para remediación de aguas contaminadas”, *RESEARCH ARTICLE*, [En línea], <https://cutt.ly/vO8wjoC> [Acceso En. 16, 2022]
- [66] T. Martinez, J. D. La Puerta, M. Garcia, R. Murillo, R. García, “Fuel Properties of Tire Pyrolysis Liquid and Its Blends with Diesel Fuel,” *Energy Fuels*, vol. 27, no. 6, pp. 3296–3305, Jun. 2013.
- [67] J. Fernandez Gonzalez, *Tecnologías Para El Uso Y Transformación De Biomasa Energética*. Ediciones Paraninfo, 2015.
- [68] A. Gómez, S. Rincón, W. Klose. (2010). Carbón activado de cuesco de palma. [En línea]. Disponible: <https://www.uni-kassel.de/upress/online/frei/978-3-89958-820-0.volltext.frei.pdf>
- [69] L. M. Romero Millán, M. A. Cruz Domínguez, F. E. Sierra Vargas, “Efecto de la temperatura en el potencial de aprovechamiento energético de los productos de la pirólisis del cuesco de palma”, *Tecnura*, vol. 20, no. 48, pp. 89-99, feb, 2016, [En línea], <https://revistas.udistrital.edu.co/index.php/Tecnura/article/view/10551/12038> [Acceso Feb. 10, 2022]

- [70] A. Gómez, W. Klose, S. L. Rincón & W. Wiest, “Transformación termoquímica de la biomasa residual del proceso de extracción del aceite de palma: tecnologías y perspectivas”, vol. 25, no. 48, pp. 388-397, 2004.
- [71] C. O. Quesada González, M. A. Cantos Macías, W. L. Duharte, D. M Pozo González & L. C. Bigñot Favier, “Efecto de la velocidad de calentamiento y la biomasa en la cinética de su pirólisis”, *SCIELO*, vol. 31, no. 3, sept-dic, 2019, [En línea], http://scielo.sld.cu/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S2224-54212019000300478 [Acceso Feb. 17, 2022]
- [72] J. A. Caballero Suarez, *Estudio cinético de la pirólisis de lignina. Diseño de un reactor para el estudio de las reacciones secundarias*, tesis doct., Facultad de Ingenierías, Universidad de Alicante, Alicante, España, 1995. [En línea] Disponible: <file:///C:/Users/USUARIO/Downloads/Caballero-Suarez-Jose-Antonio.pdf>
- [73] M. A. Cantos Macías, O. Quesada González, A. Ross Mesa, A. L. Brito Soubanell, A. Casanova Gómez, “Cinética de la pirólisis de residuos madereros”, *Química*, vol. 30, no. 3, mzo, pp. 400-422, 2018, [En línea], <https://www.redalyc.org/journal/4435/443557797003/html/> [Acceso Feb. 17, 2022]
- [74] E. Orrego Restrepo, *Cambios estructurales fisicoquímicos de la biomasa durante la pirólisis lento.*, tesis mast., Facultad de Ingenierías, Universidad Nacional, Medellín, Colombia, 2021. [En línea] Disponible: <https://repositorio.unal.edu.co/bitstream/handle/unal/79780/1036944138.2021.pdf?sequence=4&isAllowed=y>

ANEXO 1.

RECOMENDACIONES

Mantener las temperaturas del reactor altas, permite que la reacción mantenga bajas energías de activación, provocando una mayor espontaneidad en el sistema y que la reacción tienda a desplazarse a la producción de los productos deseados que son los sólidos, líquidos y gases de interés y no los secundarios.

Para este caso, se recomienda usar reactores de alto tiempo de residencia, es decir, la pirólisis convencional, ya que un mal procedimiento en la esterilización y carga puede contaminar el proceso reactivo así que asegurarse que este sea realizado correctamente y que ocurra de la forma más aproximada posible a la estimada en la programación, es lo ideal en esta situación.

De acuerdo a las cinéticas de reacción es aconsejable realizar un proyecto experimental para determinar las cinéticas nuevamente para el cuesco de palma aceitera y también para otros tipos de biomasa como la cascarilla de arroz, madera de pino y lodos, de esta forma tratar de desarrollar un nuevo modelo cinético para el cuesco y realizar comparaciones frente a otras sustancias.

Es recomendable para futuras investigaciones tener presente las variaciones de temperatura a lo largo de la pared del pirolizador a medida que transcurre el tiempo y las acumulaciones de calor en el interior del equipo.

Respecto al calentamiento es sugerirle realizarlo directamente ya que permite una mayor transferencia de calor hacia la biomasa, así poder acelerar y mejorar el rendimiento en la pirólisis.