

MODELO MATEMÁTICO DE UN REACTOR TUBULAR MODULABLE QUE PERMITA LA REDUCCIÓN DE ALQUITRANES POR MEDIO DEL CRAQUEO CATALÍTICO EN EL GAS DE SÍNTESIS GENERADO EN LA GASIFICACIÓN DE BIOMASA

I. Ramirez-Cardenas^a, L. Mendoza-Geney^b

^aSemillero de energías, Fundacion Universidad de America, Bogotá, Colombia

^bSemillero de energías, Fundacion Universidad de America, Bogotá, Colombia

Resumen

Este artículo presenta el análisis y los resultados de un modelo matemático que describe un reactor de lecho fijo de calentamiento indirecto para la reducción de la concentración de los alquitranes presentes en el gas de síntesis generados en la gasificación de biomasa por medio del craqueo catalítico. Se evalúa el rendimiento del reactor variando parámetros como él, flujo másico, temperatura del gas de síntesis y las condiciones geométricas del reactor, generando información para determinar parámetros de diseño que incrementan el rendimiento del reactor. El modelo es desarrollado en Python y se solucionó por el método de diferencias finitas en 2 dimensiones, como resultado de la simulación, la temperatura adecuada del gas de síntesis para reducir la concentración del alquitrán en un 99% es de 550 °C.

Palabras clave: Craqueo catalítico; alquitranes; Biomasa; Modelo matemático; Python

Abstract

This paper presents the analysis and results of a mathematical model describing an indirectly heated fixed-bed reactor for the reduction of the concentration of tars present in the synthesis gas generated in biomass gasification by catalytic cracking. The reactor performance is evaluated by varying parameters such as it, mass flow, syngas temperature and reactor geometrical conditions, generating information to determine design parameters that increase the reactor performance. The model is developed in Python and was solved by the finite difference method in 2 dimensions. As a result of the simulation, the appropriate synthesis gas temperature to reduce the tar concentration by 99% is 550 °C.

Keywords: catalytic cracking; tars; Biomass; Mathematical model; Python

1. Introducción

Seis años después de la COP21 y del nacimiento del Acuerdo de París, los científicos y los principales expertos sobre el clima expresaron preocupación por los resultados de la COP26, la cumbre sobre el cambio climático que tuvo lugar el 12 de noviembre del 2021, los expertos destacan que la temperatura del planeta aumentó hasta ahora 1,1 ° C en promedio, y solo ese incremento ya ha puesto al mundo en un estado de calentamiento peligroso, con temperaturas récord, incendios forestales, inundaciones y sequías. Las soluciones que se discutieron en Glasgow dependen de lograr cantidades poco realistas de electricidad limpia, mecanismos de captura de carbono y quema de biomasa[1].

Para lograr este objetivo es fundamental analizar los procesos de conversión de la biomasa los cuales pueden ser los procesos de transformación bioquímica (Digestión anaerobia y compostaje) y termoquímica (Pirólisis, licuefacción, combustión y gasificación). De los procesos de conversión termoquímica de la biomasa la gasificación presenta grandes perspectivas, puesto que ofrece entre otras ventajas, una mayor eficiencia de conversión en comparación con la pirólisis y la combustión [2]. La gasificación es el proceso en el que se transforma la biomasa sólida en combustibles gaseosos, la celulosa se transforma en hidrocarburos más ligeros, incluso en monóxido de carbono e hidrógeno. Esta mezcla de gases (gas de síntesis), tienen un poder calorífico inferior (PCI) equivalente a la sexta parte del poder calorífico inferior del gas natural, cuando se emplea aire como agente gasificante [3].

El gas de síntesis se somete a un tratamiento posterior, mediante el reformado con vapor o la oxidación parcial, para convertir los hidrocarburos producidos por la gasificación en hidrógeno y monóxido de carbono. A continuación, el monóxido de carbono se somete a un proceso de cambio para obtener una mayor fracción de hidrógeno, mediante la eliminación del dióxido de carbono y la metanización o la adsorción por oscilación de presión [4]. Las diferencias importantes entre el pirólisis y la gasificación son, por tanto, la mejora del rendimiento del gas y la eliminación de los subproductos sólidos y líquidos [5].

Una de las principales ventajas de la gasificación es la amplia gama de recursos de biomasa disponibles, que van desde los cultivos agrícolas y los cultivos energéticos específicos hasta los residuos y los desechos orgánicos. La materia prima puede tener una calidad muy variada, pero aun así el gas producido está bastante estandarizado y produce un producto homogéneo. Esto permite elegir la materia prima más disponible y económica en cada momento [6].

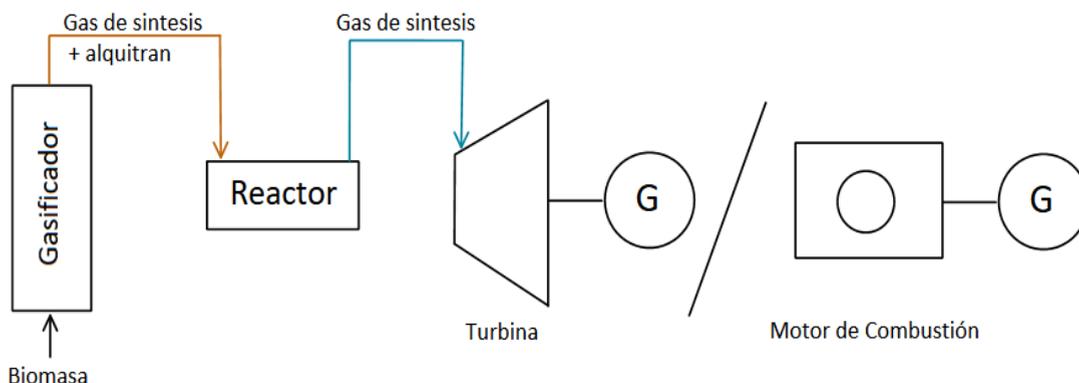
En la práctica la gasificación puede convertir de un 60 % a un 90 % de la energía de la biomasa en energía del gas [2], estos gases son susceptibles de ser utilizados en un motor o turbina de gas, sin embargo, estos tienen ciertas limitantes dado que la presencia de alquitranes generados en la gasificación de biomasa a temperaturas menores a 300 °C se condensan. La condensación de los alquitranes genera obstrucciones y taponamientos de tuberías y accesorios lo cual facilita la formación de coque causando abrasión en las superficies de los equipos de combustión [7].

Por este motivo, es indispensable conocer los requerimientos de la calidad del gas, para los motores de combustión interna la cantidad de alquitranes debe ser inferior a 100 mg/m³ y para las turbinas a gas la cantidad de alquitranes debe ser inferior a 5 mg/m³ [8]. Para evitar estas dificultades operacionales se debe reducir la fracción de alquitranes por medio de procesos físicos y/o por medio de reacciones secundarias. Dentro de las reacciones secundarias el mecanismo que presenta mejores resultados a la hora de reducir la fracción de alquitranes es el craqueo catalítico el cual consiste en la descomposición de hidrocarburos pesados en moléculas más simples, por la ruptura de los enlaces carbono-carbono[8].

En la siguiente figura se presenta el proceso que se lleva a cabo en la generación de energía, empleando como combustible el gas de síntesis de la biomasa, como se puede observar, la gasificación de biomasa se lleva a cabo en el gasificador, como producto se obtiene el gas de síntesis, este contiene una alta concentración de alquitranes, en la siguiente etapa, el gas pasa a través del reactor con el objeto de reducir la concentración del alquitrán y finalmente ingresar a la turbina y/o motor de combustión.

Figura 1

Diagrama del Proceso



Nota: Diagrama de proceso de la implementación del reactor en una turbina a gas y motor a combustión

En esta investigación se plantea evaluar la configuración geométrica de un dispositivo modulable que realice la reducción de alquitranes por medio del método craqueo catalítico, con el fin de mejorar la eficiencia de un motor y una turbina de gas usando como combustible el gas de síntesis.

Nomenclatura

\dot{m}	Flujo másico, kg/s
P	Presión, kPa
C_p	Calor Especifico, kJ/(kg K)
λ	Conductividad Térmica en la fase volátil, W/(m K)
Pr	Numero de Prandlt
η	Viscosidad Dinámica, Pa.s
ν_c	Viscosidad Cinemática, m ² .s
ρ	Densidad, kg/m ³
Re	Numero de Reynolds
v	Velocidad del fluido m/s
D	Diámetro del Reactor m
Nu	Numero de Nusselt
h	Coefficiente de convección, W/(m ² K)
R	Constante de gases ideales, kJ/(kmol K)
E_a	Energía de activación de gasificación, kJ/ kmol
K_0	Factor pre-exponencial, s ⁻¹
T_r	Temperatura reducida
T_s	Temperatura del reactor, K
T	Temperatura del gas, K

2. Modelo matemático y diseño de la simulación

Se ha desarrollado un modelo matemático que permite predecir la concentración del alquitrán al interior de reactor con el fin de evaluar la reducción del alquitrán a distintas geometrías y tipos de catalizador. Para desarrollar un modelo para la reducción del alquitrán, se adoptan las siguientes suposiciones que simplifican el proceso:

1. El reactor opera en condiciones de estado estacionario.
2. El modelo se plantea en dos dimensiones (2D).
3. Se supone un flujo masico y presión constante al interior del reactor.
4. La conductividad térmica en el eje axial y radial es constante.
5. El flujo masico respecto al eje axial es constante.
6. El reactor de se considera de paredes lisas.

2.1. Descripción del Modelo

Se adopto un modelo en el cual el fluido de trabajo es el gas de síntesis de la biomasa, este es una mezcla de gases que contiene el 80 % alquitranes el cual debe reducirse significativamente. El balance de energía se integra con el modelo de Laplace por conducción-convección y el balance de masa se integra con el modelo de cinética de reacción ambos balances se solucionan por medio del método numérico de diferencias finitas.

2.2. Ecuación de Gobierno

El balance de energía para la fase volátil se presenta a continuación [9], [10]:

$$\frac{d}{dz}(\dot{m}C_P dT) = \frac{d}{dr}\left(k \frac{dT}{dr}\right) + \frac{d}{dz}\left(k \frac{dT}{dz}\right) + h(T - T_s) \quad (1)$$

Dónde $\frac{d}{dz}(\dot{m}C_P dT)$ corresponde al cambio de energía diferencial del gas; la transferencia de calor por conducción en el eje radial es $\frac{d}{dr}\left(k \frac{dT}{dr}\right)$ y en el eje axial es $\frac{d}{dz}\left(k \frac{dT}{dz}\right)$ mas la transferencia de calor por convección $h(T - T_s)$ donde T_s es la temperatura de superficie del reactor.

Gracias a la suposición número 4 y 5 la Ecuación 1 se simplifica y queda de la siguiente manera:

$$\dot{m}C_P \frac{dT}{dz} = \lambda \frac{dT^2}{dr^2} + \lambda \frac{dT^2}{dz^2} + h(T - T_s) \quad (2)$$

La Ecuación gobierno en términos de nodos globales por el método de diferencias finitas es [11]:

$$\dot{m}C_P \left(\frac{T_{[i+1,j]} - T_{[i-1,j]}}{2\Delta z}\right) = \lambda \left(\frac{T_{[i-1,j]} - 2T_{[i,j]} + T_{[i+1,j]}}{\Delta r^2}\right) + \lambda \left(\frac{T_{[i,j-1]} - 2T_{[i,j]} + T_{[i,j+1]}}{\Delta r^2}\right) + h(T_{[i,j]} - T_s) \quad (3)$$

Para poder solucionar la Ecuación 3 se calculan las variables que son constantes en todo el proceso. A continuación, se definen las relaciones para el cálculo de las propiedades de la Ecuación de gobierno.

2.2.1. Calor específico para la fase volátil del Benceno C_P

La determinación del calor específico se realiza a través del uso de una relación polinomial en función de la temperatura [8]. En este estudio se analizará la fase volátil de la mezcla de gases la cual está compuesta por un 15% de CO un 5% de H_2 y un 80% de benceno (C_6H_6):

$$\frac{C_P}{R} = a + bT + cT^2 + dT^3 + eT^4 \quad (4)$$

Se usan los coeficientes descritos en el trabajo de Poling et al. [12] que muestran un error máximo de 2,5 % en un rango de temperatura entre 50 - 1200 K. Los valores de temperatura deben ser en K y los valores del calor específico dependen de las unidades de la constante universal R. Los coeficientes en la relación polinomial para cada especie de la fase gaseosa se muestran en la Tabla 1

Tabla 1

Coeficientes para la determinación del calor específico para las especies en la fase volátil [12]

Especie	Coeficientes				
	a	$b \cdot 10^{-3}$	$c \cdot 10^{-5}$	$d \cdot 10^{-8}$	$e \cdot 10^{-11}$
CO	3,912	-3,913	1,182	-1,302	0,515
H_2	2,883	3,681	-0,772	0,692	-0,213
Benceno	3,551	-6,184	14,365	-19,807	8,234

2.2.2. Viscosidad dinámica η

La determinación de la viscosidad dinámica para el CO y H_2 , se determina de acuerdo con la Ecuación empleada por Reichenberg presentes en el Manual de Ingeniería Química de Perry [13]:

$$\eta = \frac{AT_r}{(1 + 0,36 T_r(T_r - 1))^{1/6}} \quad (5)$$

Donde A está definido por la siguiente Ecuación:

$$A = 1,61 \times 10^{-10} \left(\frac{M^{1/2} P_c^{2/3}}{T_c^{1/6}} \right) \quad (6)$$

donde M es la masa molar del gas en $kg/kmol$, la presión crítica P_c del gas en Pa y la temperatura crítica T_c en K. T_r es la temperatura reducida, definida como el cociente entre la temperatura del proceso y la temperatura crítica del gas:

$$T_r = \frac{T}{T_c} \quad (7)$$

Los resultados de la viscosidad dinámica que se tienen de esta Ecuación están en Pa.s y se obtienen errores no mayores al 4% [8]

La determinación de la viscosidad dinámica para el benceno (C_6H_6) en la fase volátil, se determina de acuerdo con la Ecuación empleada por Stiel y Thodos presentes en el Manual de Ingeniería Química de Perry [13]:

$$\eta = 4,6 \times 10^{-4} \left(\frac{NM^{1/2} P_c^{2/3}}{T_c^{1/6}} \right) \quad (8)$$

donde N se calcula a partir de las siguientes ecuaciones:

$$N = 0,00034 T_r^{0,94} \quad T_r \leq 1,5 \quad (9)$$

$$N = 0,0001778 (4,58 T_r - 1,67) \quad T_r > 1,5 \quad (10)$$

El resultado de viscosidad dinámica obtenido de la Ecuación 8 está en Pa.s 10^{-3} [13]

2.2.3. Viscosidad cinemática ν_c

La viscosidad cinemática se determina a partir de la relación de la viscosidad dinámica y la densidad del gas.

$$\nu_c = \frac{\eta}{\rho} \quad (11)$$

El resultado de la viscosidad cinemática obtenido de la Ecuación 11 está en $m^2 \cdot s$

2.2.4. Conductividad térmica λ

La determinación de la conductividad térmica del gas se realiza a través del uso de una relación polinomial en función de la temperatura [8]. En este estudio se analizará la fase volátil de la mezcla de gases la cual está compuesta por un 15% de CO un 5% de H_2 y un 80% de benceno (C_6H_6):

$$\lambda = A + BT + CT^2 + DT^3 \quad (12)$$

Donde T es la temperatura en K y el resultado se obtiene en W/m.K. Los coeficientes en la relación polinomial para cada especie de la fase gaseosa se muestran en la Tabla 2, los cuales se obtiene del trabajo realizado por Poling et al [12].

Tabla 2

Coefficientes para la determinación de la conductividad térmica para las especies en la fase volátil [12]

Especie	Coeficientes			
	$A \cdot 10^{-3}$	$B \cdot 10^{-5}$	$C \cdot 10^{-8}$	$D \cdot 10^{-11}$
CO	0,507	9,120	-3,520	0,812
H ₂	8,099	66,89	-41,58	0,553
Benceno	-8,455	3,618	9,799	-4,058

2.2.5. Numero de Reynolds Re

El número de Reynolds es el cociente de las fuerzas de inercia sobre las fuerzas viscosas del fluido, este depende de la configuración geométrica de la superficie, de la velocidad de flujo y del tipo del fluido. Este da como resultado una cantidad adimensional [14]. La siguiente Ecuación es para una geometría cilíndrica:

$$Re = \frac{vD}{\nu_c} \quad (13)$$

donde v es la velocidad de corriente del fluido en m.s y D el diámetro del Reactor en m.

2.2.6. Numero de Prandlt Pr

El número de Prandlt es la relación entre la difusividad molecular de la cantidad de movimiento y la difusividad molecular del calor. Este da como resultado una cantidad adimensional [14] :

$$Pr = \frac{C_p \eta}{\lambda} \quad (14)$$

2.2.7. Numero de Nusselt Nu

Teniendo en cuenta la suposición numero 6 para el cálculo del número de Nusselt se calcula el factor de fricción de las paredes del reactor la cual se puede determinar a partir de la primera Ecuación de Petukhov explicita, [14] dada como:

$$f = (0,790 \ln Re - 1,64)^{-2} \quad 3000 < Re < 5 \times 10^6 \quad (15)$$

El número de Nusselt para flujo turbulento en tubos esta dado para la segunda Ecuación de Petukhov, [14] expresada como:

$$Nu = \frac{(f/8)(Re - 1000)Pr}{1 + 12,7(f/8)^{0,5} (Pr^{2/3} - 1)} \quad \begin{matrix} 0,5 \leq Pr \leq 2000 \\ 3 \times 10^3 < Re < 5 \times 10^6 \end{matrix} \quad (16)$$

Con el objetivo de garantizar una transferencia de calor apropiada el flujo del gas al interior del reactor siempre debe ser turbulento y un numero de Prandlt mayor a 0,5.

2.2.8. Coeficiente de convección h

La determinación del coeficiente de convección se calcula mediante la relación de transferencia de calor por convección y la transferencia de calor por conducción, teniendo en cuenta el resultado obtenido por la Ecuación 16 se tiene que:

$$h = \frac{\lambda Nu}{D} \quad (17)$$

Los resultados del coeficiente de convección están en $W/(m^2 K)$.

2.3. Cinética de reacción

La Ecuación que describe la reducción de alquitranes en términos del eje axial del reactor es [8]:

$$\frac{d\omega_K}{dz} = -\frac{1}{v} K_0 \exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right) \omega_K \quad (18)$$

donde k_0 es el factor pre-exponencial en s^{-1} , R es la constante de gases ideales en $kJ/(kmol K)$, E_a es la energía de activación de gasificación, T temperatura del gas en K , v es la velocidad del gas en m/s y w_k es la concentración del gas.

La Ecuación de cinética de reacción en términos de nodos globales por el método de diferencias finitas es [11]:

$$\frac{\omega_{K[i+1]} - \omega_{K[i-1]}}{2\Delta z} = -\frac{1}{v} K_0 \exp\left(\frac{E_a}{RT}\right) \omega_{K[i]} \quad (19)$$

El incremento de la temperatura y el tiempo de residencia genera una reducción en la concentración de los alquitranes mayor, debido a la descomposición de las reacciones secundarias homogéneas de los alquitranes [15], [16]. Dabai et al. [17] obtienen una reducción de la fracción de alquitranes cercana al 98% a temperaturas mayores a $1000^\circ C$ y con tiempo de residencia de $0,5$ s de la fase volátil generada en la pirolisis de varios tipos de biomasa. Estos resultados son congruentes con la información reportada por Han y Kim [15], afirmando que la temperatura y tiempo de residencia necesarios para lograr eficiencias de reducción adecuadas son $1250^\circ C$ y $0,5$ s, respectivamente. Por otro lado, Morf et al.[16] obtienen una reducción de la fracción de alquitranes de 88% usando un tiempo de residencia de $0,5$ s y una temperatura de $990^\circ C$. Sin embargo, el aumento de la temperatura puede incrementar las reacciones que promueven la formación de alquitranes de mayor peso molecular y la formación de hollín [18].

Es por esto por lo que la temperatura de trabajo del reactor es de $1000^\circ C$, con el fin de obtener una reducción en la concentración del alquitrán adecuada y evidenciar un comportamiento similar a los resultados obtenidos por Dabai et al [17].

2.4. Diseño de la simulación

La implementación del método numérico de diferencias finitas para la Ecuación (2) nos da como resultado el perfil de temperaturas al interior del reactor, lo cual permite determinar punto a punto la variación de la temperatura en función de las condiciones geométricas del reactor.

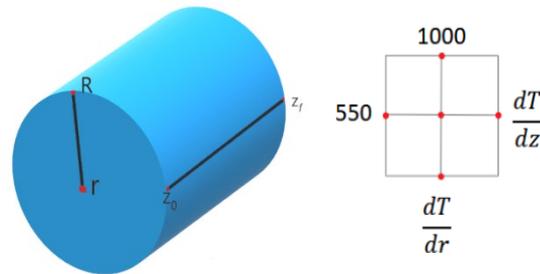
El reactor estará sometido a una temperatura superficial de $1000^\circ C$, esta se eleva por medio del calentamiento indirecto y de la recirculación de los gases de combustión del motor y/o turbina. El gas de síntesis entra al reactor a una temperatura de $550^\circ C$, la cual es la temperatura promedio de trabajo del gasificador de lecho fijo. Para este estudio la temperatura del gas de síntesis se evaluará en un rango de temperaturas entre 550 y $900^\circ C$, con el fin de evaluar como la variación de la temperatura del gas afecta el rendimiento del reactor y la cinética de reacción para que ocurra una reducción del alquitrán óptima.

La siguiente figura describe la geometría del reactor en 3 dimensiones (3D), se presenta las condiciones de frontera de la Ecuación de gobierno (2), como se puede observar, la parte superior se encuentra el nodo de la temperatura superficial del reactor ($1000^\circ C$), la cual es una condición de frontera tipo Dirichlet, de igual forma la temperatura del gas de síntesis, la cual ingresa al reactor ($550^\circ C$), esta se sitúa en el nodo izquierdo. Las condiciones de frontera tipo Neumann son las condiciones de simetría del reactor, estas se igualan a 0 debido a que son las temperaturas mínimas

y no hay transferencia de calor, el nodo derecho es igual a la variación de la temperatura respecto al eje axial, y el nodo inferior, es la variación de la temperatura respecto al radio.

Figura 2

Geometría del reactor



Nota: Boceto del reactor en 3D y condiciones de frontera.

El software que se implementó para resolver el modelo matemático es Python. En la tabla 3 se puede observar las variables implícitas en la solución de la Ecuación de gobierno. Teniendo en cuenta el perfil de temperaturas al interior del reactor, se procede a resolver la Ecuación de cinética de reacción por el método de diferencias finitas, dado que es una Ecuación de primer orden, se necesita una condición inicial para la solución de la Ecuación (18). Teniendo en cuenta la composición del gas enunciado en la Sección 2.2.1, el alquitrán tiene una concentración inicial del 80% del gas, el objetivo es reducir la concentración en un 10 o 5% con el fin de estar en el rango concentración permitida de un motor y/o turbina para aprovechar el poder calorífico del gas en la cámara de combustión y generar más energía o trabajo.

Para el diseño del reactor inicialmente se inicia la simulación con un flujo masico de 5 kg/h. En la tabla 3 se encuentran los valores implícitos en la simulación, gracias a la solución de la Ecuación de gobierno (2) y la Ecuación de cinética de reacción (18), se determina que a este flujo masico el diámetro del reactor es de 2,7 cm y la longitud de 80 cm.

Tabla 3

Variables implícitas en el diseño del reactor de 5 kg/h

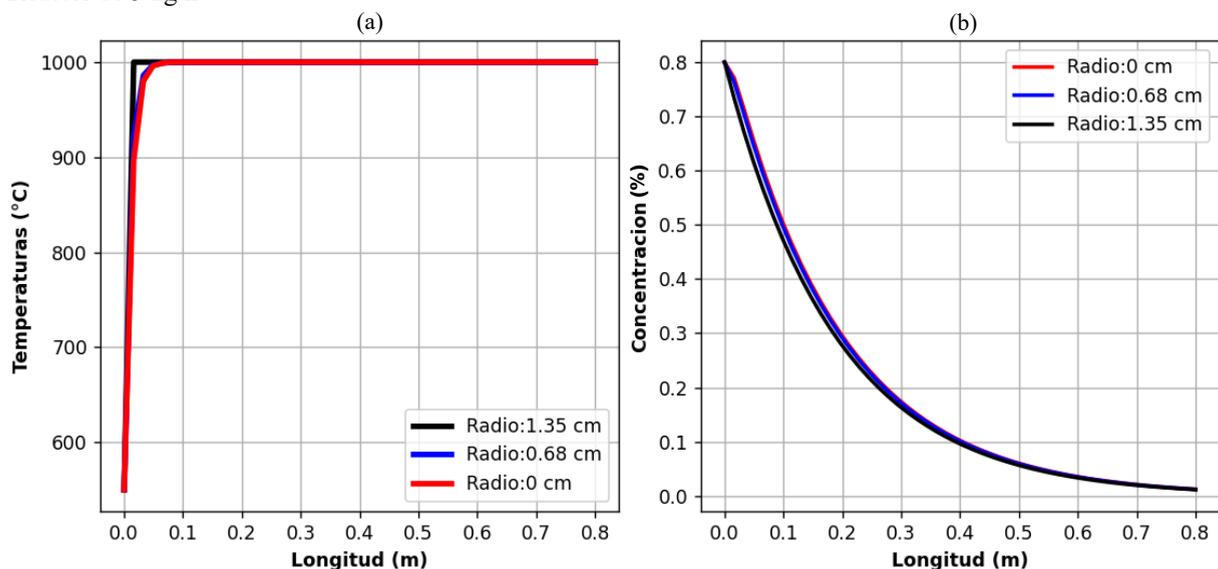
Propiedades del reactor	Valor	Refs.
Mezcla de Gas	$Co + H_2 = C_6H_6$	
Presion, kPa	100	
Constante de gases ideales, kj/kmol k	8,3144	
Flujo másico, kg/h	5	
Diámetro del reactor, cm	2,7	
Longitud del reactor, cm	80	
Temperatura del Gas, °K	823,15	
Temperatura de la pared del reactor, k	1273,15	
Peso molecular del gas, kg/kmol	66,7	
Temperatura crítica del C_6H_6 , K	561,65	[13]
Temperatura crítica del H_2 , K	32,97	[13]
Temperatura crítica del Co, K	132,92	[13]
Presion crítica del C_6H_6 , kPa	4935	[13]
Presion crítica del H_2 , kPa	1294	[13]
Presion crítica del Co, kPa	3495	[13]
Calor específico del gas, kg/kmol k	2,88	

Conductividad térmica del gas, W/(m K)	0,0745	
Caudal, m ³ /s	0,0014	
Velocidad del gas, m/s	2,48	
Densidad del gas, kg/m ³	0,97	
Viscosidad dinámica del gas, Pa/s	2,19e ⁻⁵	
Viscosidad cinemática del gas, m ² /s	2,24e ⁻⁵	
Numero de Reynolds	3008	
Numero de Prandtl	0,84	
Factor de fricción	0,045	
Numero de Nusselt	10,68	
Coefficiente de convección, W/(m ² K)	29,48	
Factor pre-exponencial, s ⁻¹	2280	[8]
Concentración inicial, %	80	
Energía de Activación carbón activado, kg/kmol	-54520	[8]

La figura 3, a) representa la solución de la Ecuación de gobierno, en la cual se representa la transferencia de calor al interior del reactor, y en b) la solución de la cinética de reacción.

Figura 3

Reactor de 5 kg/h



Nota: (a) Transferencia de calor al interior del reactor respecto a la longitud del reactor, (b) reducción de la concentración de alquitranes respecto a la longitud del reactor.

Como se puede observar en la Fig. 3 (a). La transferencia de calor en el reactor es bastante rápida, debido a el diámetro del reactor, a solo 5 centímetros de la longitud del reactor ya se encuentra a 1000 °C las tres curvas que corresponden a distintos radios del mismo reactor y en (b) debido al diámetro del reactor, se debe tener una longitud de 80 cm con el fin de aumentar el tiempo de actividad catalítica en el gas, con el objetivo de reducir la cantidad de alquitranes entre un 10 o 5 %, y como se puede observar a esta longitud se reduce un 98 % la fracción de alquitrán de la mezcla de gas.

3. Resultados y discusión

Teniendo en cuenta las dimensiones del reactor de un flujo masico de 5 kg/h se opta por incrementar el flujo masico y variar las temperaturas del gas para determinar el diseño apropiado facilitando la fabricación de este y la implementación en un motor a combustión interna y/o turbina a gas.

En la Tabla 4 se presentan las variables implícitas en el diseño de un reactor de 50 kg/h a una temperatura del gas a 550 °C, como se puede observar a un mayor flujo masico el diámetro del reactor es mayor y la longitud se reduce considerablemente comparado con el reactor de 5 kg/h, cabe mencionar que la temperatura superficial de reactor se mantiene constante en todas las simulaciones a 1000 °C, igual que las condiciones del catalizador y propiedades fisicoquímicas del gas.

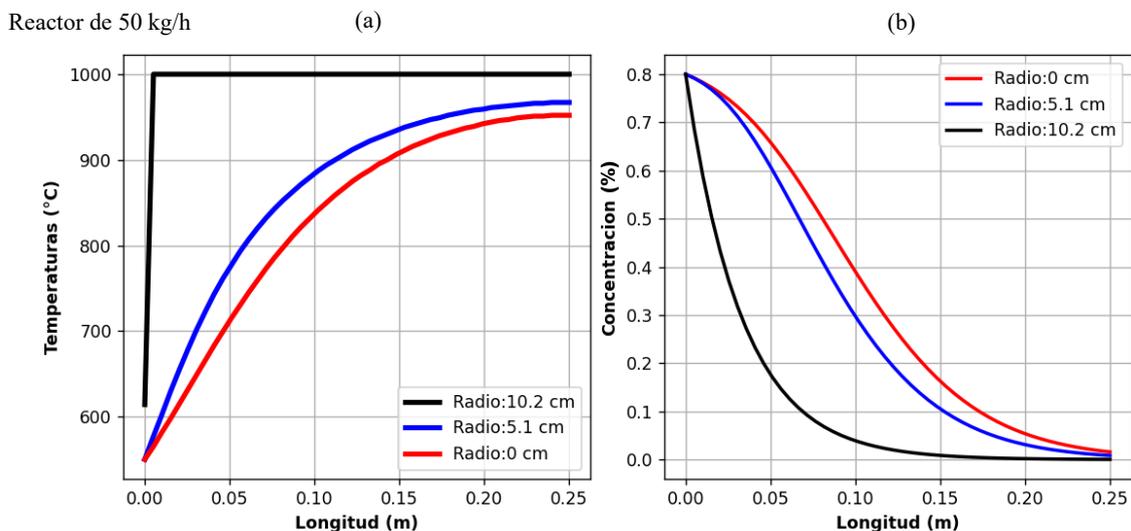
Tabla 4

Variables implícitas en el diseño del reactor a 50 kg/h – 550 °C

Propiedades del reactor	Valor
Flujo másico, kg/h	50
Diámetro del reactor, cm	20,4
Longitud del reactor, cm	25
Temperatura del Gas, °C	550
Velocidad del gas, m/s	0,43
Numero de Reynolds	3982
Coefficiente de convección, W/(m ² K)	5,28

Los resultados de la simulación con las condiciones presentadas en la tabla 4 se observan en la Fig. 4.

Figura 4



Nota: (a) Transferencia de calor al interior del reactor respecto a la longitud del reactor, (b) reducción de la concentración de alquitranes respecto a la longitud del reactor.

En la Fig. 4. En (a) la curva de color negro representa la pared del reactor, la cual se encuentra a la temperatura más alta, la curva azul representa el radio medio entre el centro del reactor y la pared del reactor y la curva de color rojo representa el centro del reactor, en (b) la curva de color negro representa la pared del reactor, la cual se encuentra a la temperatura más alta, la curva azul representa el radio medio entre el centro del reactor y la pared del reactor y la

curva de color rojo representa el centro del reactor, en este grafico se logra observar una reducción ideal de la concentración de alquitrán a una longitud de 18 cm, cabe resaltar que la curva de color negro representa un reducción en la concentración del alquitrán deseada a una longitud de 10 cm como se puede observar en el Fig. 4 (b), debido a que esta se encuentra a la temperatura más alta del reactor.

Para este análisis es importante determinar como la temperatura del gas afecta la reducción de la concentración del alquitrán, es por esto a que se realizan otras dos simulaciones con las mismas dimensiones del reactor, pero con una temperatura distinta del gas, una simulación a 750 °C y la otra 900 °C esta última como temperatura máxima de operación del gas en el reactor, comparando el rendimiento del reactor a tres distintas temperaturas del gas, 550 ,750 y 900 °C respectivamente.

En la tabla 5 se presentan las variables implícitas en el reactor de 50 kg/h a una temperara de 750 °C.

Tabla 5

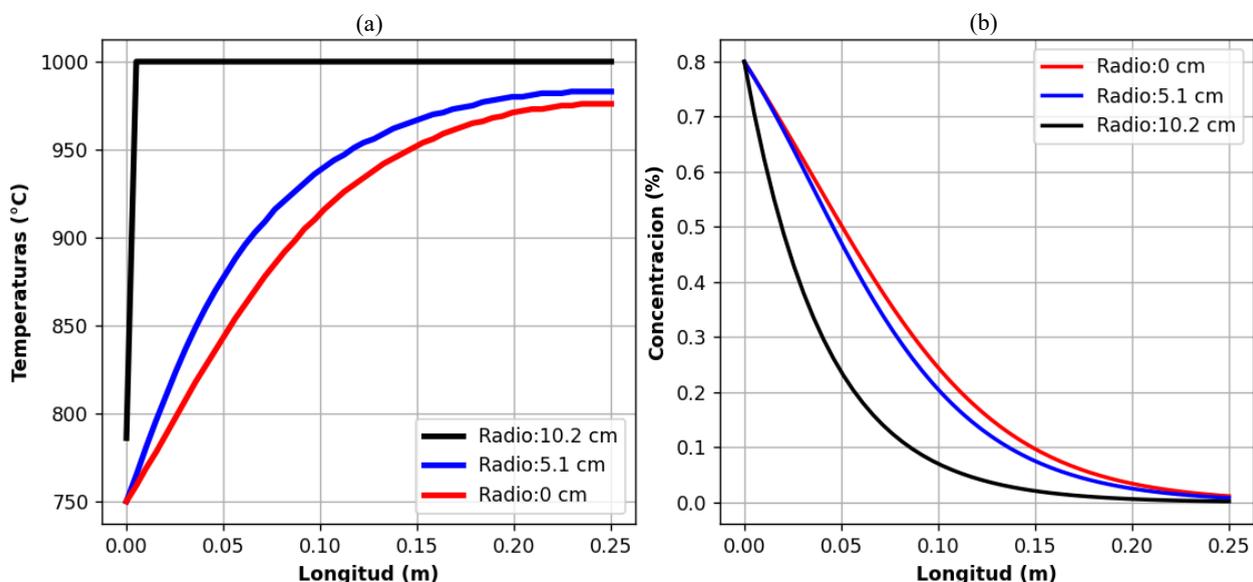
Variables implícitas en el diseño del reactor a 50 kg/h – 750 °C

Propiedades del reactor	Valor
Flujo másico, kg/h	50
Diámetro del reactor, cm	20,4
Longitud del reactor, cm	25
Temperatura del Gas, °C	750
Velocidad del gas, m/s	0,54
Numero de Reynolds	3340
Coefficiente de convección, W/(m ² K)	5,57

Los resultados de la simulación con las condiciones presentadas en la tabla 5 se observan en la Fig. 5.

Figura 5

Reactor de 50 kg/h – 750° C



Nota: (a) Transferencia de calor al interior del reactor respecto a la longitud del reactor, (b) reducción de la concentración de alquitranes respecto a la longitud del reactor.

En la Fig. 5 .Se puede observar un comportamiento similar de la transferencia de calor respecto a la Fig. 4 (a), en este caso parte de 750 °C la temperatura del gas, sin embargo, en la gráfica (b) la reducción de la concentración del alquitrán esperada se da a una longitud de 18 cm comparada con la Fig. 4 (b) que se da la reducción esperada a una longitud de 22 cm, cabe resaltar que el número de Reynolds disminuye al aumentar la temperatura del gas por ende hay mayor tiempo de residencia en el gas y ocurre una reducción del alquitrán a una longitud más corta.

En la tabla 6 se presentan las variables implícitas en el reactor de 50 kg/h a una temperatura de 900 °C.

Tabla 6

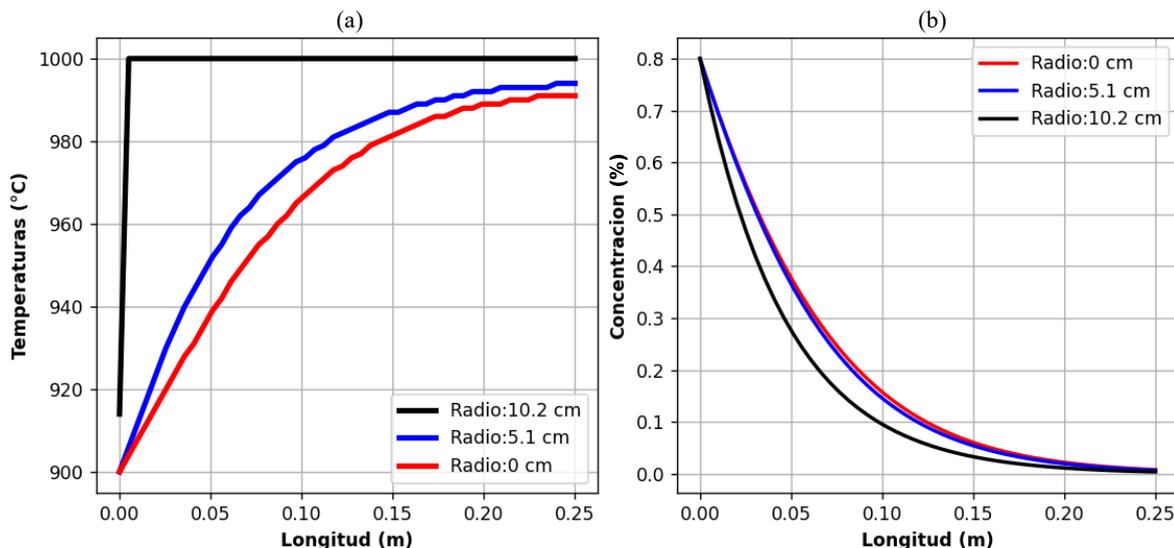
Variables implícitas en el diseño del reactor a 50 kg/h – 900 °C

Propiedades del reactor	Valor
Flujo másico, kg/h	50
Diámetro del reactor, cm	20,4
Longitud del reactor, cm	25
Temperatura del Gas, °C	900
Velocidad del gas, m/s	0,62
Numero de Reynolds	3039
Coefficiente de convección, W/(m ² K)	5,86

Los resultados de la simulación con las condiciones presentadas en la tabla 6 se observan en la Fig. 6.

Figura 6

Reactor 50 kg/h -900 °C



Nota: (a) Transferencia de calor al interior del reactor respecto a la longitud del reactor, (b) reducción de la concentración de alquitranes respecto a la longitud del reactor.

En la Fig. 6 .Se puede observar un comportamiento similar de la transferencia de calor respecto a la Fig. 5 (a), en este caso parte de 900 °C la temperatura del gas, sin embargo, en la gráfica (b) la reducción de la concentración del alquitrán se da a una longitud de 15 cm comparada con la Fig. 5 (b) que se da la reducción esperada a una longitud de 18 cm.

Teniendo en cuenta las tres simulaciones anteriormente desarrolladas se determina que la temperatura del gas no afecta

en gran medida la reducción de la concentración del alquitrán, sin embargo, se puede ahorrar hasta 7 cm de material para la longitud del reactor, es por esto que no es prescindible el aumento de la temperatura del gas para aumentar el rendimiento, de hecho, al mantener una temperatura del gas a 550 °C se ahorran costos ya que se necesita menos energía para elevar la temperatura del gas hasta 900 °C.

Para la siguiente simulación se eleva el flujo masico del reactor a 100 kg/h a una temperatura del gas de 550 °C, los parámetros de diseño se presentan en la tabla 7.

Tabla 7

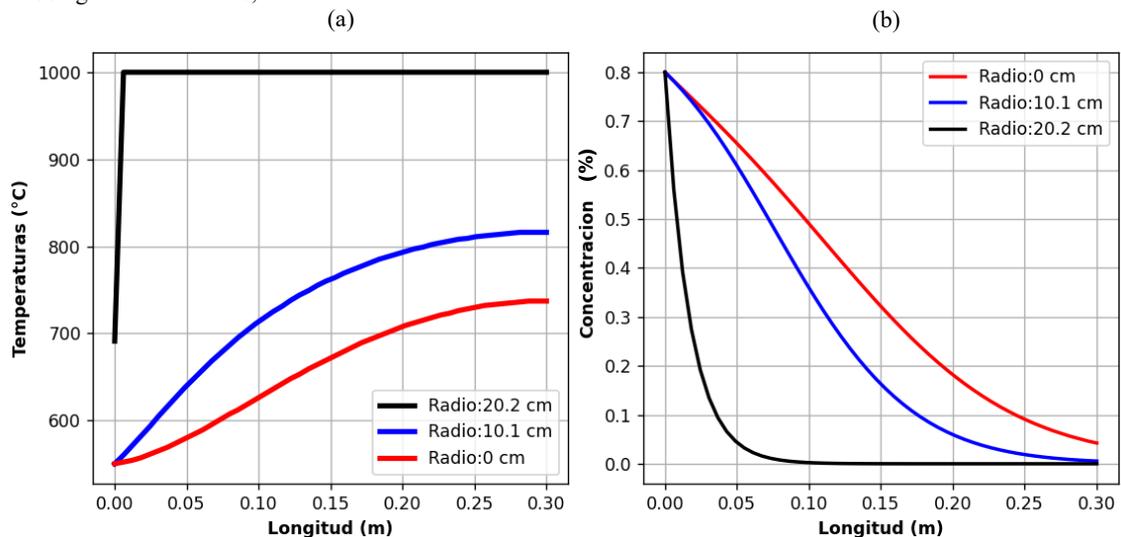
Variables implícitas en el diseño del reactor a 100 kg/h a un diámetro de 40,4 cm

Propiedades del reactor	Valor
Flujo másico, kg/h	100
Diámetro del reactor, cm	40,4
Longitud del reactor, cm	30
Temperatura del Gas, °C	550
Velocidad del gas, m/s	0,22
Numero de Reynolds	4021
Coefficiente de convección, W/(m ² K)	2,69

Los resultados de la simulación con las condiciones presentadas en la tabla 7 se observan en la Fig. 7.

Figura 7

Reactor 100 kg/h – Diámetro 40,4 cm



Nota: (a) Transferencia de calor al interior del reactor respecto a la longitud del reactor, (b) reducción de la concentración de alquitranes respecto a la longitud del reactor.

En la Fig. 7 En (a) la temperatura al interior del reactor no llega a los 1000 °C de la pared debido al diámetro del reactor de 40,4 cm y al flujo masico de 100 kg/h, sin embargo, en (b) la concentración del alquitrán se reduce significativamente siendo que las temperaturas no son tan altas como en el reactor de 50 kg/h, en este reactor la concentración se reduce lo esperado, debido a que la curva de color rojo de la Fig. 7 (b) a una longitud de 30 cm del reactor está por debajo del 10% de concentración del alquitrán, el cual es un factor determinante para evaluar el rendimiento del reactor.

En la Tabla 8 se evalúa un reactor con un flujo masico de 100 kg/h, y se varían las dimensiones de este, con el fin de evaluar como las dimensiones del reactor afecta el rendimiento de este.

Tabla 8

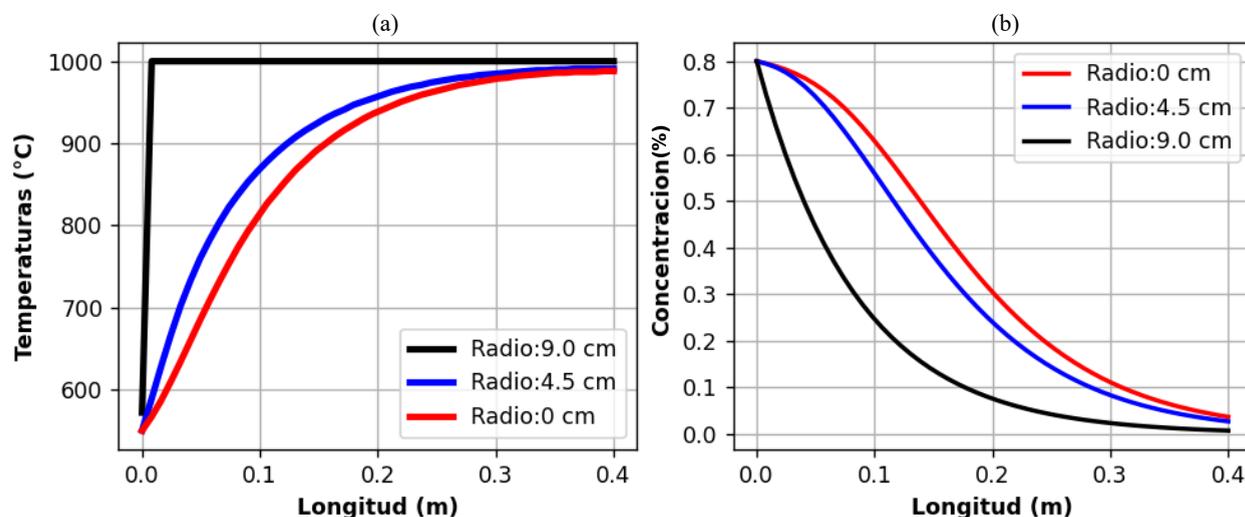
Variables implícitas en el diseño del reactor a 100 kg/h a un diámetro de 18 cm

Propiedades del reactor	Valor
Flujo másico, kg/h	100
Diámetro del reactor, cm	18
Longitud del reactor, cm	40
Temperatura del Gas, °C	550
Velocidad del gas, m/s	1,12
Numero de Reynolds	9026
Coefficiente de convección, W/(m ² K)	12,4

Los resultados de la simulación con las condiciones presentadas en la tabla 8 se observan en la Fig. 8.

Figura 8

Reactor de 100 kg/h – Diámetro de 18 cm



Nota: (a) Transferencia de calor al interior del reactor respecto a la longitud del reactor, (b) reducción de la concentración de alquitranes respecto a la longitud del reactor.

Teniendo en cuenta la Fig. 7 (b) y la Fig. 8 (b) se logra evidenciar que para mantener una reducción en la concentración de alquitranes ideal se debe evaluar el espacio de aplicación del reactor, ya que como se puede apreciar en la Fig. 8 (b) se debe aumentar la longitud para mantener una concentración de alquitranes igual a la curva de color rojo de la Fig. 7 (b), cabe resaltar que el diámetro se reduce considerablemente de 40,4 cm a 18 cm y la longitud aumenta de 30 cm a 40 cm.

Para el siguiente análisis se eleva el flujo masico a 150 kg/h, en la tabla 9 se presentan las variables implícitas en el diseño del reactor.

Tabla 9

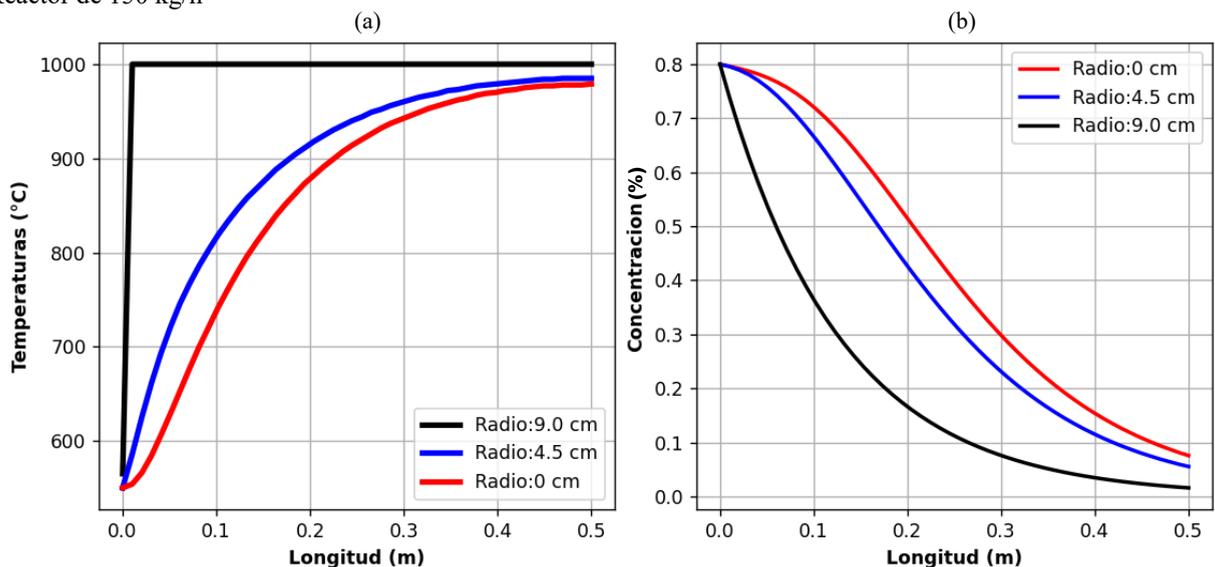
Variables implícitas en el diseño del reactor a 150 kg/h

Propiedades del reactor	Valor
Flujo másico, kg/h	150
Diámetro del reactor, cm	18
Longitud del reactor, cm	50
Temperatura del Gas, °C	550
Velocidad del gas, m/s	1,68
Numero de Reynolds	13539
Coefficiente de convección, W/(m ² K)	17,2

Los resultados de la simulación con las condiciones presentadas en la tabla 9 se observan en la Fig. 9.

Figura 9

Reactor de 150 kg/h



Nota: (a) Transferencia de calor al interior del reactor respecto a la longitud del reactor, (b) reducción de la concentración de alquitranes respecto a la longitud del reactor.

El reactor de 150 kg/h (Fig. 9) presenta unos resultados similares al reactor de 100 kg/h (Fig. 8). Se puede determinar que dependiendo de las condiciones a las que estará trabajando el reactor se debe escoger un flujo másico y un dimensionamiento adecuado para que cumpla el objetivo de reducir la concentración del alquitrán.

Los resultados obtenidos muestran coherencia con lo reportado por Dabai et al [17] y, Han y Kim [15], ya que, al incrementar la temperatura y el tiempo de residencia del gas en el reactor, la reducción en la concentración de alquitranes en el gas es mayor. La cinética de reacción al interior del reactor corrobora los parámetros cinéticos empleados por Mendoza [8] para el craqueo catalítico de alquitranes, utilizando como catalizador el carbón activado.

4. Conclusiones

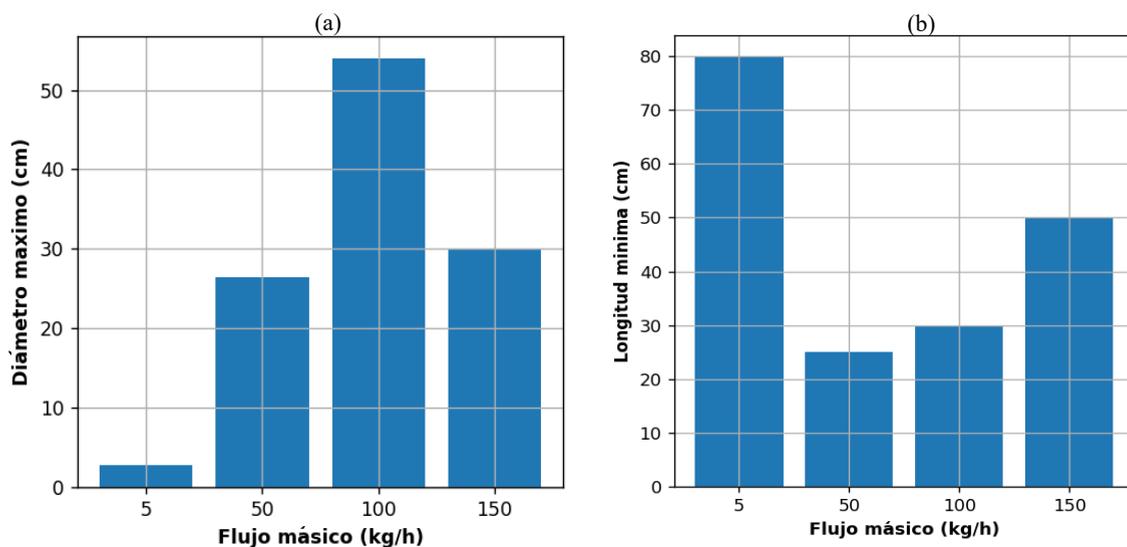
En este trabajo, gracias al modelo matemático se diseñó un reactor que permite la reducción de la concentración de los alquitranes en el gas de síntesis de biomasa a partir del craqueo catalítico, se evaluó el rendimiento del reactor a distintos flujos másicos, temperaturas del gas de síntesis y geometrías.

Los siguientes aspectos son importantes para el diseño del reactor:

1. Se recomienda que la temperatura del gas de síntesis sea de 550 °C para obtener una reducción en la concentración de los alquitrans entre un 95 a un 100 %
2. Es recomendable utilizar flujos masicos mayores a 10 kg/h con el fin de tener una geometría más fácil de fabricar y unas longitudes inferiores a 50 cm.
3. Según la aplicación del reactor, ya sea en una turbina a gas o motor a combustión interna, se recomienda que el diámetro sea inferior a 3 veces la longitud del reactor con el fin de tener una reducción de la concentración del alquitrán adecuada, y un Reynolds inferior a 3000.
4. El flujo másico del gas debe ser turbulento para mejorar la transferencia de calor y reducir el tiempo de actividad catalítica en el reactor.
5. No se recomienda incrementar el diámetro del reactor por encima de los valores presentados en la Fig. 10 (a), ya que el número de Reynolds sería inferior a 3000 y los resultados inducirían a una solución errada.
6. No se recomienda disminuir la longitud del reactor de los valores reflejados en la Fig. 10 (b), ya que se reduciría la concentración de los alquitrans en el gas a un 20%.

Figura 10

Geometría del reactor respecto a flujos masicos



Nota: (a) Diámetro máximo del reactor respecto al flujo masico, (b) Longitud mínima del reactor respecto al flujo masico.

La implementación de este modelo permite diseñar reactores que mejoran la calidad del gas de síntesis, esta tecnología permite reemplazar los combustibles fósiles por el gas de síntesis como combustible para la producción de energía eléctrica, transporte terrestre y marítimo, de esta forma se reduce la huella de carbono y se cumple con los lineamientos de la COP26 [1].

5. Referencias

- [1] BBC News Mundo, “¿Cuál es el veredicto de los científicos sobre lo acordado para frenar el cambio climático en la COP26?,” *BBC*, Nov. 18, 2021. <https://www.bbc.com/mundo/noticias-59323791> (accessed Aug. 08, 2022).
- [2] R. Lesme Jaén, L. Garcia Faure, L. Oliva Ruiz, J. Pajarín Rodríguez, and D. Revilla Suarez, “Gasificación de biomasa para la generación de electricidad con motores de combustión interna. Eficiencia del proceso,” *Universidad de Oriente, Centro de Estudios de Eficiencia Energética*, vol. 36, no. 2, pp. 161–172, 2016, doi: 10.1590/2224-6185.2016.2.
- [3] BESEL, “Biomasa:Gasificación,” in *IDAE (Instituto para la Diversificación y Ahorro de la Energía) ELABORACIÓN*, no. 1, Madrid: Instituto para la Diversificación y Ahorro de la Energía, 2007, pp. 1–36. doi: 10.1111/j.1748-1716.1971.tb04939.x.
- [4] S. Mokhatab, W. A. Poe, and J. Y. Mak, *Handbook of natural gas transmission and processing: Principles and practices*, Fourth Edition. Gulf Professional Publishing is an imprint of Elsevier, 2018. doi: 10.1016/C2017-0-03889-2.
- [5] James G. Speight, *Synthetic fuels: Production and products*, vol. 27, no. 4. McGRAW-HILL, 2008.
- [6] Mark Jan Prins, “Thermodynamic analysis of biomass gasification and torrefaction,” EINDHOVEN UNIVERSITY OF TECHNOLOGY, 2005. doi: 10.6100/IR583729.
- [7] B. KAVALOV and S. D. PETEVES, *Status and Perspectives of Biomass to Liquid Fuels un the European Union*, Institute for Energy. Netherlands: European Commission, 2005.
- [8] Libardo Enrique Mendoza Geney, “Pirolisis de biosólidos En Horno Rotatorio,” Universidad Nacional de colombia, Bogotá, 2016.
- [9] J. John D. Andenon, *Computational Fluid Dynamics*, McGraw-Hill., vol. Engineering. 1995.
- [10] Y. Qian, Y. Yu, G. Xu, and X. Liu, “CFD modeling of coal pyrolysis in externally heated fixed-bed reactor,” *Fuel*, vol. 233, pp. 685–694, Dec. 2018, doi: 10.1016/j.fuel.2018.06.100.
- [11] Steven C. Chapra and Raymond P. Canale, *Métodos numéricos para ingenieros*, McGraw-Hill., vol. Quinta. 2007.
- [12] Bruce E. Poling, John M. Prausnitz, and John P. O’Connell, *The properties of gases and liquids*, Fifth Edition. McGraw-Hill, 2001.
- [13] Don W. Green and Marylee Z. Southard, *Perry’s Chemical Engineers’ Handbook*, 9 th edition. Mc Graw Hill, 2019.
- [14] Yunus A. Çengel and Afshin J. Ghajar, *Transferencia de calor y masa*, Cuarta edición., vol. 4th. Mc Graw Hill, 2011.
- [15] J. Han and H. Kim, “The reduction and control technology of tar during biomass gasification/pyrolysis: An overview,” *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 12, no. 2, pp. 397–416, 2008, doi: 10.1016/j.rser.2006.07.015.
- [16] P. Morf, P. Hasler, and T. Nussbaumer, “Mechanisms and kinetics of homogeneous secondary reactions of tar from continuous pyrolysis of wood chips q.” [Online]. Available: <http://www.fuel>
- [17] F. Dabai, N. Paterson, M. Millan, P. Fennell, and R. Kandiyoti, “Tar formation and destruction in a fixed bed reactor simulating downdraft gasification: Effect of reaction conditions on tar cracking products,” *Energy and Fuels*, vol. 28, no. 3, pp. 1970–1982, Mar. 2014, doi: 10.1021/ef402293m.
- [18] T. A. Milne, R. J. Evans, and N. Abatzoglou, “Biomass Gasifier ‘Tars’: Their Nature, Formation, and Conversion.” [Online]. Available: <http://www.doe.gov/bridge/home.html>