

Modelo de la composición del gas generado en un gasificador downdraft usando como biomasa residuos de Madera

Elbis D'Espaux Shelton¹

¹Universidad de las Ciencias Informáticas, Cuba. Email: eshelton@uci.cu

Resumen

En este trabajo se presentan las herramientas para el desarrollo de un modelo matemático que favorece el cálculo de los procesos termoquímicos que ocurren en el interior de un gasificador downdraft y que permite predecir la composición de los gases generados a la salida del reactor usando residuos de madera de Algarrobo a partir de la composición termofísica de la biomasa, la temperatura del lecho y otras propiedades. Para ello se vale del planteamiento de las ecuaciones de balance de energía y de especies empleándose el método de numérico de diferencias finitas con lo cual se logra mayor precisión de la composición del gas generado. Esto permitirá elevar la calidad del gas que se produce teniendo en cuenta el aumento de su valor calórico y la disminución de su contenido de alquitrán, a partir del control de la cinética de las reacciones y considerando además el tamaño de la biomasa.

Palabras clave: biomasa, gasificador downdraft, gas generado, modelación matemática

Abstract

This work presents the tools for the development of a mathematical model that favors the calculation of the thermochemical processes that occur inside a downdraft gasifier and that allows predicting the composition of the gases generated at the exit of the reactor using wood waste of Carob tree from the thermophysical composition of the biomass, the bed temperature and other properties. To do this, it uses the approach of the energy and species balance equations, using the finite difference numerical method, which achieves greater precision in the composition of the gas generated. This will allow the quality of the gas produced to be raised taking into account the increase in its caloric value and the decrease in its tar content are taken into account, based on the control of the kinetics of the reactions and also considering the size of the biomass.

Keywords: biomass, downdraft gasifier, generated gas, mathematical modeling

1. Introducción

Las investigaciones generales en el área de gasificación de biomasa incluyen el estudio de la cinética de la pirólisis o la gasificación de biomásas seleccionadas. La composición del gas resultante depende del gasificador que se tenga, de las características particulares de la biomasa empleada y de las condiciones de operación y diseño del gasificador. Por ello las pesquisas continúan, se experimentan y modelan modificaciones constructivas a los gasificadores existentes, se optimizan parámetros de operación con el objetivo fundamental de elevar la

calidad del gas que se produce en varias direcciones: aumentar su valor calórico, disminuir su contenido de alquitrán, obtener combustibles de mayor calidad y otros materiales.

La gasificación de biomasa es un fenómeno complejo en el que se presenta transferencia de calor y de masa de manera simultánea. El desarrollo de pruebas experimentales que permitan evaluar la influencia de cada uno de los parámetros que intervienen en el proceso enfrenta desventajas significativas, se requiere un alto número de ensayos y, por ende, de una gran disponibilidad de tiempo para optimizar condiciones

operativas, recursos, personal calificado y dinero. Los resultados pudieran ser inconsistentes al no tenerse siempre las mismas condiciones experimentales. Además, la variabilidad de la composición de la biomasa pudiera afectar los resultados.

No se conoce para una biomasa dada la composición del gas a obtener ni el valor de la eficiencia del proceso en un gasificador tipo downdraft, a partir de condiciones específicas del gasificador como temperatura del lecho, y características termofísica de la biomasa, a la hora de diseñar o evaluar una instalación de gasificación. Se necesita predecir la composición de los gases generados a la salida del gasificador, a partir de la composición termofísica de la biomasa, la temperatura del lecho y otras propiedades pues no siempre se tienen los analizadores de gases.

Actualmente hay una tendencia del uso de la modelación de la gasificación para describir el este proceso sin necesidad de desarrollar experimentos, los cuales pueden resultar costosos. Es por eso que en este trabajo se desarrolla un modelo matemático que permite predecir con mayor exactitud la composición del gas generado en un gasificador downdraft usando residuos de madera a través del control de las variables que intervienen en el proceso.

Los modelos matemáticos reportados en la literatura revisada para analizar el comportamiento de un gasificador a escala de laboratorio aplicando el balance de masa y de energía y la minimización de la energía libre de Gibbs no pronostican satisfactoriamente la composición de los gases generados en la gasificación de biomasa a través del control de las variables que intervienen en el proceso lo que introduce un error en la estimación, cálculo y diseño de estas instalaciones.

Las metodologías que utilizan modelos de equilibrio termodinámico suelen ser más simples, por tanto, las predicciones de la composición del gas son menos precisas.

En la revisión de los principales modelos de gasificación se conoce que los investigadores han trabajado con modelos Cero-Dimensionales (0-D) que relacionan variables de entrada y salida prediciendo la composición final del gas obtenido y la temperatura de equilibrio en función de parámetros de entrada: tipo de biomasa (análisis elemental e inmediato), poder calorífico, humedad, temperatura, entre otros. El estudio del proceso de gasificación bajo un planteamiento 0-D, se basa en equilibrio químico y termodinámico [1].

Modelos dimensionales de 1, 2 y 3 dimensiones se utilizan para determinar la evolución de parámetros del proceso termoquímico a través de su paso por el

gasificador según el nivel de complejidad y tiempo computacional que se desee invertir en las simulaciones.

Entre los trabajos estudiados están: Pandey et al, el cual referencia al modelo para gasificador de lecho fijo downdraft basado en el equilibrio termodinámico [2], donde a partir de la ecuación de la energía mínima de Gibbs obtiene predicciones de la composición del gas producto en la gasificación de la madera de Eucalipto, también fue estudiado el modelo basado en la minimización de la energía libre de Gibbs de Altafini y Mirandola para la gasificación del carbón, Ruggiero y Manfrida presentan un modelo que permite estudiar el proceso de gasificación variando los parámetros de entrada al modelo [1] [3].

En el presente trabajo se presentan las herramientas necesarias para analizar el desarrollo de un modelo matemático que permite el cálculo de los procesos termoquímicos que se presentan en el interior de un gasificador downdraft y también la determinación de los perfiles de temperatura. El modelo se basó en el planteamiento de las ecuaciones de balance de energía y de especies y se empleó el método de los volúmenes de control. Para ello se utilizó el método numérico de diferencias finitas a través de la discretización de las ecuaciones de balance que fueron determinadas en el proceso analizado.

Los resultados esperados serían un modelo capaz de predecir con mayor precisión la composición del gas generado en el proceso de gasificación, lo que podría permitir obtenerse un gas con mayor poder calorífico, a partir del control de la cinética de las reacciones y considerando la formación de alquitrán, la formación de hidrocarburos y el tamaño de la biomasa y valoración económica de las ventajas por la aplicación de la gasificación para obtener energía eléctrica en sustitución de combustible convencional.

La modelación de la gasificación constituye una vía económica a la hora de diseñar un gasificador, con el propósito de describir el proceso dando la composición de los gases a obtener sin tener que desarrollar experimentos, pues se requieren equipos costosos para llevar a cabo la experimentación y no es factible siempre su adquisición [4].

La gasificación es la conversión de un caudal sólido en un combustible gaseoso o líquido que puede ser quemado para liberar energía o ser utilizado para la producción de sustancias químicas valiosas y constituye uno de los recursos que permite sustituir una parte importante de los combustibles fósiles; requiere de un agente gasificante para reordenar la estructura molecular de la biomasa y convertirla en un combustible útil con una relación mayor de la relación hidrógeno-carbón (H/C) [5]. La calidad del gas

producido en la instalación depende no solo de las características del flujo de gas, del agente gasificante utilizado, del tipo de biomasa experimental y del diseño del reactor, sino también de los parámetros de operación [6].

El proceso está conformando por varios fenómenos complejos que van desde los mecanismos de transferencia de masa y energía en un sistema reactivo heterogéneo, derivando las etapas de secado y devolatilización del combustible para dar paso a la oxidación de los volátiles y el carbón, con el consecuente cambio del diámetro de las partículas y las pérdidas de presión en el lecho [7].

El proceso de gasificación se realiza en los gasificadores. Estos reactores son apropiados para la producción de energía a pequeña y mediana escala. Debido a las características del mismo es difícil mantener una temperatura de operación uniforme al interior del reactor. Por ello es que resulta impredecible conocer la composición del producto [8].

La biomasa a medida que va atravesando el reactor sufre varias transformaciones hasta su total devolatilización ya que va descomponiéndose hasta convertirse en gas y en otros subproductos que resultan desechables en el proceso final.

Los modelos matemáticos de la mayoría de sistemas, ya sean térmicos, mecánicos, hidráulicos, etc, se representan mediante ecuaciones diferenciales parciales y ordinarias que en la mayoría de los casos requieren de soluciones numéricas. Estas ecuaciones nacen de los balances de masa, de cantidad de movimiento, de energía y de especies (cuando se tienen reacciones químicas) para el sistema a modelar.

El objetivo de este trabajo es desarrollar un modelo matemático que permita predecir con mayor exactitud la composición del gas generado en un gasificador downdraft usando residuos de madera de Algarrobo a través del control de las variables que intervienen en el proceso.

2. Métodos y metodología

El proceso de gasificación se modela utilizando ecuaciones diferenciales para describir los fenómenos de combustión y las reacciones químicas involucradas.

Se identifican las especies gaseosas involucradas en el proceso de gasificación, como CO (Monóxido de Carbono), CO₂ (Dióxido de Carbono), H₂ (Hidrógeno), CH₄ (metano), N₂ (Nitrógeno), oxígeno (O₂), alquitranes, agua y otros productos de gasificación.

Se formulan las ecuaciones de balance de masa para cada especie involucrada y las ecuaciones de balance de energía para describir cómo se cambia la energía en el reactor de gasificación.

Luego se integran las ecuaciones diferenciales para obtener las soluciones que describen cómo cambian las concentraciones de las especies y la energía en el gasificador en función del tiempo y del espacio.

Los procesos de transformación de biomasa que se presentan al interior del gasificador de lecho fijo se presentan de manera independiente y secuencial a medida que la biomasa va fluyendo a lo largo del gasificador e incrementa su temperatura. Estos procesos al tener dos fases se pueden modelar de manera independiente y luego ser vinculados en el desarrollo del modelo general [9].

Por tal motivo, la metodología para determinar el gas que se obtiene consiste en emplear primeramente el método de los volúmenes de control, el cual se basa en la aplicación de los balances de masa, de energía y de cantidad de movimiento para cada uno de estos.

Este método permite llegar a una forma discretizada de las ecuaciones diferenciales y no requiere de conocer previamente las formulaciones que se aplican en cada volumen de control. Cabe destacar además que demanda de un menor manejo matemático y permite una mayor comprensión de los fenómenos físicos presentes. Luego para cada uno de los volúmenes se aplica el método numérico que más se ajusta que son los elementos finitos y dentro de estos el método de Diferencias Finitas [10].

2.1. Ecuaciones para los balances de especies y energía en las fases gaseosa y sólida

Se debe tener en cuenta que las propiedades de la fase sólida no tienen influencia sobre las propiedades de la fase gaseosa, excepto en la dispersión.

Las ecuaciones de balance de especies se desarrollan para la cantidad de movimiento en la dirección radial ya que se supone que la velocidad en tubo vacío para la sección transversal del reactor es constante.

Se utiliza convenientemente las coordenadas cilíndricas para plantear las ecuaciones de balance de energía y de masa por la geometría cilíndrica del reactor. De este modo se eliminan algunas raíces cuadradas que se involucran y resulta un modelo más sencillo. El sistema de coordenadas es mostrado en la Figura 1.

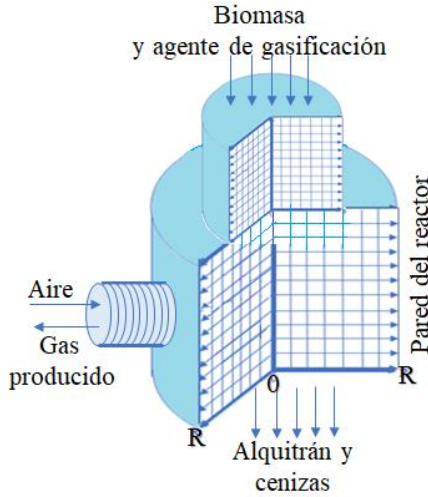


Figura 1. Representación en coordenadas cilíndricas.
Fuente: Elaboración propia.

En las ecuaciones de balance de la fase gaseosa se considera que la presión total dentro del gasificador permanece constante y es igual a la presión atmosférica.

El balance de energía de esta fase se simplifica suponiendo que la transferencia de calor por dispersión en la dirección axial es despreciable por ser mucho menor que la transferencia de calor por convección debido al alto flujo de gas y la velocidad de los gases en la dirección radial es despreciable y por lo tanto la transferencia de calor por convección en esa dirección también lo es. La ecuación general de balance de energía para la fase gaseosa es:

$$(cC_{p,m})^g \frac{\partial T^g}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r D_{r,th}^g \frac{\partial T^g}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{ax,th}^g \frac{\partial T^g}{\partial z} \right) + (cC_{p,m})^g w_r^g \frac{\partial T^g}{\partial r} - (cC_{p,m})^g w_{ax}^g \frac{\partial T^g}{\partial z} - \frac{h_{GP} A_{esp}}{\varepsilon_b} (T^g - T_{sup}^s) - q_{th}^g \quad (1)$$

Donde $(cC_{p,m})^g$ corresponde a los gases albergados en los poros de la fase sólida, $\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r D_{r,th}^g \frac{\partial T^g}{\partial r} \right)$ es la transferencia de calor por dispersión en la dirección radial, $\frac{\partial}{\partial z} \left(D_{ax,th}^g \frac{\partial T^g}{\partial z} \right)$ es transferencia de calor por dispersión en la dirección axial, $(cC_{p,m})^g w_r^g \frac{\partial T^g}{\partial r}$ la transferencia de calor por convección en la dirección radial, $(cC_{p,m})^g w_{ax}^g \frac{\partial T^g}{\partial z}$ es transferencia de calor por convección en la dirección axial, c es la concentración total de la fase gaseosa, $C_{p,m}$ la capacidad calorífica del gas, $\frac{h_{GP} A_{esp}}{\varepsilon_b} (T^g - T_{sup}^s)$ la transferencia de calor por convección entre la fase sólida y gaseosa teniendo en cuenta la porosidad del lecho. Este término apunta a la resolución simultánea de la ecuación en ambas fases [9], q_{th}^g refiere la generación por las reacciones

químicas al interior del reactor en la fase gaseosa y A_{esp} es el área específica de transferencia, representa el área de transferencia de calor entre las fases sólida y gaseosa por unidad de volumen.

$$q_{th}^g = \sum_{j=1}^n \Delta h_{r,m} r_{v,i} \quad (2)$$

$$A_{esp} = \frac{A_p n_p}{V_{total}} \quad (3)$$

$$A_p = \pi d_p^2 \quad (4)$$

$$n_p = \frac{V^s}{V_p} \quad (5)$$

El término $\Delta h_{r,m}$ es la entalpía de reacción de la fase gaseosa y $r_{v,i}$ la velocidad de reacción. El área superficial de las partículas es A_p , las partículas son consideradas esféricas.

A partir del sistema de coordenadas es posible establecer las condiciones de frontera. En el punto medio del gasificador, el gradiente de temperatura desaparece debido a la simetría térmica, por tanto, se tiene $r=0$ lo cual significa que $\frac{\partial T^g}{\partial r} = 0$.

La transferencia de calor por convección entre la pared y el gas en la pared del gasificador cuando $r=R$ significa que:

$$\lambda_r^g \frac{\partial T^g}{\partial r} = h_{WG} (T_W - T_R^g) \quad (6)$$

A la entrada del gasificador la fase gaseosa se encuentra a una temperatura establecida $z=0$ que significa $T^g = T_0$.

A la salida del gasificador no se presenta transferencia de calor. $z=L$ significa que $\frac{\partial T^g}{\partial z} = 0$

Como condición inicial se tiene que la temperatura de la fase gaseosa es conocida, $t=0$ significa que $T_{m,n}^g = T_{in}^g$.

La ecuación de balance de especies para cada componente i de la fase gaseosa es:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r D_{i,r} \frac{\partial c_i}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{i,ax} \frac{\partial c_i}{\partial z} \right) + \frac{\partial (w_r^g c_i)}{\partial r} - \frac{\partial (w_{ax}^g c_i)}{\partial z} - \frac{\beta A_{esp}}{\varepsilon_b} (c_i^g - c_{i,sup}^s) \quad (7)$$

Donde $\frac{\partial c_i}{\partial t}$ representa la concentración para cada especie, $\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r D_{i,r} \frac{\partial c_i}{\partial r} \right)$ es transferencia de masa por

dispersión en la dirección radial, $D_{i,r}$ es la constante de difusión másica en esa dirección. Además se tiene $\frac{\partial}{\partial z}(D_{i,ax} \frac{\partial c_i}{\partial z})$ como la transferencia de masa por dispersión en la dirección axial, $D_{i,ax}$ es la constante de difusión másica en esa dirección, $\frac{\partial(w_r^g c_i)}{\partial r}$ es la transferencia de masa convección en la dirección radial, $\frac{\partial(w_{ax}^g c_i)}{\partial z}$ transferencia de masa por convección en la dirección axial y $\frac{\beta A_{esp}}{\varepsilon_b}(c_i^g - c_{i,sup}^s)$ es la transferencia de masa por convección entre la fase sólida y gaseosa teniendo en cuenta la porosidad del lecho.

En el balance de especies supone que la transferencia de masa por dispersión en la dirección axial se desprecia por ser mucho menor que la transferencia por convección debido al alto flujo de gas y la velocidad de los gases en la dirección radial es despreciable, por tanto, la transferencia de masa por convección también lo es. En el punto medio del gasificador, el gradiente de concentración desaparece debido a la simetría del equipo.

A la entrada del reactor la fase gaseosa se encuentra con una composición de entrada establecida $z=0$ que significa que $c_i^g = c_{i,in}^g$ y a la salida del gasificador no se presenta transferencia de calor por tanto $z=L$ significa que $\frac{\partial c_i^g}{\partial z} = 0$.

La ecuación general del balance de energía para la fase sólida es:

$$(cC_{p,m})_e^s \frac{\partial T^s}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \lambda_e^s \frac{\partial T^s}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_e^s \frac{\partial T^s}{\partial z} \right) + (cC_{p,m})_e^s w_r^s \frac{\partial T^s}{\partial r} - (cC_{p,m})_e^s w_{ax}^s \frac{\partial T^s}{\partial z} - \frac{h_{GP} A_{esp}}{1 - \varepsilon_b} (T^g - T_{sup}^s) - q_{th}^s \quad (8)$$

Donde $(cC_{p,m})_e^s \frac{\partial T^s}{\partial t}$ representa la acumulación, $\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \lambda_e^s \frac{\partial T^s}{\partial r} \right)$ transferencia de calor por conducción en la dirección radial efectiva, $\frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_e^s \frac{\partial T^s}{\partial z} \right)$ es transferencia de calor por conducción en la dirección axial efectiva, $(cC_{p,m})_e^s w_r^s \frac{\partial T^s}{\partial r}$ transferencia de calor por convección en la dirección radial, $(cC_{p,m})_e^s w_{ax}^s \frac{\partial T^s}{\partial z}$ es la transferencia de calor por convección en la dirección axial, $\frac{h_{GP} A_{esp}}{1 - \varepsilon_b} (T^g - T_{sup}^s)$ es la transferencia de calor de fase sólida a gaseosa teniendo en cuenta la porosidad del lecho y q_{th}^s representa la generación debido a las reacciones químicas al interior del reactor en la fase sólida, consumo energético.

En el balance de energía de la fase sólida se supone que la transferencia de calor en la dirección radial se presenta solo por conducción, ya que no se presenta flujo de partículas en esa dirección.

La transferencia de calor en la dirección axial se presenta por conducción y convección, obteniendo la ecuación:

$$(cC_{p,m})_e^s \frac{\partial T^s}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \lambda_e^s \frac{\partial T^s}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_e^s \frac{\partial T^s}{\partial z} \right) - (cC_{p,m})_e^s w_{ax}^s \frac{\partial T^s}{\partial z} - \frac{h_{GP} A_{esp}}{1 - \varepsilon_b} (T^g - T_{sup}^s) - q_{th}^s \quad (9)$$

En el punto medio del gasificador, el gradiente de temperatura desaparece debido a la simetría del equipo, $r=0$ significa que $\frac{\partial T^s}{\partial r} = 0$.

La transferencia de calor por conducción y radiación entre la pared y las partículas, en la pared del gasificador se manifiesta cuando $r=R$ como $\lambda_e^s \frac{\partial T^s}{\partial r} = (h_{WP} + h_{rad,WP})(T_W - T_R^s)$ siendo este término la transferencia de calor por conducción y radiación entre la pared y las partículas.

A la entrada del gasificador la biomasa se encuentra con la temperatura del ambiente circundante, o sea $z=0$ significa que $T^s = T_{amb}$.

A la salida del gasificador no se presenta transferencia de calor, $z=L$ significa que $\frac{\partial T^e}{\partial z} = 0$.

La condición inicial es que la temperatura de la fase sólida es conocida, $t=0$ significa que $T_{m,n}^s = T_0^s$.

Según referencia [9], el balance de especies para la fase gaseosa contenida en los poros de la fase sólida se simplifica en la siguiente expresión:

$$r_{v,i} = \frac{\varepsilon_b}{1 - \varepsilon_b} \beta A_{esp} (c_i^g - c_{i,sup}^s) \quad (10)$$

Esta ecuación representa la transferencia de masa entre la fase gaseosa y los gases contenidos en los poros de la fase sólida y es válida suponiendo que no existen gradientes de concentración al interior de las partículas, es decir cuando la fase sólida se considera homogénea. Para la condición inicial se tiene que la composición de la fase gaseosa contenida en los poros de la fase sólida es conocida e igual a la del agente de gasificación empleado.

2.2. Descripción de la metodología empleada

Los métodos de elementos finitos representan una herramienta muy útil como alternativa para la solución

de problemas complejos de transferencia de calor. El mismo permite la aproximación de soluciones de ecuaciones diferenciales. Entre estos está el método de diferencias finitas el cual se aplica en la modelación de gasificadores downdraft para resolver ecuaciones diferenciales parciales que describen el comportamiento del proceso de gasificación. A continuación, se presentan los pasos generales para su aplicación:

Primeramente, se divide el espacio en intervalos finitos, creando una malla que cubre el dominio del problema. Cada nodo en la malla se conoce como un punto de control. Luego se utilizan las ecuaciones del modelo para describir el comportamiento del proceso de gasificación. Estas ecuaciones se aplican a cada nodo en la malla y a cada intervalo de tiempo.

Estas ecuaciones se discretizan, lo cual implica reemplazar las derivadas parciales por diferencias finitas, transformando las ecuaciones en sistemas de ecuaciones algebraicas. Posteriormente se resuelve el sistema de ecuaciones algebraicas utilizando el método de Gauss para las matrices y el método de Newton. De este modo se obtiene la temperatura y la composición del gas.

Al final se comparan los resultados numéricos con datos experimentales para validar la precisión del modelo.

3. Resultados

Para comenzar con los cálculos necesarios para la utilización del modelo deben determinarse primeramente las propiedades físicas y químicas en las fases sólida y gaseosa de la biomasa. Además, deben tenerse los coeficientes de transferencia de calor y masa en función de la temperatura y composición. Se empleó residuo de madera de Algarrobo, por la disponibilidad de cinéticas de reacción y de pruebas experimentales para la validación del modelo.

Inicialmente, para cuantificar la producción de gas se caracterizó la biomasa. El algarrobo es un árbol común de madera dura, muy usado para producir carbón de buena calidad. Las características de esta biomasa se obtuvieron por termogravimetría en el laboratorio de la Universidad de Hasselt en Bélgica.

Las experiencias se desarrollaron en un equipo estándar TGA (Modelo TG-v5.2B) a presión atmosférica y en atmósfera de Nitrógeno, $m = 10.32$ mg. Luego de tener tabulados los resultados se realizó un procesamiento estadístico de la data para caracterizarla utilizando el programa Statistica 12 [11]. Pérdida total de masa: 98,44 % Contenido de cenizas: 1,56% y Humedad: 12%. La biomasa presenta excelentes características para emplear como

combustible por su bajo contenido en cenizas y de humedad en la calidad de las fracciones orgánicas analizadas. Este resultado se visualiza en la Figura 2.

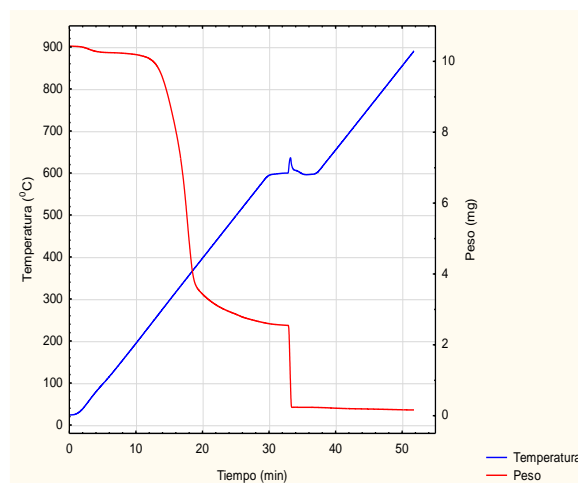


Figura 2. Devolatilización del Algarrobo. Fuente: Elaboración propia

Como variables independientes se tienen la presión y la temperatura de un sistema, ya que, al ser variables intensivas, nunca serán dependientes para el modelo presentado; también las propiedades del sólido son independientes, debido a que únicamente dependen del material del sólido cuya condición no se evalúa en el presente modelo.

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

Se determinó que el modelo posee un grado de libertad, lo cual significa algebraicamente que este sistema posee infinitas soluciones, pero como el modelo requiere de una suposición inicial para la temperatura, debido a que es necesario el cálculo de la misma para poder obtener las demás condiciones del modelo y a continuación realizar la cantidad de iteraciones necesarias hasta que el modelo converja, entonces, la obtención de la solución final depende de la suposición inicial de temperatura realizada. O sea, que se refiere a un problema con condiciones iniciales.

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

Se finaliza cuando los cambios en las variables calculadas son tan despreciables que se considera que se ha alcanzado el estado estacionario. El error se

calcula como la diferencia entre los valores absolutos de cada variable en cada iteración.

Las ecuaciones discretizadas planteadas se satisfacen cuando los residuos calculados para cada nodo, para las dos fases son cero. Sin embargo, los errores de redondeo entre iteración e iteración hacen que estos valores nunca lleguen a serlo. Si se tuviera una máquina con precisión infinita, se llegaría a un residuo nulo después de cierto número de iteraciones. En la práctica, si se trabaja con variables definidas con doble precisión, el residuo descenderá entre iteración e iteración hasta estabilizarse en un valor muy pequeño (10^{-15} - 10^{-16}). Se puede decir que el método iterativo convergerá para un determinado instante de tiempo, cuando todos los residuos calculados sean menores a un valor previamente establecido.

La solución en este estudio se fijó con 3 cifras decimales exactas, quiere decir esto que se detienen las iteraciones cuando el error sea menor que 0,0005.

3.1. Discretización de las ecuaciones

Para una validación teórica hay que discretizar las ecuaciones, utilizando el método de los volúmenes de control empleando el método de diferencias finitas, analizando cada tipo de nodo en la malla tal como se muestra en la Figura 3.

Para integrar se especifican perfiles de variación de la variable dependiente entre los puntos de la malla para evaluar las integrales resultantes. La solución obtenida del sistema de ecuaciones discretizadas resultante satisface en forma exacta las ecuaciones consideradas, sin depender del tamaño de la malla.

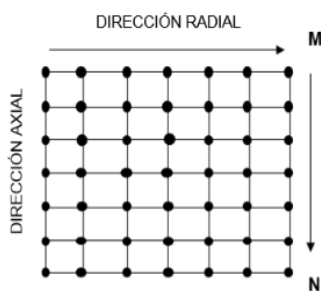


Figura 3. Malla bidimensional para resolver las ecuaciones discretizadas. Fuente: Elaboración propia.

Se definen los nodos superiores $np=0$, $0 \leq mp \leq m$. Para estos la temperatura de las fases sólida y gaseosa será constante e igual a la temperatura ambiente. La discretización de la ecuación de balance de masa para la fase gaseosa se realiza de manera similar a las ecuaciones de balance de energía, teniendo en cuenta las ecuaciones de balance y condiciones de frontera planteadas.

$$\begin{aligned} & \frac{D_{r,th}^g}{r} \frac{T_{m+1,n} - T_{m,n}}{\Delta r} + S(T) \left[\frac{T_{m+1,n} - T_{m,n}}{\Delta r} \right]^2 \\ & + D_{r,th}^g \left[\frac{T_{m+1,n} - 2T_{m,n} + T_{m-1,n}}{\Delta r^2} \right]^2 \\ & + \frac{T_{m-1,n} - T_{m,n}}{\Delta r} - (cC_{p,m})^g w_{ax}^g \frac{T_{m,n+1} - T_{m,n}}{\Delta z} \\ & - \frac{h_{GP} A_{esp}}{\varepsilon_b} (T^g - T_{sup}^s) - q_{th}^g \end{aligned} \quad (11)$$

Análogamente para la fase sólida la ecuación queda:

$$\begin{aligned} & \frac{\lambda_e^s}{r} \frac{T_{m+1,n} - T_{m,n}}{\Delta r} \\ & + \lambda_e^s \frac{T_{m+1,n} - 2T_{m,n} + T_{m-1,n}}{\Delta r^2} \\ & + \lambda_e^s \frac{T_{m,n+1} - 2T_{m,n} + T_{m,n-1}}{\Delta z^2} \\ & - (cC_{p,m})_e^s w_{ax}^s \frac{T_{m,n+1} - T_{m,n}}{\Delta z} - \frac{h_{GP} A_{esp}}{1 - \varepsilon_b} (T^g \\ & - T_{sup}^s) - q_{th}^g \end{aligned} \quad (12)$$

Así se va haciendo para todas las ecuaciones diferenciales y esto genera una matriz.

Se calcula la matriz de temperatura en cada posición mediante las ecuaciones obtenidas en el balance de energía utilizando la discretización. Se realiza este procedimiento y se analiza el cambio de la temperatura entre iteración e iteración hasta que la desviación está definida por una función de error y este debe ser menor al error prefijado, en este punto se deja de iterar.

Se utiliza el método de Gauss para la solución de las ecuaciones discretizadas. En este método, cada nodo es visitado en cierto orden y se calcula el nuevo valor de la variable de interés a partir de las ecuaciones discretizadas. El cálculo del nuevo valor para un nodo específico requiere del conocimiento de los valores de sus nodos vecinos (norte, sur, este, oeste, de la otra fase y del tiempo anterior). Para los nodos vecinos que ya han sido visitados durante la iteración actual, el valor de la variable de interés es el de esa iteración, sin embargo, para aquellos nodos vecinos que aún no han sido visitados, su valor es el de la iteración anterior.

Este método requiere el almacenamiento de los campos de variables de la iteración actual ($t + 1$) y los valores encontrados en el instante de tiempo anterior (t) para cada una de las fases.

3.2 Validación del modelo

Los parámetros empleados para las simulaciones se tomaron teniendo en cuenta las condiciones de operación de un gasificador de prueba existente en el laboratorio UNESP en Sao Paulo.

El equipo de prueba consta de un reactor tubular de acero calentado indirectamente, cuyo diámetro interno es de 8,25 cm. El reactor se encuentra dividido en dos zonas: una de secado y pirólisis y una de gasificación.

La zona de secado y pirólisis se calienta mediante un intercambiador de calor tubular por el que fluye aire, que se calienta previamente a través del horno eléctrico que calienta la zona de gasificación. Este horno puede alcanzar una temperatura máxima de 1400 K. La zona de secado y pirólisis tiene una longitud de 0,5 m mientras que la zona de gasificación tiene 1,0 m, para una longitud total del reactor de 1,5m.

Por la parte superior del reactor se alimenta nitrógeno que se emplea como gas de barrido y biomasa de manera continua en función de la pérdida de masa del sólido presente en su interior. Los gases generados salen por la parte inferior del reactor para su posterior análisis.

Basado en las condiciones de operación del reactor de prueba, se hicieron las siguientes suposiciones para las simulaciones:

El gasificador tiene un diámetro $D=8,25$ cm y una longitud $L=1,5$ m. Al inicio del proceso el reactor se encuentra lleno de biomasa. La madera de algarrobo, cuyo contenido de humedad se determinó que era del 12%, se humedece previamente hasta el valor establecido para aumentar la concentración de aire, el cual se emplea como agente de gasificación.

Las temperaturas de entrada de las fases sólida y gaseosa son iguales y constantes y son de $T=300$ K. La temperatura inicial de la pared del gasificador es de 300 K. Esta temperatura varía tanto con el tiempo como con la posición. La velocidad de la fase sólida a la salida del reactor es nula. El diámetro inicial de las partículas, las cuales se consideran de forma esférica, es de $dp=0,02$ m.

En la Tabla 1 se recoge el resultado de la composición de los gases al aplicar el modelo.

Tabla 1. Composición de las especies en el modelo. Fuente: Elaboración propia.

H_2	CO	CO_2	CH_4
0,298	0,3013	0,2101	0,1906

En el modelo la longitud equivalente a 0m le corresponde una temperatura ambiente de 300,15K, según las condiciones de frontera.

En la Figura 4 se muestra la relación entre la temperatura axial y longitud del gasificador que se tomó para hacer la validación.

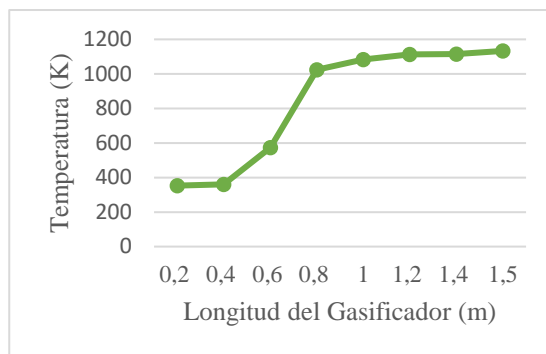


Figura 4. Relación de la Temperatura axial ($R/2$) y longitud del gasificador. Fuente: Elaboración propia.

Uno de los resultados arrojados por el modelo logrado se muestra en la Figura 4 y es la relación de la temperatura axial ($R/2$) y longitud del gasificador.

El perfil de temperatura obtenido para la cama de partículas en esta longitud del reactor evidencia que la temperatura aumenta de manera directa respecto a la longitud, se observa el perfil de temperatura marcado y el cambio de la curva.

El proceso de pirólisis comienza aproximadamente a los 0,62 m a una temperatura de 620 K y a 850 K, 0,76m comienza la gasificación.

Se muestra en la Figura 5 la fracción molar de los diferentes componentes gaseosos formados que son el CO , H_2 , CO_2 y CH_4 , se encuentra el consumo de biomasa y la formación de fase volátil en donde se puede observar la influencia de la temperatura para $r=R/2$.

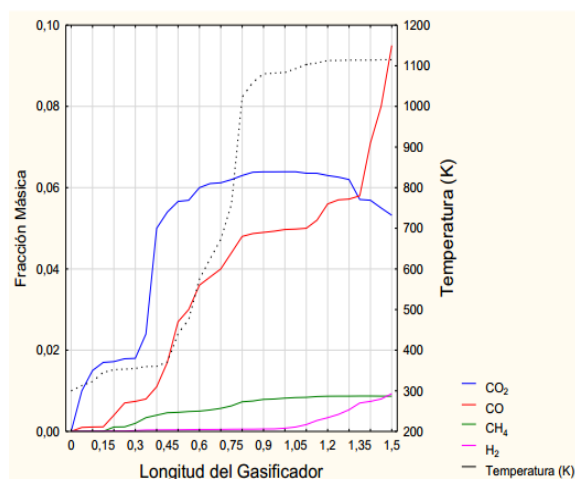


Figura 5. Composición del gas producto para $r=R/2$. Fuente: Elaboración propia.

Es notable que la fracción molar de la biomasa disminuye porque promueve que se den las reacciones de gasificación, lo que significa que la conversión de

H₂ aumenta y de esta forma incrementa la concentración de hidrógeno en el gas de síntesis.

Esto puede ser logrado utilizando el modelo para cualquier punto del gasificador.

3.3 Comparación con otros resultados obtenidos

Si se compara la metodología usada para la modelación con otras empleadas en otras literaturas revisadas se tienen los siguientes resultados:

Empleando datos de la literatura revisada, según Cabrera [12] y Contreras [13], se tiene la composición química aproximada del Algarrobo (Tabla 2):

Tabla 2. Características fisicoquímicas del Algarrobo. Fuente: Elaboración propia.

Característica	Algarrobo [12]	Algarrobo [13]
DPP efectivo (mm)	1,63	
C	48%	46,62%
H	6,23%	5,73%
N	0,49%	0,20%
O	43,56%	32,52%
S	0,05%	0,08%
c_T	1,20	2,82
ρ (g.m.L ⁻¹)	0,539	
Humedad (%)	10,8	12,03

La comparación de la composición del gas producto resulta para $r=R/2=4,125$ según lo mostrado en la Figura 6.

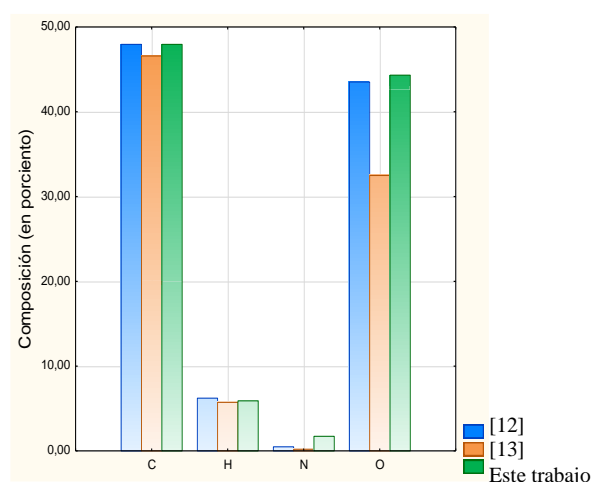


Figura 6. Composición del gas producto según otras literaturas y este trabajo. Fuente: Elaboración propia.

Se tiene una desviación igual a 2,63 y 0,41 con [12] y [13] respectivamente. En el segundo caso el porcentaje de humedad fue el mismo y de ahí que la desviación típica fuera menor. O sea, que la semejanza indica que

realmente el modelo resulta más preciso respecto a otros analizados y que no utilizaron esta metodología.

Al comparar con el resultado obtenido por Acosta en [10], quien hace uso también del método numérico de diferencias finitas para obtener sus logros utilizando este gasificador para datos reales con residuos de madera se tiene mediante una técnica estadística de comparación de medias que la desviación standart fue de 0.63 para el producto final, indicando que la diferencia entre el resultado real y el obtenido a través del modelo no es significativa.

4. Conclusiones

Para la modelación del proceso de gasificación en este trabajo se empleó la metodología de los volúmenes de control y los elementos finitos. Teniendo en cuenta una serie de consideraciones de la gasificación, pudo llegarse a una forma discretizada de las ecuaciones diferenciales generando la solución mediante la metodología de diferencias finitas ofreciendo una mayor representación de la descripción de los fenómenos físicos y químicos involucrados en el proceso.

Este modelo permitió analizar la dinámica del proceso de gasificación, incluyendo la evolución temporal y espacial de las variables involucradas, determinar los perfiles de temperatura y la composición del gas generado a través de la evaluación termodinámica y el control de las variables del proceso sin tener que utilizar un analizador de gases.

Al comparar con las metodologías empleadas en estudios previos pudo constatar que los resultados son más certeros al validarse con datos experimentales pues se llega a un mejor resultado y más cercano a lo que en realidad ocurre. Esto evidencia la precisión del modelo a pesar de que requiere para su implementación de un mayor conocimiento técnico para desarrollar la discretización espacial y temporal.

5. Agradecimientos

Este trabajo fue realizado gracias a los datos ofrecidos por los laboratorios de la Universidad Hasselt de Bélgica en colaboración con el Centro de Estudios de Energías Renovables de la Universidad de Oriente y la ejecución se realizó gracias al Proyecto CAPES-MES, en especial al grupo de investigación que coordina el Profesor Dr. José Luz Silveira, de la Facultad de Ingeniería de la Universidad Estadual Paulista en Brasil.

6. Referencias

[1] J. Pérez, D. Borge y A. John, «Biomass gasification process: theoretical and experimental studies a

review,» *Rev. Fac. Ing. Univ. Antioquia*, n° 52, pp. 95-107, Marzo, 2010.

[2] S. Pandey, B. Baral, S. Karki y Aadar, « Prediction of Syngas Composition from Biomass Gasification using Thermodynamics Equilibrium Model,» *Rentech Symposium Compendium*, vol. 3, September 2013.

[3] Q. Chen, R. Yang, B. Zhao, Y. Li, S. Wang y H. Wu , «Investigation of heat of biomass pyrolysis and secondary reactions by simultaneous thermogravimetry and differential scanning calorimetry,» *Fuel*, n° 134, p. 467-476, 2014.

[4] A. Caballero-Chavarría, M. P. Rojas-Soto, M. M. Villalobos-Barquero y A. Davis-Barquero, «Simulación de gasificación de biomasa enriquecida con hidrocarburos,» *Tecnología en marcha*, vol. 32, pp. 60-70, Octubre-Diciembre 2019.

[5] E. R. Gutiérrez-Gualotuña, J. A. Soria -Amancha, P. M. Tafur-Escanta y N. Rodríguez-Trujillo, «Modelos matemáticos de los parámetros energéticos de desempeño de gasificadores tipo downdraft mediante técnicas de regresión,» *Científica*, vol. 23, n° 1665-0654, pp. 69-81, enero-junio 2019.

[6] L. I. Cristian, «Diseño del proceso de gasificación para los combustibles sólidos recuperados procedentes de una planta de tratamiento mecánico biológico,» p. 92, 2019.

[7] M. R. Muñoz, «Evaluación de un proceso factible para la producción de syngas,» *Memoria Presentación de resultados de investigación Zafra*, pp. 390-398, 2019 – 2020.

[8] J. d. L. Briseño Escalante, C. Felipe Mendoza , F. López Sánchez y E. Lima Muñoz , «Valorización energética de los residuos sólidos mediante la tecnología de gasificación por plasma,» *Revista Tendencias en Docencia e Investigación en Química*, vol. 6, n° 191, p. 6, 2020.

[9] P. Vicente, F. Albesa y M. Condorí, «Estudio Experimental de Gasificación en un gasificador Downdraft prototipo,» *ASADES*, vol. 4, pp. 06.151-06.161, 2016.

[10] P. A. Acosta Camargo y L. A. Chipatecua Hernández, «Modelación del Proceso de Gasificación de biomasa en un reactor de lecho fijo con calentamiento indirecto,» *Fundación Universidad de América*, vol. BOGOTÁ D.C, 2018.

[11] E. D’Espaux Shelton, J. R. Copa Rey y J. Luz Silveira, «Characterization of the Syngas obtained from Carob Tree Wood to Run an Internal Combustion

Engine,» *XI Latin-American Congress on Electricity Generation and Transmission*, Sao Paulo, Brasil, 2015.

[12] G. Cabrera, S. Mandriñan y D. Muñoz, «Evaluation the rates of Energy Conversion in the production of biomass fuel gas», *Biotecnología en el Sector Agropecuario y Agroindustrial*, n° 2, pp. 118 - 125, 2013.

[13] J. R. Contreras O, Eficiencia del carbón activado de la *Hymenaea courbaril* para la adsorción de níquel en aguas sintéticas a través de un sistema continuo., Maracaibo, Venezuela: Trabajo de Grado MAGÍSTER SCIENTIARUM en ciencias ambientales, Marzo, 2010.