Modelación de la gasificación de biomasa en un reactor de lecho fijo

Harold Jhair García Patiño
Código: 291499

Tesis presentada como requisito parcial para optar al título de
Magíster en Ingeniería - Ingeniería Mecánica

Dirigido por
Sonia Lucia Rincón Prat

Universidad Nacional de Colombia
Facultad de Ingeniería
Bogotá, D.C., Colombia
2011

Tesis aprobada por la Facultad de Ingeniería en cumplimiento de los requisitos exigidos para otorgar el título de **Magíster en Ingeniería - Ingeniería Mecánica**

Sonia Lucia Rincón Prat
Directora

Wolfgang Klose
Jurado

Carlos Humberto Galeano Ureña
Jurado

Julio César Vargas Sáenz
Jurado

Universidad Nacional de Colombia
Bogotá, D.C., 2011

Agradecimientos

A mis padres por sus consejos y voces de aliento durante el desarrollo de este trabajo.

A la Ing. Sonia Rincón y el Ing. Alexander Gómez del Departamento de Ingeniería Mecánica y Mecatrónica de la Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá, por su apoyo, confianza, asesoría y consejos para el desarrollo de este trabajo.

Al Instituto de Ingeniería Térmica de la Universidad de Kassel, Alemania, por su colaboración, asesoría y apoyo.

Resumen

Se realiza la modelación matemática de un reactor de lecho fijo de calentamiento indirecto que tiene en cuenta los procesos de transferencia de calor y de masa y las reacciones químicas que ocurren durante la transformación termoquímica de biomasa a través de los procesos de pirólisis y gasificación. Mediante este modelo se puede predecir la composición de los gases obtenidos y la distribución de temperaturas en el interior del reactor, en cualquier instante.

El modelo se desarrolla a partir del planteamiento de las ecuaciones de balance de energía y de masa para un sistema heterogéneo compuesto por una fase sólida, correspondiente a la biomasa y el carbonizado y una fase gaseosa, que corresponde al agente de gasificación y la fase volátil generada. No se consideran gradientes ni de concentración ni de temperatura al interior de las partículas que componen la fase sólida.

Para la solución del modelo se desarrolla un programa computacional en el lenguaje C++. La discretización de las ecuaciones planteadas se realiza mediante el método de volúmenes finitos. Los resultados obtenidos con el modelo se comparan con resultados experimentales determinados por otros autores en reactores de prueba, obteniéndose resultados aceptables.

Palabras clave: Modelación matemática, biomasa, pirólisis, gasificación, reactor de lecho fijo.

Abstract

A mathematical modeling of a fixed bed reactor with indirect heating is performed taking into account the heat and mass transfer processes and the chemical reactions that occur during the thermochemical processing of biomass through pyrolysis and gasification. By means of this model can be predicted the gas composition obtained and the temperature distribution inside the reactor at any time.

The model is developed from the approach of the mass and energy balances to a heterogeneous system composed of a solid phase, corresponding to the biomass and char, and a fluid phase, corresponding to the gasification agent and the volatile phase generated. Concentration or temperature gradients within the solid-phase particles are not considered.

A computer program in C++ is developed to solve the model. The discretization of the balance equations is performed through the finite volume method. The results obtained with the model fit very well with experimental data determined by other authors in test reactors.

Keywords: Mathematical modeling, biomass, pyrolysis, gasification, fixed bed reactor.

Contenido

Agradecimientos v

Resumen vi

Lista de símbolos x

Lista de tablas xiv

Lista de figuras xvi

1. Introducción 1

2. Planteamiento del problema 4
2.1. Zonas No Interconectadas en Colombia 4
2.2. Biomasa en Colombia 5
2.2.1. Bosques naturales y plantaciones forestales 6
2.2.2. Especies agrícolas 6
2.3. Pirólisis y gasificación 9
2.4. Equipos de gasificación 11
2.5. Modelación matemática de un gasificador de lecho fijo 15

3. Modelación matemática de la gasificación en reactores de lecho fijo 19
3.1. Procesos de transferencia de calor y de masa 19
3.2. Ecuaciones de balance 20
3.2.1. Fase gaseosa 21
3.2.2. Fase sólida 24

4. Propiedades físicas y coeficientes de transferencia de calor y de masa 27
4.1. Fase gaseosa 27
4.1.1. Viscosidad dinámica 27
4.1.2. Conductividad térmica 31
4.1.3. Calor específico molar 33
4.1.4. Coeficientes de difusión y dispersión 35
4.2. Fase sólida 37
4.2.1. Conductividad térmica efectiva 38
4.2.2. Calor específico molar 38

4.2.3. Determinación de la velocidad de la fase sólida y encogimiento de las partículas . . . 39
4.2.4. Densidad y porosidad de la fase sólida . . . 40
4.3. Transferencia de calor y de masa . . . 41
4.3.1. Coeficiente de transferencia de calor entre la fase sólida y la fase gaseosa 41
4.3.2. Coeficiente de transferencia de masa entre la fase sólida y la fase gaseosa 43
4.3.3. Coeficiente de transferencia de calor entre la pared y la fase gaseosa . 43
4.3.4. Coeficiente de transferencia de calor entre la pared y la fase sólida . . 43
4.3.5. Coeficiente de transferencia de calor por radiación entre la pared y la fase sólida . . . 44
4.4. Perfiles de porosidad de la cama y de velocidad de gases dentro de ella . . . 44
4.4.1. Perfil de porosidad de la cama . . . 44
4.4.2. Perfil de velocidad de la fase gaseosa . . . 45
4.4.3. Determinación de la velocidad de la fase gaseosa . . . 47

5. Procesos de transformación de la biomasa 48
5.1. Proceso de secado . . . 48
5.1.1. Secado de biomasa . . . 48
5.1.2. Condensación de vapor de agua . . . 51
5.2. Proceso de pirólisis . . . 53
5.2.1. Reacciones primarias . . . 53
5.2.2. Reacciones secundarias . . . 55
5.2.3. Entalpías de reacción . . . 56
5.3. Proceso de gasificación . . . 56
5.3.1. Reacciones heterogéneas sólido - gas . . . 56
5.3.2. Reacciones homogéneas en la fase gaseosa . . . 58

6. Solución del modelo matemático 59
6.1. Solución del sistema de ecuaciones algebraicas discretizadas . . . 62
6.2. Desarrollo del programa . . . 64

7. Resultados del modelo 66
7.1. Muestra de resultados del modelo . . . 67
7.2. Comparación de resultados del modelo con mediciones experimentales . . . 84

8. Conclusiones y perspectivas 88

A. Anexo: Discretización de las ecuaciones de balance 89
1.1. Discretización de las ecuaciones de balance de energía . . . 89
1.1.1. Nodos superiores ($\mathbf{n_P = 0,\ 0 \leq m_P \leq m}$) . . . 89
1.1.2. Nodos internos ($\mathbf{1 \leq n_P < n,\ 1 \leq m_P < m}$) . . . 89

1.1.3. Nodos internos - Frontera externa ($\mathbf{1} \leq \mathbf{n_P} < \mathbf{n},\ \mathbf{m_p} = \mathbf{m}$) 95
1.1.4. Nodos internos centrales ($\mathbf{1} \leq \mathbf{n_P} < \mathbf{n},\ \mathbf{m_p} = \mathbf{0}$) 96
1.1.5. Nodos internos inferiores ($\mathbf{n_P} = \mathbf{n},\ \mathbf{1} \leq \mathbf{m_p} \leq \mathbf{m}$) 98
1.1.6. Nodo inferior - Frontera externa ($\mathbf{n_p} = \mathbf{n},\ \mathbf{m_p} = \mathbf{m}$) 99
1.1.7. Nodo inferior central ($\mathbf{n_p} = \mathbf{n},\ \mathbf{m_p} = \mathbf{0}$) 101
1.2. Discretización de las ecuaciones de balance de masa 102

Bibliografía **103**

Lista de símbolos

Símbolos con letras latinas

Símbolo	Término	Unidad SI	Definición
A	Área	m^2	$\int\int dxdy$
c	Concentración molar	$\frac{\mathrm{mol}}{\mathrm{m}^3}$	$\frac{n}{V}$
C	Coeficiente	1	Ec. 4-58
C_p	Calor específico	$\frac{\mathrm{J}}{\mathrm{kgK}}$	$\frac{1}{m}\left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_{P,m}$
$C_{p,m}$	Calor específico molar	$\frac{\mathrm{J}}{\mathrm{molK}}$	$C_p M$
d_p	Diámetro de partícula	m	
D_r	Diámetro del reactor	m	
D	Coeficiente de difusión	$\frac{\mathrm{m}^2}{\mathrm{seg}}$	
E_a	Energía de activación	$\frac{\mathrm{J}}{\mathrm{mol}}$	
h	Coeficiente convectivo de transferencia de calor	$\frac{\mathrm{W}}{\mathrm{m}^2\mathrm{K}}$	$\frac{\varphi_{th}}{\Delta T}$
$h^{\circ}_{f,m}$	Entalpía de formación molar	$\frac{\mathrm{J}}{\mathrm{mol}}$	
$\Delta h_{r,m}$	Entalpía de reacción estándar	$\frac{\mathrm{J}}{\mathrm{mol}}$	
h_{fg}	Entalpía de vaporización específica	$\frac{\mathrm{J}}{\mathrm{kg}}$	$h_g - h_f$
k_0	Factor preexponencial	$\frac{1}{\mathrm{s}}$	
L	Longitud	m	DF
m	Masa	kg	DF
n	Cantidad de materia	mol	DF
n	Coeficiente	1	Ec. 4-59
n	Orden de reacción	1	
M	Masa molar	kg/kmol	$\frac{m_i}{n_i}$
P	Presión	Pa	$\frac{\vec{F}\cdot\vec{n}}{A}$
r	Coordenada radial	m	
r	Velocidad de reacción	$\frac{\mathrm{mol}}{\mathrm{m}^3 s}$	$\frac{1}{V}\left(\frac{dn_i}{dt}\right)$
res	Residuo	1	
R^*	Coordenada radial adimensional	1	$\frac{r}{r_{max}}$
R_u	Constante universal de los gases	J/molK	
S	Término fuente generalizado	-	Anexo A
t	Tiempo	s	DF
T	Temperatura	K	DF

Símbolo	Término	Unidad SI	Definición
V	Volumen	m^3	$\int dr^3$
w	Velocidad	$\frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}}$	$(\frac{dr}{dt}, \frac{dv}{dt}, \frac{dz}{dt})$
w_0	Velocidad en tubo vacío	$\frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}}$	$\varepsilon_b w$
x_i	Fracción molar	1	$\frac{n_\mathrm{i}}{n}$
y_i	Fracción másica	1	$\frac{m_\mathrm{i}}{m}$
z	Coordenada axial	m	

Símbolos con letras griegas

Símbolo	Término	Unidad SI	Definición
α	Difusividad térmica	$\frac{\mathrm{m}^2}{\mathrm{s}}$	$\frac{\lambda}{\rho C_p}$
β	Coeficiente de transferencia de masa	$\frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}}$	$\frac{\varphi_m}{\Delta c}$
ϵ	Emisividad	1	
ε_b	Porosidad de la cama	1	$\frac{V^g}{V_{total}}$
ε_p	Porosidad de la partícula	1	$\frac{V_p^g}{V_p}$
η	Viscosidad dinámica	$\frac{\mathrm{kg}}{\mathrm{ms}}$	
κ	Velocidad de calentamiento	$\frac{\mathrm{K}}{\mathrm{s}}$	$\frac{dT}{dt}$
ν	Coeficiente estequiométrico	1	
φ_{th}	Flujo de calor	$\frac{\mathrm{W}}{\mathrm{m}^2}$	
ρ	Densidad	$\frac{\mathrm{kg}}{\mathrm{m}^3}$	$\frac{m}{V}$
Θ	Temperatura adimensional	1	$\frac{T}{T_W}$
σ	Constante de Boltzmann	$\frac{\mathrm{J}}{\mathrm{K}}$	
λ	Conductividad térmica	$\frac{\mathrm{W}}{\mathrm{mK}}$	
Φ_V	Flujo volumétrico	$\frac{\mathrm{m}^3}{\mathrm{s}}$	$\frac{\Delta V}{\Delta t}$

Subíndices

Subíndice	Término
ag	Agente de gasificación
alq	Alquitranes
amb	Relativo a las condiciones ambientales
atm	Relativo a las condiciones atmosféricas
BM	Biomasa
ax	Axial

Subíndice	Término
c	Relativo al punto crítico
cal	Calentamiento
e	Valor efectivo
esp	Específico
eq	Equivalente
evap	Evaporación
G	Fase gaseosa
i	Contador de las especies químicas
in	A la entrada
k	Contador para las reacciones químicas
m	Molar
m	Contador para los nodos discretizados radiales
max	Máximo
n	Contador para los nodos discretizados axiales
p	Partícula
pir	Pirolizado
r	Radial
rad	Radiación
sup	Superficial
th	Térmico
tot	Total
v	Relativo al volumen
W	Pared
0	Estado de referencia, valor inicial

Superíndices

Superíndice	Término
j	Contador para la discretización en el tiempo
g	Fase gaseosa
s	Fase sólida

Números adimensionales

$Gr = \frac{g\beta(T_s - T_\infty)L^3}{\nu^2}$	Número de Grashof
$Nu = \frac{hL}{k}$	Número de Nusselt
$Pe = \frac{wL}{\alpha}$	Número de Péclet
$Pr = \frac{\nu}{\alpha}$	Número de Prandtl
$Re = \frac{wL}{\nu}$	Número de Reynolds
$Re_{\varepsilon_b} = \frac{\omega_0 L}{\nu}$	Número de Reynolds
$Sc = \frac{\nu}{D}$	Número de Schmidt
$Sh = \frac{\beta L}{D}$	Número de Sherwood

Abreviaturas

Abreviatura	**Término**
$T.C.$	Transferencia de calor
$T.M.$	Transferencia de masa

Lista de Tablas

2-1. Area sembrada, producción y productos energéticos de cultivos de interés [34] 7
2-2. Departamentos con cultivos de palma de aceite (Fuente: Fedepalma) 9

4-1. Propiedades para determinar la viscosidad dinámica de gases de interés a 1 bar 30
4-2. Coeficientes para determinar la conductividad térmica de gases de interés a 1 bar 32
4-3. Coeficientes para determinar el calor específico molar de gas ideal de gases de interés 34
4-4. Densidad y porosidad de la madera de haya y su carbonizado 41

5-1. Cinéticas de reacción formales para la pirólisis de madera de haya [28] 54

7-1. Comparación entre las composiciones libres de agua de la fase gaseosa medidas experimentalmente [16, 12] y las obtenidos mediante el modelo 86

Lista de Figuras

2-1. Zonas no Interconectadas en Colombia [7] 4
2-2. Fuentes de biomasa [33] 5
2-3. Procesos para la transformación de la biomasa con fines energéticos 10
2-4. Esquema de los diferentes tipos de gasificadores de lecho fijo [23] 13
2-5. Esquema del sistema de generación de energía eléctrica 15
2-6. Tipos de modelos [29] 16

3-1. Esquema general de un reactor de lecho fijo 19
3-2. Procesos de transferencia de calor y de masa al interior de un reactor de lecho fijo 20
3-3. Sistema de coordenadas para el planteamiento de las ecuaciones de balance . 21

4-1. Viscosidades dinámicas del CO y el H_2 en función de la temperatura, obtenidas mediante diferentes planteamientos 28
4-2. Conductividad térmica del CO_2 en función de la temperatura, obtenidas mediante diferentes planteamientos 31
4-3. Calor específico molar del CO_2 en función de la temperatura, obtenidas mediante diferentes planteamientos 33
4-4. Modelamiento del movimiento de la cama en la dirección axial 40
4-5. Perfil de porosidad ε_b en función del radio adimensional 45
4-6. Perfil de velocidad del gas ω^g para diferentes números de Reynolds en función del radio 46

5-1. Modelo de secado de biomasa 49
5-2. Fracciones de masa durante la pirólisis para cada una de las especies, con $\kappa = 5$ K/min 55
5-3. Pérdida de masa del carbonizado de madera de haya a 850 °C con 70 % H_2O y 70 % CO_2 57

6-1. Esquema general del modelo matemático desarrollado 59
6-2. Volumen de control para nodos internos 60
6-3. Estimaciones obtenidas con diferentes esquemas en función de Pe [24] 61
6-4. Esquema simplificado del programa desarrollado 64

7-1. Gasificador de lecho fijo en el que desarrollaron pruebas experimentales y perfil de temperatura de la pared del mismo cuando se alcanza el estado estacionario[12] 66

7-2. Composición y temperatura media radial del gas producido y grado de conversión de la fase sólida a la salida del reactor en función del tiempo 68
7-3. Composición y temperatura media radial del gas producido y grado de conversión de la fase sólida en función de la longitud para $t = 8\,\mathrm{h}$ 69
7-4. Distribución de temperatura de la fase sólida después de $t = 8\,\mathrm{h}$ 70
7-5. Distribución de temperatura de la fase gaseosa después de $t = 8\,\mathrm{h}$ 71
7-6. Distribución del grado de conversión de las partículas después de $t = 8\,\mathrm{h}$ . . 71
7-7. Distribución del diámetro de las partículas después de $t = 8\,\mathrm{h}$ 72
7-8. Distribución de la porosidad de la fase sólida después de $t = 8\,\mathrm{h}$ 73
7-9. Distribución de la densidad de la fase sólida después de $t = 8\,\mathrm{h}$ 74
7-10.Distribución de la velocidad de la fase sólida después de $t = 8\,\mathrm{h}$ 75
7-11.Distribución de la velocidad de la fase gaseosa después de $t = 8\,\mathrm{h}$ 75
7-12.Composición y temperatura media radial del gas producido y grado de conversión de la fase sólida a la salida del reactor en función del tiempo 76
7-13.Composición y temperatura media radial del gas producido y grado de conversión de la fase sólida en función de la longitud para $t = 8\,\mathrm{h}$ 77
7-14.Distribución de temperatura de las fases sólida y gaseosa después de $t = 8\,\mathrm{h}$. 78
7-15.Distribución del grado de conversión de las partículas después de $t = 8\,\mathrm{h}$ . . 79
7-16.Distribución del diámetro de las partículas después de $t = 8\,\mathrm{h}$ 80
7-17.Distribución de la porosidad de la fase sólida después de $t = 8\,\mathrm{h}$ 80
7-18.Distribución de la densidad de la fase sólida después de $t = 8\,\mathrm{h}$ 81
7-19.Distribución de la velocidad de la fase sólida después de $t = 8\,\mathrm{h}$ 81
7-20.Distribución de la velocidad de la fase gaseosa después de $t = 8\,\mathrm{h}$ 82
7-21.Composición y temperatura media radial del gas producido y grado de conversión de la fase sólida a la salida del reactor en función del tiempo para $T_{W,\,max} = 1275\,\mathrm{K}$ 83
7-22.Composición y temperatura media radial del gas producido y grado de conversión de la fase sólida en función de la longitud para $t = 8\,\mathrm{h}$ y $T_{W,\,max} = 1275\,\mathrm{K}$ 83
7-23.Comparación entre la distribución axial de temperaturas calculada y la medida experimentalmente para el centro del reactor 84
7-24.Comparación entre la distribución radial de temperaturas calculada y la medida experimentalmente 85

A-1. Volúmenes de control - Nodos superiores 89
A-2. Volúmenes de control - Nodos internos 90
A-3. Volúmenes de control - Nodos internos, Frontera externa 95
A-4. Volúmenes de control - Nodos internos centrales 97
A-5. Volúmenes de control - Nodos internos inferiores 98
A-6. Volúmenes de control - Nodo inferior, Frontera externa 99
A-7. Volúmenes de control - Nodo inferior central 101

1. Introducción

Uno de los grandes problemas de la sociedad actual es la alta dependencia energética de los combustibles fósiles como el petróleo, el carbón y el gas natural. Los combustibles fósiles son fuentes no renovables de energía, que se encuentran en la naturaleza en una cantidad grande, pero limitada y no existe un sistema de producción a corto plazo que permita recuperar el combustible consumido. Un aspecto adicional que genera gran preocupación son las emisiones que resultan del proceso de combustión usado para su aprovechamiento energético. Dentro de éstas se encuentran las emisiones de dióxido de carbono, consideradas una de las principales causantes del efecto invernadero, y las emisiones de gases contaminantes como el monóxido de carbono, los óxidos de nitrógeno y los compuestos azufrados. Estos factores han generado diversos conflictos políticos y trastornos económicos y ambientales, que han impulsado en los últimos años a la comunidad mundial a invertir en la investigación, desarrollo y aplicación de tecnologías alternativas para la generación de energía.

En la actualidad se busca aumentar la participación de las energías alternativas y renovables en la producción energética mundial, para suplir una demanda en constante aumento causada por la alta industrialización de las ciudades y el mejoramiento de la calidad de vida de la población en general. Dentro de las principales ventajas del uso de energías renovables se encuentra que sus emisiones netas de dióxido de carbono son cero (no hay aumento del CO_2 atmosférico) y que su distribución territorial es menos concentrada, lo que permite mantener una autonomía energética en los países. Dentro de las energías renovables se encuentran la energía solar, eólica, de la biomasa, hidráulica, de los océanos y geotérmica. De todas las energías renovables, la biomasa es la que mejor se aprovecha en el mundo, y representa aproximadamente el 11 % del consumo energético mundial [9, 18]. Dentro de este 11 %, el 4 % corresponde a usos tecnificados y el 7 % a usos tradicionales como las estufas de leña [15].

La biomasa se refiere al conjunto de materia orgánica renovable de origen vegetal, animal o procedente de la transformación natural o artificial de la misma [34, 9, 18]. Ésta se puede clasificar en biomasa natural y biomasa residual. La biomasa, como fuente de energía, procede de manera indirecta del sol y puede ser considerada una energía renovable siempre que se sigan unos parámetros ambientales adecuados en su uso y explotación, como el reemplazo de las biomasas empleadas con fines energéticos con la siembra de nuevas plantaciones. La biomasa puede ser transformada en energía térmica, eléctrica o en combustibles de origen vegetal. La quema de dichos combustibles y la quema directa de biomasa liberan CO_2 al ambiente, efecto que se puede contrarrestar con la siembra de nuevos bosques o plantas, que retiran este gas de la atmósfera, haciendo del proceso un ciclo cerrado en el cual no se aumenta el CO_2 atmosférico.

En Colombia existen estudios preliminares sobre la biomasa residual generada y las biomasas naturales [34]. Se destacan por la disponibilidad para su aprovechamiento energético el bagazo de caña, la cascarilla de arroz, la cascarilla de café, el cuesco y la fibra de palma de aceite, residuos de la industria maderera y residuos de cosechas. Una parte de estos residuos es empleada con fines energéticos dentro de las mismas plantaciones, o para industrias como la papelera, la de aglomerados, alimentos para ganado, etc., lo que dificulta realizar un estimativo real de la cantidad de biomasa disponible en el país para la producción de energía. Otra parte no encuentra ningún uso adicional generando problemas de almacenamiento en las plantas productoras.

La generación de energía eléctrica a partir de biomasa puede considerarse como una solución económica y ambientalmente viable para las Zonas No Interconectadas (ZNI) del país, que ocupan el 66 % del territorio colombiano. La generación energética proveniente de fuentes alternas como la biomasa, permite eliminar los costos que acarrea el transporte de combustibles fósiles a estas zonas, que en muchos casos son de difícil acceso. La conexión de estas zonas al sistema eléctrico nacional presenta problemas como los altos niveles de pérdidas por deficiencias en la redes y en los esquemas de comercialización, bajos niveles de facturación y recaudo en las zonas de difícil acceso, baja demanda causada por la precaria actividad industrial y comercial, puntos distantes de atención y pago, etc. [7]. En las ZNI existe abundante biomasa, que puede ser utilizada de manera inmediata para la generación de energía eléctrica, mediante la aplicación de alguna de las tecnologías existentes.

El aprovechamiento energético de la biomasa también puede considerarse una opción para aquellas zonas en las que existen abundancia de estos recursos, como en las plantas procesadoras de alimentos y maderas en la que la biomasa residual producida puede emplearse con fines de generación eléctrica, logrando una mejora en la productividad de éstas.

El aprovechamiento energético de la biomasa se puede realizar mediante procesos bioquímicos (fermentación alcohólica, digestión anaeróbica y digestión aeróbica), termoquímicos (pirólisis, gasificación, licuefacción y combustión) y fisicoquímicos (extracción y transesterificación). Estos procesos permiten la generación de combustibles sólidos, líquidos y gaseosos, ya sea para uso in-situ o para almacenamiento, transporte y aplicaciones posteriores [19, 21]. Las características de la biomasa residual que se encuentra en el país, hacen de los procesos termoquímicos una alternativa viable para su aprovechamiento energético. Adicionalmente, estos procesos tienen la ventaja de que su implementación no compite con el cultivo de productos alimenticios como ocurre en procesos como la fermentación alcohólica para la producción de bioetanol o la transesterificación para la producción de biodiesel. En este trabajo se estudiará el proceso global de la gasificación de biomasa en un reactor de lecho fijo, incluyendo las etapas previas de secado y de pirólisis.

El desarrollo de nuevas tecnologías incluye el análisis de los procesos a escala de laboratorio y la construcción de equipos a nivel de planta piloto, hasta llegar a su implementación a nivel industrial. Estos desarrollos siempre van acompañados del planteamiento de modelos matemáticos que describen los fenómenos que se llevan a cabo. Éstos modelos se utilizan en el escalamiento de equipos experimentales a equipos de mayor tamaño y en la optimización de los parámetros de operación. Los modelos matemáticos ayudan a comprender los fenómenos físicos que se presentan en los procesos, permitiendo el desarrollo de las tecnologías y la propuesta de ideas innovadoras para la solución de problemas. El desconocimiento de los fenómenos presentes en los procesos, limita el desarrollo tecnológico a una copia o adaptación de tecnologías existentes, lo que resulta poco práctico en el caso de tecnologías en desarrollo como el aprovechamiento energético de biomasa mediante el proceso de gasificación. El uso de modelos matemáticos permite estudiar la influencia de los parámetros que intervienen en un proceso de manera rápida y práctica y la evolución de las variables de interés en el tiempo.

La pirólisis y la gasificación de biomasa son fenómenos complejos en los que se presenta transferencia de calor y de masa de manera simultánea. El desarrollo de un amplio programa de pruebas experimentales que permitan evaluar la influencia de cada uno de los parámetros que intervienen en el proceso, sobre los resultados obtenidos, es poco práctico y requiere de una gran disponibilidad de tiempo, recursos, personal calificado y dinero. Es fundamental determinar las condiciones óptimas de operación del equipo, que permitan obtener gases combustibles con un elevado poder calorífico y buenas características de limpieza (bajos contenidos de alquitranes). Un gas con alto contenido de alquitranes y aceites necesitará un tratamiento previo de limpieza riguroso, antes de ser usado en aplicaciones energéticas como su oxidación en motores de combustión interna. Así mismo un gas con un elevado poder calorífico, estará en capacidad de producir una mayor cantidad de energía por combustión. Esto se traduce en un aumento en la potencia obtenida con la misma cantidad de combustible.

El modelo matemático que se plantea en el presente trabajo se fundamenta en el planteamiento de las ecuaciones de balance de masa, de energía y de especies para un sistema heterogéneo de dos fases (fase sólida y fase gaseosa), en el que no se tienen en cuenta gradientes ni de concentración ni de temperatura en el interior de la fase sólida. Las cinéticas de las reacciones que ocurren dentro del equipo se extraen de estudios experimentales previos realizados por otros autores. El modelo tiene en cuenta la disminución del tamaño efectivo de las partículas a medida que ocurren los procesos de pirólisis y gasificación, así como el movimiento de la cama de material a través del reactor.

2. Planteamiento del problema

2.1. Zonas No Interconectadas en Colombia

Las Zonas No Interconectadas (ZNI) se refieren a aquellas zonas del país que no se encuentran conectadas al Sistema Eléctrico Nacional, las cuales ocupan el 66 % del territorio colombiano [7]. Dentro de estas zonas el 89 % de la población es de carácter rural, con una densidad de población de 3,05 habitantes por km^2. Allí habitan 1.831.822 personas, de las cuales solo el 34 % tienen servicio de energía eléctrica. La Figura **2-1** muestra la distribución de las ZNI en el territorio nacional.

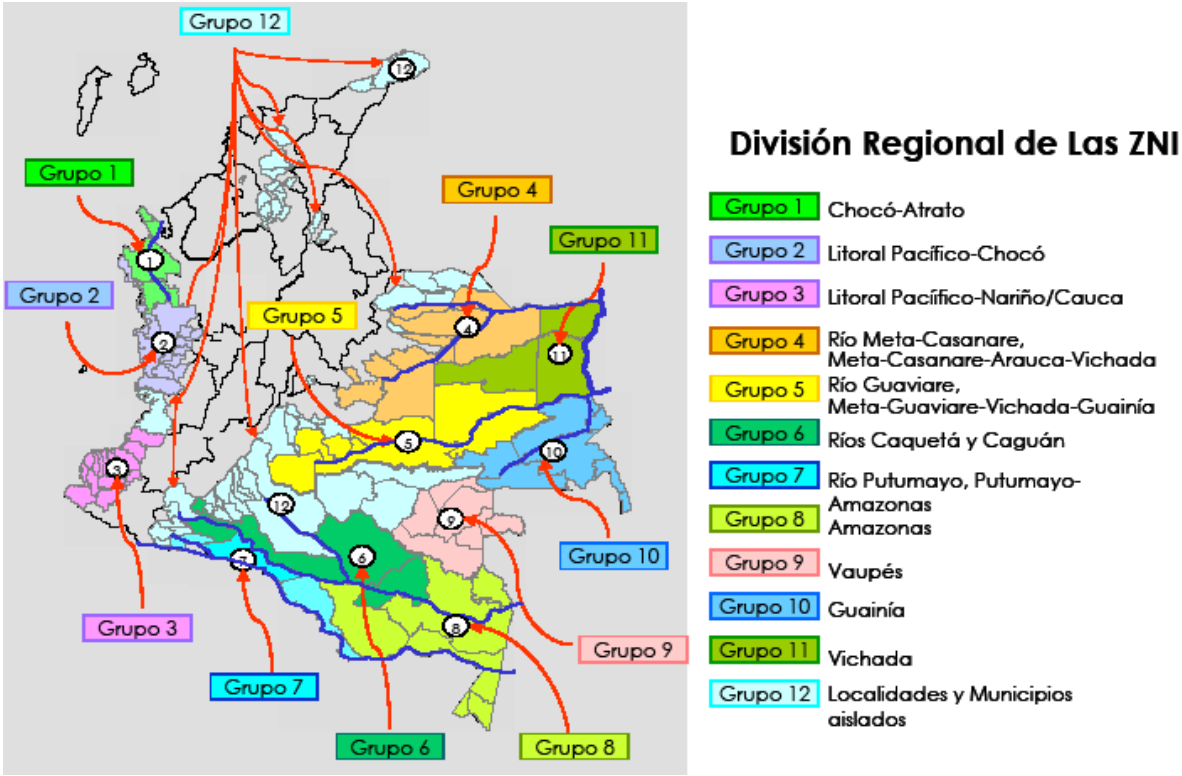


Figura 2-1.: Zonas no Interconectadas en Colombia [7]

Dentro de la problemática general que conlleva la instalación y prestación del servicio eléctrico para estas zonas se encuentran los altos niveles de pérdidas por deficiencias en las redes y en los esquemas de comercialización, bajos niveles de facturación y recaudo en las zonas de difícil acceso, baja demanda causada por la precaria actividad industrial y comercial, puntos distantes de atención y pago, etc. [7]. Una solución a este problema es la generación de energía eléctrica a partir de fuentes alternas, diferentes a los hidrocarburos o el carbón,

debido a los grandes costos requeridos para garantizar el suministro a partir de estas fuentes no renovables.

En la mayoría de las Zonas No Interconectadas existe abundante biomasa, que puede ser utilizada de manera inmediata para la generación de energía eléctrica, con la aplicación de alguna de las tecnologías existentes. El uso de esta fuente renovable puede considerarse como una solución económica y ambientalmente viable para la producción de energía en las ZNI.

2.2. Biomasa en Colombia

La biomasa se refiere al conjunto de materia orgánica renovable de origen vegetal, animal o procedente de la transformación natural o artificial de la misma [34, 9, 18]. La biomasa se puede clasificar en natural (producida en ecosistemas naturales) y residual (generada por cualquier actividad humana, principalmente en procesos agrícolas, industriales, o propios del hombre, como basuras y aguas residuales) (Figura **2-2**).

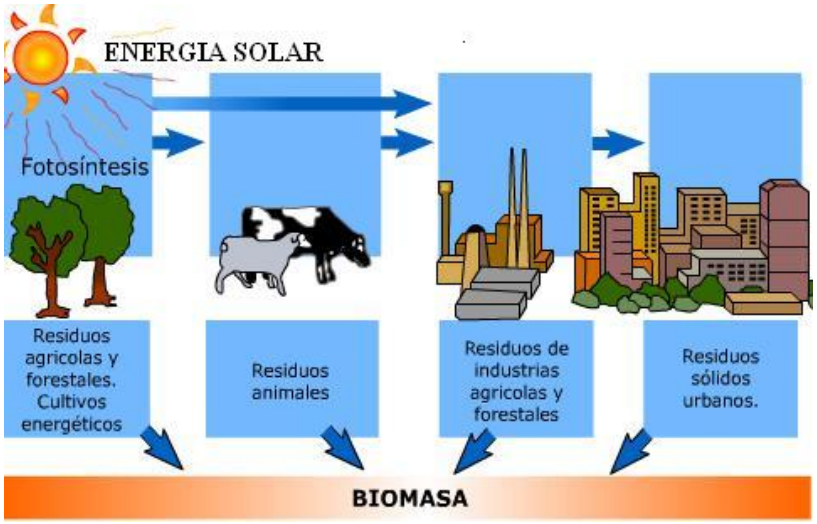


Figura 2-2.: Fuentes de biomasa [33]

En Colombia existen estudios preliminares sobre la biomasa residual generada y las biomasas naturales [34]. Se destacan por la disponibilidad para su aprovechamiento energético el bagazo de caña, la cascarilla de arroz, la cascarilla de café, el cuesco y la fibra de palma de aceite, residuos de la industria maderera y residuos de cosechas. Una parte de estos residuos es empleada para fines energéticos dentro de las mismas instalaciones, o para industrias como la papelera, la de aglomerados, alimentos para ganado, etc., lo que dificulta realizar un estimativo real de la cantidad de biomasa disponible en el país para la producción de energía.

2.2.1. Bosques naturales y plantaciones forestales

La importancia energética de los bosques naturales radica en su capacidad para generar residuos producto de la explotación de maderas comerciales, además de la posibilidad de emplearla directamente en sistemas de generación. Según un estudio realizado por el INDERENA, el país tenía en 1983 una superficie total de 53,1 millones de hectáreas cubiertas de bosque natural, de las cuales 39,1 millones se consideraban bosques comerciales. El 70 % de los bosques naturales se encuentran en la región Amazónica, el 12,6 % en la Andina, el 10,3 % en la Orinoquía, el 6,5 % en la región Pacífica y sólo el 0,6 % en la región Caribe [34]. Las zonas donde se encuentran los bosques naturales coinciden en muchos casos con zonas no interconectadas al Sistema Eléctrico Nacional como se puede observar en la Figura **2-1**.

Según la Unidad de Planeación Minero Energética UPME [34], los resultados de la investigación realizada en 1983 siguen siendo válidas, debido al estancamiento de la economía forestal en el país. Cabe aclarar que no toda el área de bosques se puede considerar como fuente de materia prima, debido a la poca rentabilidad para la explotación de estos recursos en algunas regiones, a que algunas zonas son consideradas como reservas naturales, a la acción negativa de la colonización espontánea y los cultivos ilícitos, entre otras. La industria de la madera en Colombia utiliza en sus procesos únicamente 60 de las 150 especies potencialmente utilizables, entre las que se destacan el roble o flormorado, cedro, anime, caoba, ceiba, acacia amarilla y roja, etc. Los residuos de las diferentes industrias madereras (madera aserrada, pulpa, tableros, etc.) se pueden considerar como una fuente importante de biomasa, que puede ser empleada en la producción de energía para las ZNI. En la literatura se encuentra extensa documentación sobre el uso de maderas con fines energéticos, incluyendo procesos termoquímicos de pirólisis y gasificación.

2.2.2. Especies agrícolas

Para establecer el potencial energético actual proveniente de cultivos o residuos agroindustriales, se deben identificar las especies de interés energético que se cultivan actualmente en Colombia. Tomando como referencia la bibliografía consultada, las experiencias existentes sobre el proceso de gasificación de biomasa y la gran cantidad de cultivos de ciertas especies en Colombia, son de especial interés energético especies como el arroz, el café, la caña de azúcar, la palma africana, el maíz, la yuca, y los residuos producidos por sus industrias como la cascarilla de arroz y de café, el bagazo de caña, la fibra de palma, etc. La Tabla **2-1** muestra el área sembrada, la producción anual y los productos energéticos de interés para cada una de estas especies. El producto energético es la cantidad de producto de interés que se puede obtener por cada tonelada de producto primario procesado o cosechado. (Ej: se obtienen 250 kg de cascarilla de arroz por cada tonelada de arroz producido).

Tabla 2-1.: Area sembrada, producción y productos energéticos de cultivos de interés [34]

Especie	**Área (ha)**	**Producción (Ton/año)**	**Producto energético**	**% Producto energético**
Arroz	85.194,5	1.704.551	Cascarilla de arroz	25
Café	386.019,2	487.726	Cascarilla de café	10
Caña de azúcar	254.309,4	21.897.120	Bagazo de caña	29
			Residuos de cosecha	46
Palma africana	150.000	2.889.472	Cuesco de palma	7
			Fibra de palma	12

Bagazo y residuos de cosecha de caña de azúcar

Los ingenios ubicados en el Cauca y Valle del Cauca producen conjuntamente el 99 % de la caña de azúcar del país. La industria azucarera genera dos productos de interés energético: el bagazo de caña y los residuos de cosecha. La producción de residuos de caña varía entre 46 y 50 % de la producción total de caña. En estos ingenios se produce en promedio, 11,5 millones de toneladas de residuos de cosecha y 7 millones de toneladas de bagazo por año.

Según Asocaña, el 94 % del bagazo producido es utilizado como energético en los mismos ingenios, mientras que el 6 % restante se utiliza para la industria papelera (debido a su alto contenido de celulosa), la industria de aglomerados y como alimento para ganado. Los residuos de cosecha de la caña de azúcar son poco empleados en la actualidad y representan una gran cantidad de biomasa no aprovechada, ya que para su recolección y transporte se debe incurrir en elevados costos que los ingenios no están dispuestos a asumir [34].

Debido a la alta demanda del bagazo de caña para otros usos, a los costos en que se incurren para la recolección y transporte de los residuos de cosecha, a que sus cultivos se encuentran concentrados en una pequeña zona del territorio nacional y al alto contenido de humedad (50 %) y cenizas (11-27 %) del bagazo, no es atractivo utilizar este tipo de biomasa como fuente para la producción de energía eléctrica para las ZNI.

Cascarilla de arroz

Se estima que en Colombia se producen anualmente mas de 400 mil toneladas de cascarilla de arroz. Una parte de la cascarilla producida se comercializa para uso en establos, caballerizas, avicultura y para labores de jardinería. Sin embargo, este mercado no es capaz de consumirla toda e incluso se cree que no consume más del 5 % del total de cascarilla producida. El uso que demanda los mayores volúmenes es el de la semi-quema controlada al aire libre, que garantiza la comercialización de la cascarilla semi-quemada, la cual es usada como sustrato en los cultivos de flores [34].

La cascarilla no siempre se encuentra disponible cerca de los cultivos de arroz, sino en los sitios de procesamiento. En Colombia parte de la producción de arroz de los LLanos y la Costa Atlántica es procesada en el interior, Tolima y Huila, por lo tanto, la mayor cantidad de cascarilla de arroz se encuentra en zonas del país con servicio eléctrico.

Teniendo en cuenta lo mencionado anteriormente, y conociendo que la cascarilla de arroz tiene un alto contenido de cenizas (14-24 %), se descarta este tipo de biomasa para la producción de energía eléctrica para las ZNI. Cabe mencionar como factor adicional que la cascarilla tiene un alto poder abrasivo que dificulta su uso en equipos de gasificación, debido a su elevado contenido de sílice.

Fibra de coco

Para el análisis de la fibra de coco producida en el país no se encontraron industrias procesadoras que almacenen este residuo y permitan su utilización con fines energéticos. Sin embargo, el coco se encuentra en grandes cantidades en la Zona Atlántica del país y es una opción que no se debe descartar, ya que además presenta condiciones similares en cuanto a fluidez y otras características, a las mostradas por la fibra de palma africana para el proceso de gasificación.

Cuesco de palma africana

En Colombia se producen anualmente casi 3 millones de toneladas de racimo de palma africana, de los cuales el aceite representa en promedio el 20 % del peso del racimo. La parte restante es considerada como residuo, conformado por la pulpa, la almendra, el raquis y el cuesco [34].

Por lo general la pulpa y el raquis son consumidos dentro de las mismas plantas extractoras, para producir el vapor que se consume en el proceso. Con la almendra, una vez extraído el aceite se produce palmiste, el cual se utiliza como complemento en la alimentación de ganado y para la fabricación de concentrados para animales [34]. El aceite extraído del palmiste se utiliza en la producción de margarina y jabones, en la industria cosmética, en la industria del aluminio como grasa en los procesos embutición profunda, entre otros. El cuesco, que es la cascara dura que recubre la almendra, no tiene un uso específico; en algunos casos se emplea para quemado directo pero generalmente queda como producto de desecho.

En la Tabla **2-2** se observan los departamentos donde se tienen los principales cultivos de palma africana con su respectiva área cultivada. Debido a la alta disponibilidad de cuesco de palma en las ZNI del país (como se puede concluir al observar la Tabla **2-2**), al moderado contenido de cenizas, a sus buenas condiciones de fluidez y a la alta experiencia y documen-

tación en el trabajo con este tipo de biomasa, el cuesco de palma es una buena alternativa a tener en cuenta junto a la madera y los residuos de las industrias madereras, como fuente energética para la producción de energía eléctrica para las ZNI del país.

Tabla 2-2.: Departamentos con cultivos de palma de aceite (Fuente: Fedepalma)

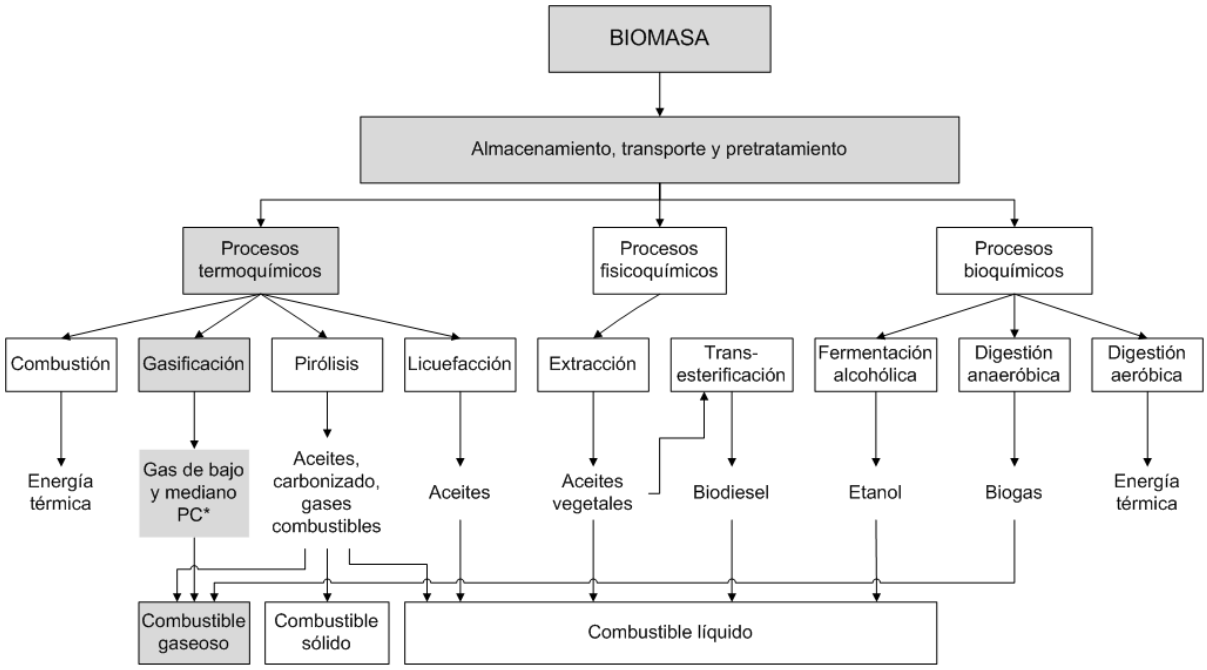
Departamento	Area (ha)	%
Atlántico	279	0,2
Caquetá	435	0,3
Casanare	8.800	5,9
Cesár	27.319	18,2
Cundinamarca	1.826	1,2
La Guajira	73	0,0
Magdalena	24.754	16,5
Meta	41.237	27,5
Nariño	20.996	14,0
Norte de Santander	289	0,2
Santander	23.818	15,9
Valle del Cauca	132	0,1

2.3. Pirólisis y gasificación

El uso energético de la biomasa se puede realizar mediante procesos bioquímicos (fermentación alcohólica, digestión anaeróbica y digestión aeróbica), termoquímicos (pirólisis, gasificación, licuefacción y combustión) y fisicoquímicos (extracción y transesterificación). Estos procesos permiten el aprovechamiento directo o la generación de combustibles sólidos, líquidos y gaseosos, ya sea para uso in-situ o para almacenamiento, transporte y aplicaciones posteriores (Figura **2-3**) [19, 21].

Las características de la biomasa residual que se encuentra en el país hacen de los procesos termoquímicos una alternativa viable para su aprovechamiento energético. Estos procesos tienen la ventaja adicional, de que su implementación no compite con el cultivo de productos alimenticios como ocurre en procesos como la fermentación alcohólica para la producción de bioetanol a partir de caña de azúcar o de maíz o la transesterificación para la producción de biodiesel a partir de aceite comestibles, como el aceite de palma o de soya.

La pirólisis es un proceso previo a la gasificación que consiste en la degradación térmica de un material causada por su calentamiento en ausencia de oxígeno. Se produce a través de una serie compleja de reacciones químicas y de procesos de transferencia de masa y de calor. Este proceso comienza alrededor de los 70 °C, llegando a ser prácticamente completo



* PC: Poder calorífico

Figura 2-3.: Procesos para la transformación de la biomasa con fines energéticos

en torno a los 500 °C [19, 21]. Las proporciones relativas de las fracciones producidas durante este proceso dependen de las condiciones físicas en las que se realice. Factores como la velocidad de calentamiento, el tiempo de residencia, la temperatura máxima alcanzada en el proceso, la composición química de la biomasa y el tamaño de las partículas tienen una gran influencia en la distribución de los productos que se obtienen [19, 21].

Los productos primarios formados mediante pirólisis son (dependiendo de las condiciones del proceso) [27]:

- Gases: Compuestos principalmente de CO, CO_2, CH_4, C_2H_6, H_2 y pequeñas cantidades de hidrocarburos pesados.
- Líquidos (alquitranes o bioaceites y agua condensada): Alquitranes compuestos por una mezcla de distintos productos como pueden ser: cetonas, ácido acético, compuestos aromáticos y otras fracciones más pesadas y agua proveniente del secado y reacciones químicas.
- Sólidos (carbonizado): residuo carbonoso que puede ser utilizado como combustible o para la producción de carbón activo.

La gasificación puede definirse como un proceso de oxidación parcial a elevada temperatura del que se obtiene un gas combustible como producto principal, compuesto principalmente por monóxido de carbono, dióxido de carbono, hidrógeno, metano y algunas pequeñas cantidades de cenizas, alquitranes e hidrocarburos pesados. Es un proceso termoquímico en el que

los productos obtenidos de un proceso previo de pirólisis, se transforman en un gas combustible de moderado poder calorífico, mediante una serie de reacciones homogéneas (gas-gas) y heterogéneas (carbonizado sólido-gas). Estas reacciones ocurren a una temperatura superior a la del proceso de pirólisis (800 - 1100 °C), en presencia de un agente de gasificación como aire, oxígeno, dióxido de carbono o vapor de agua [3, 4, 9, 19].

El agente de gasificación empleado para el proceso juega un papel importante en la composición del gas generado. Al utilizar aire se genera un gas pobre con un poder calorífico de 4 - 7 MJ/m^3 STP, debido a que el alto contenido de nitrógeno introducido en el aire se diluye en el gas producido. Al emplear oxígeno se obtiene un gas con un moderado poder calorífico de 10 - 15 MJ/m^3 STP y con vapor de agua se obtiene un gas con poder calorífico de 13 - 20 MJ/m^3 STP. Si se emplea hidrógeno, se puede llegar a obtener un gas con alto poder calorífico (40 MJ/m^3 STP), que puede ser empleado como sustituto del gas natural [4, 20].

Las principales reacciones que ocurren durante el proceso de gasificación son [17, 25, 12, 23, 27]:

Reacciones de oxidación (Cuando se emplea aire u oxígeno como agente de gasificación):

$C + O_2 \Longrightarrow CO_2$ $\qquad \Delta H = -394\,\mathrm{kJ/mol}$

$C + 1/2\,O_2 \Longrightarrow CO$ $\qquad \Delta H = -111\,\mathrm{kJ/mol}$

Reacciones de gasificación:

$C + H_2O \Longrightarrow CO + H_2$ $\qquad \Delta H = 131\,\mathrm{kJ/mol}$

$C + CO_2 \Longrightarrow 2CO$ $\qquad \Delta H = 172\,\mathrm{kJ/mol}$

Reacción de conversión agua-gas:

$CO + H_2O \iff CO_2 + H_2$ $\qquad \Delta H = -41\,\mathrm{kJ/mol}$

Reacciones de reformado:

$CH_4 + CO_2 \iff 2H_2 + 2CO$ $\qquad \Delta H = 247\,\mathrm{kJ/mol}$

$CH_4 + H_2O \iff 3H_2 + CO$ $\qquad \Delta H = 206\,\mathrm{kJ/mol}$

2.4. Equipos de gasificación

El proceso de gasificación se lleva a cabo en equipos diseñados para tal fin llamados gasificadores. Para el proceso de gasificación se pueden emplear diversos tipos de gasificadores, clasificados principalmente en de lecho fijo y semimóvil, de lecho móvil y de lecho fluidizado, existiendo diversas variaciones en los diseños dentro de cada tipo. La elección del tipo de gasificador influye altamente en la composición del gas obtenido. Para elegir el tipo de gasificador para una aplicación determinada se deben tener en cuenta las características del gas requerido y su aplicación posterior, el tipo de biomasa a emplear, la escala de producción que

se desea y consideraciones económicas. Los reactores de lecho fijo son los más económicos debido a sus pocas partes móviles, lo que se traduce en el uso de una tecnología más sencilla y barata, aunque menos eficiente.

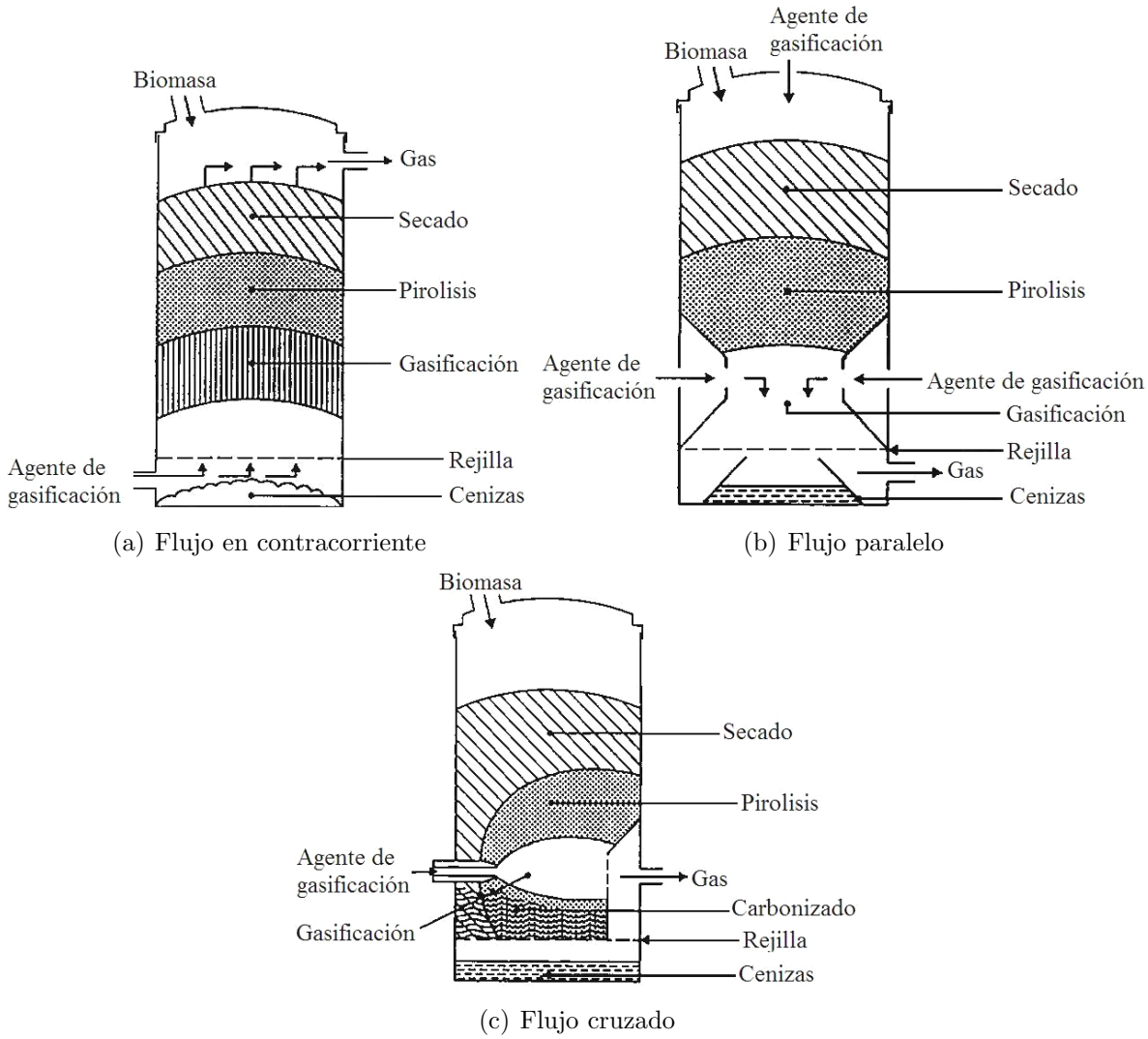
Los gasificadores de lecho fijo (alimentación por lotes) o semimóvil (alimentación en continuo) tienen una cama fija de partículas sólidas de biomasa a través de las cuales se mueve el agente de gasificación. En los reactores de lecho fijo la fase sólida se mueve lentamente hacia la parte baja del reactor, a medida que ocurre la descomposición de la biomasa. Este tipo de gasificadores presentan las condiciones técnicas más simples, siendo relativamente fáciles de diseñar y de operar. Consisten principalmente de un espacio cilíndrico en donde suceden de forma secuencial los procesos de secado, pirólisis y gasificación, una unidad de alimentación de biomasa, un sistema de remoción de cenizas, un sistema dosificador del agente de gasificación y la salida del gas [6].

Estos reactores son especialmente 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. Es por esto que la composición del gas generado puede ser impredecible y poco eficiente para producciones a gran escala (superior a 1 MW) [17]. La operación de los gasificadores de lecho fijo está altamente influenciada por las propiedades morfológicas, físicas y químicas de la biomasa. En estos gasificadores es común encontrar problemas como: falta de uniformidad en el flujo de la fase sólida, formación de puentes y adherencia de material (alquitranes y sólido que no fluye) a las paredes del equipo y caídas considerables de presión en el reactor [23].

Dependiendo de la dirección de flujo en la cual se mueve el agente gasificante se pueden tener reactores de flujo en contracorriente, flujo paralelo y de flujo cruzado (Figura **2-4**).

En los reactores de flujo en contracorriente (Figura **2-4a**), el agente gasificante es introducido por la parte baja del equipo y circula en sentido opuesto a la fase sólida. La biomasa es alimentada por la parte superior del reactor y fluye lentamente hacia la parte baja del mismo, mientras que las cenizas son removidas por la zona inferior. El gas producido es entregado por la parte superior a una temperatura relativamente baja (menores a 300 °C), lo que se traduce en una alta eficiencia térmica del equipo. Las desventajas de este sistema son el alto contenido de alquitranes en el gas producido [3, 4, 6, 9, 20, 23].

En los reactores de flujo paralelo (Figura **2-4b**), el agente gasificante es introducido por la parte media o superior del equipo y el gas combustible es retirado por la parte baja. Por lo tanto, la fase sólida y el gas se mueven en la misma dirección. Al igual que en los gasificadores de flujo en contracorriente, la biomasa es alimentada por la parte superior del reactor fluyendo hacia la parte baja del mismo. Su principal ventaja radica en la posibilidad de



(a) Flujo en contracorriente

(b) Flujo paralelo

(c) Flujo cruzado

Figura 2-4.: Esquema de los diferentes tipos de gasificadores de lecho fijo [23]

obtener un gas con bajo contenido de alquitranes y aceites, adecuado para su uso en motores de combustión interna, ya que los alquitranes generados durante la pirólisis se degradan al fluir por la cama del material ya pirolizado. Los gases producidos salen del reactor con temperaturas de 900 - 1000 °C aproximadamente, haciendo que la eficiencia térmica general de estos equipos sea baja [3, 4, 6, 9, 20, 23].

En un reactor de flujo cruzado (Figura **2-4c**), la biomasa es alimentada por la parte superior del reactor y fluye hacia la parte baja del mismo a medida que el proceso de gasificación ocurre. El agente gasificante es introducido lateralmente al reactor mientras que el gas es extraído por el lado opuesto del equipo, al mismo nivel. El gas producido abandona el reactor a una temperatura de 700 - 900 °C, lo que hace que la eficiencia térmica del equipo sea baja. Las cenizas son removidas por la parte inferior del reactor. Al igual que los reactores de flujo

en contracorriente, los reactores de flujo cruzado producen un gas con un alto contenido de alquitranes [6, 20, 23].

Los reactores de lecho fijo también se pueden clasificar dependiendo de la forma en la cual se adiciona calor al equipo. Esta clasificación distingue entre reactores de calentamiento directo y reactores de calentamiento indirecto.

- En los reactores de calentamiento directo, las reacciones exotérmicas de combustión entre el oxígeno, el carbonizado y los compuestos volátiles, proveen el calor necesario para que se produzca la descomposición de la biomasa. Como existe un contacto directo entre el medio de calentamiento y los productos presentes en el reactor, los gradientes de temperatura dentro de la cama en la dirección radial son bajos. Esto ayuda a que la velocidad de reacción sea constante para toda la sección transversal del equipo, y por lo tanto a que la velocidad de la cama y el encogimiento de las partículas en la dirección radial sean iguales [4, 16]. Sin embargo el agente de gasificación empleado normalmente en este tipo de gasificador es aire lo que genera un gas con un bajo poder calorífico (4 - 6 MJ/m^3 STP), debido a la gran cantidad de nitrógeno introducida en él [4, 20].

- En los reactores de calentamiento indirecto, el calor es suministrado a través de las paredes del reactor, es decir, el medio de calentamiento no entra en contacto con el producto que se procesa. Esto genera gradientes de temperatura en la dirección radial, lo que hace que la velocidad de reacción no sea uniforme. Las partículas ubicadas cerca de las paredes del equipo, reaccionan más rápido que las ubicadas en el centro del reactor. Como consecuencia de esto, la velocidad de la cama no es constante y se produce un perfil de velocidad para la sección transversal del equipo [4, 16]. Este tipo de calentamiento permite obtener gases combustibles con un poder calorífico moderado cuando se emplea vapor de agua u oxígeno como agentes de gasificación (12 - 18 MJ/m^3 STP), lo que representa una ventaja importante comparado con los gasificadores de calentamiento directo.

Cuando un equipo de gasificación se usa en conjunto con un motor de combustión interna, es importante que el motor sea alimentado con un gas lo suficientemente libre de material particulado y alquitranes. Las cantidades tolerables de estas sustancias varían dependiendo de las características del motor. Según la FAO [23], las cantidades promedio tolerables para los motores actuales son:

- Material particulado: Menor que 50 mg/m^3 de gas, preferiblemente 5 mg/m^3

- Alquitranes: Menores que 500 mg/m^3

2.5. Modelación matemática de un gasificador de lecho fijo

Un sistema de generación de energía eléctrica a partir de gasificación de biomasa incluye un gasificador, sistemas de acondicionamiento que incluyen limpieza y almacenamiento de los gases producidos, un motor de combustión interna, un generador eléctrico y sistemas auxiliares como reguladores de voltaje y baterías para el almacenamiento de la energía. El esquema general del sistema de generación de energía eléctrica se muestra en la Figura **2-5**.

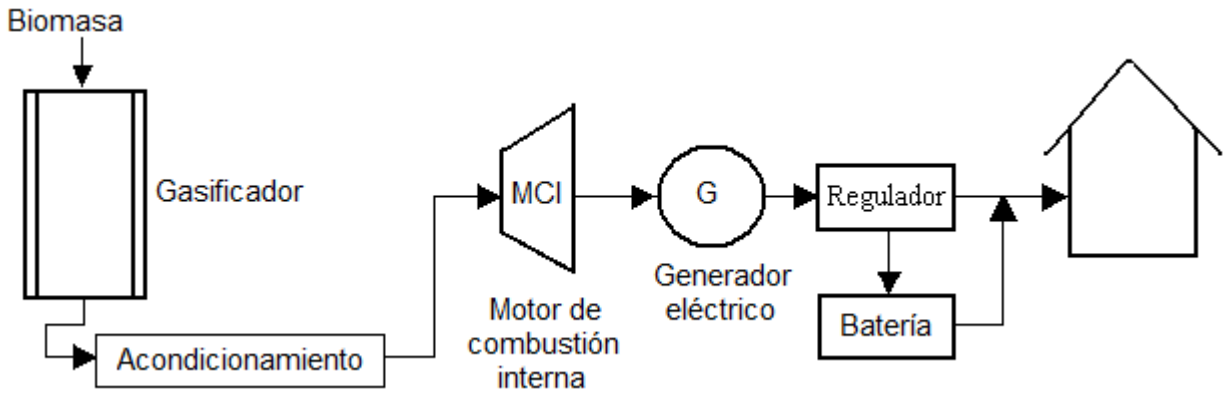


Figura 2-5.: Esquema del sistema de generación de energía eléctrica

El presente trabajo se centra en el desarrollo de un modelo matemático para un gasificador de lecho fijo de calentamiento indirecto, flujos en paralelo y vapor de agua como agente de gasificación. Dicho modelo permite simular la composición química del gas obtenido mediante los procesos de pirólisis y gasificación, en función del tipo de biomasa empleada y los parámetros de operación del equipo.

En general, 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 diferenciales nacen del planteamiento de los balances de masa, de cantidad de movimiento, de energía y de especies (cuando se tienen reacciones químicas) para el sistema a modelar.

Un gasificador de lecho fijo es un sistema térmico que involucra complejas reacciones químicas, para su modelamiento se pueden plantear diferentes tipos de modelos (Figura **2-6**):

MODELOS DE CELDAS Y DE CANALES: En los modelos de celdas el reactor se modela como una red bidimensional de sistemas sencillos (celdas) conectados entre sí. En los modelos de canales se realiza una distribución del lecho en volúmenes de control con contenido y sin contenido de materia.

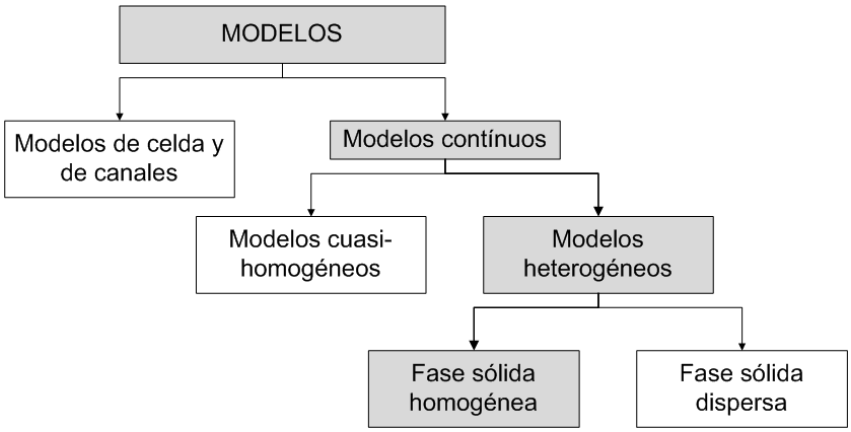


Figura 2-6.: Tipos de modelos [29]

MODELOS CONTINUOS: Dentro de los modelos continuos se distinguen dos tipos de modelos: los modelos cuasihomogéneos y los modelos heterogéneos.

- **Modelos cuasihomogéneos:** Son aquellos en los que se considera a la cama de material contenida en el reactor como un sólido con cierta porosidad. Dichos poros corresponden a los espacios intergranulares dentro de la cama sólida, donde se aloja el agente gasificante (vapor de agua, aire, etc) y los gases obtenidos. En los modelos cuasihomogéneos no se tienen en cuenta diferencias de concentración y temperatura entre el fluido y la fase sólida.

- **Modelos heterogéneos:** Se considera a la cama de material como un sistema donde conviven distintas fases. Generalmente se diferencia entre fase sólida, correspondiente a la biomasa y el carbonizado, y la fase gaseosa correspondiente al agente de gasificación y la fase volátil. Los modelos heterogéneos deben ser empleados cuando existan diferencias de concentración y/o temperatura entre la fase sólida y la fase volátil. Dentro de este tipo de modelos se puede hacer distinción entre: modelos heterogéneos de fase sólida homogénea y modelos heterogéneos de fase sólida dispersa.

  - *Fase sólida homogénea:* Se considera que no existen gradientes de concentración y temperatura al interior de las partículas.
  - *Fase sólida dispersa:* Se considera que existen gradientes de concentración y temperatura al interior de las partículas.

Para el caso del reactor de lecho fijo en estudio, se tiene que aunque las diferencias de temperatura entre la fase sólida y la fase gaseosa son casi despreciables, las diferencias de concentración no lo son. Por lo general, para los procesos de gasificación se convierte la biomasa en partículas pequeñas antes del inicio del proceso. Esto se hace con el fin de aumentar el área superficial que entra en contacto con la fase gaseosa, lo que facilita el desarrollo de

las reacciones químicas en el interior del reactor. Teniendo en cuenta el pequeño tamaño de las partículas de la fase sólida (aproximadamente 2 mm), se puede considerar que no existen gradientes ni de concentración ni de temperatura al interior de las partículas. Para la modelación matemática del reactor de lecho fijo se emplea por lo tanto un *modelo heterogéneo de fase sólida homogénea*.

Dependiendo de la complejidad del modelo las soluciones numéricas pueden requerir de extensos códigos de programación. El interés que se puede tener en el desarrollo de modelos exactos que describan de manera muy precisa lo que ocurre en la realidad, se puede perder al descubrir la complejidad en la que se incurre para encontrar la solución numérica. Por este motivo en la modelación de sistemas complejos, es una práctica común y casi obligatoria el uso de simplificaciones que permiten encontrar una solución aproximada a la real. En la mayoría de los casos la complejidad que tiene el modelo al no realizar estas simplificaciones, no justifica la poca ganancia en exactitud de los resultados. Cabe aclarar que dichas simplificaciones deben hacerse con un claro conocimiento del proceso y equipo a modelar y bajo una sólida sustentación teórica o experimental. La validación del modelo es un paso obligado y se realiza mediante la comparación de los datos obtenidos experimentalmente con los arrojados por el modelo matemático planteado.

El planteamiento del modelo heterogéneo se basa en la formulación de las ecuaciones de balance de masa, de energía y de especies, para la fase sólida y la fase gaseosa. Las ecuaciones de balance de especies se desarrollan para los principales compuestos obtenidos en el gas generado, que como se mencionó en la sección 2.3 son: monóxido de carbono (CO), dióxido de carbono (CO_2), hidrógeno (H_2), metano (CH_4), alquitranes y agua (H_2O). En el proceso de gasificación también se producen pequeñas cantidades de algunos hidrocarburos pesados, pero estos no se tienen en cuenta dentro de las especies a balancear.

En el capítulo 4 se profundiza en el planteamiento de las ecuaciones de balance de masa, de energía y de especies para las dos fases y se muestra que no es necesaria la formulación de ecuaciones de cantidad de movimiento en la dirección radial, ya que se puede suponer que la velocidad en tubo vacío para la sección transversal del reactor es constante.

Los métodos numéricos para la solución de ecuaciones diferenciales se basan en el reemplazo de las ecuaciones diferenciales que rigen los procesos por una serie de ecuaciones algebraicas. Dentro de los métodos numéricos más conocidos y ampliamente empleados en la modelación de procesos se encuentran el método de las diferencias finitas, el método de los volúmenes de control y el método de los elementos finitos.

En los métodos de las diferencias finitas y los volúmenes de control, el sistema a analizar se divide en una malla ortogonal compuesta por una serie de elementos de volumen individua-

les. El método de las diferencias finitas se basa en el reemplazo de las derivadas presentes en las ecuaciones diferenciales por diferencias adecuadas para cada uno de los volúmenes, mientras que el método de los volúmenes de control se basa en la aplicación de los balances de masa, de energía y de cantidad de movimiento para cada uno de estos. Con los dos métodos se llega a la misma forma discretizada de las ecuaciones diferenciales, sin embargo su principal diferencia radica en que el planteamiento mediante el método de las diferencias finitas requiere del conocimiento previo de las ecuaciones diferenciales que aplican en cada volumen de control, mientras que en los volúmenes de control no. Además el método de los volúmenes de control requiere de un menor manejo matemático y proporciona una mayor comprensión de los fenómenos físicos presentes.

En el método de los elementos finitos el sistema a analizar se divide en una malla generalmente no ortogonal compuesta por una serie de elementos de volumen de forma irregular (p.ej. volúmenes triangulares), lo que permite una mayor flexibilidad en el ajuste de las mallas discretizadas a sistemas con formas irregulares. Este método es comúnmente aplicado en el análisis de esfuerzos en estructuras y piezas mecánicas, sin embargo su aplicación en fenómenos de transferencia de calor no es muy común. Dentro de las principales razones para su limitada aplicación a fenómenos de transferencia de calor se encuentra la dificultad en su adaptación a los procesos convectivos [24]. La formulación de este método es más complicada y en general, su solución es más compleja y requiere de una mayor cantidad de recursos computacionales que los métodos de diferencias finitas y volúmenes de control.

En el modelo matemático a desarrollar se emplea el método de los volúmenes de control por las razones anteriormente expuestas. Los fundamentos teóricos para la discretización de las ecuaciones diferenciales en fenómenos conductivos y convectivos, mediante el método de los volúmenes finitos se encuentran en [24]. Allí además se discuten algunos métodos directos e iterativos para la solución de las ecuaciones discretizadas.

3. Modelación matemática de la gasificación en reactores de lecho fijo

Para la modelación matemática del gasificador de lecho fijo se emplea un modelo heterogéneo compuesto por dos fases: una fase sólida, correspondiente a la biomasa y el carbonizado, y una fase gaseosa correspondiente al agente de gasificación y la fase volátil. En la Figura **3-1** se muestra el esquema general de un gasificador de lecho fijo de calentamiento indirecto y flujo en paralelo.

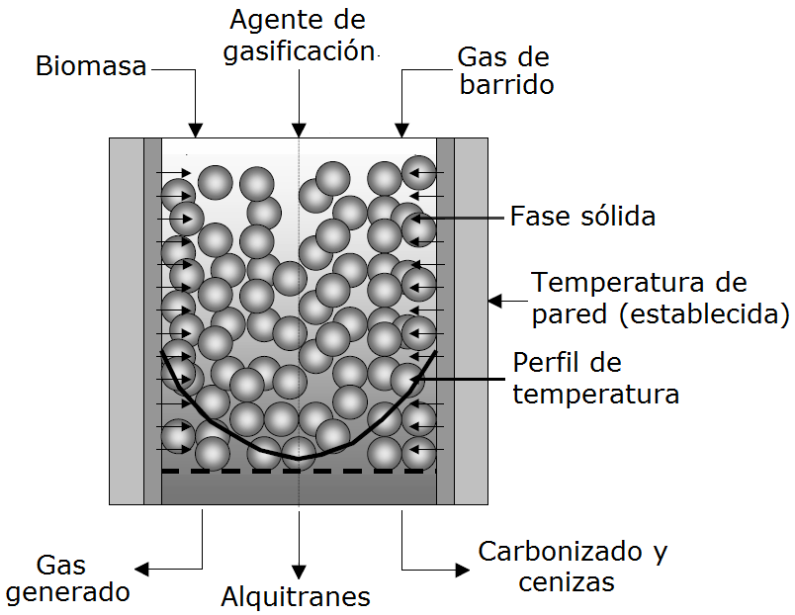


Figura 3-1.: Esquema general de un reactor de lecho fijo

3.1. Procesos de transferencia de calor y de masa

En los reactores de lecho fijo se presenta transferencia de calor por conducción, convección y radiación y transferencia de masa por convección y dispersión. Los procesos de transferencia que se presentan se muestran en la Figura **3-2** y se describen a continuación:

Transferencia de calor

- *Convección:* Entre la pared del reactor y la fase gaseosa (1), entre la fase gaseosa y las partículas (2) y entre la misma fase gaseosa (3).

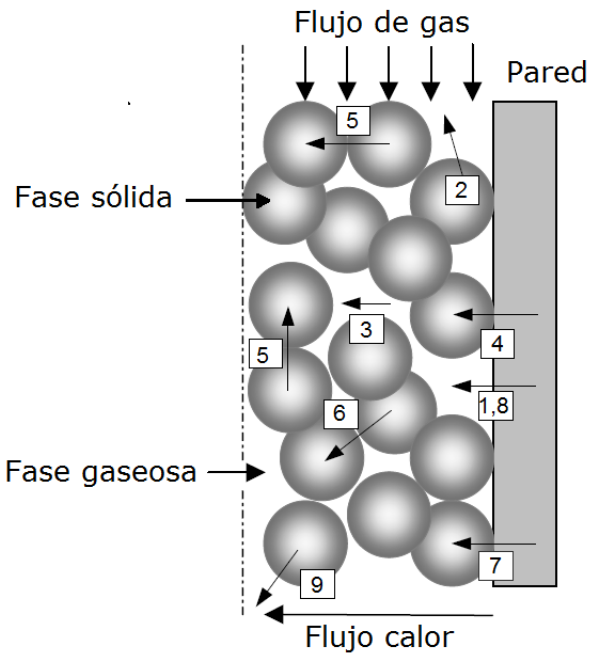


Figura 3-2.: Procesos de transferencia de calor y de masa al interior de un reactor de lecho fijo

- *Conducción:* Entre la pared del reactor y las partículas de la cama (4), y entre las partículas (5).
- *Radiación:* Entre las partículas de la cama (6), entre la pared del reactor y las partículas de la cama (7), entre la pared del reactor y la fase gaseosa (8) y entre la fase gaseosa y las partículas (9).

En el presente modelamiento no se tiene en cuenta la transferencia de calor por radiación entre el gas y las partículas, ni entre la pared del reactor y el gas debido a que en los gases, la radiación solo es apreciable en procesos a alta temperatura como la combustión.

Transferencia de masa

- *Convección:* Entre la fase gaseosa y las partículas (2) y entre la misma fase gaseosa (3).
- *Dispersión:* En la fase gaseosa (3).

3.2. Ecuaciones de balance

El planteamiento del modelo se basa en la formulación de las ecuaciones de balance de energía y de especies químicas para las fases sólida y gaseosa. En el modelo no se plantean ecuaciones de cantidad de movimiento en la dirección radial ya que como se muestra en

el capítulo 4, se puede suponer que la velocidad en tubo vacío para la sección transversal del reactor es constante. Las ecuaciones de balance de energía y de masa se plantean en coordenadas cilíndricas con base en el sistema de coordenadas mostrado en la Figura **3-3**.

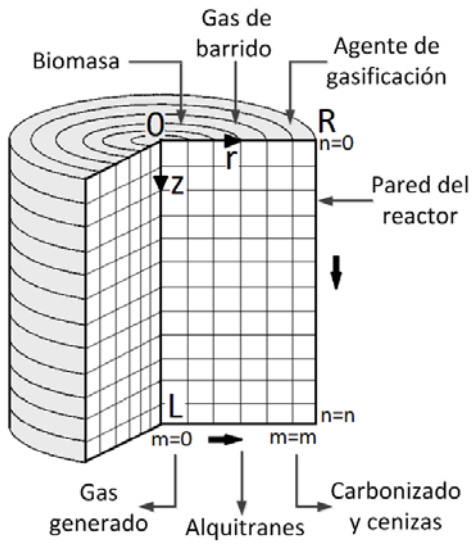


Figura 3-3.: Sistema de coordenadas para el planteamiento de las ecuaciones de balance

3.2.1. Fase gaseosa

Para el planteamiento de 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. Esta suposición se realiza debido a que en el equipo experimental a modelar (ver Capítulo 7) se tiene una bomba a la salida del gasificador que succiona los gases, permitiendo regular la presión al interior del mismo.

Balance de energía

La ecuación general de balance de energía para la fase gaseosa es:

$$\underbrace{(cC_{p,m})^g \frac{\partial T^g}{\partial t}}_{\text{Acumulación}} = \underbrace{\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r D^g_{r,th}\frac{\partial T^g}{\partial r}\right)}_{\text{Dispersión radial}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial z}\left(D^g_{ax,th}\frac{\partial T^g}{\partial z}\right)}_{\text{Dispersión axial}} + \underbrace{(cC_{p,m})^g \omega^g_r \frac{\partial T^g}{\partial r}}_{\text{Convección radial}} \ldots$$

$$\ldots - \underbrace{(cC_{p,m})^g \omega^g_{ax}\frac{\partial T^g}{\partial z}}_{\text{Convección axial}} - \underbrace{\frac{h_{GP}A_{esp}}{\varepsilon_b}(T^g - T^s_{sup})}_{\text{T.C. gas-sólido}} - \underbrace{q^g_{th}}_{\text{Generación}}$$

donde el penúltimo término de la ecuación representa la transferencia de calor por convección entre la fase sólida y la fase gaseosa teniendo en cuenta la porosidad del lecho. La existencia

de este término hace que las ecuaciones de balance de energía de las dos fases se deban resolver de manera simultánea.

El balance de energía de la fase gaseosa se simplifica con base en las siguientes suposiciones:

- La transferencia de calor por dispersión en la dirección axial es despreciable, ya que ésta es mucho menor que la transferencia de calor por convección debido al alto flujo de gas.
- 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.

Obteniéndose la siguiente ecuación:

$$(cC_{p,m})^g \frac{\partial T^g}{\partial t} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r D^g_{r,th}\frac{\partial T^g}{\partial r}\right) - (cC_{p,m})^g \omega^g_{ax}\frac{\partial T^g}{\partial z} - \frac{h_{GP}A_{esp}}{\varepsilon_b}(T^g - T^s_{sup}) - q^g_{th} \quad (3\text{-}1)$$

donde el término de generación debido a las reacciones químicas que se presentan al interior del reactor en la fase gaseosa es:

$$q^g_{th} = \sum_{j=1}^{n} \Delta h_{r,m} r_{v,i} \quad (3\text{-}2)$$

y el área específica de transferencia A_{esp}, la cual representa el área de transferencia de calor entre las fases sólida y gaseosa por unidad de volumen, está dada por:

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

El área superficial de las partículas A_p y el número de partículas n_p se encuentran mediante:

$$A_p = \pi d_p^2 \qquad n_p = \frac{V^s}{V_p} \quad (3\text{-}4)$$

<u>*Condiciones de frontera*</u>

- En el punto medio del gasificador, el gradiente de temperatura desaparece debido a la simetría térmica:

$$r = 0: \quad \frac{\partial T^g}{\partial r} = 0$$

- Transferencia de calor por convección entre la pared y el gas en la pared del gasificador:

$$r = R: \quad \lambda^g_r \frac{\partial T^g}{\partial r} = h_{WG}(T_W - T^g_R)$$

- A la entrada del gasificador la fase gaseosa se encuentra a una temperatura establecida:

$$z = 0: \quad T^g = T_0$$

- A la salida del gasificador no se presenta transferencia de calor:

$$z = L: \quad \frac{\partial T^g}{\partial z} = 0$$

<u>*Condición inicial:*</u> La temperatura de la fase gaseosa es conocida:

$$t = 0: \quad T^g_{m,n} = T^g_{in}$$

Balance de especies

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

$$\underbrace{\frac{\partial c_i}{\partial t}}_{\text{Acumulación}} = \underbrace{\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\, D_{i,r}\frac{\partial c_i}{\partial r}\right)}_{\text{Dispersión radial}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial z}\left(D_{i,ax}\frac{\partial c_i}{\partial z}\right)}_{\text{Dispersión axial}} + \underbrace{\frac{\partial(\omega^g_r c_i)}{\partial r}}_{\text{Convección radial}} \ldots$$

$$\ldots - \underbrace{\frac{\partial(\omega^g_{ax} c_i)}{\partial z}}_{\text{Convección axial}} - \underbrace{\frac{\beta A_{esp}}{\varepsilon_b}(c^g_i - c^s_{i,sup})}_{\text{T.M. gas-sólido}}$$

donde el último término de la ecuación representa la transferencia de masa por convección entre la fase sólida y la fase gaseosa teniendo en cuenta la porosidad del lecho. La existencia de este término hace que las ecuaciones de balance de masa de las dos fases se deban resolver de manera simultánea.

El balance de especies de la fase gaseosa se simplifica con base en las siguientes suposiciones:

- La transferencia de masa por dispersión en la dirección axial es despreciable, ya que ésta es mucho menor que la transferencia de masa por convección debido al alto flujo de gas.
- La velocidad de los gases en la dirección radial es despreciable y por lo tanto la transferencia de masa por convección en esa dirección también lo es.

Obteniéndose la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\, D_{i,r}\frac{\partial c_i}{\partial r}\right) - \frac{\partial(\omega^g_{ax} c_i)}{\partial z} - \frac{\beta A_{esp}}{\varepsilon_b}(c^g_i - c^s_{i,sup}) \tag{3-5}$$

El área específica de transferencia A_{esp} se encuentra como se explicó en la sección correspondiente al balance de energía.

Condiciones de frontera

- En el punto medio del gasificador, el gradiente de concentración desaparece debido a la simetría del equipo:

$$r = 0: \quad \frac{\partial c_i^g}{\partial r} = 0$$

- No se presenta transferencia de masa en la dirección radial para la pared del reactor:

$$r = R: \quad \frac{\partial c_i^g}{\partial r} = 0$$

- A la entrada del reactor la fase gaseosa se encuentra con una composición de entrada establecida:

$$z = 0: \quad c_i^g = c_{i,in}^g$$

- A la salida del gasificador no se presenta transferencia de masa:

$$z = L: \quad \frac{\partial c_i^g}{\partial z} = 0$$

Condición inicial: La composición de la fase gaseosa es conocida e igual a la del agente de barrido empleado:

$$t = 0: \quad c_{m,n}^g = c_{N_2}$$

3.2.2. Fase sólida

Como se mencionó en el planteamiento de las ecuaciones de balance de la fase gaseosa, la presión total dentro del gasificador permanece constante e igual a la presión atmosférica.

Balance de energía

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

$$\underbrace{(cC_{p,m})_e^s \frac{\partial T^s}{\partial t}}_{\text{Acumulación}} = \underbrace{\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\lambda_e^s \frac{\partial T^s}{\partial r}\right)}_{\text{Conducción radial efectiva}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial z}\left(\lambda_e^s \frac{\partial T^s}{\partial z}\right)}_{\text{Conducción axial efectiva}} + \underbrace{(cC_{p,m})_e^s \omega_r^s \frac{\partial T^s}{\partial r}}_{\text{Convección radial}} \ldots$$

$$\ldots - \underbrace{(cC_{p,m})_e^s \omega_{ax}^s \frac{\partial T^s}{\partial z}}_{\text{Convección axial}} + \underbrace{\frac{h_{GP} A_{esp}}{1-\varepsilon_b}(T^g - T_{sup}^s)}_{\text{T.C. gas-sólido}} - \underbrace{q_{th}^s}_{\text{Generación}}$$

El balance de especies de la fase gaseosa se simplifica con base en las siguientes suposiciones:

- 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.
- Las partículas de la fase sólida son de forma esférica.

Obteniéndose la siguiente ecuación:

$$(cC_{p,m})_e^s \frac{\partial T^s}{\partial t} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\lambda_e^s \frac{\partial T^s}{\partial r}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\lambda_e^s \frac{\partial T^s}{\partial z}\right) - (cC_{p,m})_e^s \omega_{ax}^s \frac{\partial T^s}{\partial z} ... \\ ... + \frac{h_{GP}A_{esp}}{1-\varepsilon_b}(T^g - T_{sup}^s) - q_{th}^s \quad (3\text{-}6)$$

El término de generación debido a las reacciones químicas que se presentan al interior del reactor en la fase sólida se calcula de manera similar al término de generación de la fase gaseosa mostrado en la ecuación 3-2.

<u>*Condiciones de frontera*</u>

- En el punto medio del gasificador, el gradiente de temperatura desaparece debido a la simetría del equipo:

$$r = 0: \quad \frac{\partial T^s}{\partial r} = 0$$

- Transferencia de calor por conducción y radiación entre la pared y las partículas, en la pared del gasificador:

$$r = R: \quad \lambda_e^s \frac{\partial T^s}{\partial r} = (h_{WP} + h_{rad,WP})(T_W - T_R^s)$$

- A la entrada del gasificador la biomasa se encuentra con la temperatura del ambiente circundante:

$$z = 0: \quad T^s = T_{amb}$$

- A la salida del gasificador no se presenta transferencia de calor:

$$z = L: \quad \frac{\partial T^s}{\partial z} = 0$$

<u>*Condición inicial:*</u> La temperatura de la fase sólida es conocida:

$$t = 0: \quad T_{m,n}^s = T_0^s$$

Balance de especies

Según Schlünder y Tsotsas [29], el balance de especies para la fase gaseosa contenida en los poros de la fase sólida se puede simplificar hasta la siguiente expresión:

$$r_{v,i} = -\frac{\varepsilon_b}{1-\varepsilon_b}\beta A_{esp}(c_i^g - c_{i,sup}^s) \tag{3-7}$$

Esta ecuación representa la transferencia de masa entre la fase gaseosa y los gases contenidos en los poros de la fase sólida. La Ec. 3-7 es válida bajo el supuesto de que no existen gradientes de concentración al interior de las partículas, es decir cuando la fase sólida se considera homogénea.

<u>*Condición inicial:*</u> La composición de la fase gaseosa contenida en los poros de la fase sólida es conocida e igual a la del agente de barrido empleado:

$$t = 0: \quad c_{sup_{m,n}}^s = c_{N_2}$$

4. Propiedades físicas y coeficientes de transferencia de calor y de masa

Para la solución de las ecuaciones de balance planteadas en la sección 3.1 se deben determinar las propiedades físicas y químicas de las fases sólida y gaseosa y los coeficientes de transferencia de calor y de masa en función de la temperatura y composición. La biomasa empleada para el desarrollo del modelo es madera de haya, debido a la disponibilidad tanto de cinéticas de reacción como de pruebas experimentales para realizar la validación del modelo. Los planteamientos empleados para su determinación se muestran a continuación.

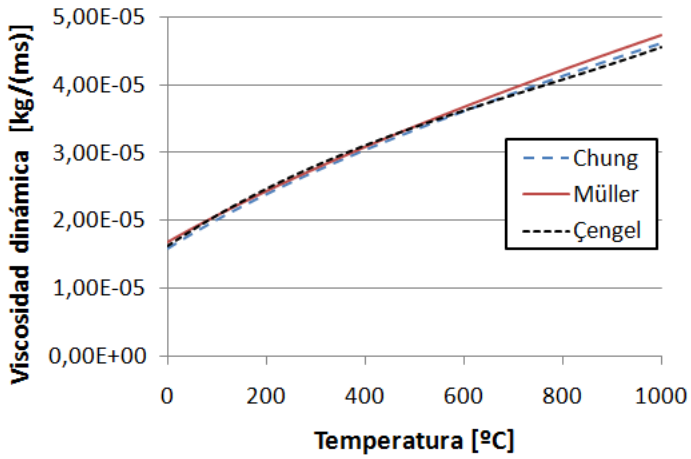
4.1. Fase gaseosa

Para determinar las propiedades físicas de la fase gaseosa es necesario conocer las propiedades de cada uno de sus componentes individuales. Como se mencionó en la sección 2.3, los principales componentes que se generan durante los procesos de pirólisis y gasificación son CO, CO_2, CH_4, H_2, H_2O y alquitranes. Adicionalmente la fase gaseosa se compone también de H_2O adicional introducida al equipo como agente de gasificación y del proceso de secado de la biomasa y N_2 empleado como gas de barrido. Para la determinación de las propiedades de los componentes, es válida la suposición de gas ideal, debido a la baja presión de operación del equipo.

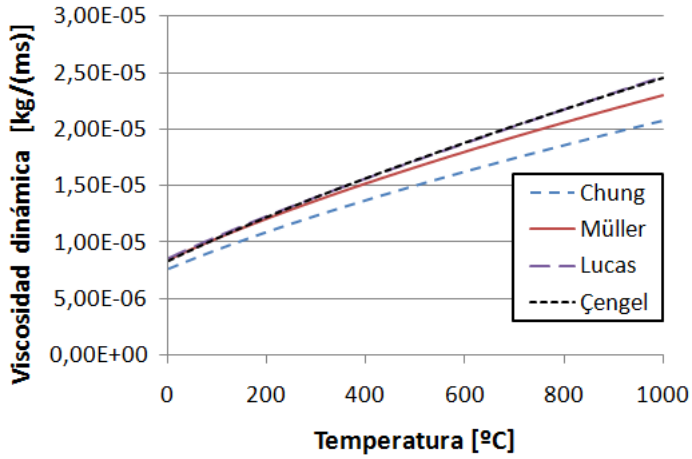
Salvo en la caso de la dispersión, las propiedades de la fase sólida no tienen ninguna influencia sobre las propiedades de la fase gaseosa. A continuación se muestran las correlaciones empleadas para determinar la viscosidad dinámica, conductividad térmica y calor específico molar en función de la temperatura de cada uno de los componentes y de la mezcla de gases para la fase gaseosa.

4.1.1. Viscosidad dinámica

Para determinar la viscosidad dinámica de cada uno de los componentes en función de la temperatura y a presión constante, se compararon los resultados obtenidos con las expresiones en forma de ley de potencias mostradas por Müller en [22] y los métodos de Chung y Lucas mostrados por Reid et al. en [26], con los valores tabulados en Çengel [5]. Se encontró que el método de Chung es el que más se aproxima a los valores tabulados para el CO, CO_2, CH_4, H_2O y N_2, mientras que el método de Lucas es el más adecuado para el H_2. Las gráficas comparativas de los resultados obtenidos mediante los diferentes planteamientos, para el CO y el H_2 se muestran en la Figura **4-1**.



(a) Monóxido de carbono



(b) Hidrógeno

Figura 4-1.: Viscosidades dinámicas del CO y el H_2 en función de la temperatura, obtenidas mediante diferentes planteamientos

Método de Chung

El método de Chung presentado por Reid et al. en [26] muestra que la viscosidad dinámica de un gas a una temperatura T puede encontrarse mediante:

$$\eta = 40{,}785 \frac{F_c (MT)^{1/2}}{V_c^{2/3} \Omega_v} \tag{4-1}$$

donde η es la viscosidad dinámica en μP, M es la masa molar en kg/kmol, T es la temperatura en Kelvin y V_c es el volumen crítico en cm^3/mol.

El factor F_c se encuentra según Reid et al. [26] mediante:

$$F_c = 1 - 0{,}2756\omega + 0{,}059035 \left(131{,}3 \frac{\mu}{(V_c T_c)^{1/2}} \right)^4 + \kappa \tag{4-2}$$

donde ω es el factor acentrico, κ es un factor de corrección para sustancias altamente polares como los alcoholes, ácidos y el agua, μ es el momento dipolar en debyes y T_c es la temperatura crítica en Kelvin.

El cálculo del término Ω_v para usar en la Ec. 4-1 según Reid et al. [26] es:

$$\Omega_v = 1{,}16145(T^*)^{-0{,}14874} + 0{,}52487\exp(-0{,}7732T^*) + 2{,}16178\exp(-2{,}43787T^*) \tag{4-3}$$

la cuál es válida para $0{,}3 \leq T^* \leq 100$, donde $T^* = 1{,}2593(T/T_c)$.

Método de Lucas

La viscosidad dinámica de un gas a una temperatura T según el método de Lucas mostrado por Reid et al. en [26] es:

$$\eta\xi = [0{,}087T_r^{0{,}618} - 0{,}357\exp(-0{,}449T_r) + 0{,}340\exp(-4{,}058T_r) + 0{,}018]F_P^o F_Q^o \tag{4-4}$$

donde η es la viscosidad dinámica en μP, $T_r = (T/T_c)$ es la temperatura reducida y F_P^o y F_Q^o son factores de corrección que toman en cuenta los efectos polares y cuánticos.

El cálculo de ξ para usar en la Ec. 4-4 se realiza mediante:

$$\xi = 0{,}176\left(\frac{T_c}{M^3P_c^4}\right)^{1/6} \tag{4-5}$$

con ξ en $(\mu\text{P})^{-1}$, P_c en bar, T_c en Kelvin y M en kg/kmol.

El coeficiente F_P^o se encuentra según Reid et al. [26] mediante:

$$\begin{aligned}
F_P^o &= 1 & 0 \leq \mu_r < 0{,}022 \\
F_P^o &= 1 + 30{,}55(0{,}292 - Z_c)^{1{,}72} & 0{,}022 \leq \mu_r < 0{,}075 \\
F_P^o &= 1 + 30{,}55(0{,}292 - Z_c)^{1{,}72}|0{,}96 + 0{,}1(T_r - 0{,}7)| & \mu_r \geq 0{,}075
\end{aligned} \tag{4-6}$$

donde Z_c es el factor de compresibilidad crítico, y μ_r es el momento dipolar adimensional:

$$\mu_r = 52{,}46\frac{\mu^2 P_c}{T_c^2} \tag{4-7}$$

con μ en debyes, P_c en bar y T_c en Kelvin.

El coeficiente F_Q^o es usado solamente para los gases cuánticos He, H_2 y D_2 y se encuentra según Reid et al. [26] a partir de:

$$F_Q^o = 1{,}22Q^{0{,}15}\{1 + 0{,}00385[(T_r - 12)^2]^{1/M}\text{sign}(T_r - 12)\} \tag{4-8}$$

donde $Q = 1{,}38$ (He), $Q = 0{,}76$ (H_2), $Q = 0{,}52$ (D_2). El símbolo sign( ) indica que se debe tomar +1 o -1 dependiendo del si el valor ( ) es mayor o menor que 0.

Las propiedades necesarias para calcular la viscosidad dinámica de cada uno de los componentes, mediante las ecuaciones 4-1 - 4-8 se muestran en la Tabla **4-1**.

Tabla 4-1.: Propiedades para determinar la viscosidad dinámica de gases de interés a 1 bar

Símbolo	**M (kg/kmol)**	**T_c (K)**	**V_c (cm^3/mol)**	ω	μ **(Debye)**	**Z_c**	κ
CO	20,011	139,9	93,2	0,041	0	0,295	0
CO_2	44,01	304,1	93,9	0,225	0	0,274	0
CH_4	13,043	190,6	99,2	0,007	0	0,288	0
H_2	2,016	33,2	65,1	-0,218	0	0,306	0
H_2O	18,015	647,3	57,1	0,348	1,8	0,235	0,076
N_2	28,013	126.2	89.8	0.04	0	0,290	0

Viscosidad dinámica de los alquitranes

La viscosidad dinámica de los alquitranes se determina con ayuda de la correlación de Lucas mostrada anteriormente en las ecuaciones 4-4 y 4-5. La temperatura y la presión críticas necesarias para los cálculos se determinan a partir de correlaciones dadas por Tsonopoulos et al. [31]:

$$T_c = \frac{5}{9}\exp[(1{,}29728 + 0{,}61954\lg T_b + 0{,}48262\lg\rho_{rel} + 0{,}67365(\lg\rho_{rel})^2)\ln 10]$$
$$P_c = 0{,}068948\exp[(9{,}0874 - 2{,}15833\lg T_b + 3{,}35417\lg\rho_{rel} + 5{,}6402(\lg\rho_{rel})^2)\ln 10]$$

donde P_c se da en bar y T_c en Kelvin. Según mediciones realizadas por Wiest [39] en alquitranes de maíz, se tiene para estos aceites una presión relativa al agua de $\rho_{rel} = 1{,}113$ y una temperatura de ebullición de $T_b = 523{,}15$ K. Estos valores se consideran una buena aproximación para alquitranes de otros tipos de biomasa [16].

Viscosidad dinámica de la mezcla de gases

La viscosidad dinámica de la mezcla de gases se puede calcular según el método de Wilke mostrado por Reid et al. en [26]:

$$\eta^g = \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i\eta_i^g}{\sum_{j=1}^{n} x_j\phi_{ij}} \tag{4-9}$$

en la que los parámetros de interacción ϕ_{ij} se pueden encontrar mediante:

$$\phi_{ij} = \frac{\left(1 + \sqrt{\frac{\eta_i^g}{\eta_j^g}} \sqrt[4]{\frac{M_j}{M_i}}\right)^2}{\sqrt{8 + \left(1 + \frac{M_i}{M_j}\right)}} \tag{4-10}$$

donde η_i^g es la viscosidad dinámica, $x_{i,j}$ es la fracción molar y $M_{i,j}$ es la masa molar de cada componente i y j de la mezcla de gases.

4.1.2. Conductividad térmica

Para determinar la conductividad térmica de cada uno de los componentes en función de la temperatura y a presión constante, se compararon los resultados obtenidos con las expresiones en forma de ley de potencias mostradas por Müller en [22] y las expresiones polinomiales mostradas por Reid et al. en [26], con los valores tabulados en Çengel [5]. Se encontró que las expresiones polinomiales mostradas por Reid et al. en [26] son las que más se aproximan a los valores tabulados. Las gráficas comparativas de los resultados obtenidos mediante los diferentes planteamientos, para el CO_2 se muestra en la Figura **4-2**.

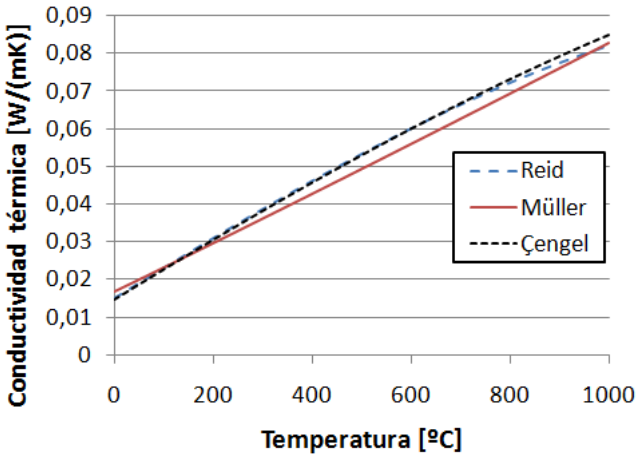


Figura 4-2.: Conductividad térmica del CO_2 en función de la temperatura, obtenidas mediante diferentes planteamientos

Reid et al. en [26] muestra que las conductividades térmicas en función de la temperatura, para una presión constante aproximada de 1 bar, se pueden encontrar mediante un polinomio de la forma:

$$\lambda = a + bT + cT^2 + dT^3 \tag{4-11}$$

con λ en W/(mK) y T en Kelvin. Los coeficientes a, b, c y d para cada uno de los componentes de la mezcla de gases se muestran en la Tabla **4-2**.

Tabla 4-2.: Coeficientes para determinar la conductividad térmica de gases de interés a 1 bar

Símbolo	**a**	**b**	**c**	**d**	**Rango (K)**
CO	$5{,}067 \cdot 10^{-4}$	$9{,}125 \cdot 10^{-5}$	$-3{,}524 \cdot 10^{-8}$	$8{,}199 \cdot 10^{-12}$	115 - 1670
CO_2	$-7{,}215 \cdot 10^{-3}$	$8{,}015 \cdot 10^{-5}$	$5{,}477 \cdot 10^{-9}$	$-1{,}053 \cdot 10^{-11}$	185 - 1670
CH_4	$-1{,}869 \cdot 10^{-3}$	$8{,}727 \cdot 10^{-5}$	$1{,}179 \cdot 10^{-7}$	$-3{,}614 \cdot 10^{-11}$	273 - 1270
H_2	$8{,}099 \cdot 10^{-3}$	$6{,}689 \cdot 10^{-4}$	$-4{,}158 \cdot 10^{-7}$	$1{,}562 \cdot 10^{-10}$	115 - 1470
H_2O	$7{,}341 \cdot 10^{-3}$	$-1{,}013 \cdot 10^{-5}$	$1{,}801 \cdot 10^{-7}$	$-9{,}100 \cdot 10^{-11}$	273 - 1070
N_2	$3{,}919 \cdot 10^{-4}$	$9{,}816 \cdot 10^{-5}$	$-5{,}067 \cdot 10^{-8}$	$1{,}504 \cdot 10^{-11}$	115 - 1470

Conductividad térmica de los alquitranes

La conductividad térmica de los alquitranes se puede calcular a partir de la expresión en forma de ley de potencias mostrada por Müller en [22]:

$$\lambda^g_{alq} = \lambda^g_{0,alq} \left(\frac{T}{T_0}\right)^n \tag{4-12}$$

Un grupo de parámetros adecuados para el uso de la ecuación anterior son mostrados por Wiest [39] y se resumen a continuación:

$$\lambda^g_{0,alq} = 0{,}014\ \mathrm{W/mK} \qquad n = 1{,}5 \qquad T_0 = 273{,}2\,\mathrm{K}$$

Conductividad térmica de la mezcla de gases

La conductividad térmica de la mezcla de gases se puede calcular a partir de la ecuación de Wassijewa mostrada por Reid et al. en [26]:

$$\lambda^g = \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i \lambda^g_i}{\sum_{j=1}^{n} x_j A_{ij}} \tag{4-13}$$

Mason y Saxena sugirieron en Reid et al. [26] que los parámetros de interacción A_{ij} para la conductividad térmica son iguales a los de la viscosidad dinámica ϕ_{ij}, por lo tanto:

$$A_{ij} = \phi_{ij} = \frac{\left(1 + \sqrt{\frac{\eta^g_i}{\eta^g_j}} \sqrt[4]{\frac{M_j}{M_i}}\right)^2}{\sqrt{8 + \left(1 + \frac{M_i}{M_j}\right)}} \tag{4-14}$$

donde λ^g_i es la conductividad térmica, $\eta^g_{i,j}$ es la viscosidad dinámica, $x_{i,j}$ es la fracción molar y $M_{i,j}$ es la masa molar de cada componente i y j de la mezcla de gases.

Transferencia de calor por radiación entre las partículas

La transferencia de calor por radiación entre las partículas, puede ser considerada mediante un término equivalente de conductividad térmica. Dentro de las correlaciones más usadas se encuentran las del tipo Damköhler, como las mostradas en [10]. Según Damköhler [10], la conductividad térmica equivalente debida a la radiación se puede calcular mediante:

$$\lambda_{rad} = 4\frac{\epsilon_P}{2-\epsilon_P}\sigma T^{s^3} d_p \frac{\varepsilon_b}{1-\varepsilon_b} \tag{4-15}$$

donde σ es la constante de Stefan-Boltzmann y ϵ_P es la emisividad de la partícula.

La conductividad térmica efectiva del gas es igual a la suma de las conductividades expresadas mediante las ecuaciones 4-13 y 4-15, ya que ambos procesos ocurren en forma paralelo. Por lo tanto:

$$\lambda_e^g = \lambda^g + \lambda_{rad} \tag{4-16}$$

4.1.3. Calor específico molar

Para determinar el calor específico molar de cada uno de los componentes en función de la temperatura y a presión constante, se compararon los resultados obtenidos con las expresiones en forma de ley de potencias mostradas por Müller en [22] y las expresiones polinomiales mostradas por Reid et al. en [26] y por Çengel en [5], con los valores tabulados en Çengel [5]. Se encontró que las expresiones polinomiales mostradas por Çengel en [5] son las que más se aproximan a los valores tabulados. Las gráficas comparativas de los resultados obtenidos mediante los diferentes planteamientos, para el CO_2 se muestran en la Figura **4-3**.

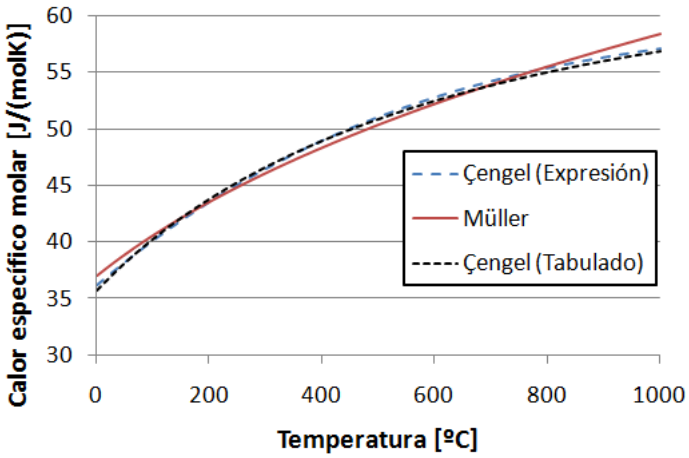


Figura 4-3.: Calor específico molar del CO_2 en función de la temperatura, obtenidas mediante diferentes planteamientos

En [5], Çengel muestra que el calor específico molar en función de la temperatura para cada componente se puede encontrar mediante un polinomio de la forma:

$$C^g_{p,m,i} = a + bT + cT^2 + dT^3 \tag{4-17}$$

con $C^g_{p,m,i}$ en J/(molK) y T en Kelvin. Los coeficientes a, b, c y d para cada uno de los componentes de la mezcla de gases se muestran en la Tabla **4-3**.

Tabla 4-3.: Coeficientes para determinar el calor específico molar de gas ideal de gases de interés

Símbolo	**a**	**b**	**c**	**d**	**Rango (K)**
CO	28,16	$1{,}675 \cdot 10^{-3}$	$5{,}372 \cdot 10^{-6}$	$-2{,}222 \cdot 10^{-9}$	273 - 1800
CO_2	22,26	$5{,}981 \cdot 10^{-2}$	$-3{,}501 \cdot 10^{-5}$	$7{,}469 \cdot 10^{-9}$	273 - 1800
CH_4	19,89	$5{,}021 \cdot 10^{-2}$	$1{,}269 \cdot 10^{-5}$	$-1{,}101 \cdot 10^{-8}$	273 - 1500
H_2	29,11	$-1{,}916 \cdot 10^{-3}$	$4{,}003 \cdot 10^{-6}$	$-8{,}704 \cdot 10^{-10}$	273 - 1800
H_2O	32,24	$1{,}923 \cdot 10^{-3}$	$1{,}055 \cdot 10^{-5}$	$-3{,}595 \cdot 10^{-9}$	273 - 1800
N_2	28,9	$-0{,}1571 \cdot 10^{-2}$	$0{,}8081 \cdot 10^{-5}$	$-2{,}873 \cdot 10^{-9}$	273 - 1800

Calor específico molar de los alquitranes

El calor específico de los alquitranes se puede calcular según Tsonopoulos et al. [31] a partir de un polinomio de segundo grado:

$$C^g_{p,\,alq} = a + bT + cT^2 \tag{4-18}$$

con $C^g_{p,\,alq}$ en J/(kgK) y T en Kelvin. Los coeficientes a, b y c se hayan a partir de las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned}
a &= 4187{,}0(-0{,}32646 + 0{,}02678K_W - CF(0{,}084773 - 0{,}080809\rho_{rel})) \\
b &= 0{,}75366(-1{,}3892 + 1{,}2122K_W - 0{,}0383K_W^2 + CF(2{,}1733 - 2{,}0826\rho_{rel})) \\
c &= 1{,}3566 \cdot 10^{-3}(-1{,}5393 - CF(0{,}78649 - 0{,}70423\rho_{rel}))
\end{aligned} \tag{4-19}$$

El factor de corrección CF se hayan a partir de:

$$\begin{aligned}
CF &= [100((12{,}8/K_W) - 1)((10{,}0/K_W) - 1)]^2 && 10{,}0 \leq K_W \leq 12{,}8 \\
CF &= 0 && \text{otros casos}
\end{aligned} \tag{4-20}$$

El factor de Watson K_W, el cual es un parámetro comúnmente usado para la caracterización de petróleos, se calcula mediante:

$$K_W = \frac{1}{\rho_{rel}} \left(\frac{9}{5}\, T_b \right) \tag{4-21}$$

donde T_b es la temperatura de ebullición en Kelvin de los alquitranes. La masa molar de los alquitranes, necesaria para el cálculo del calor específico en términos molares se determina según Wiest [39] a partir de:

$$M_{alq} = 1{,}6605 \cdot 10^{-5} T_b^{2,1962} \rho_{rel}^{-1,0164} \tag{4-22}$$

con M_{alq} en kg/kmol, T_b en K.

Calor específico molar de la mezcla de gases

El calor específico molar de una mezcla de gases ideales se puede hallar mediante:

$$C_{p,m}^{g} = \sum_{i=1}^{n} x_i C_{p,m,i}^{g} \tag{4-23}$$

donde $C_{p,m,i}^{g}$ son los calores específicos molares de cada uno de los componentes hallados mediante la Ec. 4-17 y x_i son las fracciones molares de cada componente.

4.1.4. Coeficientes de difusión y dispersión

El concepto de difusión hace referencia al transporte neto de masa dentro de una fase única, en ausencia de mezclado (ya sea por medios mecánicos o por convección). Este fenómeno de transporte se presenta por movimientos individuales de las moléculas cuando existen diferencias en la concentración de los componentes del fluido. La difusión no sólo aparece en fluidos que se encuentran en reposo, también aparece en fluidos laminares y turbulentos en su dirección de avance, aunque por lo general resulta ser varias veces inferior en magnitud a los fenómenos de transporte convectivos y suele despreciarse.

Para flujos turbulentos se presenta además de forma paralela a la difusión, una mezcla de los fluidos debido a corrientes de mezclado transversales. Estos flujo de mezclado pueden llegar a ser considerablemente más grandes que los difusivos. Esta combinación de flujos cruzados (debido a flujos turbulentos) y difusión se denomina dispersión y afecta tanto la transferencia de masa como la de calor. Para el análisis y modelación de los fenómenos de transporte es necesaria la determinación de los coeficientes de dispersión (como se muestra en las ecuaciones de balance de masa y de energía de la sección 3.2.1), que describen la magnitud de estos fenómenos. La determinación de estos parámetros se muestra a continuación.

Coeficientes de difusión binarios

Los coeficientes de difusión binarios para una mezcla de gases a bajas presiones pueden ser calculados a partir de correlaciones teóricas y empíricas mostradas en Reid et al. [26]. Allí se hace una revisión y comparación de diferentes métodos de cálculo propuestos por varios

autores y se concluye que la correlación empírica de Fuller es la que menor error presenta con respecto a resultados experimentales. Este método es el recomendado por Reid et al. [26] y es el empleado en este trabajo. La ecuación de cálculo para los coeficientes de difusión binarios es:

$$D_{ij} = \frac{0{,}00143T^{1{,}75}}{PM_{ij}^{0{,}5}\left[(\sum_v)_i^{1/3} + (\sum_v)_j^{1/3}\right]^2} \tag{4-24}$$

donde $M_{i,j}$ es la masa molar media de los componentes i y j dada por:

$$M_{ij} = 2\left(\frac{1}{M_i} + \frac{1}{M_j}\right)^{-1} \tag{4-25}$$

Los términos $\sum_v$ de la Ec. 4-24 para cada componente se determinan mediante la suma de los volúmenes de difusión atómica, los cuales son también mostrados en Reid et al. [26].

Coeficientes de difusión molecular

El método para la determinación de los coeficientes de difusión molecular para gases con múltiples componentes se muestra en Reid et al. [26]. Para los gases, los coeficientes de difusión binarios se asumen como independientes de la composición del gas (algo que no se presenta en el caso de lo líquidos). Bajo esta aproximación, los coeficientes de difusión molecular para gases con múltiples componentes se puede calcular a partir de:

$$D_{i,m} = \left(\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n} \frac{x_j}{D_{ij}}\right)^{-1} \tag{4-26}$$

Coeficientes de dispersión radial de calor y de masa

El coeficiente de dispersión radial para la transferencia de masa se calcula a partir del número de Péclet efectivo según:

$$D_{i,r,m} = \frac{w_0 d_p}{\mathrm{Pe}_{i,r,m}} \tag{4-27}$$

A partir de la analogía entre transferencia de calor y de masa se puede determinar el coeficiente de dispersión radial para la transferencia de calor según:

$$D_{r,th} = \frac{cC_{p,m}w_0 d_p}{\mathrm{Pe}_{r,th}} \tag{4-28}$$

El número de Péclet efectivo es un número de Péclet modificado que tiene en cuenta los efectos de la porosidad y la tortuosidad de la cama. Diversos planteamientos para el cálculo

del número de Péclet efectivo se encuentran disponibles en la literatura entre los que se destacan los presentados en VDI-Wärmeatlas [35], Gunn [13] y Wen y Fan [38]. El mostrado por Gunn en [13] es el que mejor se acopla a mediciones realizadas experimentalmente como las mostradas por Hiby en [14], ya que es el único que recrea la presencia de un máximo en la curva del número de Péclet en función del número de Reynolds, para diversos números de Schmidt, cuando se presentan valores elevados de este último.

Según Gunn [13] el número de Péclet efectivo en la dirección radial para el transporte de masa es:

$$\frac{1}{\mathrm{Pe}_{i,r,m}} = \frac{1}{\mathrm{Pe}_f} + \frac{\varepsilon_b}{\tau \mathrm{Pe}_{i,0,m}} \tag{4-29}$$

y para el transporte de calor:

$$\frac{1}{\mathrm{Pe}_{r,th}} = \frac{1}{\mathrm{Pe}_f} + \frac{\varepsilon_b}{\tau \mathrm{Pe}_{0,th}} \tag{4-30}$$

donde:

$$\mathrm{Pe}_{i,0,m} = \frac{w_0 d_p}{D_{i,m}} \qquad \mathrm{Pe}_{0,th} = \frac{c C_{p,m} w_0 d_p}{\lambda^g} \tag{4-31}$$

El número de Péclet fluido-mecánico Pe_f es función exclusiva del número de Reynolds y representa la dispersión radial causada por la convección en el sentido axial y se calcula según Gunn [13] mediante:

$$\mathrm{Pe}_f = 40 - 29 \exp\left(-7/\mathrm{Re}\right) \tag{4-32}$$

La tortuosidad τ para una cama es una medida que relaciona la longitud que debe recorrer un fluido en presencia de la cama de partículas con la que recorrería en ausencia de estas. La tortuosidad para una cama aleatoria de partículas esféricas se puede tomar como $\tau = 1{,}2$.

4.2. Fase sólida

Como se mencionó anteriormente no se tendrán en cuenta posibles gradientes de temperatura ni de concentración de las diferentes especies, que se puedan presentar en el interior de las partículas de la fase sólida (Modelo de fase sólida homogénea). Estas propiedades serán las mismas tanto para la superficie de la partícula como para su interior.

Al ser la biomasa (y los productos sólidos formados después de su transformación) un material poroso, se considera que la fase sólida está compuesta por el sólido y los gases que se albergan en sus poros. Por tanto, las propiedades de las partículas sólidas deben ser determinadas por medio de propiedades efectivas que combinen las propiedades de las dos fases. Otro punto

a tener en cuenta es que la composición de la fase sólida y de los gases va cambiando a medida que se presentan los procesos de transformación, lo cual influye en las propiedades a determinar. A continuación se muestran los procedimientos de cálculo de la conductividad térmica efectiva y del calor específico efectivo de la fase sólida, necesarios para el desarrollo de este modelo.

4.2.1. Conductividad térmica efectiva

En el trabajo presentado por Vervuert [36] se describe un método para calcular la conductividad térmica de la fase sólida en función de la temperatura de la misma. En él se muestra que esta propiedad se puede determinar a partir de la teoría de transferencia de calor, en la que se reconoce una proporcionalidad directa entre la conductividad térmica y el calor específico volumétrico del sólido. Según esto la conductividad térmica de la fase sólida se determina a partir de:

$$\lambda^s = k_\lambda C_m^s \frac{\rho^s}{M^s} \tag{4-33}$$

La constante de proporcionalidad también es mostrada por Vervuert en [36] y es igual a $k_\lambda = 6{,}414 \cdot 10^{-7}\mathrm{m}^2/\mathrm{s}$, y se determinó a partir de mediciones de la conductividad térmica de grafito amorfo a 300 °C.

La conductividad térmica efectiva para la fase sólida homogénea es función tanto de la conductividad térmica de la fase sólida (expresada mediante al Ec. 4-33) como de la conductividad térmica de la fase gaseosa (Ec. 4-13). La determinación de ésta se realiza a partir del modelo de celda de Missenard empleado por Vervuert [36], Jensen [16] y Wiest [39]:

$$\lambda_e^s = (1-k)\lambda^s \left(1 + \frac{\varepsilon_b(\lambda^g - \lambda^s)}{\lambda^g - \varepsilon_b^{1/3}(\lambda^g - \lambda^s)}\right) + k\lambda^g \left(1 + \frac{(1-\varepsilon_b)(\lambda^s - \lambda^g)}{\lambda^s - (1-\varepsilon_b)^{1/3}(\lambda^s - \lambda^g)}\right) \tag{4-34}$$

El factor de peso k de la Ec. 4-34 depende de la fase que se encuentre dispersa en el elemento a analizar. Cuando la fase sólida es la que se encuentra dispersa (como en los lechos) se debe tomar $k = 1$. Por el contrario si la fase dispersa es la gaseosa (como en los sólidos porosos) se debe tomar $k = 0$. Según esto, el valor adecuado para el cálculo de la conductividad térmica efectiva es $k = 0$. Cabe anotar que la conductividad térmica de la fase gaseosa a emplear en la Ec. 4-34, es la conductividad dada por la Ec. 4-13 y no por la 4-15, ya que se considera despreciable la transferencia de calor por radiación que pueda presentarse en los poros de la fase sólida.

4.2.2. Calor específico molar

El calor específico de la fase sólida en función de la temperatura se puede determinar con la ayuda de la teoría del estado sólido de Einstein. En esta teoría se consideran los átomos

del sólido como un conjunto de osciladores armónicos cuánticos que vibran con una misma frecuencia. El calor específico molar de la fase sólida según ésta teoría se determina según:

$$C_m^s = 3R_u \frac{\left(\frac{T_E}{T}\right)^2 \exp\left(\frac{T_E}{T}\right)}{\left(\exp\left(\frac{T_E}{T}\right) - 1\right)^2} \tag{4-35}$$

Los resultados de la aplicación de la Ec. 4-35 para la determinación del calor específico se adapta bien a los valores experimentales, excepto a muy bajas temperaturas, donde debido al rápido decrecimiento del término exponencial, los valores teóricos disminuyen mucho más rápido que los experimentales. La temperatura característica de Einstein T_E es un parámetro que depende del sólido y se determina mediante el ajuste del modelo a datos experimentales.

El calor específico de la madera de haya es de 1339 J/kgK a 300 K [2]. A partir de este valor se determinó que la temperatura de Einstein para la madera de haya es de $T_E = 985\,\mathrm{K}$. Para la temperatura de Einstein del pirolizado se tomó el valor determinado por Wiest [39] para el pirolizado de maíz ($T_E = 1179{,}1\,\mathrm{K}$). El calor específico de la fase sólida en la transición entre biomasa y pirolizado se calcula mediante interpolación entre los dos valores dependiendo del grado de conversión de la misma.

$$C_m^s = (1-\alpha)C_{m,BM}^s + \alpha C_{m,pir}^s \tag{4-36}$$

En la ecuación de balance de energía para la fase sólida (Ec. 3-6) se tiene el producto $(cC_{p,m})_e^s$. Este término se calcula a partir de:

$$(cC_{p,m})_e^s = \varepsilon_p (cC_{p,m})^g + (1-\varepsilon_p)(cC_{p,m})^s \tag{4-37}$$

donde el término $(cC_{p,m})^g$ corresponde a los gases albergados en los poros de la fase sólida.

4.2.3. Determinación de la velocidad de la fase sólida y encogimiento de las partículas

La velocidad a la cual se mueve la fase sólida en cada elemento de volumen se puede determinar a partir de la velocidad de pérdida de masa que se presenta en el volumen de control. Esta pérdida de masa está dada por:

$$r = V \sum_{i=1}^{n} r_{v,i} M_i \tag{4-38}$$

donde V es el volumen de referencia con el que se calculó la velocidad de reacción.

Una representación de la manera en la que se simula el movimiento de la cama debido al encogimiento de las partículas se muestra en la Figura **4-4**. Inicialmente el volumen de la fase

sólida ocupa todo el volumen de control (Figura **4-4 (1)**). Debido a las reacciones químicas presentes, se produce una pérdida de masa de la fase sólida haciendo que una parte del volumen de control quede libre (Figura **4-4 (2)**). El volumen libre se llena con fase sólida que se desplaza desde el volumen de control superior; el volumen libre que queda en la parte superior del reactor es llenado con nueva biomasa (Figura **4-4 (3)**). La fase sólida en cada elemento de volumen se asume como idealmente mezclada, calculándose las propiedades correspondientes a la fase sólida como la ponderación entre las propiedades de la biomasa existente en el volumen de control y la que se desplaza desde el volumen de control superior (Figura **4-4 (4)**).

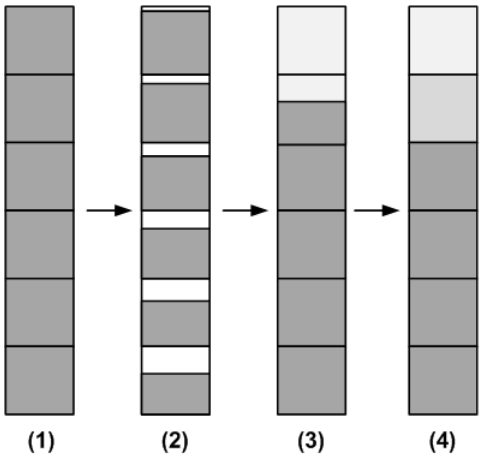


Figura 4-4.: Modelamiento del movimiento de la cama en la dirección axial

La velocidad a la que se mueve la fase sólida en cada volumen de control está dada por el flujo de masa que debe desplazarse hacia el volumen de control inferior para llenar el volumen libre creado por el encogimiento de las partículas.

El nuevo volumen de las partículas que componen la fase sólida se calcula a partir de:

$$V_p = \frac{m_p}{\rho^s(1-\varepsilon_p)} \tag{4-39}$$

donde la masa de las partículas de la fase sólida se determina mediante:

$$m_p = m_{p,0} \sum y_i^s \tag{4-40}$$

4.2.4. Densidad y porosidad de la fase sólida

Debido a los procesos de transformación de la fase sólida que se presentan en el interior del reactor, la porosidad de las partículas ε_p y su densidad ρ^s no son constantes y varían a medida que estos procesos se presentan. La porosidad y la densidad pueden ser determinados

por interpolación entre las propiedades de la biomasa y del pirolizado como se muestra en Jensen [16], dependiendo del grado de conversión de la biomasa α, así:

$$\begin{aligned} \varepsilon_p &= (1-\alpha)\varepsilon_{p,BM} + \alpha\varepsilon_{p,pir} \\ \rho^s &= (1-\alpha)\rho^s_{BM} + \alpha\rho^s_{pir} \end{aligned} \tag{4-41}$$

Este grado de conversión es $\alpha = 0$ cuando la biomasa no ha sufrido transformación alguna y se incrementa en función de la pérdida de masa normalizada, alcanzado el valor $\alpha = 1$ cuando la biomasa se transforma totalmente en carbonizado. La porosidad y la densidad de la fase sólida para la madera de haya y su carbonizado se muestran en Jensen [16], en donde se realiza una revisión de los valores mostrados en la literatura. Los valores tomados se muestran en la Tabla **4-4**.

Tabla 4-4.: Densidad y porosidad de la madera de haya y su carbonizado

	ε_p	$\rho^s\ [kg/m^3]$
Madera de haya	0,5	1500
Carbonizado 1	0,8	2000
Carbonizado 2	0,9	2000

donde Carbonizado 1 y Carbonizado 2 representan la porosidad y la densidad del carbonizado medidos después de la pirólisis y durante la gasificación respectivamente.

4.3. Transferencia de calor y de masa

Las correlaciones tomadas de la literatura para el cálculo de los coeficientes de transferencia de calor y de masa se muestran a continuación.

4.3.1. Coeficiente de transferencia de calor entre la fase sólida y la fase gaseosa

Este coeficiente se determina a partir del Número de Nusselt como:

$$h_{GP} = \frac{Nu_{GP}\lambda^g}{d_p} \tag{4-42}$$

Según Schlünder y Tsotsas [29], el número de Nusselt para una cama de partículas se puede determinar mediante:

$$Nu_{GP} = Kf_{\varepsilon_b}Nu_{EK} \tag{4-43}$$

donde Nu_{EK} es el número de Nusselt para la transferencia de calor sobre una sola partícula, f_{ε_b} es un factor de corrección que tiene en cuenta la presencia de otras partículas en la cama

que alteran el flujo de gas, y K es un factor de corrección que toma en cuenta la influencia de la dirección del flujo de calor (calentamiento o enfriamiento) sobre el coeficiente de transferencia de calor en función de la temperatura de los cuerpos. La longitud característica para el cálculo del número de Nusselt y el número de Reynolds para partículas esféricas es el diámetro de la partícula d_p.

Cuando el fluido es un gas, el factor de corrección K según Schlünder y Tsotsas [29] es:

$$K = \left(\frac{T^g}{T^s}\right)^{0,12} \tag{4-44}$$

El factor de corrección f_{ε_b} para una cama de partículas esféricas según Schlünder y Tsotsas [29] es:

$$f_{\varepsilon_b} = 1 + 1{,}5(1 - \varepsilon_b) \tag{4-45}$$

Según Gnielinski [11] y Schlünder y Tsotsas [29], el número de Nusselt promedio para una partícula esférica se puede calcular mediante:

$$Nu_{EK} = 2 + \sqrt{Nu_{lam}^2 + Nu_{turb}^2} \tag{4-46}$$

donde el número de Nusselt promedio para flujo laminar es:

$$Nu_{lam} = 0{,}664 Re_{eq}^{1/2} Pr^{1/3} \tag{4-47}$$

y para flujo turbulento:

$$Nu_{turb} = \frac{0{,}037 Re_{eq}^{0,8} Pr}{1 + 2{,}443 Re_{eq}^{-0,1} \left(Pr^{2/3} - 1\right)} \tag{4-48}$$

El rango en la cuál es válida la Ec. 4-46 es:

$$0{,}1 \leq Re_{eq} \leq 10^7 \qquad\qquad 0{,}5 < Pr < 2500$$

El número de Reynolds equivalente Re_{eq} es un número de Reynolds modificado que tiene en cuenta la influencia de la convección natural en el coeficiente de transferencia de calor, y se calcula según Schlünder y Tsotsas [29] mediante:

$$Re_{eq} = \sqrt{Re_{\varepsilon_b}^2 + \frac{Gr}{2{,}5}} \tag{4-49}$$

donde el número de Grashof Gr se encuentra mediante:

$$Gr = \frac{C Re_{\varepsilon_b}^2}{2} \tag{4-50}$$

Para números de Prandtl menores a 20, Schlünder y Tsotsas [29] recomienda usar $C \approx 5$ ya que se ajusta acertadamente a resultados experimentales.

4.3.2. Coeficiente de transferencia de masa entre la fase sólida y la fase gaseosa

El coeficiente de transferencia de masa entre la fase sólida y la fase gaseosa β_{GP} se calcula de manera similar al coeficiente de transferencia de calor h_{GP} mediante:

$$\beta_{GP} = \frac{Sh_{GP} D_{i,m}}{d_p} \tag{4-51}$$

donde los números de Nusselt Nu_{GP} y Nu_{EK} dados por las ecuaciones 4-43 y 4-46 se reemplazan por los números de Sherwood Sh_{GP} y Sh_{EK}, y el número de Prandtl Pr por el número de Schmidt Sc.

4.3.3. Coeficiente de transferencia de calor entre la pared y la fase gaseosa

Este coeficiente es difícil de determinar experimentalmente debido a la transferencia de calor simultánea entre la pared y las partículas. Sin embargo, el coeficiente de transferencia de calor puede determinarse de experimentos de transferencia de masa a través de la analogía entre transferencia de calor y transferencia de masa como se muestra en Yagi y Wakao [42].

El coeficiente de transferencia de calor entre la pared y la fase gaseosa según Yagi y Wakao [42] se encuentra a partir del número de Nusselt como:

$$h_{WG} = \frac{Nu_{WG} \lambda^g}{d_p} \tag{4-52}$$

donde:

$$\begin{aligned} Nu_{WG} &= 0{,}6 Pr^{1/2} Re^{1/2} && 1 \leq Re \leq 40 \\ Nu_{WG} &= 0{,}2 Pr^{1/3} Re^{0{,}8} && 40 < Re < 2000 \end{aligned} \tag{4-53}$$

Otras correlaciones para el cálculo del coeficiente de transferencia de calor entre la pared y la fase gaseosa se encuentran en Dixon y Cresswell [8]. Sin embargo estas correlaciones son válidas únicamente para números de Reynolds elevados (mayores a 100), que están muy por encima de los encontrados en estos reactores.

4.3.4. Coeficiente de transferencia de calor entre la pared y la fase sólida

La transferencia de calor por conducción entre la pared y la fase sólida se puede considerar a partir de un coeficiente de transferencia de calor equivalente. Para determinar el coeficiente de transferencia de calor equivalente se utiliza la correlación mostrada por Dixon y Cresswell

en [8], en el que se considera el caso ideal de transferencia de calor entre una pared plana y un arreglo de esferas.

$$h_{WP} = 2{,}12\frac{\lambda^s}{d_p} \tag{4-54}$$

4.3.5. Coeficiente de transferencia de calor por radiación entre la pared y la fase sólida

Este coeficiente se puede determinar mediante la correlación mostrada por Çengel en [5] y por Schlünder y Tsotsas en [29] para placas paralelas infinitamente grandes:

$$h_{rad,WP} = \frac{C_{WP}(T_W^4 - T_P^4)}{T_W - T_P} \tag{4-55}$$

donde:

$$C_{WP} = \frac{\sigma}{\frac{1}{\epsilon_W} + \frac{1}{\epsilon_P} - 1} \tag{4-56}$$

en la que σ es la constante de Stefan-Boltzmann y ϵ_W y ϵ_P son las emisividades de la pared y de la partícula respectivamente.

Para el cálculo del coeficiente de transferencia de calor se tomó de Çengel [5] $\epsilon_W = 0{,}6$ y $\epsilon_P = 0{,}94$ que son valores aproximados para la emisividad del acero y de la madera de haya.

4.4. Perfiles de porosidad de la cama y de velocidad de gases dentro de ella

4.4.1. Perfil de porosidad de la cama

La porosidad de la cama ε_b puede considerarse como constante para un lecho de longitud infinita. Sin embargo dentro de un reactor, la porosidad de la cama se ve perturbada por la presencia de las paredes del mismo, las cuales hacen que la porosidad no sea constante y que se cree un perfil para la sección transversal del reactor. Dicho perfil inicia con un punto máximo en la pared del reactor donde la porosidad es igual a 1 y continúa con fluctuaciones periódicas que son amortiguadas rápidamente, desapareciendo después de unos pocos diámetros de partículas hasta alcanzar un valor constante. Cuando las partículas tienen una superficie rugosa o una forma ligeramente redondeada, las fluctuaciones son muy débiles [16, 32].

El perfil de porosidad se puede determinar según Vortmeyer y Haidegger [37] mediante:

$$\varepsilon_b = \varepsilon_{b,\infty}\left[1 + C\exp\left(1 - 2\frac{r_{max} - r}{d_P}\right)\right] \tag{4-57}$$

Para calcular el factor C se debe resolver la Ec. 4-57 para un punto donde la porosidad de la cama sea conocida. Como se mencionó anteriormente, en la pared del reactor ($r = r_{max}$) la porosidad es igual a 1 ($\varepsilon_b = 1$), por lo tanto despejando C de la Ec. 4-57 se obtiene:

$$C = \frac{(1/\varepsilon_{b,\infty}) - 1}{e^1} \tag{4-58}$$

La Ec. 4-57 muestra el valor medio de la porosidad en la zona indicada sin mostrar las oscilaciones periódicas. El perfil de porosidad de la cama en función del radio, obtenido con la Ec. 4-57 para diferentes relaciones entre el diámetro del reactor y el diámetro de partícula (D_r/d_P) se muestra en la Figura **4-5**. Allí se observa que el perfil de porosidad tiende a ser uniforme para toda la sección transversal del reactor, a medida que la razón D_r/d_P aumenta.

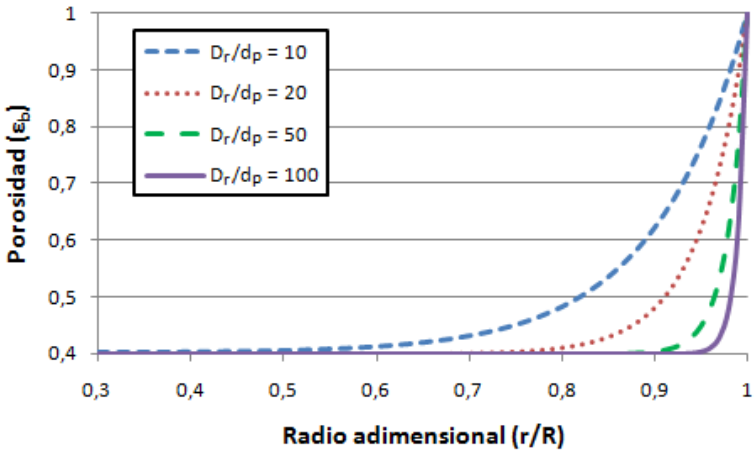


Figura 4-5.: Perfil de porosidad ε_b en función del radio adimensional

4.4.2. Perfil de velocidad de la fase gaseosa

Por lo general, en la modelación de reactores de lecho fijo, se supone que la velocidad del gas (ω_0) para toda la sección transversal es constante cuando la temperatura también lo es. Esto ocurre sólo si la porosidad es constante, caso que se presenta únicamente cuando la razón D_r/d_P tiende a infinito como queda evidenciado en la Figura **4-5**. Una serie de expresiones que permiten encontrar el perfil de velocidades para la sección transversal del reactor cuando la temperatura es constante se encuentran en Tsotsas [32]. Las ecuaciones se muestran a continuación:

$$\frac{\omega_0(r)}{\omega_0} = b\{1 - [1 - nR^*(1 - r^*)]\exp[aR^*(1 - r^*)]\} \tag{4-59}$$

donde:

$$a = \frac{4n}{(4-n)} \qquad r^* = r/R \qquad R^* = R/d_p \tag{4-60}$$

$$b = \frac{R^{*2}}{2}\left[\frac{R^{*2}}{2} - \frac{(nR^* - 1)(aR^* + 1)}{a^2} + n\left(\frac{R^{*2}}{a} + \frac{2R^*}{a^2} + \frac{2}{a^3}\right)\ldots \right.$$
$$\left. \ldots - \frac{\exp(aR^*)}{a^2}\left(1 - nR^* + \frac{2n}{a}\right)\right]^{-1} \tag{4-61}$$

El coeficiente n se encuentra a partir del número de Reynolds así:

$$10^{-1} \leq \mathrm{Re}_{\varepsilon_b} < 10^0 \longmapsto n = 112{,}5 - 26{,}31\mathrm{Re}_{\varepsilon_b} + 10{,}97\mathrm{Re}_{\varepsilon_b}^2 - 0{,}1804\mathrm{Re}_{\varepsilon_b}^3 \tag{4-62a}$$

$$10^0 \leq \mathrm{Re}_{\varepsilon_b} < 10^3 \longmapsto n = -1803 + 201{,}62(\ln \mathrm{Re}_{\varepsilon_b} + 4)\ldots$$
$$\ldots - 3737(\ln \mathrm{Re}_{\varepsilon_b} + 4)^{1/2} + 5399(\ln \mathrm{Re}_{\varepsilon_b} + 4)^{1/3} \tag{4-62b}$$

$$\mathrm{Re}_{\varepsilon_b} \geq 10^3 \longmapsto n = 27 \tag{4-62c}$$

En la Figura **4-6** se muestran los perfiles de velocidad para diferentes números de Reynolds en función del radio del reactor obtenidos con estas expresiones. Como se puede observar en la gráfica, el perfil de velocidad tiende a ser uniforme cuando el número de Reynolds aumenta.

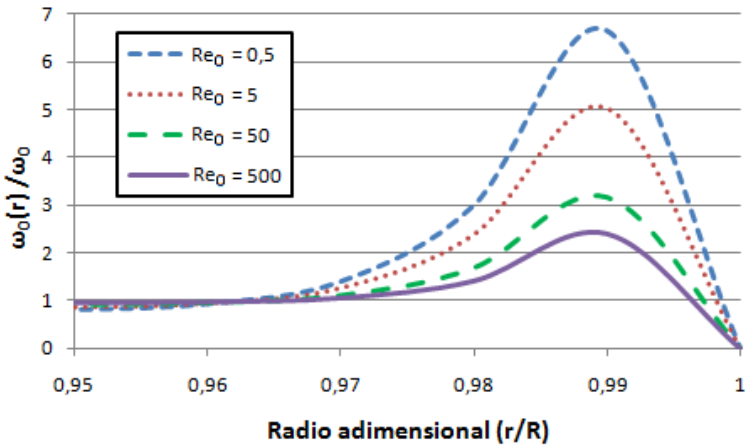


Figura 4-6.: Perfil de velocidad del gas ω^g para diferentes números de Reynolds en función del radio

Con base en los resultados mostrados en la Figura **4-6** y teniendo en cuenta que las condiciones de operación del gasificador de lecho fijo, se concluye que la velocidad de los gases en la sección transversal del reactor se puede suponer constante y por lo tanto no es necesario el planteamiento y solución de ecuaciones de cantidad de movimiento para determinarlas.

4.4.3. Determinación de la velocidad de la fase gaseosa

La presión dentro del reactor y por lo tanto de la fase gaseosa se mantiene constante a una presión de $P = P_{atm} = 100$ kPa. En el presente modelamiento no se tienen en cuenta los balances de cantidad de movimiento, sin embargo, se observa a partir de la ecuación de los gases ideales que al ser la presión al interior del reactor constante, se producirá un aumento en el volumen del gas, debido a la dilatación térmica causada por los cambios de temperatura y al cambio en la masa del gas causada por las reacciones químicas. Este aumento en el volumen del gas hace que el volumen ocupado por éste sea mayor al del volumen de control. Esta diferencia volumétrica debe ser evacuada a través de las áreas superficiales del elemento de volumen en el intervalo de tiempo analizado. Debido a las características de operación del equipo se asume que la evacuación se presenta solamente a través del área inferior del volumen de control, lo que genera un aumento en la velocidad de la fase gaseosa.

La velocidad de la fase gaseosa en el área inferior del volumen de control se determina mediante el planteamiento de la ecuación de balance de masa para el elemento de volumen, conociendo la concentración del gas al inicio y al final del intervalo de tiempo en función de la temperatura y el cambio en el número de moles del gas debido al proceso de secado y las reacciones químicas de pirólisis y gasificación. La velocidad de la fase gaseosa se despeja por lo tanto de la siguiente expresión:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\frac{\partial(\omega_{ax}^{g} c)}{\partial z} + \text{Generación} \tag{4-63}$$

5. Procesos de transformación de la biomasa

Los procesos de transformación de la biomasa que se presentan al interior del gasificador (Figura **3-1**) son el secado, la pirólisis y la gasificación. Dichos procesos se presentan de manera independiente y secuencial a medida que la biomasa fluye a lo largo del reactor e incrementa su temperatura. Estos procesos se pueden modelar de manera independiente y posteriormente ser vinculados en el desarrollo del modelo general. Como se explicó en el capítulo 4, la biomasa empleada para el desarrollo del modelo es madera de haya debido a la disponibilidad tanto de cinéticas de reacción como de pruebas experimentales para realizar la validación del modelo. A continuación se analizan cada uno de los procesos y se describen los enfoques empleados para su modelación.

5.1. Proceso de secado

El proceso de secado se analiza con ayuda del modelo planteado por Vervuert [36] para el secado de carbón. Los planteamientos realizados en este modelo pueden ser utilizados para el secado de biomasa, ya que no muestra ninguna limitante que impida su aplicación en otros materiales. Este modelo no se integra de manera directa a las ecuaciones de balance de energía y de masa. En su lugar se basa en la corrección posterior de los valores encontrados a partir de estos balances para tener en cuenta el secado de la biomasa. En la Figura **5-1** se muestra un diagrama de flujo que resume el modelo de secado empleado. Este modelo se describe detalladamente en las secciones siguientes.

5.1.1. Secado de biomasa

A partir del desarrollo de la ecuación de balance energía se determina la temperatura de la fase sólida en el volumen de control analizado, el cuál posee un contenido de humedad específico. Dependiendo de los valores de la humedad y la temperatura se pueden presentar los siguientes casos:

1. Que la temperatura de la fase sólida en el volumen de control sea menor a la temperatura de evaporación del agua a la presión del reactor ($T^s < 100$ °C).

2. Que la temperatura de la fase sólida en el volumen de control sea mayor a la temperatura de evaporación del agua a la presión del reactor ($T^s > 100$ °C) y el contenido de humedad de la misma sea mayor a cero ($y^s_{H_2O} > 0$).

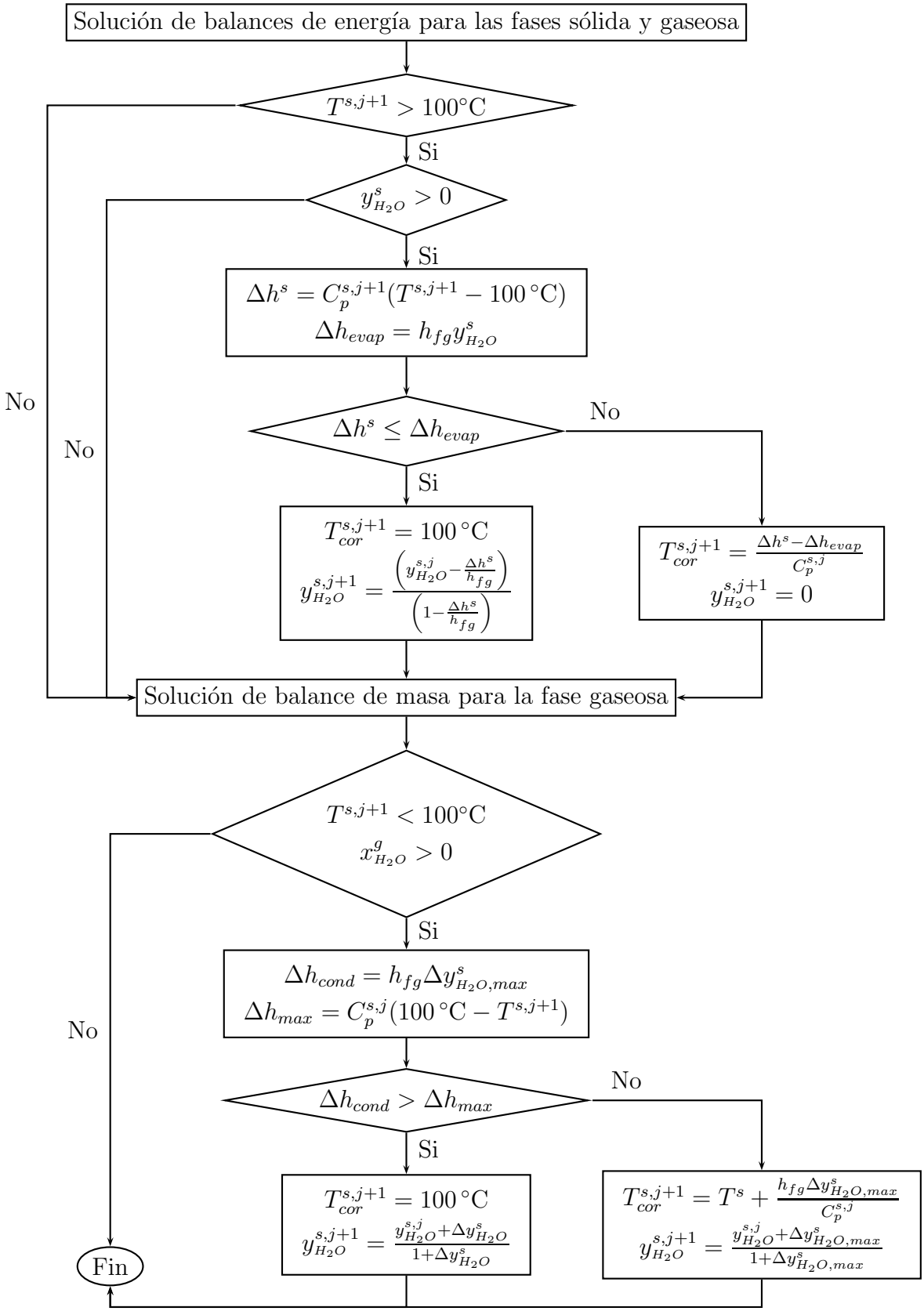


Figura 5-1.: Modelo de secado de biomasa

3. Que la temperatura de la fase sólida en el volumen de control sea mayor a la temperatura de evaporación del agua a la presión del reactor ($T^s > 100$ °C) y el contenido de humedad de la misma sea cero ($y^s_{H_2O} = 0$).

Para los casos 1 y 3 no es necesario realizar ninguna corrección ni en la temperatura, ni en la humedad de la fase sólida. Al analizar el caso 2 se observa que se tendría agua en forma líquida almacenada en la biomasa a temperaturas por encima de la temperatura de cambio de fase del agua para la presión dada, lo cual es físicamente imposible. Por lo tanto, para este caso se debe efectuar una corrección en la temperatura y en el contenido de humedad de la fase sólida.

Cuando la fase sólida se calienta por encima de la temperatura de evaporación del agua, se produce un cambio en la entalpía de ésta equivalente a:

$$\Delta h^s = C_p^{s,j+1}(T^{s,j+1} - 100\,°\mathrm{C}) \tag{5-1}$$

Esta entalpía representa la energía disponible para evaporar la humedad contenida en la fase sólida y se emplea como parámetro para realizar las correcciones en la temperatura y en el contenido de humedad de la fase sólida. La entalpía necesaria para evaporar toda la humedad contenida en la fase sólida para el volumen de control a analizar es:

$$\Delta h_{evap} = h_{fg} y^s_{H_2O} \tag{5-2}$$

Dependiendo de las proporciones de Δh^s y Δh_{evap} se pueden presentar dos casos, los cuales se analizan a continuación.

Caso 1: $\Delta h^s \leq \Delta h_{evap}$

En este caso la energía disponible para evaporar la humedad contenida en la fase sólida en el volumen de control logra evaporar una fracción de ésta. Sin embargo no es suficiente para secarla por completo. El cambio en la entalpía de la fase sólida para este caso es equivalente a:

$$\Delta h^s = h_{fg} \Delta y^s_{H_2O} \tag{5-3}$$

La temperatura corregida de la fase sólida en el volumen de control para este caso será la de evaporación del agua, es decir $T^{s,j+1}_{cor} = 100\,°\mathrm{C}$, ya que se tendrá en ella agua tanto en estado líquido como en estado gaseoso en sus poros. El cambio en el contenido de agua de la fase sólida, es igual al cambio en la masa de agua presente en esta con respecto a la masa total inicial.

$$\Delta y^s_{H_2O} = \frac{\Delta m^s_{H_2O}}{m^{s,j}} = \frac{m^{s,j}_{H_2O} - m^{s,j+1}_{H_2O}}{m^{s,j}} = \frac{\Delta h^s}{h_{fg}} \tag{5-4}$$

La fracción másica de agua $y^s_{H_2O}$ de la fase sólida siempre está relacionada con la masa total de la misma. Es decir:

$$y^{s,j}_{H_2O} = \frac{m^{s,j}_{H_2O}}{m^{s,j}} \qquad , \qquad y^{s,j+1}_{H_2O} = \frac{m^{s,j+1}_{H_2O}}{m^{s,j+1}} \tag{5-5}$$

Relacionando las ecuaciones 5-4 y 5-5 y reacomodando los términos se obtiene:

$$y^{s,j+1}_{H_2O} = \frac{\left(y^{s,j}_{H_2O} - \frac{\Delta h^s}{h_{fg}}\right)}{\left(1 - \frac{\Delta h^s}{h_{fg}}\right)} \tag{5-6}$$

Caso 2: $\Delta h^s > \Delta h_{evap}$

En este caso la energía suministrada al volumen de control en la iteración a analizar, es suficiente para evaporar toda el agua contenida en la fase sólida. Adicionalmente, la energía disponible para el secado que no se empleó en este proceso, eleva la temperatura de la fase sólida por encima de la temperatura de cambio de fase del agua ($T^{s,j+1}_{cor} > 100\,°\mathrm{C}$). Para este caso se tiene que:

$$\Delta y^s_{H_2O} = y^{s,j}_{H_2O} \qquad\qquad y^{s,j+1}_{H_2O} = 0 \tag{5-7}$$

La energía disponible para elevar la temperatura de la fase sólida por encima de la temperatura de cambio de fase del agua es:

$$\Delta h^s_{cal} = \Delta h^s - \Delta h_{evap} = C^{s,j}_p (T^{s,j+1}_{cor} - 100\,°\mathrm{C})$$

A partir de la ecuación anterior se encuentra la temperatura corregida para el volumen de control en el intervalo de tiempo analizado:

$$T^{s,j+1}_{cor} = \frac{\Delta h^s - \Delta h_{evap}}{C^{s,j}_p} \tag{5-8}$$

5.1.2. Condensación de vapor de agua

Después de corregir la temperatura y el contenido de humedad de la fase sólida se resuelven los balances de masa para cada una de las especies de la fase gaseosa y se determina la concentración de cada una de ellas en el volumen de control. Debido a los procesos de transporte de masa que tienen lugar en el reactor, parte del agua evaporada en un volumen de control puede trasladarse a otro con una temperatura menor a la de cambio de fase del agua ($T^s < 100\,°\mathrm{C}$). Cuando este caso se presenta se debe modelar la condensación de esta fracción de vapor de agua mediante la corrección de la temperatura y el contenido de humedad de la fase sólida, así como de la concentración de vapor de agua en la fase gaseosa. La cantidad de vapor de agua de la fase gaseosa que se condensa pasa a formar parte de la

fase sólida, incrementando así su humedad. La masa de vapor de agua que puede condensarse en el volumen de control es:

$$m^g_{H_2O} = x^g_{H_2O} c^g V^g M_{H_2O} \tag{5-9}$$

La fracción másica máxima de agua que puede condensarse es por lo tanto:

$$\Delta y^s_{H_2O,max} = \frac{m^g_{H_2O}}{m^{s,j}} \tag{5-10}$$

La energía que se libera cuando todo el vapor de agua contenido en la fase gaseosa se condensa es:

$$\Delta h_{cond} = h_{fg} \Delta y^s_{H_2O,max} \tag{5-11}$$

La energía liberada en el proceso de condensación ocasiona un aumento en la temperatura del elemento de volumen, la cual puede llegar máximo hasta la temperatura de cambio de fase del agua. Por lo tanto, el cambio máximo en la entalpía que se puede tener en la fase sólida del elemento de volumen es:

$$\Delta h_{max} = C^{s,j}_p (100\,^\circ\mathrm{C} - T^{s,j+1}) \tag{5-12}$$

Dependiendo de las proporciones de Δh_{cond} y Δh_{max} se pueden presentar dos casos, los cuales se analizan a continuación.

Caso 1: $\Delta h_{cond} > \Delta h_{max}$

Cuando esto ocurre solamente se puede condensar una parte del vapor de agua contenido en la fase gaseosa, ya que de lo contrario la temperatura en el elemento de volumen sería superior a la temperatura de cambio de fase del agua. El vapor de agua no condensado permanece en ese estado en la fase gaseosa sin tener influencia en el campo de temperaturas.

La temperatura corregida de la fase sólida en el volumen de control para este caso será la de evaporación del agua, es decir $T^{s,j+1}_{cor} = 100\,^\circ\mathrm{C}$. El nuevo contenido de agua de la fase sólida se puede encontrar conociendo el máximo que se pudo condensar $\Delta y^s_{H_2O}$ a partir de:

$$C^{s,j}_p (100\,^\circ\mathrm{C} - T^{s,j+1}) = h_{fg} \Delta y^s_{H_2O}$$

de donde se obtiene:

$$\Delta y^s_{H_2O} = \frac{C^{s,j}_p (100\,^\circ\mathrm{C} - T^{s,j+1})}{h_{fg}} \tag{5-13}$$

El cambio en el contenido de agua de la fase sólida para el intervalo de tiempo analizado, es igual al cambio en la masa de agua presente en esta con respecto a la masa total inicial:

$$\Delta y^s_{H_2O} = \frac{\Delta m^s_{H_2O}}{m^{s,j}} = \frac{m^{s,j+1}_{H_2O} - m^{s,j}_{H_2O}}{m^{s,j}} \tag{5-14}$$

Relacionando las ecuaciones 5-5 y 5-14 y reacomodando los términos se obtiene:

$$y_{H_2O}^{s,j+1} = \frac{y_{H_2O}^{s,j} + \Delta y_{H_2O}^{s}}{1 + \Delta y_{H_2O}^{s}} \tag{5-15}$$

Caso 2: $\Delta h_{cond} \leq \Delta h_{max}$

Cuando esto ocurre todo el vapor de agua contenido en la fase gaseosa se condensa. La temperatura corregida para el elemento de volumen se determina a partir de:

$$\Delta h_{cond} = C_p^{s,j}(T_{cor}^{s,j+1} - T^{s,j+1}) = h_{fg}\Delta y_{H_2O,max}^{s} \tag{5-16}$$

de donde se obtiene:

$$T_{cor}^{s,j+1} = T^{s} + \frac{h_{fg}\Delta y_{H_2O,max}^{s}}{C_p^{s,j}} \tag{5-17}$$

Mediante un análisis similar al realizado para el caso anterior se encuentra que el nuevo contenido de agua de la fase sólida está dado por:

$$y_{H_2O}^{s,j+1} = \frac{y_{H_2O}^{s,j} + \Delta y_{H_2O,max}^{s}}{1 + \Delta y_{H_2O,max}^{s}} \tag{5-18}$$

5.2. Proceso de pirólisis

La cinética de reacción para la pirólisis de biomasa debe cumplir con los siguientes requisitos para el desarrollo del modelo aquí presentado:

- Debe permitir calcular la composición de la fase gaseosa durante el proceso en cualquier instante de tiempo.
- Debe tener en cuenta tanto las reacciones primarias de pirólisis como las secundarias, en las cuales se presenta la desintegración de los alquitranes generados en las reacciones primarias.
- El balance de masa debe cumplirse para cualquier instante de tiempo durante el desarrollo del proceso.

5.2.1. Reacciones primarias

Para la determinación de las velocidades de reacción para las reacciones primarias de pirólisis se toman en cuenta las principales especies en las que se descompone la biomasa durante el proceso, las cuales son: CO, CO_2, CH_4, H_2O, H_2 y alquitranes. Este proceso se puede analizar a partir de un mecanismo de reacciones paralelas independientes.

Según Rummer et al. [28] la velocidad de reacción se modela mediante un esquema formal de cinética de reacción, en el que se emplea la ecuación de Arrhenius para la función dependiente de la temperatura y un esquema de potencias para la función dependiente de la concentración, como se muestra en la siguiente expresión:

$$\frac{dy_i}{dt} = \sum_{k=1}^{k} k_{0,i,k} \exp\left(-E_{a,i,k}/R_u T\right)(y_{0,i,k} - y_{i,k})^{n_{i,k}} \tag{5-19}$$

El término $y_{0,i,k}$ representa la máxima fracción másica que se puede formar de la especie i en la reacción k. Las fracciones másicas se encuentran siempre referidas a la masa inicial de la fase sólida, es decir: $y_{i,k} = m_{i,k}/m_0^s$.

Las velocidades de reacción para cada especie considerada en relación con el volumen de la fase sólida para su uso en las ecuaciones de balance de masa 4-63 y 3-7 se determinan a partir de la ecuación 5-19 según:

$$r_{v,i} = \left(\frac{dy_i}{dt}\right) \frac{m_0^s}{M_i V^s} \tag{5-20}$$

Los valores de las constantes cinéticas requeridos para la pirólisis de madera de haya determinados por Rummer et al. [28] se muestran en la Tabla **5-1**.

Tabla 5-1.: Cinéticas de reacción formales para la pirólisis de madera de haya [28]

Gas	$\mathbf{k_0}$ **/ (1/s)**	$\mathbf{E_a}$ **/ (J/mol)**	$\mathbf{y_0}$	**n**
CO	$8{,}00 \cdot 10^8$	$1{,}31 \cdot 10^5$	0,0165	1
	$6{,}00 \cdot 10^1$	$4{,}00 \cdot 10^4$	0,0190	1
	$5{,}00 \cdot 10^0$	$7{,}10 \cdot 10^4$	0,0120	1
CO_2	$5{,}00 \cdot 10^{14}$	$1{,}28 \cdot 10^5$	0,0200	2
	$1{,}00 \cdot 10^{16}$	$1{,}61 \cdot 10^5$	0,0360	2
	$2{,}00 \cdot 10^4$	$7{,}00 \cdot 10^4$	0,0080	2
H_2O	$5{,}00 \cdot 10^9$	$1{,}10 \cdot 10^5$	0,0210	2
	$7{,}00 \cdot 10^{16}$	$1{,}72 \cdot 10^5$	0,0260	2
	$2{,}00 \cdot 10^4$	$7{,}50 \cdot 10^4$	0,0190	2
H_2	$4{,}00 \cdot 10^5$	$1{,}17 \cdot 10^5$	0,0043	2
CH_4	$1{,}00 \cdot 10^{14}$	$1{,}40 \cdot 10^5$	0,0030	2
	$1{,}00 \cdot 10^6$	$1{,}00 \cdot 10^5$	0,0042	2
Alquitranes	$2{,}90 \cdot 10^6$	$9{,}30 \cdot 10^4$	0,1800	1
	$4{,}50 \cdot 10^8$	$1{,}29 \cdot 10^5$	0,4300	1
	$1{,}00 \cdot 10^8$	$1{,}30 \cdot 10^5$	0,0300	1

Las fracciones de masa de cada una de las especies calculadas mediante la integración de las velocidades de reacción para la madera de haya con una velocidad de calentamiento constante de $\kappa = 5$ K/min se muestran en la Figura **5-2**.

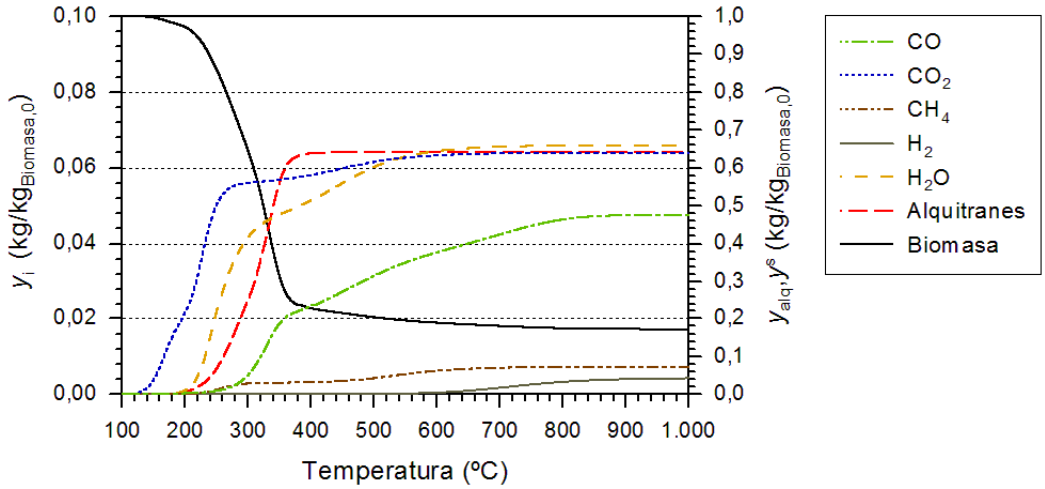


Figura 5-2.: Fracciones de masa durante la pirólisis para cada una de las especies, con $\kappa = 5$ K/min

5.2.2. Reacciones secundarias

Durante el proceso de pirólisis se forma una fracción importante de alquitranes, los cuales se descomponen en otras especies mediante reacciones secundarias de pirólisis. Para el modelamiento de la descomposición de los alquitranes se emplea en este trabajo el planteamiento teórico desarrollado por Jensen [16]. Allí se analiza la composición elemental de los alquitranes obtenidos a partir de las reacciones primarias de pirólisis y se asume que su composición es constante a lo largo de todo el proceso. Las fracciones másicas obtenidas fueron:

$$y_C = 0,4414 \qquad y_H = 0,0742 \qquad y_O = 0,4844$$

A partir de esta composición se determinó como molécula empírica para los alquitranes $C_5H_{10}O_4$, la cual se debe descomponer durante las reacciones secundarias de pirólisis en C, CO, CO_2, H_2 y CH_4. Jensen [16] propone una reacción simple donde esta hipotética molécula se descompone según:

$$C_5H_{10}O_4 \Longrightarrow C + CH_4 + CO_2 + 2CO + 3H_2 \tag{5-21}$$

La velocidad de reacción global propuesta se determina a partir de:

$$r_v = k_0 \exp\left(-E_a/R_uT\right)c^g x_{alq} \tag{5-22}$$

donde según Wutti et al. [41]: $k_0 = 2 \cdot 10^8$ s^{-1} y $E_a = 200000$ J/mol. Las velocidades de reacción de los componentes individuales se calculan a partir de los coeficientes estequiométricos según:

$$r_{v,i} = \nu_i r_v \tag{5-23}$$

5.2.3. Entalpías de reacción

Según Rummer et al. [28] y Wutti et al. [41] las entalpías de reacción para las reacciones de pirólisis primarias y secundarias son cero. Esta suposición es comúnmente empleada en las reacciones de pirólisis al considerar que las entalpías de reacción de las reacciones exotérmicas y endotérmicas de cada componente prácticamente se anulan entre sí.

5.3. Proceso de gasificación

5.3.1. Reacciones heterogéneas sólido - gas

Para el desarrollo del modelo aquí planteado se necesitan establecer planteamientos cinéticos para la gasificación de biomasa con vapor de agua y dióxido de carbono. Como se mencionó anteriormente, en este proceso se emplea vapor de agua como agente de gasificación. Además, durante la pirólisis de la biomasa se generan tanto vapor de agua como dióxido de carbono, haciendo que estos dos compuestos reaccionen con el pirolizado presente. Las reacciones de gasificación entre las fases sólida y gaseosa son por lo tanto:

$$\mathrm{C} + \mathrm{CO_2} \Longrightarrow 2\mathrm{CO}$$
$$\mathrm{C} + \mathrm{H_2O} \Longrightarrow \mathrm{CO} + \mathrm{H_2}$$

Las reacciones de metanización no serán tomadas en cuenta, ya que como muestra Wölki [40] la formación de metano durante la gasificación mediante reacciones heterogéneas a presión atmosférica es despreciable. Wölki [40] realizó un estudio sobre las velocidades de reacción de la gasificación de pirolizado con dióxido de carbono y vapor de agua. En su trabajo se observa una extensa revisión bibliográfica de las cinéticas de reacción planteadas por diversos autores para una gran variedad de biomasas. Muchas de las cinéticas mostradas están expresadas en términos superficiales, y por lo tanto no pueden ser empleadas en el modelo aquí descrito, ya que éste no presenta ninguna información sobre el área reactiva de las partículas ni de la variación de esta a medida que los procesos de transformación ocurren. Así mismo, algunos autores en sus publicaciones solo establecen la cinética para una sola reacción, ya sea con dióxido de carbono o con agua, pero no con ambas. En estos casos no es posible emplear para la reacción faltante una cinética establecida por otro autor, ya que las condiciones de prueba bajo las que fueron determinadas varían por lo general de manera significativa.

Teniendo en cuenta las restricciones mencionadas y la revisión y comparación de algunas de las cinéticas mostradas en Wölki [40], se determinó la cinética de reacción para madera de haya a partir de los resultados experimentales mostrados por Gómez [12]. La velocidad de reacción se determina a partir de:

$$r_v = k_0 \exp\left(-E_a/R_u T\right) x_{ag}^n \frac{\rho_{0,C}^s (1-\varepsilon_{p,0})}{M_C} \tag{5-24}$$

donde para la gasificación con dióxido de carbono:

$$k_0 = 1,397 \cdot 10^5\,1/\mathrm{s} \qquad E_a = 189927\,\mathrm{J/mol} \qquad n = 0,546 \tag{5-25}$$

y para la gasificación con vapor de agua:

$$k_0 = 3,176 \cdot 10^4\,1/\mathrm{s} \qquad E_a = 189927\,\mathrm{J/mol} \qquad n = 0,671 \tag{5-26}$$

En la Figura **5-3** se muestra la pérdida de masa del carbonizado de madera de haya a 850°C bajo una concentración constante de 70 % de vapor de agua y 70 % de dióxido de carbono.

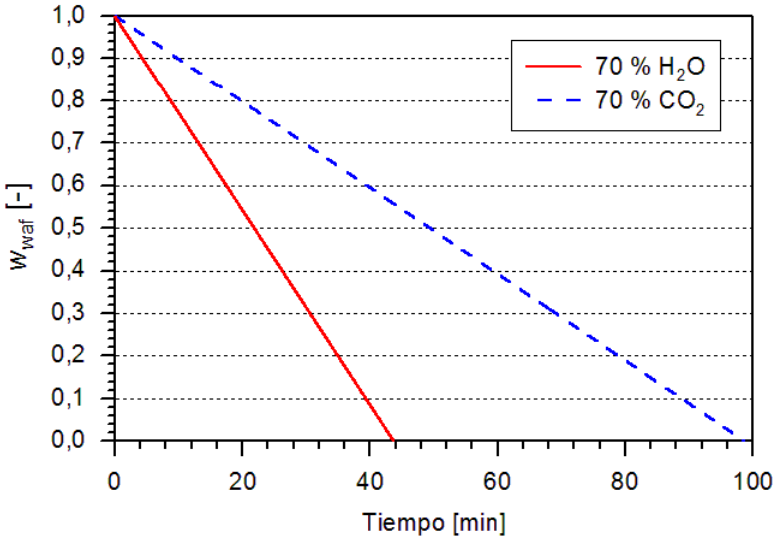


Figura 5-3.: Pérdida de masa del carbonizado de madera de haya a 850 °C con 70 % H_2O y 70 % CO_2

Entalpías de reacción

Las entalpías de reacción para las reacciones de gasificación se calculan a partir de:

$$\Delta h_{r,m} = \sum_{prod} \nu_i \left(\int_{T_0}^{T} C_{p,m,i} dT + h^{\circ}_{f,m,i} \right) - \sum_{reac} \nu_i \left(\int_{T_0}^{T} C_{p,m,i} dT + h^{\circ}_{f,m,i} \right) \tag{5-27}$$

Donde $h^{\circ}_{f,m,i}$ es la entalpía de formación molar de la especie i a la temperatura de referencia estándar $T_0 = 293{,}15\,\mathrm{K}$. Las entalpías de reacción para las reacciones de gasificación forman el término fuente para la ecuación de balance de energía de la fase sólida descrito por la Ec. 3-6.

5.3.2. Reacciones homogéneas en la fase gaseosa

En la fase gaseosa sólo se tendrá en cuenta la reacción homogénea:

$$\mathrm{CO} + \mathrm{H_2O} \iff \mathrm{CO_2} + \mathrm{H_2} \tag{5-28}$$

Para el cálculo de la velocidad de reacción y sus correspondientes parámetros cinéticos se emplea el planteamiento mostrado por de Souza-Santos [30]. En él se muestra que la velocidad de reacción se puede calcular a partir de:

$$r_v = k\left(x_{CO}x_{H_2O} - \frac{x_{CO_2}x_{H_2}}{K}\right)c^2 \tag{5-29}$$

Donde el coeficiente k se calcula a partir de la ecuación de Arrhenius y la constante de equilibrio se calcula mediante la ecuación de van't Hoff:

$$k = k_0 \exp\left(-E_a/R_uT\right) \qquad K = K_0 \exp\left(\Delta h_{r,m}/R_uT\right) \tag{5-30}$$

con: $k_0 = 2,78\,\mathrm{m^3/(mol\,s)}$, $E_a = 12555\,\mathrm{J/mol}$, $K_0 = 0,0265$ y $\Delta h_{r,m} = -32909\,\mathrm{J/mol}$. Las velocidades de reacción de los componentes individuales se calculan a partir de los coeficientes estequiométricos según:

$$r_{v,i} = \nu_i r_v \tag{5-31}$$

Entalpías de reacción

La entalpía de reacción para la reacción homogénea mostrada se calcula de manera análoga a las entalpías de reacción para las reacciones de gasificación, cuyo procedimiento fue descrito en la sección 5.3.1. Esta entalpía de reacción forma el término fuente para la ecuación de balance de energía de la fase gaseosa descrito por la Ec. 3-1.

6. Solución del modelo matemático

El esquema general del modelo planteado se muestra en la Figura **6-1**. El modelo utiliza las variables de entrada mostradas en la figura, calcula las propiedades de las fases sólida y gaseosa y los coeficientes de transferencia de calor y de masa, el proceso de secado y las cinéticas de reacción de los procesos de pirólisis y gasificación, para determinar la composición de la fase gaseosa y las temperaturas en el interior del reactor en cualquier instante de tiempo.

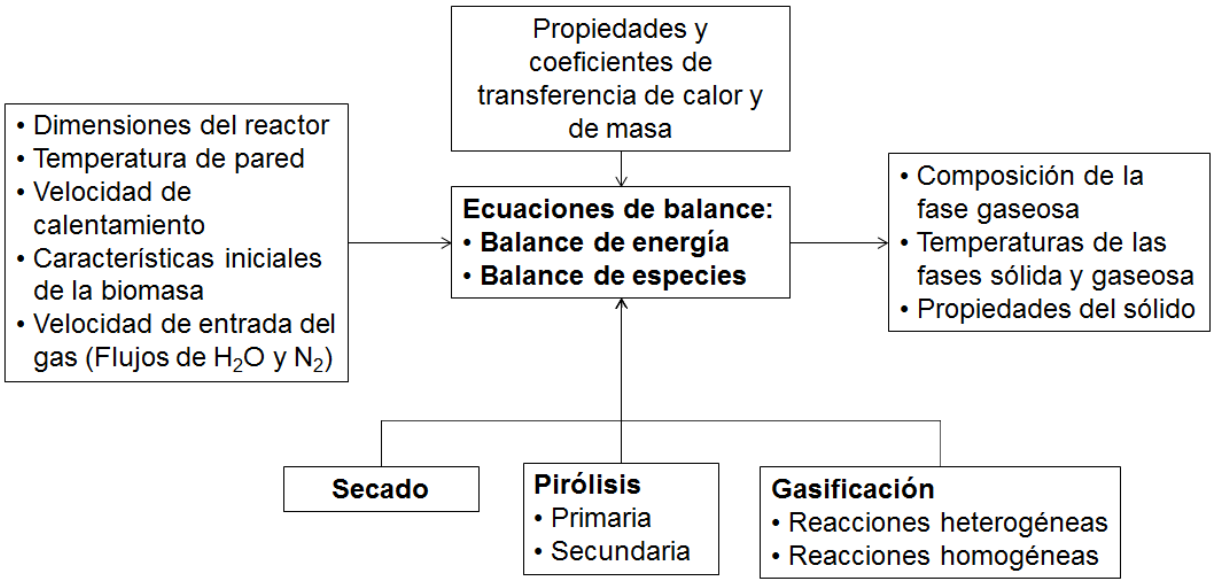


Figura 6-1.: Esquema general del modelo matemático desarrollado

La discretización de las ecuaciones de balance de energía y de especies se realizó mediante el método de los volúmenes de control. Para la discretización de ecuaciones de balance en las que se presentan fenómenos de transporte por difusión y convección, es importante introducir una variable adimensional conocida como número de Péclet. El número de Péclet Pe relaciona las velocidades de los fenómenos de transporte por convección y por difusión:

$$\mathrm{Pe} = \frac{\text{Transporte por convección}}{\text{Transporte por difusión}} \tag{6-1}$$

Un elevado número de Péclet indica que los fenómenos convectivos prevalecen sobre los difusivos, mientras que valores bajos de este (en el intervalo $(-1 < \mathrm{Pe} < 1)$ muestran que la difusión es importante y prevalece sobre la convección. En la mayoría de aplicaciones de ingeniería, los fenómenos convectivos prevalecen sobre los difusivos, generando números de Péclet elevados.

Para la modelación de sistemas térmicos que incluyen fenómenos de transporte por difusión y convección, se pueden emplear diversos esquemas. Dentro de estos se destacan el método de diferencias centradas, el esquema upwind, el esquema exponencial, el esquema híbrido y el esquema Power-Law.

El *esquema de diferencias centradas* es una aproximación para la discretización de fenómenos convectivos-difusivos que tiene su origen en el truncamiento de la serie de Taylor. Este planteamiento asume que la propiedad convectiva ϕ (Temperatura, entalpía, concentración, etc.), correspondiente a la frontera del volumen de control (Figura **6-2**), es el promedio de los valores nodales, es decir:

$$\phi_w = \frac{\phi_W + \phi_P}{2} \tag{6-2}$$

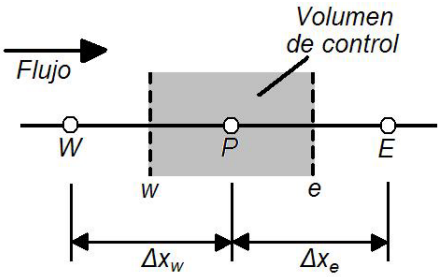


Figura 6-2.: Volumen de control para nodos internos

El *esquema upwind* o esquema corriente arriba es un esquema que desprecia la influencia del transporte por convección del nodo corriente abajo del volumen de control. Este planteamiento asume que la propiedad convectiva ϕ (Temperatura, entalpía, concentración, etc.), correspondiente a la frontera del volumen de control (Figura **6-2**), es igual al valor nodal corriente arriba de la frontera.

El *esquema exponencial* se basa en la solución analítica de la ecuación diferencial de convección-difusión para el caso unidimensional. Con este esquema se obtienen estimaciones exactas para cualquier valor del número de Péclet. Sin embargo es poco empleado debido a su alto consumo de recursos computacionales y a que para casos multidimensionales y cuando existen términos de fuentes o sumideros, sus estimaciones no son muy buenas.

El *esquema híbrido* se basa en una mezcla entre los esquemas de diferencias centradas y el esquema upwind. Para el intervalo $-2 \leq \mathrm{Pe} \leq 2$ es idéntico al esquema de diferencias centradas, mientras que para valores de Péclet por fuera de este rango es idéntico al esquema upwind. Este esquema también puede ser visto como una aproximación de tres líneas a la solución exacta, y por lo tanto sus estimaciones son razonables y bastante precisas.

El *esquema Power-Law* es similar al esquema híbrido en el sentido de mezclar dos funciones diferentes dependiendo de la magnitud del número de Péclet. Para el intervalo $-10 \leq \mathrm{Pe} \leq 10$, las estimaciones se realizan con base en la definición de la función $A(|\mathrm{Pe}|) = (1-0{,}1|\mathrm{Pe}|)^5$. Para valores de Péclet por fuera de este rango, este esquema es idéntico al upwind, es decir $A(|\mathrm{Pe}|) = 0$. El esquema Power-Law es bastante preciso y sus estimaciones son por mucho, cercanas a la solución exacta.

Otros esquemas para la discretización de fenómenos de transporte que incluyen convección y difusión han sido planteados por diversos autores. Sin embargo, la complejidad en su implementación y la poca ganancia en exactitud con respecto a los ya mencionados, hacen que sean descartados en este documento.

En la Figura **6-3** se muestran las estimaciones obtenidas con los esquemas mencionados para diversos valores del número de Péclet.

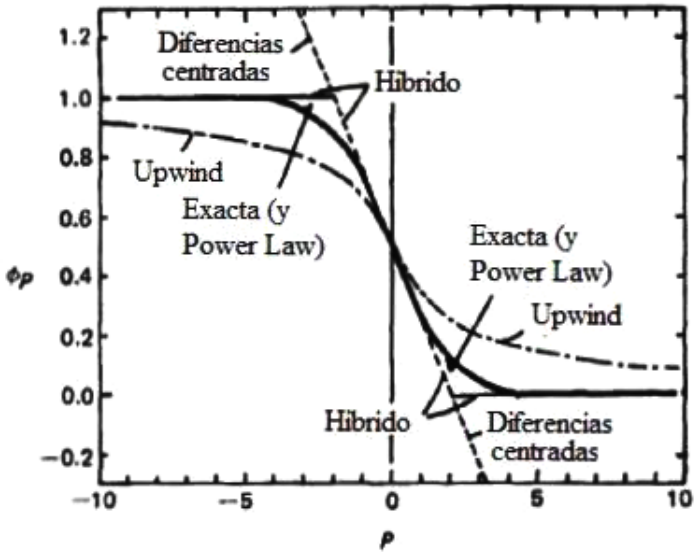


Figura 6-3.: Estimaciones obtenidas con diferentes esquemas en función de Pe [24]

La discretización del modelo en las coordenadas espaciales se desarrolla mediante el esquema Power Law descrito anteriormente y se puede encontrar en el Anexo A. En el modelo planteado se desprecian los efectos de la dispersión en la dirección axial para la fase gaseosa, lo que conlleva a que las discretizaciones mediante los esquemas Upwind y Power-Law sean idénticas. La discretización en la coordenada temporal se desarrollará mediante el esquema implícito, en el cual se asume que el nuevo valor de la variable de interés (temperatura, concentración, etc) a encontrar para el tiempo $t+1$, prevalece a lo largo de todo el intervalo de tiempo $(t : t+1)$. Este esquema asegura la convergencia del modelo sin importar el tamaño de los volúmenes de control ni del intervalo de tiempo tomado.

6.1. Solución del sistema de ecuaciones algebraicas discretizadas

Para la solución de las ecuaciones discretizadas obtenidas anteriormente, en general se pueden emplear dos métodos: Métodos directos y métodos iterativos.

Los métodos directos son adecuados para la solución de sistemas unidimensionales, sin embargo su extensión a sistemas multidimensionales es complicada y requiere de una gran cantidad de almacenamiento computacional y tiempo de ejecución. Los sistemas unidimensionales generan matrices tridiagonales que pueden ser resueltos fácilmente mediante algoritmos directos como el TDMA (Tri-Diagonal Matriz Algoritm). Sin embargo, el algoritmo TDMA no puede ser extendido fácilmente a sistemas multidimensionales. Existen métodos directos análogos al TDMA para sistemas multidimensionales, pero la gran cantidad de operaciones requeridas y de memoria computacional necesaria para el almacenamiento de datos, los hace poco prácticos y poco empleados.

Los métodos iterativos comienzan con un campo esperado o inicial de la variable de interés y emplean las ecuaciones discretizadas para obtener un campo mejorado, más cercano a la solución exacta. Al realizar múltiples repeticiones del algoritmo, se obtiene finalmente una solución lo suficientemente cercano a la solución exacta de las ecuaciones. Los métodos iterativos usualmente consumen menos recursos computacionales, y son especialmente adecuados para el manejo de ecuaciones no lineales y de sistemas multidimensionales.

Existen muchos métodos iterativos dentro de los que se destacan el método de Gauss-Seidel punto a punto, el método de Gauss-Seidel línea a línea, el método ADI (Alternating - Direction Implicit), el método SIP (StrongIy Implicit Procedure), etc.

Dentro de los métodos iterativos, el método de Gauss-Seidel punto a punto es el más sencillo para su implementación, y es el que se emplea en el presente documento para la solución de las ecuaciones discretizadas mostradas en el Anexo A. 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 encontradas en el instante de tiempo anterior (t) para cada una de las fases.

En el método descrito anteriormente, no existen diferencias fundamentales entre solucionar un problema de estado estable y solucionar un intervalo de tiempo para un problema transitorio. Solucionar un problema de estado transitorio es equivalente a solucionar sucesivos problemas en estado estable para cada intervalo de tiempo.

La convergencia de un método iterativo se presenta cuando iteraciones adicionales del método no producen cambios significativos en los valores de las variables estimadas. En la práctica, el proceso iterativo concluye cuando se satisface algún criterio de convergencia. A menudo, los cambios relativos en los valores estimados entre una iteración y otra son empleados para formular un criterio de convergencia. Este tipo de criterio puede resultar erróneo en ciertos casos, cuando las condiciones del problema hacen que los cambios entre iteraciones sucesivas sean pequeños, creando una falsa idea de convergencia.

Una forma más adecuada para evaluar la convergencia de los métodos iterativos, es evaluar que tan perfectamente satisfacen los valores encontrados en la iteración realizada, a las ecuaciones discretizadas planteadas. Lo anteriormente expuesto se realiza calculando un valor llamado residuo para cada uno de los nodos. El residuo para los nodos de la fase sólida y la fase gaseosa se calcula según Patankar [24] a partir de:

$$\text{res} = a_P\phi_P - a_E\phi_E - a_W\phi_W - a_N\phi_N - a_S\phi_S - a_P^0\phi_P^0 - a_{esp}\phi_P \tag{6-3}$$

Para comprender el significado de la ecuación anterior se sugiere revisar el Anexo A, donde se explica el significado de cada uno de los términos.

Las ecuaciones discretizadas planteadas se satisfacen cuando los residuos calculados para cada uno de los nodos, para las dos fases son cero. Sin embargo, los errores de redondeo entre iteración e iteración debido a las limitantes en la precisión de la máquina, 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 un método iterativo convergerá para un determinado instante de tiempo, cuando todos los residuos calculados sean menores a un valor previamente establecido. Si alguno de los residuos calculados supera el criterio de convergencia establecido, una nueva iteración del método será necesaria. Según Patankar [24] un residuo apropiado para evaluar la convergencia del método es de 10^{-5}.

6.2. Desarrollo del programa

Para la solución del modelo planteado se realizó un programa en el lenguaje C++. El esquema simplificado del programa desarrollado se muestra en la Figura **6-4**.

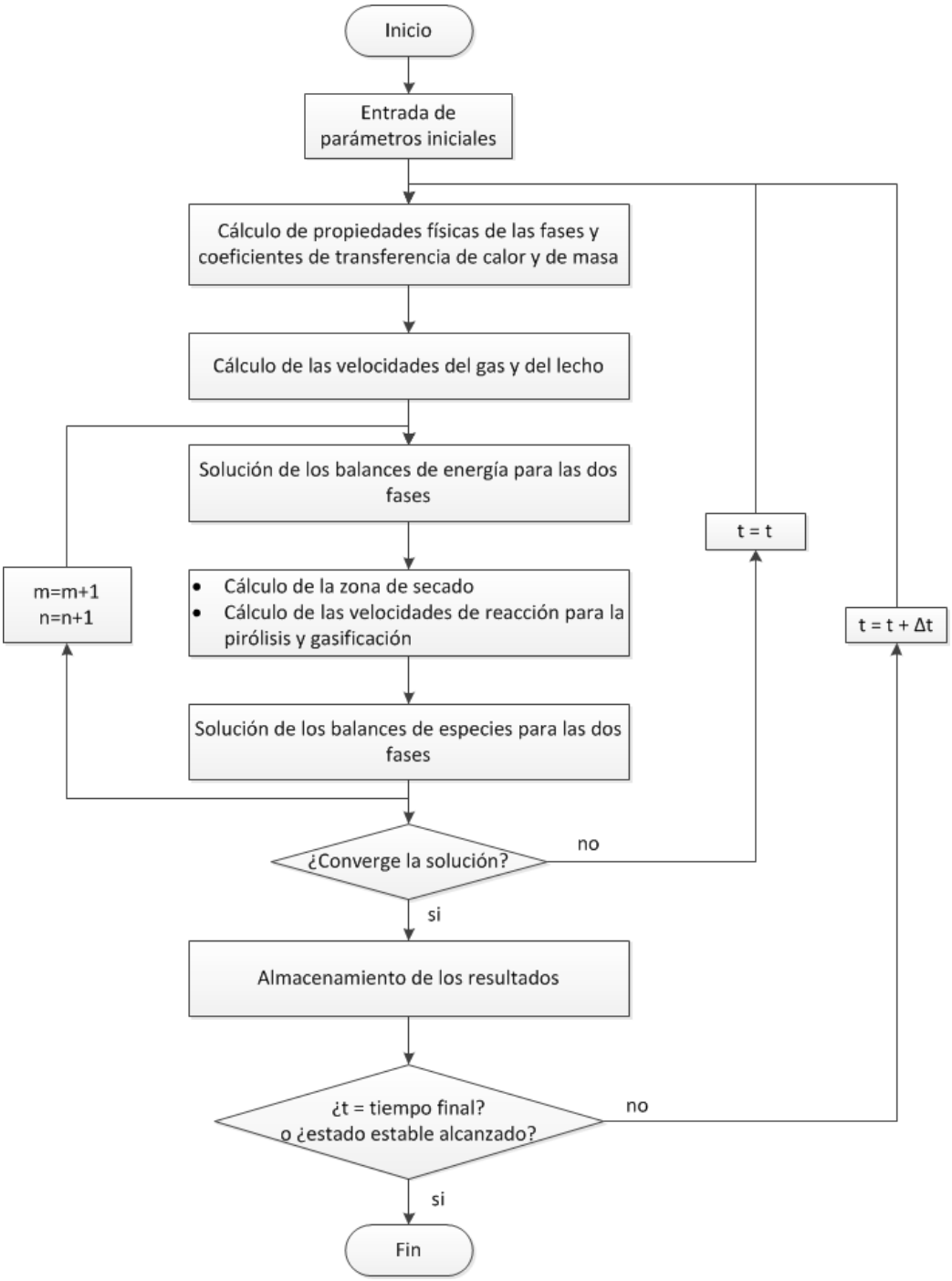


Figura 6-4.: Esquema simplificado del programa desarrollado

Al iniciar el programa se establecen los parámetros iniciales tales como dimensiones del reactor, características de la biomasa, temperatura de la pared, velocidad de calentamiento, etc. Posteriormente se determinan las propiedades de las fases sólida y gaseosa y los coeficientes de transferencia de calor y de masa. Luego se calculan las velocidades de las fases sólida y gaseosa y se resuelven los balances de energía para las dos fases. Posteriormente se calculan el proceso de secado y las velocidades de reacción de los procesos de pirólisis y gasificación, y se resuelven los balances de especies para las dos fases. A continuación se evalúa la convergencia de la solución obtenida para el intervalo de tiempo calculado, por medio de la evaluación de los residuos para las ecuaciones de balance en cada nodo. Si la solución no converge se realiza una nueva iteración del método de solución hasta que la convergencia dentro del intervalo de tiempo se presente. Los resultados obtenidos para cada intervalo de tiempo se almacenan para su posterior análisis y se repite el proceso para el siguiente intervalo de tiempo. El programa finaliza cuando se alcanza el tiempo de simulación programado o cuando los cambios en las variables calculadas son tan despreciables que se considera que se ha alcanzado el estado estacionario.

7. Resultados del modelo

En este capítulo se muestran los resultados obtenidos con el modelo desarrollado en el que se acoplan los procesos de secado, pirólisis y gasificación de biomasa. Los parámetros empleados para las simulaciones se tomaron teniendo en cuenta las condiciones de operación de un gasificador de prueba existente en el Instituto de Ingeniería Térmica de la Universidad de Kassel - Alemania, del cual se tienen resultados de pruebas experimentales. La comparación de los resultados de estas pruebas experimentales con los obtenidos con el modelo permiten realizar la validación del mismo. El esquema del reactor de prueba y el perfil de temperaturas que se obtiene en la pared del mismo cuando se alcanza el estado estacionario se muestra en la Figura **7-1**.

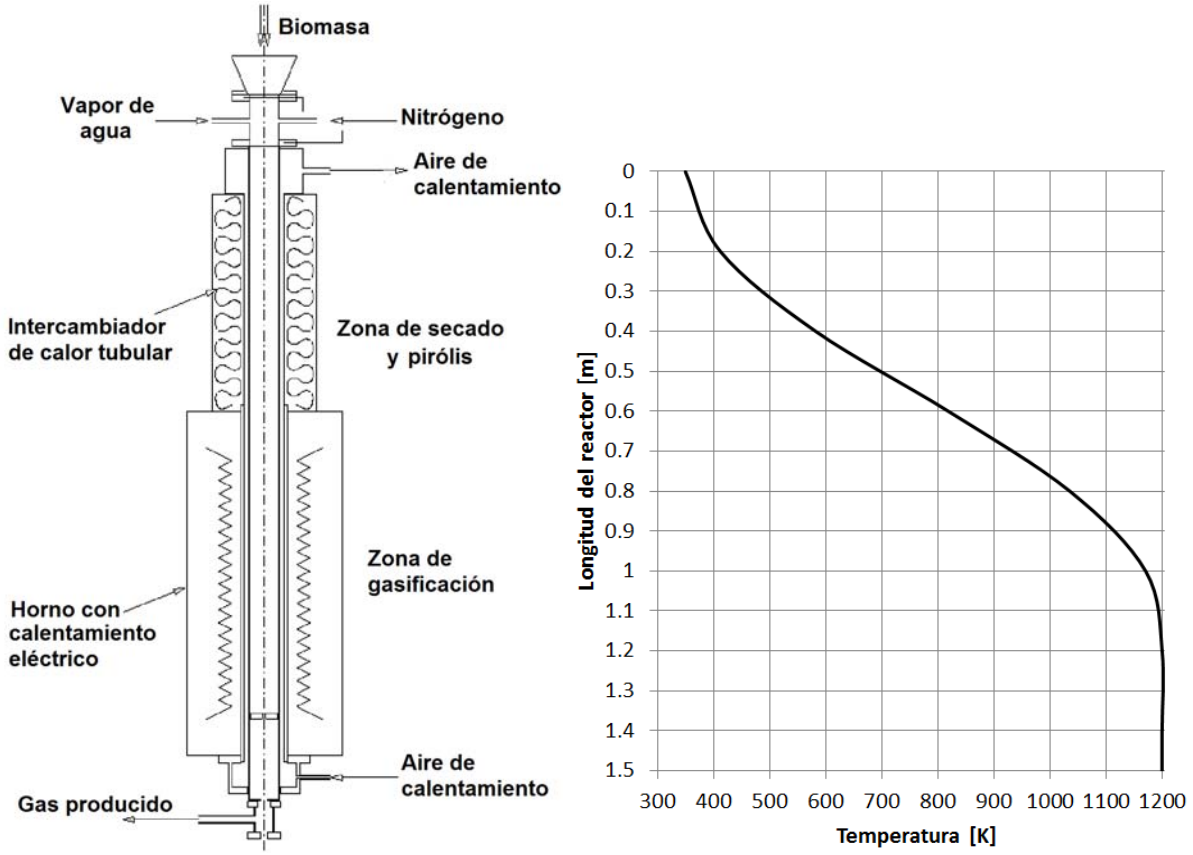


Figura 7-1.: Gasificador de lecho fijo en el que desarrollaron pruebas experimentales y perfil de temperatura de la pared del mismo cuando se alcanza el estado estacionario[12]

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 caliente 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 1,5 m. Por la parte superior del reactor se alimenta nitrógeno que se emplea como gas de arrastre y biomasa húmeda de manera contínua 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 $D_r = 8{,}25\,\mathrm{cm}$ y una longitud $L = 1{,}5\,\mathrm{m}$. Al inicio del proceso el reactor se encuentra lleno de biomasa cuya humedad es del 30 %. La madera de haya, cuyo contenido de humedad es del 6,5 %, se humedece previamente hasta el valor establecido para aumentar la concentración de vapor de agua, el cual se emplea como agente de gasificación. La biomasa dosificada durante el proceso también tiene una humedad del 30 %.

- La temperatura de entrada de las fases sólida y gaseosa son iguales y constantes y son de $T = 350\,\mathrm{K}$.

- La temperatura inicial de la pared del gasificador es de $T_W = 350\,\mathrm{K}$. Esta temperatura varía tanto con el tiempo como con la posición. A la salida del reactor y para los últimos 0,375 cm la temperatura de la pared aumenta a una tasa de calentamiento constante $\kappa = 60\,\mathrm{K/min}$ hasta una temperatura máxima de 1200 K. Para los primeros 1,125 m se interpola la temperatura según el perfil mostrado en la Figura **7-1**.

- La velocidad de la fase sólida a la salida del reactor es nula ($w^s_{z=L} = 0\,\mathrm{m/s}$).

- A la entrada del reactor se tiene un flujo constante de 0,5 l/min de nitrógeno, el cuál se emplea como gas de barrido.

- El diámetro inicial de las partículas, las cuales se consideran de forma esférica, es de $d_p = 0{,}002\,\mathrm{m}$.

7.1. Muestra de resultados del modelo

En la Figura **7-2** se muestra la variación en función del tiempo de la composición y temperatura promedio de los gases generados y el grado de conversión de la fase sólida a la salida del reactor obtenidos con el modelo. La evolución de estas variables se muestra en estado

transitorio a medida que el reactor se calienta y los procesos de transformación se presentan. Se observa que el grado de conversión de la fase sólida aumenta como consecuencia del secado de la biomasa. Después de que la biomasa se encuentra seca, el grado de conversión de la fase sólida sigue aumentando debido a las reacciones de pirólisis. Este aumento coincide con el aumento en la fracción molar de alquitranes, los cuales se forman durante el proceso de pirólisis. El instante en el cual inician las reacciones de gasificación no se puede apreciar en esta gráfica, debido a que ocurren de manera paralela a las reacciones primarias y secundarias de pirólisis. No obstante se observa una disminución en la tasa a la que se descompone la biomasa después de que se ha pirolizado por completo, debido a que las reacciones de gasificación ocurren a una velocidad mucho menor que las de pirólisis. También se observa que después de aproximadamente 5 h, no se tiene ni agua ni dióxido de carbono en el gas a la salida del reactor, debido a que estas especies se consumen casi por completo en las reacciones de gasificación.

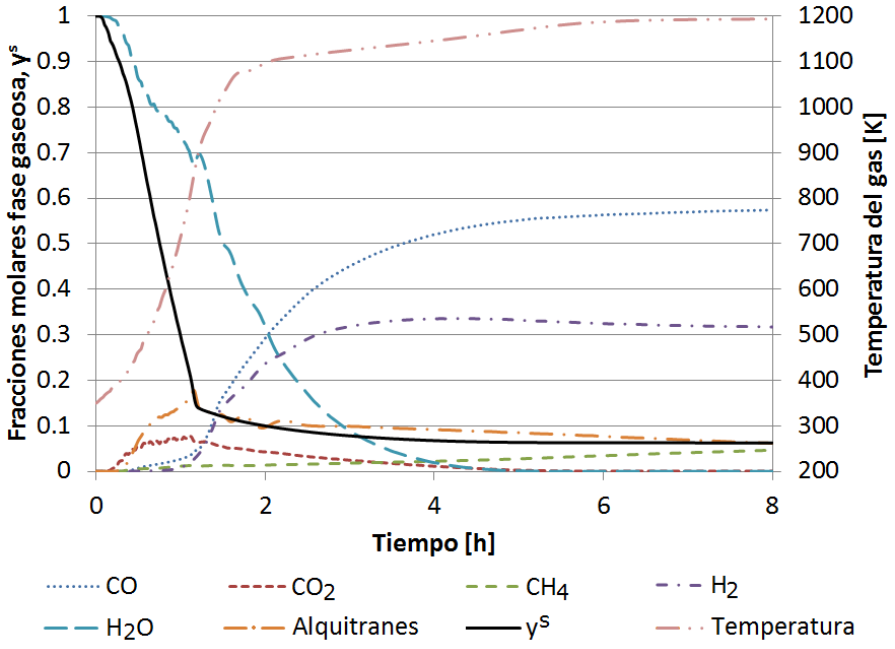


Figura 7-2.: Composición y temperatura media radial del gas producido y grado de conversión de la fase sólida a la salida del reactor en función del tiempo

La Figura **7-3** muestra la composición y temperatura de los gases generados y el grado de conversión de la fase sólida en función de la altura del reactor para un tiempo $t = 8$ h. Al igual que para la figura anterior, se promediaron radialmente las variables mencionadas. En la gráfica se observa un aumento en el grado de conversión de la fase sólida debido a los procesos de secado, pirólisis primaria y gasificación. En la zona de gasificación se observa una disminución en las fracciones molares de CO_2 y H_2O y el correspondiente aumento en las fracciones de CO y H_2 como consecuencia de las reacciones de gasificación. Sin embargo, se observa que después de aproximadamente 1,25 m no se tiene ni agua ni dióxido de carbono

en el gas, lo que detiene el aumento en el grado de conversión del sólido debido a la ausencia de reacciones de gasificación. Por el contrario, se aprecia una disminución en el grado de conversión a medida que se van descomponiendo los alquitranes. Esta disminución se debe a la formación de carbonizado durante las reacciones secundarias de pirólisis en las cuales los alquitranes se degradan.

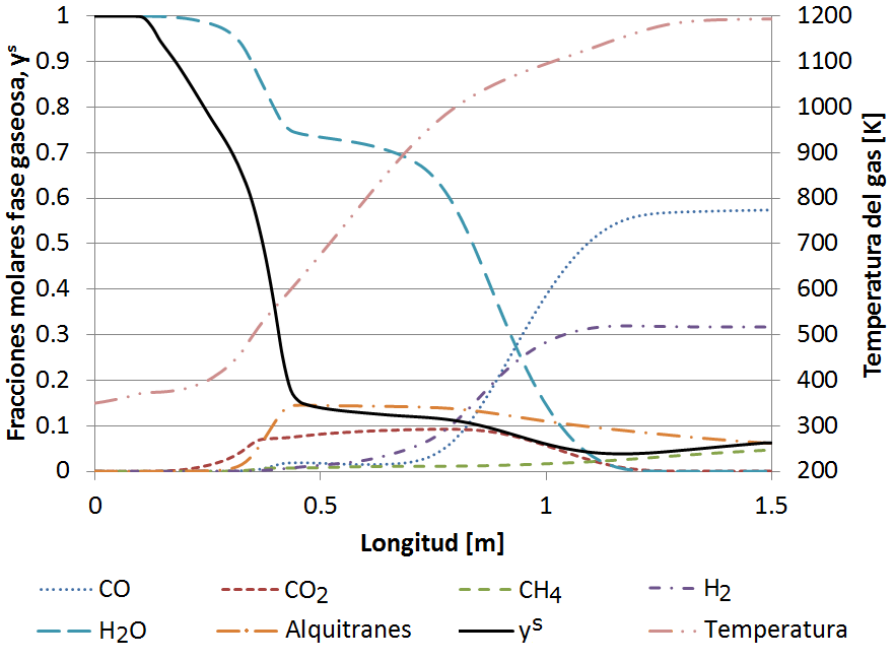


Figura 7-3.: Composición y temperatura media radial del gas producido y grado de conversión de la fase sólida en función de la longitud para $t = 8\,\mathrm{h}$

A continuación se muestra la variación de diversas propiedades en el interior del reactor después de un tiempo de $t = 8\,\mathrm{h}$. Las siguientes gráficas muestran los perfiles radiales para diferentes alturas en el reactor. Las líneas sólidas mostradas que no aparecen en la leyenda de las gráficas hacen referencia a alturas intermedias entre las alturas referenciadas y se agregaron para mostrar de manera más clara la evolución de las variables.

La distribución de temperaturas de la fase sólida se muestra en la Figura **7-4**. En la gráfica se observa que la temperatura de la fase sólida aumenta con la longitud del reactor debido al perfil de temperaturas que se tiene en la pared y a los procesos de transferencia de calor que se presentan al interior del mismo. Como es de esperarse en un gasificador de calentamiento indirecto existen gradientes de temperatura entre la pared y el centro del reactor, sin embargo estos gradientes disminuyen con la longitud del reactor, especialmente en las zonas en las que las reacciones endotérmicas de gasificación no son muy fuertes. Para el centro del reactor se tiene un gradiente de temperatura entre la pared y el centro de 54 K aproximadamente, mientras que para la salida del reactor el gradiente disminuye a 12 K.

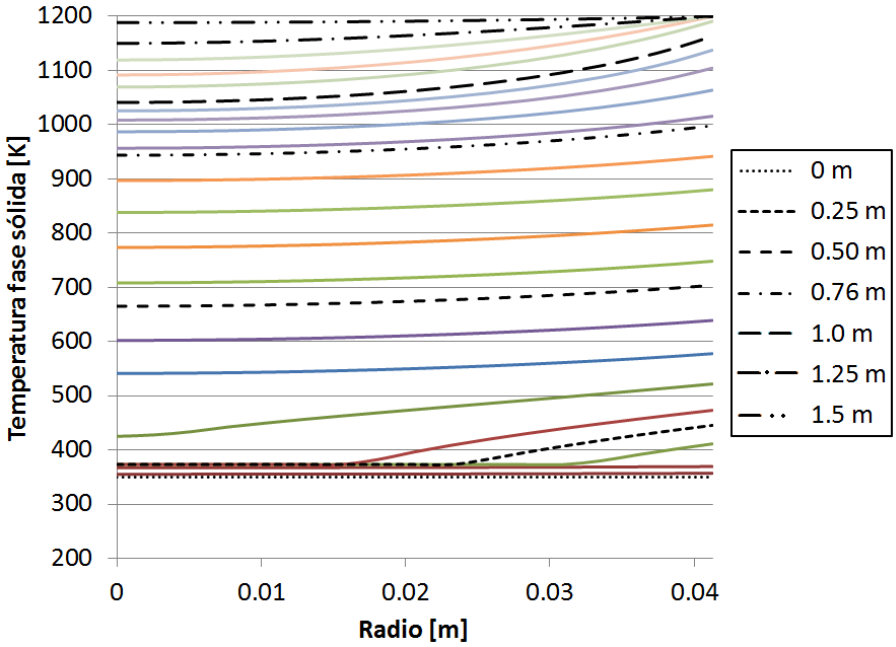


Figura 7-4.: Distribución de temperatura de la fase sólida después de $t = 8\,\mathrm{h}$

De igual manera se muestra en la Figura **7-5** la distribución de temperaturas de la fase gaseosa. En ella se observa que los perfiles de temperatura de las fases gaseosa y sólida son casi idénticos, siendo despreciables las diferencias entre ambos. Esto demuestra que las reacciones endotérmicas de gasificación presentes en la fase sólida y la reacción exotérmica homogénea presente en la fase gaseosa no generan gradientes de temperatura apreciables entre las fases.

En la Figura **7-6** se muestran los perfiles obtenidos para el grado de conversión de las partículas de la fase sólida, referida a su masa inicial después de un tiempo de $t = 8\,\mathrm{h}$. En esta figura se puede apreciar el aumento en el grado de conversión con la longitud del reactor a medida que los procesos de transformación se presentan. Se observa que en las zonas cercanas a la entrada del reactor la pérdida de masa ocurre de manera rápida en la zona de secado, la cual es bastante distinguible en la gráfica. Después de que la biomasa se seca, el grado de conversión aumenta nuevamente al iniciar la descomposición del sólido mediante reacciones de pirólisis. Cuando la biomasa se ha pirolizado por completo y se compone solo de carbonizado, la pérdida de masa se presenta a una tasa mucho menor debido a que las reacciones de gasificación ocurren de manera mucho más lenta que las de pirólisis. También se observa que la pérdida de masa de las partículas siempre es mayor en las zonas cercanas a la pared del reactor que en el centro, debido a las temperaturas más altas allí presentes que favorecen las reacciones de pirólisis y de gasificación. Se observa además que la mayor descomposición del sólido se presenta en una zona intermedia del reactor (aproximadamente a 1,25 m) y no a la salida del mismo, debido a que allí se presentan de manera más fuerte las reacciones de gasificación. Como se observó en la Figura **7-3**, en las zonas cercanas a

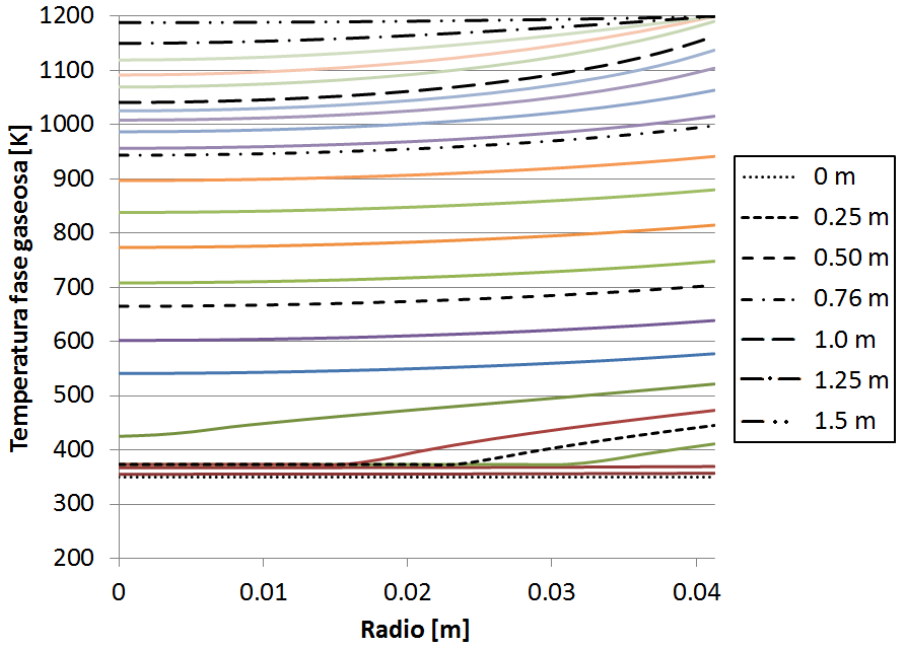


Figura 7-5.: Distribución de temperatura de la fase gaseosa después de $t = 8\,\mathrm{h}$

la salida del reactor las fracciones molares de CO_2 y H_2O son muy pequeñas, lo que hace que las reacciones de gasificación sean casi nulas. En esta zona sin embargo se presenta una ligera disminución en el grado de conversión de las partículas. Esta disminución se debe a la formación de carbonizado durante las reacciones secundarias de pirólisis.

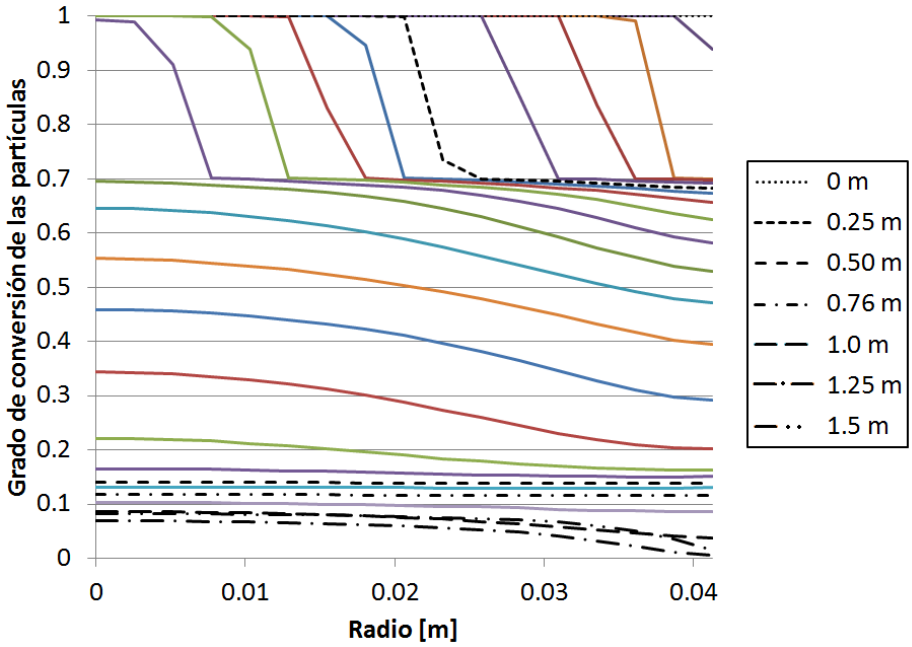


Figura 7-6.: Distribución del grado de conversión de las partículas después de $t = 8\,\mathrm{h}$

La Figura **7-7** muestra los perfiles obtenidos para el diámetro de las partículas en el reactor después de un tiempo de $t = 8\,\mathrm{h}$. En ella es evidente la disminución del diámetro de partícula con la longitud del reactor a medida que los procesos de transformación se presentan. A la entrada del reactor, todas las partículas tiene un diámetro igual a $d_p = 0{,}002\,\mathrm{m}$. Este diámetro no varía durante el proceso de secado de la biomasa, ya que no se presenta encogimiento alguno de las partículas. A partir de las reacciones de pirólisis el diámetro de partícula disminuye hasta que la biomasa se piroliza por completo y se compone solo de carbonizado. En esta gráfica es bastante notorio el final del proceso de pirólisis, ya que debido a que las reacciones de gasificación ocurren lentamente, existen muchas zonas del reactor con diámetros de partícula similares, correspondientes al diámetro mínimo alcanzado después de la pirólisis (0,00137 m). El diámetro de las partículas en la zona de gasificación sigue disminuyendo pero a una tasa mucho menor de la observada en la zona de pirólisis. También se observa en la gráfica que el diámetro de las partículas siempre es menor en las zonas cercanas a la pared del reactor que en el centro debido a las temperaturas más altas allí presentes, y que las partículas más pequeñas se encuentran a una altura aproximada de 1,25 m y no a la salida del reactor, lo que concuerda con lo mostrado en la Figura **7-6** para el grado de conversión de las partículas. El carbono formado durante las reacciones secundarias de pirólisis no produce un aumento en el diámetro de las partículas, ya que se deposita en sus poros produciendo una disminución en la porosidad sin aumentar el diámetro.

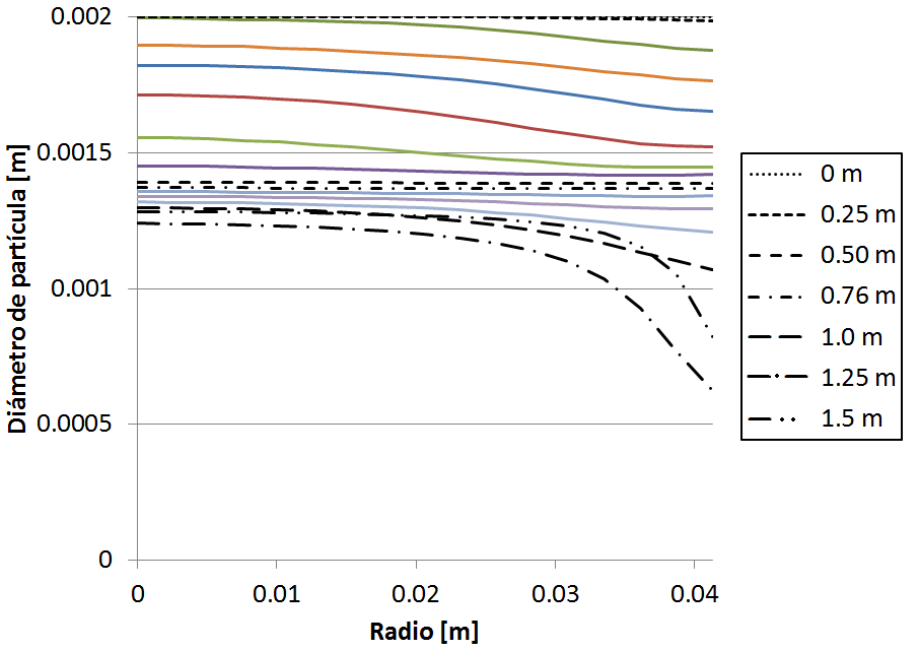


Figura 7-7.: Distribución del diámetro de las partículas después de $t = 8\,\mathrm{h}$

En la Figura **7-8** se muestran los perfiles obtenidos para la porosidad de las partículas que componen la fase sólida en el reactor después de un tiempo de $t = 8\,\mathrm{h}$. En la gráfica se observa un aumento en la porosidad de las partículas en las zonas cercanas a la entrada

del reactor debido al secado de la biomasa. La zona de secado es bastante reconocible en la gráfica. Como se mencionó en la sección 4.2.4 la porosidad de las partículas aumenta en el proceso de pirólisis en función del grado de conversión, hasta que las partículas se componen solo de carbonizado. Durante el proceso de gasificación, la porosidad de la partícula aumenta de forma paralela a la disminución de la fracción de masa y del diámetro de las partículas. Este aumento en la porosidad es proporcional a la velocidad de las reacciones de gasificación.

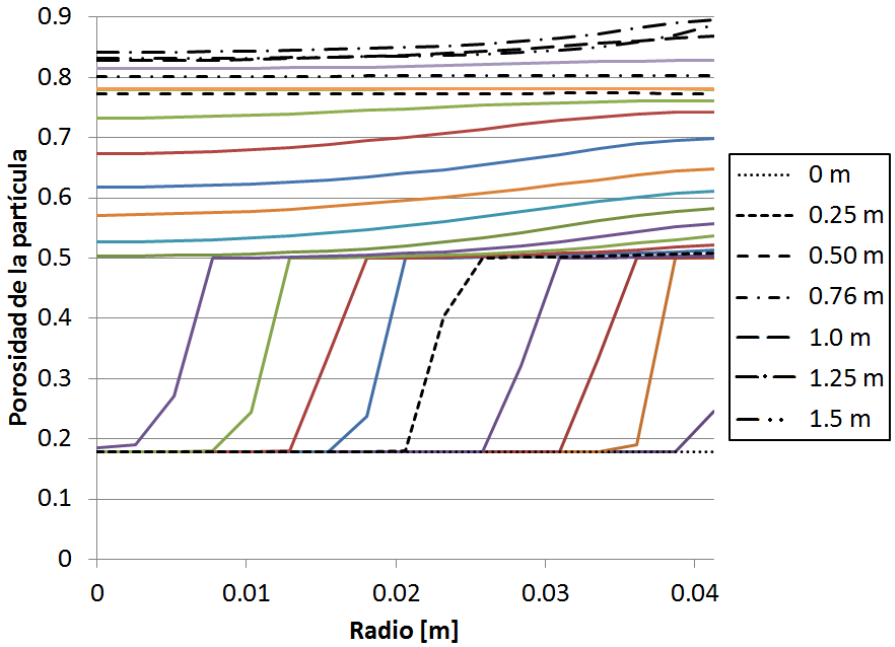


Figura 7-8.: Distribución de la porosidad de la fase sólida después de $t = 8\,\mathrm{h}$

La Figura **7-9** muestra los perfiles obtenidos para la densidad de las partículas que componen la fase sólida en el reactor después de un tiempo de $t = 8\,\mathrm{h}$. Al igual que ocurre con la porosidad, la densidad de las partículas aumenta en función del secado de la biomasa y del grado de conversión en el proceso de pirólisis. Este aumento se produce hasta un valor máximo, correspondiente al momento en el cual las partículas se pirolizan por completo. La densidad de las partículas permanece constante cuando la fase sólida se compone completamente de carbonizado. La formación y destrucción de carbono a través de las reacciones secundarias de pirólisis y las reacciones de gasificación no tienen influencia sobre la densidad de las partículas.

Los perfiles obtenidos para la velocidad de la fase sólida después de un tiempo de $t = 8\,\mathrm{h}$ se muestran en la Figura **7-10**. Para la pirólisis el movimiento de la cama se presenta a medida que la fase sólida se descompone hasta que se piroliza por completo. En las zonas cercanas a la pared del reactor, la descomposición de la biomasa mediante la pirólisis se encuentra más avanzada que en el centro, debido a las temperaturas más altas allí presentes, haciendo que las partículas en el centro sean más grandes y tengan un menor grado de conversión. Al

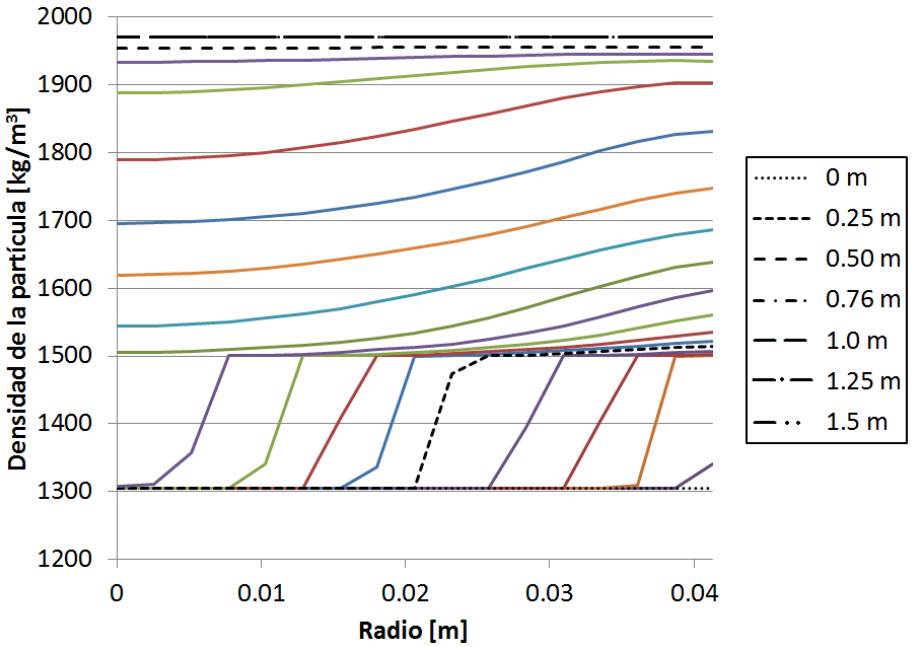


Figura 7-9.: Distribución de la densidad de la fase sólida después de $t = 8\,\mathrm{h}$

tener un menor grado de conversión, las partículas siguen reaccionando y perdiendo masa a una tasa mayor. Esto hace que el movimiento de la cama en el centro del reactor sea más rápido que en la pared. Para la zona de gasificación, el movimiento de la cama se presenta siempre y cuando exista un agente de gasificación en la fase gaseosa, ya que la masa de las partículas en un volumen de control nunca puede ser cero, debido al flujo de éstas desde los volúmenes superiores. Entre más alta sea la temperatura, más altas serán las velocidades de reacción de las reacciones de gasificación y más alta será la pérdida de masa de las partículas y la velocidad de la cama. Por lo tanto, en la zona de gasificación la velocidad de la fase sólida es más grande en la pared del reactor que en el centro.

Los perfiles de velocidad de la fase gaseosa se muestran en la Figura **7-11**. Los cambios en la velocidad del gas se deben a la formación de gas durante los procesos de transformación y a la dilatación térmica causada por las variaciones de temperatura. Durante el proceso de secado se produce un aumento en la velocidad de la fase gaseosa debido a la evaporación de la humedad contenida en la biomasa. La velocidad del gas en la zona de pirólisis es también dependiente de la velocidad de reacción. Cuanta más biomasa es pirolizada, mayor será la velocidad del mismo. Las reacciones secundarias de pirólisis tienen también una fuerte influencia en la velocidad de la fase gaseosa, ya que por cada mol de alquitranes que se descompone se forman siete moles de gas, haciendo que la velocidad de la fase gaseosa sea mayor. De manera similar se presenta un aumento en la velocidad de la fase gaseosa durante las reacciones de gasificación, debido a que por cada mol de agua o de dióxido de carbono que reacciona con el carbonizado se forman dos moles de gas. En la gráfica queda

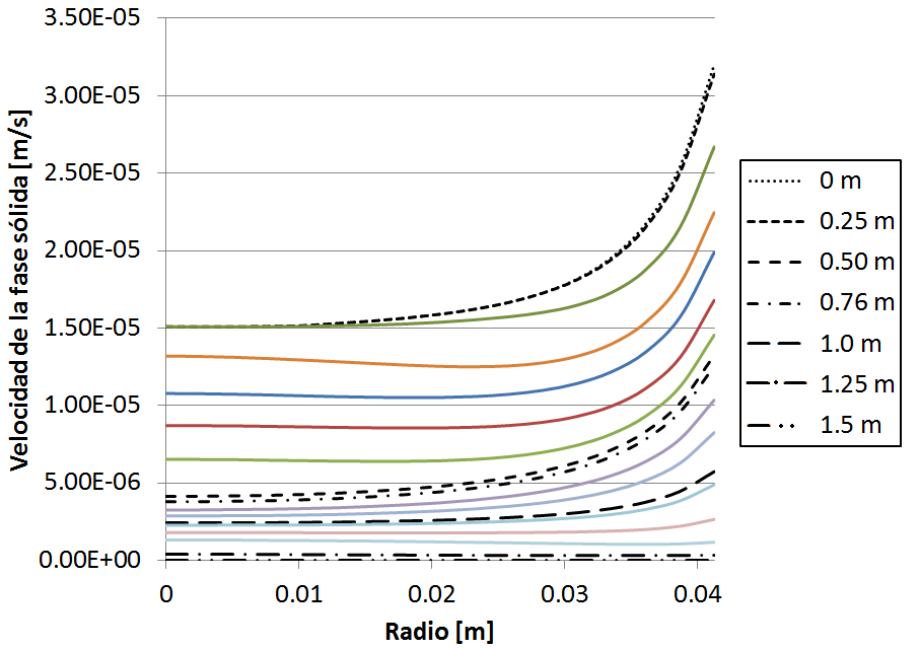


Figura 7-10.: Distribución de la velocidad de la fase sólida después de $t = 8\,\mathrm{h}$

evidenciado el aumento en la velocidad del gas con la longitud reactor debido a los fenómenos explicados. Las oscilaciones que se presentan en las zonas cercanas al centro del reactor son debidas a la recondensación de vapor de agua causada por la difusión del mismo hacia zonas con temperaturas menores a 373,15 K.

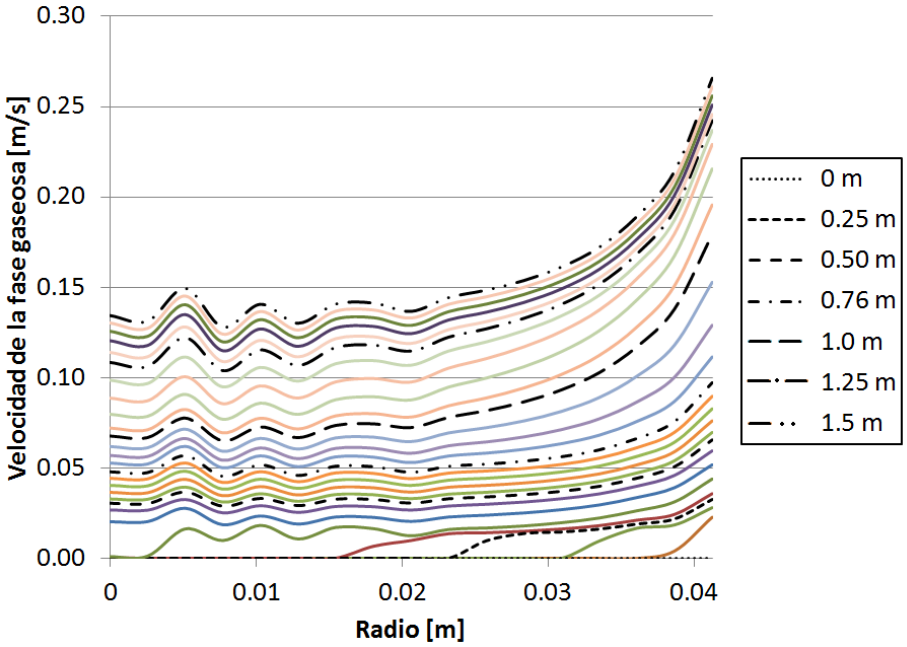


Figura 7-11.: Distribución de la velocidad de la fase gaseosa después de $t = 8\,\mathrm{h}$

Como quedó evidenciado en la Figura **7-3**, el vapor de agua evaporado en el proceso de secado y formado en el proceso de pirólisis no es suficiente para que la cama de carbonizado se gasifique eficientemente. Debido a esto se realizó una simulación con las mismas condiciones presentadas al comienzo del capítulo, pero adicionando un flujo constante de 1,0 kg/h de vapor de agua a 100 kPa y 493,15 K a la entrada del reactor, una vez que se alcanza la temperatura máxima en la pared. Este vapor de agua adicionado actúa como agente de gasificación. Los resultados mostrados se muestran en las siguientes gráficas.

En la Figura **7-12** se muestra la variación en función del tiempo de la composición y temperatura promedio de los gases generados y el grado de conversión de la fase sólida a la salida del reactor. La evolución de estas variables se muestra en estado transitorio a medida que el reactor se calienta y los procesos de transformación se presentan. Se observa que el grado de conversión de la fase sólida en la zona de gasificación aumenta a una velocidad mucho mayor a la encontrada para las condiciones anteriores en la Figura **7-3**. Así mismo se observa que la temperatura media alcanzada a la salida del reactor es aproximadamente 100 K menor a la encontrada anteriormente, debido al aumento en la velocidad de la fase gaseosa y al aumento en la velocidad de la reacción endotérmica de gasificación con vapor de agua. La composición de los gases generados también varía, obteniéndose una relación más cercana entre el H_2 y el CO. A la salida del reactor se obtiene una concentración de vapor de agua cercana al 30 %, lo que garantiza la existencia de reacciones de gasificación a lo largo de toda la cama.

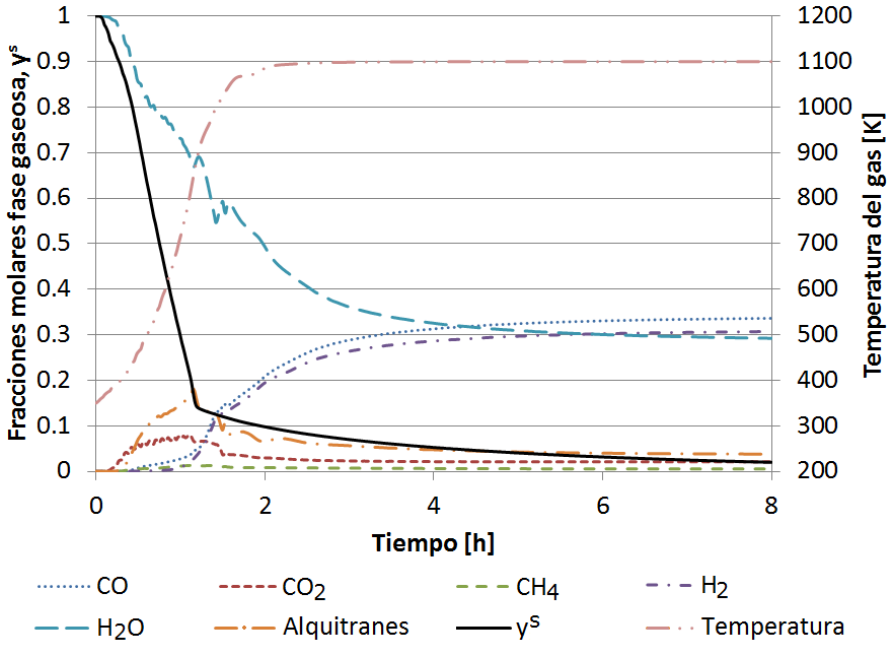


Figura 7-12.: Composición y temperatura media radial del gas producido y grado de conversión de la fase sólida a la salida del reactor en función del tiempo

La Figura **7-13** muestra la composición y temperatura de los gases generados y el grado de conversión de la fase sólida en función de la altura del reactor para un tiempo $t = 8$ h. En la gráfica se observa que el aumento en el grado de conversión de la fase sólida en la zona de gasificación es mucho mayor que la encontrada en la Figura **7-3**, lo que es de esperarse al aumentar la velocidad de la reacción de gasificación con vapor de agua como consecuencia de una mayor concentración de éste. Se observa también que la fracción molar de alquitranes permanece casi constante, descomponiéndose muy poco al pasar por la cama de carbonizado. Esto se debe a que el aumento en la velocidad del gas causado por el flujo de vapor de agua introducido, disminuye considerablemente el tiempo de residencia de los alquitranes.

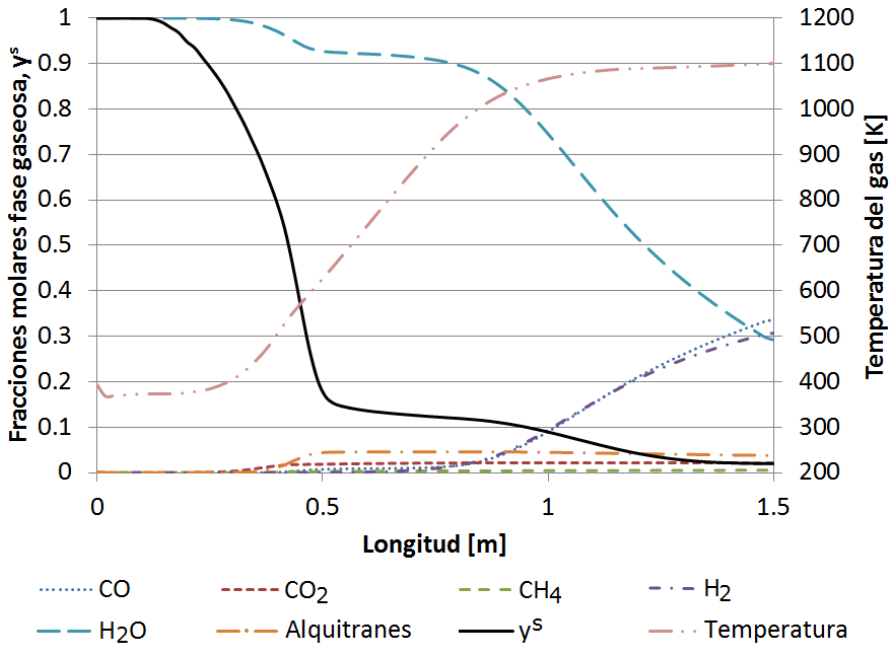
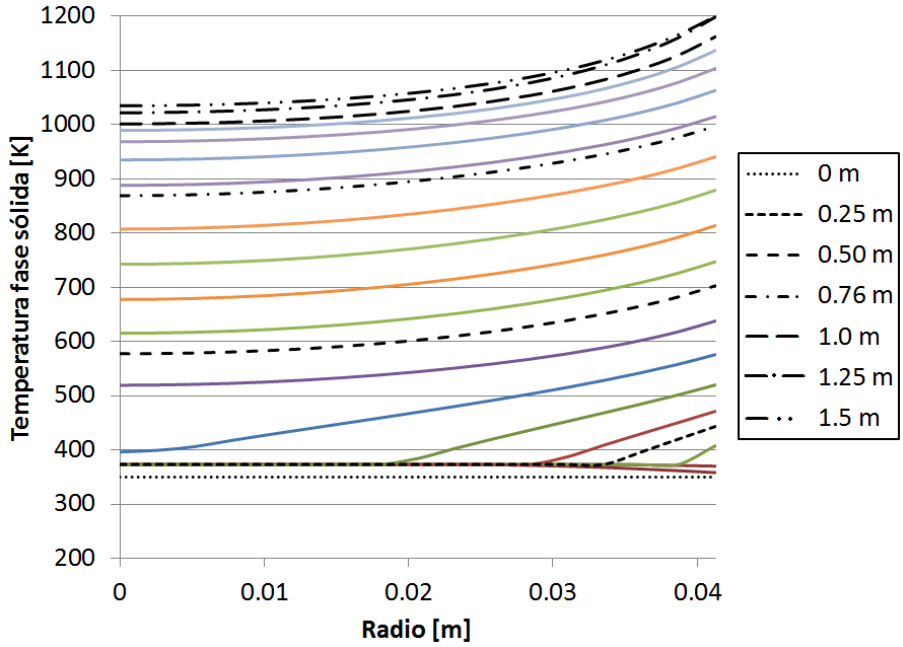
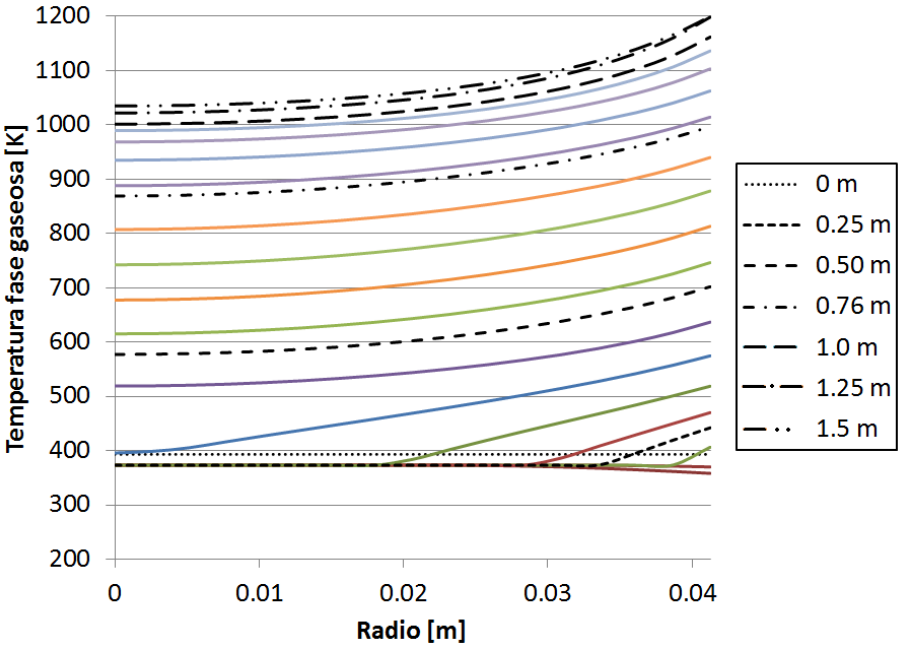


Figura 7-13.: Composición y temperatura media radial del gas producido y grado de conversión de la fase sólida en función de la longitud para $t = 8$ h

Las distribuciones de temperaturas de las fases sólida y gaseosa se muestran en las Figuras **7-14**. En las gráficas se observa que los gradientes de temperatura existentes entre el centro y la pared del reactor son más altos a los observados en las Figuras **7-4** y **7-5**. Esto se debe al aumento en la velocidad del gas causado por el flujo de vapor de agua introducido y al aumento en la velocidad de la reacción endotérmica de gasificación con vapor de agua. Para el centro del reactor se tiene un gradiente de temperatura entre la pared y el centro de 128 K aproximadamente, mientras que para la salida del reactor el gradiente es de 165 K.



(a) Fase sólida



(b) Fase gaseosa

Figura 7-14.: Distribución de temperatura de las fases sólida y gaseosa después de $t = 8\,\mathrm{h}$

En la Figura **7-15** se muestran los perfiles obtenidos para el grado de conversión de las partículas de la fase sólida, referida a su masa inicial después de un tiempo de $t = 8\,\mathrm{h}$. En la figura se puede apreciar una mayor perdida de masa en la zona de gasificación comparado con lo encontrado en la Figura **7-6**. Así mismo se observa que la pérdida de masa del sólido

se presenta de manera consistente a lo largo de todo el reactor, debido a la presencia de la reacción de gasificación con vapor de agua. El aumento en la pérdida de masa en la zona de gasificación genera un aumento en la velocidad de la cama, lo que hace que el grado de conversión sea menor en la zona de pirólisis como se puede observar al comparar esta variable para una altura de 0,5 m en las Figuras **7-15** y **7-6**.

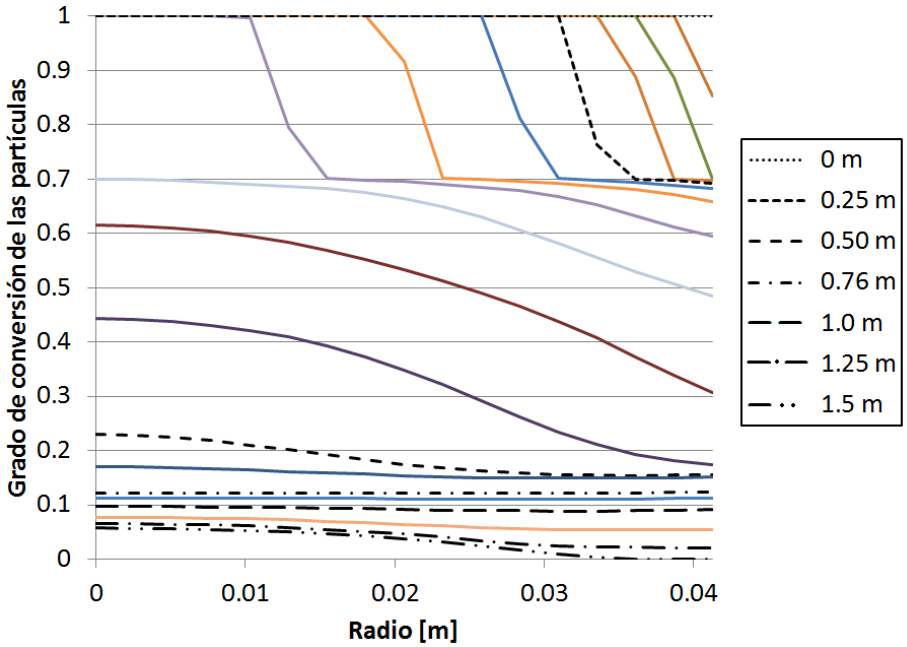


Figura 7-15.: Distribución del grado de conversión de las partículas después de $t = 8\,\mathrm{h}$

La variación en el grado de conversión de la biomasa se refleja en una disminución más fuerte en el diámetro de las partículas con la longitud y en un aumento en la porosidad de las partículas en la zona de gasificación, como se aprecia en las Figuras **7-16** y **7-17**. La distribución obtenida para la densidad de las partículas que componen la fase sólida se muestra en la Figura **7-18**.

En las Figuras **7-19** y **7-20** se puede observar que las velocidades de las fases sólida y gaseosa son superiores a las obtenidas en la simulación realizada sin usar vapor de agua adicional (Figuras **7-10** y **7-11**). El aumento en la velocidad de la fase sólida se debe a que la reacción de gasificación con vapor de agua ocurre de una manera más fuerte debido al aumento en la concentración de vapor de agua en el gas. El aumento en la velocidad de esta reacción hace que las partículas en los volúmenes de control inferiores sean más pequeñas forzando a un mayor flujo de partículas desde los volúmenes de control superiores. Así mismo, la velocidad del gas aumenta debido al flujo de vapor de agua adicional introducido y a la mayor formación de gases en la zona de gasificación.

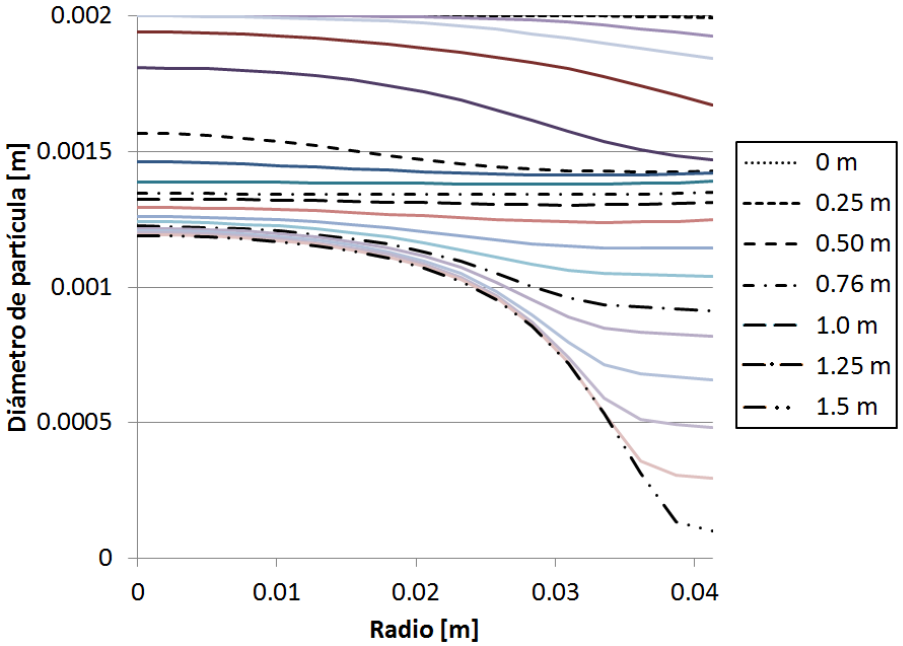


Figura 7-16.: Distribución del diámetro de las partículas después de $t = 8\,\mathrm{h}$

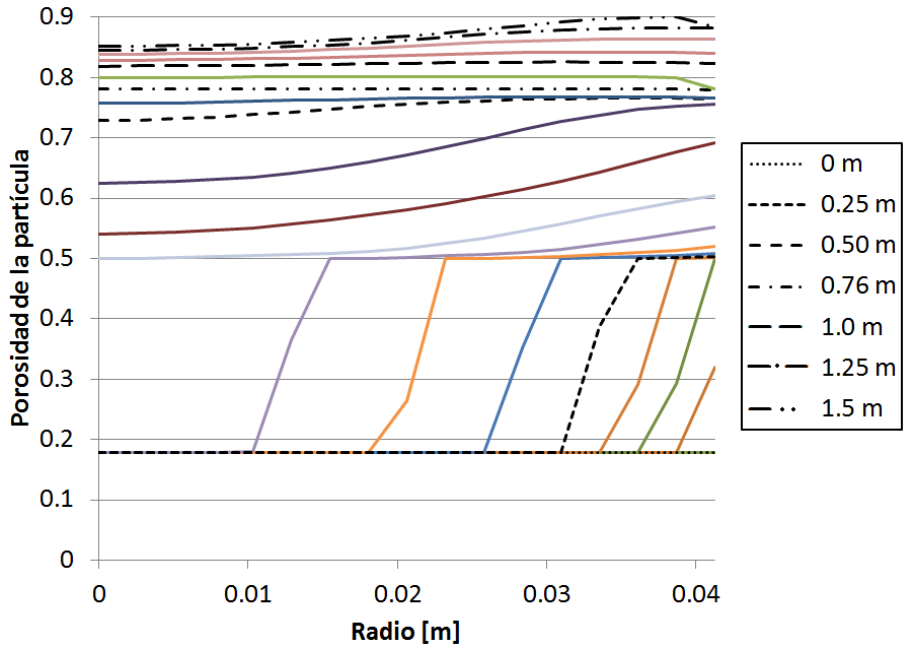


Figura 7-17.: Distribución de la porosidad de la fase sólida después de $t = 8\,\mathrm{h}$

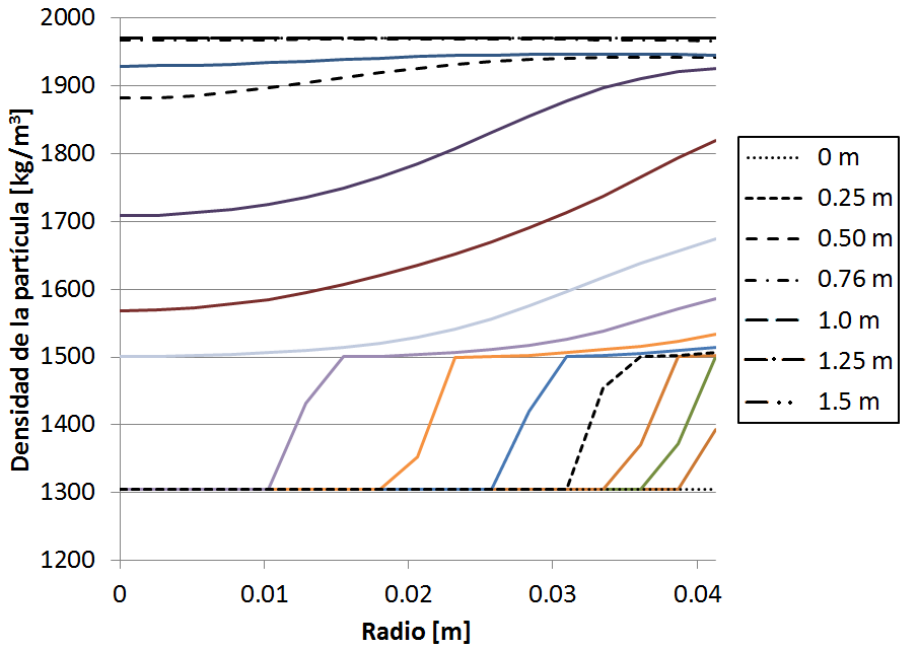


Figura 7-18.: Distribución de la densidad de la fase sólida después de $t = 8\,\mathrm{h}$

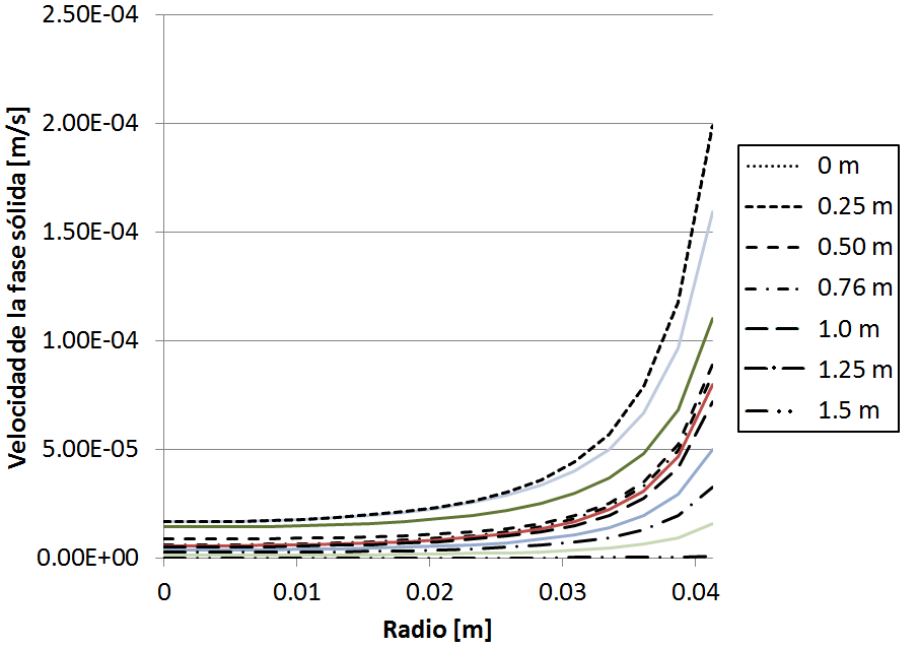


Figura 7-19.: Distribución de la velocidad de la fase sólida después de $t = 8\,\mathrm{h}$

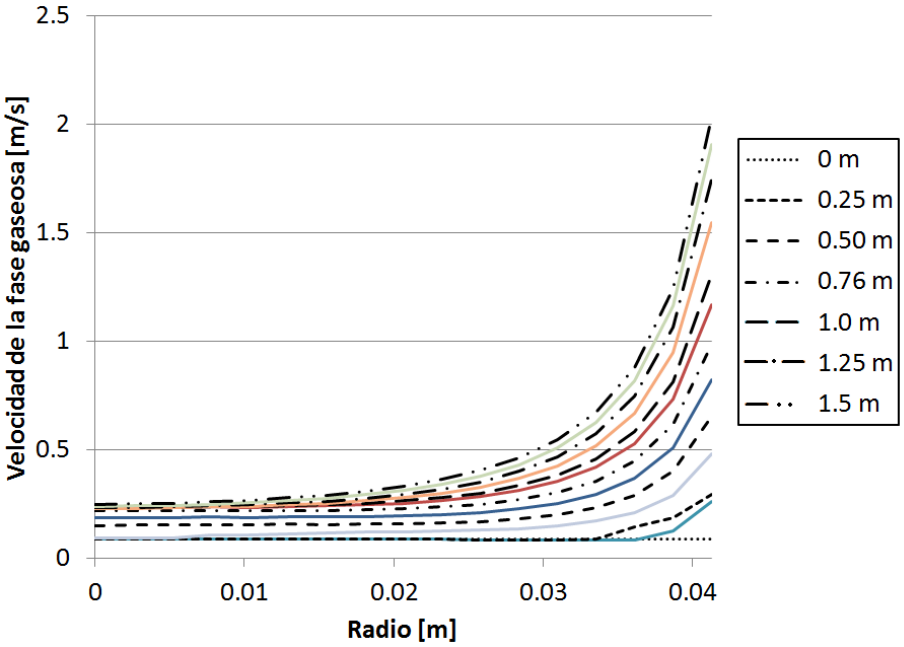


Figura 7-20.: Distribución de la velocidad de la fase gaseosa después de $t = 8\,\mathrm{h}$

Por último, se realizó una nueva simulación empleando los mismos parámetros mencionados al inicio del capítulo, adicionando un flujo constante de 1,0 kg/h de vapor de agua a 100 kPa y 393 K a la entrada del reactor, una vez que se alcanza la temperatura máxima en la pared, pero esta vez con una temperatura de pared máxima de 1275 K. En la Figura **7-21** se muestra la variación en función del tiempo de la composición y temperatura promedio de los gases generados y el grado de conversión de la fase sólida a la salida del reactor. En la Figura **7-22** se muestra la composición y temperatura de los gases generados y el grado de conversión de la fase sólida en función de la altura del reactor para un tiempo $t = 8$ h. Al comparar las Figuras **7-21** y **7-12** y las Figuras **7-22** y **7-13** se observa una disminución en la fracción molar de H_2O y un aumento en las fracciones molares de H_2 y CO, debido al aumento en la velocidad de reacción de la gasificación con vapor de agua causada por el aumento en la temperatura. Así mismo se observa un mayor grado de conversión de la fase sólida en la zona de gasificación.

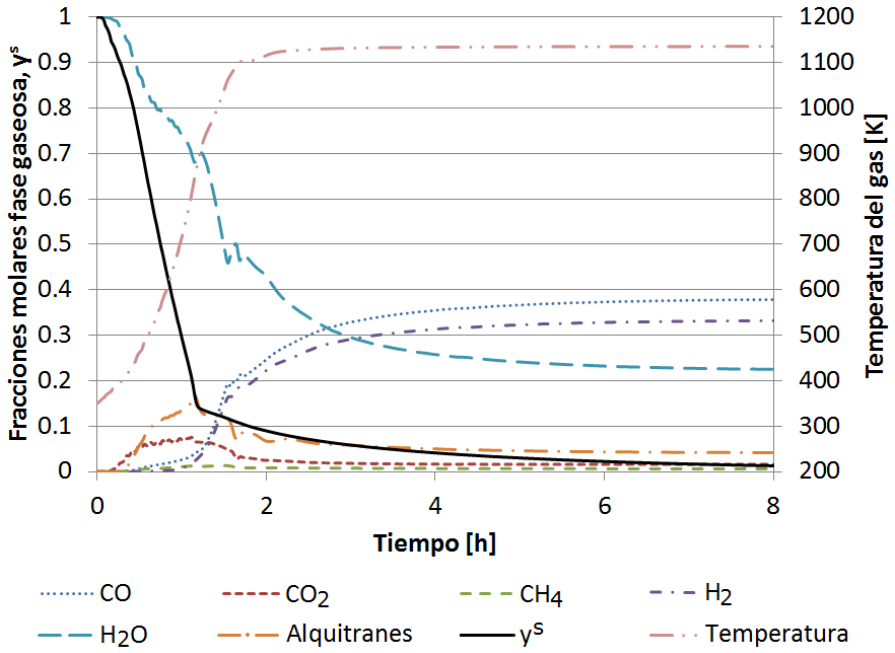


Figura 7-21.: Composición y temperatura media radial del gas producido y grado de conversión de la fase sólida a la salida del reactor en función del tiempo para $T_{W,\,max} = 1275\,\mathrm{K}$

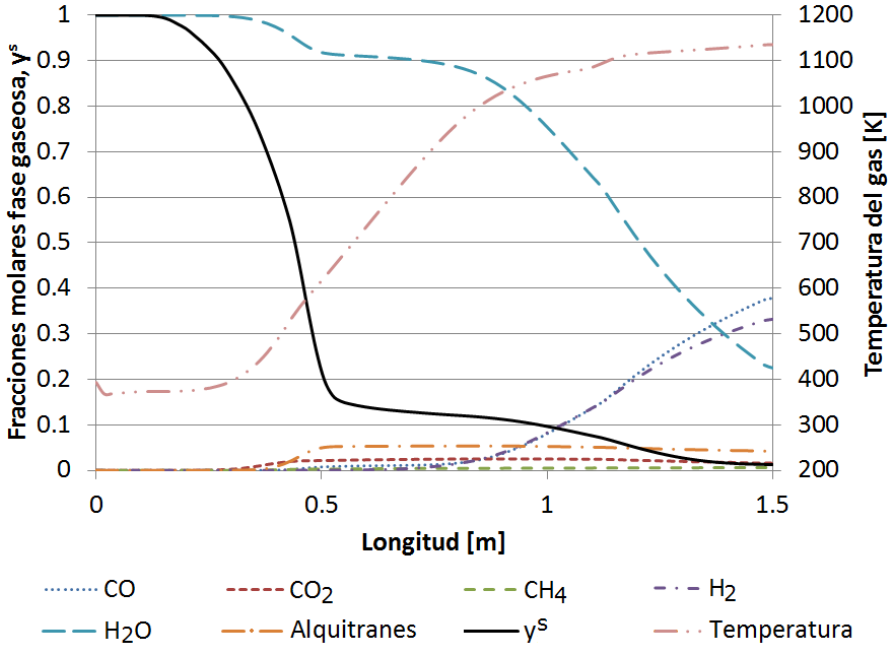


Figura 7-22.: Composición y temperatura media radial del gas producido y grado de conversión de la fase sólida en función de la longitud para $t = 8\,\mathrm{h}$ y $T_{W,\,max} = 1275\,\mathrm{K}$

7.2. Comparación de resultados del modelo con mediciones experimentales

En primer lugar se compara la distribución de temperaturas en el sentido axial del reactor. En la Figura **7-23** se muestra el perfil de temperaturas calculado mediante el modelo para el centro del reactor en función de su longitud, comparado con dos perfiles de temperatura medidos experimentalmente en condiciones similares de prueba y el perfil de temperatura de la pared del reactor. Los perfiles de temperatura medidos experimentalmente se tomaron del trabajo realizado por Jensen en [16]. Las desviaciones que se presentan entre las dos mediciones experimentales mostradas, se deben a que para el reactor de prueba la alimentación de biomasa se realiza en intervalos de tiempo discretos y no de manera continua, según lo explica Jensen [16]. Esto hace que la altura de la cama y la longitud de biomasa húmeda puedan variar entre medición y medición alterando los perfiles obtenidos. En la gráfica se observa que el perfil de temperatura axial coincide muy bien con los resultados experimentales hasta una temperatura aproximada de 1000 K. Luego se observa una fuerte influencia de las reacciones endotérmicas de gasificación en la zona comprendida entre los 0.8 y 1.2 m que hacen que las temperaturas en esa zona sean aproximadamente 100 K menores a las obtenidas experimentalmente. Hacia el final del reactor se presenta una caída en las temperaturas medidas experimentalmente debido a que algunos de esos puntos se encuentran por debajo de la rejilla de la cama.

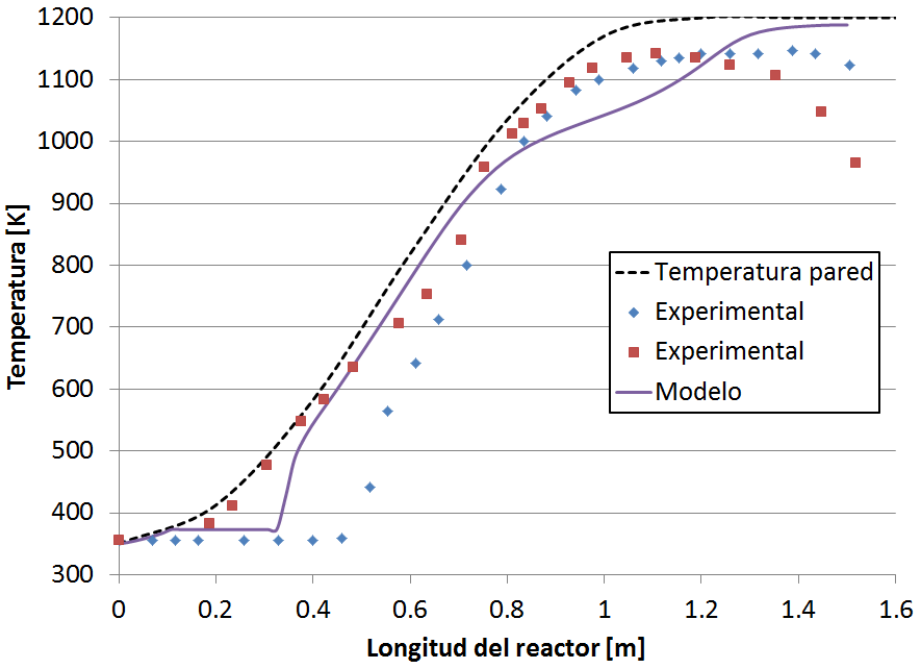


Figura 7-23.: Comparación entre la distribución axial de temperaturas calculada y la medida experimentalmente para el centro del reactor

La distribución de temperaturas en el sentido radial del reactor calculadas mediante el modelo, se comparan en la Figura **7-24** con las temperaturas medidas en el reactor de prueba. Nuevamente las temperaturas medidas experimentalmente se tomaron del trabajo realizado por Jensen [16]. Las temperaturas se midieron para tres alturas diferentes en el reactor en cuatro ubicaciones radiales igualmente espaciadas. Las alturas tomadas corresponden a $h = 0{,}575\,\mathrm{m}$, $h = 0{,}975\,\mathrm{m}$ y $h = 1{,}175\,\mathrm{m}$ medidas a partir de la entrada del reactor. Estas alturas no se pueden relacionar directamente con la altura de la cama ya que ésta no es constante, debido a que la alimentación de biomasa se realiza en intervalos de tiempo discretos. Las dos mediciones mostradas para cada ubicación corresponden a temperaturas de la pared del reactor de $T_W = 1150\,\mathrm{K}$ y $T_W = 1200\,\mathrm{K}$. Se observa que las temperaturas obtenidas con el modelo difieren hasta en 70 K de las medidas experimentalmente. Para la zona de pirólisis se observa que el gradiente de temperatura entre la pared y el centro del reactor obtenido con el modelo es menor que el medido experimentalmente, mientras que para la zona de gasificación sucede lo opuesto.

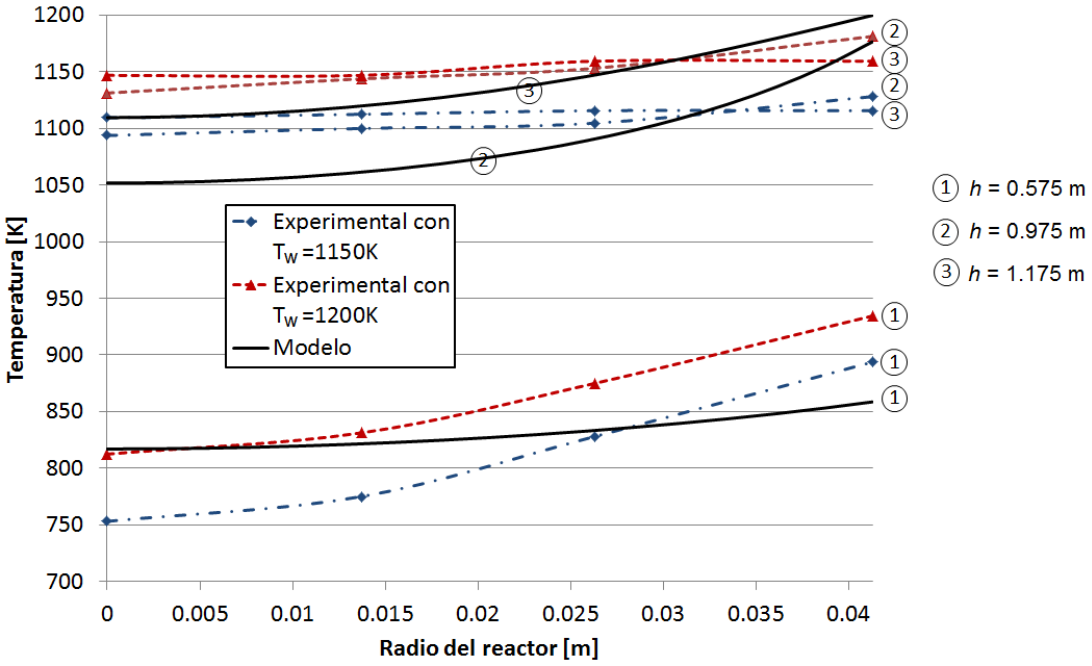


Figura 7-24.: Comparación entre la distribución radial de temperaturas calculada y la medida experimentalmente

Ahora se comparan las composiciones de la fase gaseosa obtenidas mediante el modelo con las mediciones experimentales realizadas en el reactor de prueba, las cuales son mostradas por Jensen [16] y Gómez [12]. Para el desarrollo de las pruebas se empleó una velocidad de calentamiento del horno de $\kappa = 60\,\mathrm{K/min}$ hasta una temperatura máxima de 1150 K. Esta temperatura se mantuvo durante un tiempo de $t = 5\,\mathrm{h}$, para luego aumentarla hasta 1200 K. Una vez alcanzado el estado estacionario para las dos temperaturas máximas analizadas se

determinaron las composiciones de la fase gaseosa con el uso de analizadores de gases en línea y cromatografía. La diferencia encontrada entre los dos métodos de medición fue a lo sumo del 1 %.

En la Tabla **7-1** se comparan las mediciones experimentales mostradas por Jensen [16] y Gómez [12] para dos temperaturas radiales promedio tomadas a la salida del reactor, con los resultados encontrados mediante el modelo aquí planteado para temperaturas de pared establecidas en 1200 K y 1275 K, utilizando un flujo másico constante de vapor de 1 kg/h de vapor de agua como agente de gasificación. Para una mejor comparación de los resultados del modelo con las mediciones experimentales se muestran en la tabla las temperaturas radiales promedio obtenidas a la salida del reactor.

Tabla 7-1.: Comparación entre las composiciones libres de agua de la fase gaseosa medidas experimentalmente [16, 12] y las obtenidos mediante el modelo

	Experimental		**Modelo**	
Especie	1110 K	1158 K	1100 K	1135 K
H_2	0,520	0,500	0,434	0,429
CO	0,390	0,460	0,475	0,489
CO_2	0,065	0,020	0,030	0,020
CH_4	0,015	0,010	0,008	0,008
Alquitranes	0,010	0,010	0,053	0,054

Como se observa en la Tabla **7-1**, las composiciones obtenidas mediante el modelo planteado son cercanas a los obtenidos en las pruebas experimentales mostradas en [12, 16]. En ella se observa que la fracción molar de monóxido de carbono predicha mediante el modelo es mayor a la obtenida en las pruebas experimentales, mientras que la fracción de hidrógeno es menor. Una justificación para este resultado es la alta velocidad con la que fluye el gas en la zona de mayor temperatura, la cual hace que el tiempo de residencia de los gases sea muy corto y la influencia de la reacción homogénea agua-gas (sección 5.3.2), cuyo equilibrio a altas temperaturas tiende hacia la formación de H_2 y destrucción de CO, sea baja.

La fracción de alquitranes calculada también es mayor a la medida en las pruebas experimentales. Esto puede deberse a que la cinética de reacción mediante la cual los alquitranes se convierten en gases como el H_2, CO, CO_2 y CH_4 se determinó teóricamente y no se tienen resultados experimentales que comprueben su validez. Otra razón es nuevamente la alta velocidad a la que fluyen los gases, lo cual le da tiempos de residencia muy bajos a los alquitranes para su descomposición.

A partir de la velocidad del lecho determinada con el modelo desarrollado se encontró que el flujo másico de entrada de la biomasa es de 1,2 kg/h para la temperatura promedio de

salida de 1100 K y de 1,7 kg/h para la temperatura promedio de salida de 1135 K. Este flujo másico es un poco mayor al valor experimental mostrado por Jensen [16] en el que se tiene un flujo másico de 1,23 kg/h para temperatura media de salida de 1158 K.

8. Conclusiones y perspectivas

En este trabajo se desarrolló un modelo matemático para el cálculo de los procesos termoquímicos presentes en el interior de un reactor de gasificación de calentamiento indirecto. Mediante éste se pudieron determinar los perfiles de temperatura y la composición del gas generado. Se realizó la validación del modelo con ayuda de mediciones experimentales llevadas a cabo en el gasificador de prueba existente en el Instituto de Ingeniería Térmica de la Universidad de Kassel, Alemania. Mediante esta validación se encontró que el modelo predice el comportamiento del gasificador de prueba de manera adecuada. Sin embargo, investigaciones posteriores que se realicen con base en este modelo deben centrarse primero en realizar una validación más extensa con el fin de realizar los ajustes que se encuentren pertinentes.

Mediante el modelo desarrollado se encontró que para las condiciones de operación del equipo de prueba se obtendría un gas combustible con un poder calorífico entre 12 y 13 MJ/m^3 STP a una tasa de 0,041 m^3/min STP para una temperatura máxima de pared de 1200 K y un flujo másico de 1 kg/h de vapor de agua a la entrada del reactor. Tomando la eficiencia de un motor de combustión interna como del 30 % y la de un generador eléctrico como del 90 %, se estima que mediante el gasificador de prueba se podrían generar 2,2 kWh de energía eléctrica.

El modelo desarrollado se basó en el planteamiento de las ecuaciones de balance de energía y de especies. El balance de cantidad de movimiento para la determinación de los perfiles de velocidad de la fase gaseosa no fue considerado. En su lugar se utilizó una forma más simple para tener en cuenta la variación de la velocidad del gas con la dilatación térmica y las reacciones químicas como se explicó en el capítulo 4. Este perfil de velocidad tiene una altísima influencia en los resultados obtenidos, por lo que se podría pensar en la implementación de balances de cantidad de movimiento que permitan obtener perfiles más precisos para mejorar el modelo. Debe sin embargo ponderarse la exactitud ganada en el modelo con la complejidad en la programación y los costos computacionales en los que se incurren para tener en cuenta estos balances.

El modelo desarrollado requiere de elevados tiempos de procesamiento, siendo el tiempo de CPU empleado cerca de 10 veces el tiempo real del proceso físico simulado. Una optimización del código desarrollado y la programación mediante métodos más eficaces para la solución de las ecuaciones discretizadas es una alternativa a futuro.

A. Anexo: Discretización de las ecuaciones de balance

1.1. Discretización de las ecuaciones de balance de energía

1.1.1. Nodos superiores $(\mathbf{n_P = 0,\ 0 \leq m_P \leq m})$

Fases sólida y gaseosa

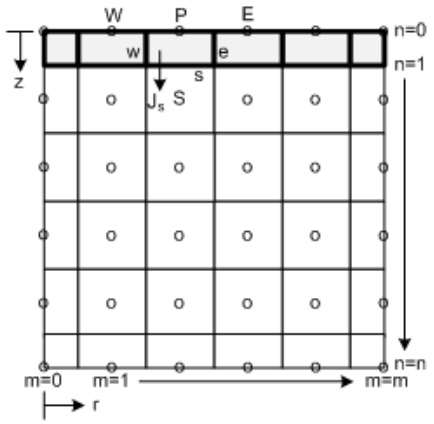


Figura A-1.: Volúmenes de control - Nodos superiores

El volumen de control analizado se muestra en la Figura **A-1**. Para los nodos superiores la temperatura de las fases sólida y gaseosa será constante e igual a la temperatura ambiente. Como esta temperatura permanece invariable a lo largo del tiempo la ecuación de estos nodos se reduce a:

$$T^s_{m_P,0} = T^g_{m_P,0} = T_{\text{amb}} \tag{A-1}$$

1.1.2. Nodos internos $(\mathbf{1 \leq n_P < n,\ 1 \leq m_P < m})$

El volumen de control analizado se muestra en la Figura **A-2**. Las áreas correspondientes a cada una de las caras del volumen de control y el volumen del mismo son:

$$A_w = \Delta z \left[2\pi \left(m_P \Delta r - \frac{\Delta r}{2} \right) \right]$$

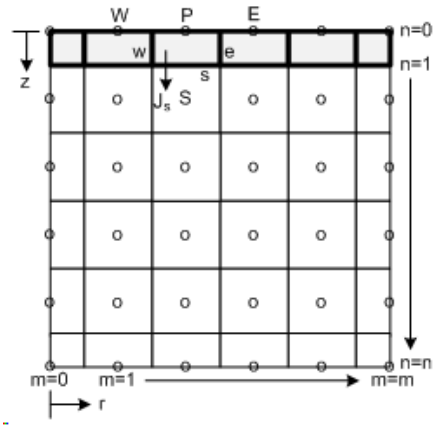


Figura A-2.: Volúmenes de control - Nodos internos

$$
\begin{aligned}
A_e &= \Delta z \left[2\pi \left(m_P \Delta r + \frac{\Delta r}{2} \right) \right] \\
A_n &= A_s = \Delta r \left[2\pi \left(m_P \Delta r \right) \right] \\
V &= \Delta r \Delta z \left[2\pi \left(m_P \Delta r \right) \right]
\end{aligned} \tag{A-2}
$$

Fase gaseosa

Aplicando la ecuación de la conservación de energía para la fase gaseosa en el volumen de control analizado, se obtiene:

$$
\begin{aligned}
cV \frac{\partial h}{\partial t} &= J_w + J_e + J_n - J_s + J_{\text{fase sólida}} + S^g \\
\frac{c_P V h_P}{\Delta t} - \frac{c_P^0 V h_P^0}{\Delta t} &= J_w + J_e + J_n - J_s + J_{\text{fase sólida}} + S^g
\end{aligned} \tag{A-3}
$$

donde:

$$
\begin{aligned}
J_n &= (cw_{ax})_n h_n A_n \\
J_s &= (cw_{ax})_s h_s A_s \\
J_w &= \left[D_{r,th_w} \frac{\partial T}{\partial z} \right] A_w \\
J_e &= \left[D_{r,th_e} \frac{\partial T}{\partial z} \right] A_e \\
J_{\text{fase sólida}} &= h_{GP} A_{esp} V (T_P^s - T_P^g)
\end{aligned} \tag{A-4}
$$

El término $J_{\text{fase sólida}}$, representa la transferencia de calor entre la fase gaseosa y la fase sólida presente en el volumen de control analizado, mientras que los términos J_w, J_e, J_n y J_s representan la transferencia de calor por convección-difusión de la fase gaseosa con los volúmenes

de control adyacentes.

En la ecuación A-4, el área específica A_{esp}, está dada por:

$$A_{\text{esp}} = \frac{A_P n_P}{V^g} \tag{A-5}$$

Donde el área superficial de las partículas A_p, el número de partículas n_P y el volumen del gas V^g se encuentran mediante:

$$A_P = \pi d_P^2 \qquad n_P = \frac{V^s}{V_P} = \frac{V^s}{\frac{4}{3}\pi\left(\frac{d_P}{2}\right)^3} \qquad V^g = \varepsilon_b V_{\text{total}}$$

Reemplazando las ecuaciones anteriores en la ecuación A-5, se obtiene:

$$A_{\text{esp}} = \frac{6(1-\varepsilon_b)}{\varepsilon_b d_P} \tag{A-6}$$

Aplicando la ecuación de la continuidad (conservación de masa) para el volumen de control en análisis, se obtiene:

$$V\frac{\partial c}{\partial t} = F_n - F_s \tag{A-7}$$

donde:

$$\begin{aligned} F_n &= (cw_{\text{ax}})_n A_n \\ F_s &= (cw_{\text{ax}})_s A_s \end{aligned} \tag{A-8}$$

Multiplicando la ecuación A-7 por h_P y discretizando con respecto al tiempo se tiene que:

$$h_P V\frac{c_P - c_P^0}{\Delta t} = h_P F_n - h_P F_s$$

Reorganizando los términos se obtiene:

$$\frac{c_P h_P V}{\Delta t} = \frac{c_P^0 h_P V}{\Delta t} + h_P F_n - h_P F_s \tag{A-9}$$

Reemplazando la ecuación A-9 en la ecuación A-3:

$$\begin{aligned} \frac{c_P^0 V h_P}{\Delta t} - \frac{c_P^0 V h_P^0}{\Delta t} &= J_w + J_e + (J_n - h_P F_n) - (J_s - h_P F_s) + J_{\text{fase sólida}} + S^g \\ \frac{c_P^0 C_p V}{\Delta t}(T_P - T_P^0) &= J_w + J_e + (J_n - h_P F_n) - (J_s - h_P F_s) + J_{\text{fase sólida}} + S^g \end{aligned} \tag{A-10}$$

donde:

$$J_w = \left[D_{r,th_w}\frac{\partial T}{\partial r}\right] A_w = \left[D_{r,th_w}\frac{T_W - T_P}{\Delta r}\right] A_w$$

$$J_w = a_W(T_W - T_P) \quad \text{con} \quad a_W = \frac{D_{r,th_w} A_w}{\Delta r} \tag{A-11}$$

$$J_e = \left[D_{r,th_e} \frac{\partial T}{\partial r} \right] A_e = \left[D_{r,th_e} \frac{T_E - T_P}{\Delta r} \right] A_e$$
$$J_e = A_E(T_E - T_P) \quad \text{con} \quad a_E = \frac{D_{r,th_e} A_e}{\Delta r} \tag{A-12}$$

$$J_n - F_n h_P = (cw_{\text{ax}})_n h_n A_n - (cw_{\text{ax}})_n h_n \tag{A-13}$$

Tomando la temperatura de la cara del volumen de control, como la temperatura corriente arriba de la misma: $h_n = h_N$

$$J_n - F_n h_P = (cw_{\text{ax}})_n (h_N - h_P) A_n$$
$$J_n - F_n h_P = (cw_{\text{ax}})_n C_p (T_N - T_P) A_n$$
$$J_n - F_n h_P = a_N(h_N - h_P) \quad \text{con} \quad a_N = (cw_{ax})_n A_n C_p$$
$$J_s - F_s h_P = (cw_{\text{ax}})_s h_s A_s - (cw_{\text{ax}})_s h_s \tag{A-14}$$

Tomando la temperatura de la cara del volumen de control, como la temperatura corriente arriba de la misma: $h_s = h_P$

$$J_s - F_s h_P = (cw_{\text{ax}})_s (h_P - h_P) A_s$$
$$J_s - F_s h_P = 0$$

Por lo tanto:

$$\frac{(c^0 C_p)_P^g V}{\Delta t}(T_P^g - T_P^{0,g}) = a_W^g(T_W^g - T_P^g) + a_E^g(T_E^g - T_P^g) + a_N^g(T_N^g - T_P^g) + a_{\text{esp}}(T_P^s - T_P^g) + S^g$$

Ahora:

$$a_P^{0,g} = \frac{(c^0 C_p)_P^g V}{\Delta t} \qquad a_{\text{esp}}^g = h_{GP} A_{\text{esp}} V \qquad a_P^g = a_W^g + a_E^g + a_N^g + a_{\text{esp}}^g + a_P^{0,g}$$

Con lo que se obtiene la ecuación para determinar la temperatura de la fase gaseosa en el nodo analizado, para el nuevo instante de tiempo:

$$a_P^g T_P^g = a_W^g T_W^g + a_E^g T_E^g + a_N^g T_N^g + a_P^{0,g} T_P^{0,g} + a_{\text{esp}}^g T_P^s + S^g$$

$$T_P^g = \frac{a_W^g T_W^g + a_E^g T_E^g + a_N^g T_N^g + a_P^{0,g} T_P^{0,g} + a_{\text{esp}}^g T_P^s + S^g}{a_P^g} \tag{A-15}$$

Fase sólida

Aplicando la ecuación de la conservación de energía para la fase sólida en el volumen de control analizado, se obtiene:

$$cV\frac{\partial h}{\partial t} = J_w + J_e + J_n - J_s + J_{\text{fase gaseosa}} + S^s$$
$$\frac{c_P V h_P}{\Delta t} - \frac{c_P^0 V h_P^0}{\Delta t} = J_w + J_e + J_n - J_s + J_{\text{fase gaseosa}} + S^s \tag{A-16}$$

donde:

$$J_n = \left[(cw_{ax})_n h_n + \lambda_n \frac{\partial T}{\partial z}\right] A_n = \left[(cw_{ax})_n h_n + \frac{\lambda_n (T_N - T_P)}{\Delta z}\right] A_n$$
$$J_s = \left[(cw_{ax})_s h_s + \lambda_s \frac{\partial T}{\partial z}\right] A_s = \left[(cw_{ax})_s h_s + \frac{\lambda_s (T_S - T_P)}{\Delta z}\right] A_s$$
$$J_w = \left[\lambda_w \frac{\partial T}{\partial r}\right] A_w = \left[\frac{\lambda_w (T_W - T_P)}{\Delta r}\right] A_w$$
$$J_e = \left[\lambda_e \frac{\partial T}{\partial r}\right] A_e = \left[\frac{\lambda_e (T_E - T_P)}{\Delta r}\right] A_e$$
$$J_{\text{fase gaseosa}} = \frac{\varepsilon_b}{1-\varepsilon_b} h_{GP} A_{esp} V (T_P^g - T_P^s) \tag{A-17}$$

El término $J_{\text{fase gaseosa}}$, representa la transferencia de calor entre la fase sólida y la fase gaseosa presente en el volumen de control analizado, mientras que los términos J_w, J_e, J_n y J_s representan la transferencia de calor por convección-difusión de la fase sólida con los volúmenes de control adyacentes.

En la ecuación A-17, el área específica A_{esp}, está dada por la expresión encontrada en la sección 1.1.2:

$$A_{\text{esp}} = \frac{6(1-\varepsilon_b)}{\varepsilon_b d_P} \tag{A-18}$$

La discretización de la fase sólida se realiza mediante el esquema Power-Law descrito en Patankar [24], el cual como se muestra en el capítulo 6 describe correctamente la influencia de los fenómenos difusivos y convectivos en función del número de Péclet. Los fenómenos convectivos-difusivos se evalúan mediante la función del número de Péclet:

$$A(|\text{Pe}|) = \text{mayor}[0,\ (1 - 0{,}1|\text{Pe}|)^5] \tag{A-19}$$

Con base en este esquema, se puede expresar la discretización para la fase sólida de manera similar a la encontrada anteriormente para la fase gaseosa así:

$$a_P^s T_P^s = a_W^s T_W^s + a_E^s T_E^s + a_N^s T_N^s + a_S^s T_S^s + a_P^{0,s} T_P^{0,s} + a_{\text{esp}}^s T_P^g + S^s$$

$$T_P^s = \frac{a_W^s T_W^s + a_E^s T_E^s + a_N^s T_N^s + a_S^s T_S^s + a_P^{0,s} T_P^{0,s} + a_{\text{esp}}^s T_P^g + S^s}{a_P^s} \tag{A-20}$$

Donde:

$$a_W^s = \frac{\lambda_w^s A_w}{\Delta r} \quad a_E^s = \frac{\lambda_e^s A_e}{\Delta r} \quad a_S^s = \frac{\lambda_s^s A(|\text{Pe}_s|) A_s}{\Delta z} \quad a_N^s = (cw_{ax})_n A_n C_p + \frac{\lambda_n^s A(|\text{Pe}_n|) A_n}{\Delta z}$$

$$a_P^{0,s} = \frac{(c^0 C_p)_P^s V}{\Delta t} \quad a_{\text{esp}}^s = \frac{\varepsilon_b}{1-\varepsilon_b} h_{GP} A_{\text{esp}} V \quad a_P^s = a_W^s + a_E^s + a_N^s + a_S^s + a_{\text{esp}}^s + a_P^{0,s} \tag{A-21}$$

Como se observa en las ecuaciones A-15 y A-21, no es posible calcular de manera independiente las temperaturas de las fases sólida y gaseosa para el nuevo instante de tiempo $t+1$. Si se desea calcular la temperatura de la fase sólida para el nuevo instante de tiempo, se observa rápidamente que ésta depende de la temperatura de la fase gaseosa en ese nuevo instante, además de su propio valor en el tiempo actual. Lo mismo sucede si se desea calcular la temperatura en el nuevo instante de tiempo $t+1$ para la fase gaseosa. Por lo tanto es necesario acoplar las dos ecuaciones anteriores para determinar los valores de las temperaturas en los tiempos futuros, para ambas fases.

Reemplazando la ecuación A-15 en la ecuación A-21 y reacomodando los términos, se obtiene una nueva ecuación para determinar la temperatura de la fase sólida en el nuevo instante de tiempo, que incluye la temperatura de la fase gaseosa en ese mismo tiempo:

$$T_P^s = \frac{a_W^s T_W^s + a_E^s T_E^s + a_N^s T_N^s + a_S^s T_S^s + a_P^{0,s} T_P^{0,s} + a_{\text{esp}}^s \left(\frac{a_W^g T_W^g + a_E^g T_E^g + a_N^g T_N^g + a_P^{0,g} T_P^{0,g} + S^g}{a_P^g} \right) + S^s}{a_P^s} \tag{A-22}$$

donde:

$$a_P^s = a_W^s + a_E^s + a_N^s + a_S^s + a_P^{0,s} + a_{\text{esp}}^s \left(1 - \frac{a_{\text{esp}}^g}{a_p^g} \right) \tag{A-23}$$

Resumen de ecuaciones

Las ecuaciones discretizadas que permiten encontrar las temperaturas de la fase sólida y la fase gaseosa para los nodos evaluados, para el nuevo instante de tiempo son:

Fase sólida

$$T_P^s = \frac{a_W^s T_W^s + a_E^s T_E^s + a_N^s T_N^s + a_S^s T_S^s + a_P^{0,s} T_P^{0,s} + a_{\text{esp}}^s \left(\frac{a_W^g T_W^g + a_E^g T_E^g + a_N^g T_N^g + a_P^{0,g} T_P^{0,g} + S^g}{a_P^g} \right) + S^s}{a_P^s}$$

Fase gaseosa

$$T_P^g = \frac{a_W^g T_W^g + a_E^g T_E^g + a_N^g T_N^g + a_P^{0,g} T_P^{0,g} + a_{\text{esp}}^g T_P^s + S^g}{a_P^g}$$

donde:

$$a_W^s = \frac{\lambda_w^s A_w}{\Delta r} \qquad a_E^s = \frac{\lambda_e^s A_e}{\Delta r} \qquad a_S^s = \frac{\lambda_s^s A(|\text{Pe}_s|) A_s}{\Delta z} \qquad a_N^s = \left[(cw_{ax})_n^s C_p + \frac{\lambda_n^s A(|\text{Pe}_n|)}{\Delta z} \right] A_n$$

$$a_W^g = \frac{D_{r,th_w}^g A_w}{\Delta r} \qquad a_E^g = \frac{D_{r,th_e}^g A_e}{\Delta r} \qquad a_N^g = (cw_{ax})_n^g A_n C_p^g$$

$$a_P^{0,s} = \frac{(c^0 C_p)_P^s V}{\Delta t} \qquad a_P^{0,g} = \frac{(c^0 C_p)_P^g V}{\Delta t} \qquad a_{\text{esp}}^s = \frac{\varepsilon_b}{1-\varepsilon_b} h_{GP} A_{\text{esp}} V \qquad a_{\text{esp}}^g = h_{GP} A_{\text{esp}} V$$

$$a_P^s = a_W^s + a_E^s + a_N^s + a_S^s + a_P^{0,s} + a_{\text{esp}}^s \left(1 - \frac{a_{\text{esp}}^g}{a_p^g} \right) \qquad a_P^g = a_W^g + a_E^g + a_N^g + a_{\text{esp}}^g + a_P^{0,g}$$

1.1.3. Nodos internos - Frontera externa $(1 \leq \mathbf{n_P} < \mathbf{n},\ \mathbf{m_p} = \mathbf{m})$

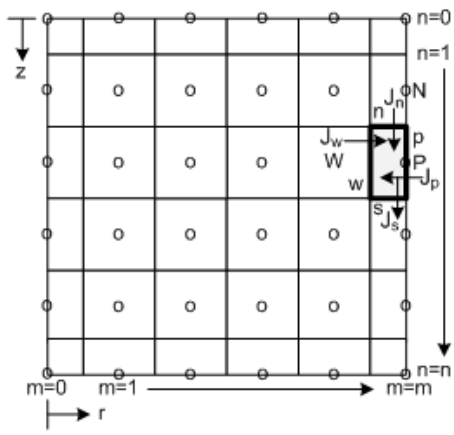


Figura A-3.: Volúmenes de control - Nodos internos, Frontera externa

El volumen de control analizado se muestra en la Figura **A-3**. Las áreas correspondientes a cada una de las caras del volumen de control y el volumen del mismo son:

$$\begin{aligned}
A_w &= \Delta z \left[2\pi \left(m\Delta r - \frac{\Delta r}{2} \right) \right] \\
A_p &= \Delta z \left[2\pi \left(m\Delta r \right) \right] \\
A_n &= A_s = \frac{\Delta r}{2} \left[2\pi \left(m\Delta r - \frac{\Delta r}{4} \right) \right] \\
V &= \Delta z \left(\frac{\Delta r}{2} \right) \left[2\pi \left(m\Delta r - \frac{\Delta r}{4} \right) \right]
\end{aligned} \tag{A-24}$$

El flujo de calor transferido a través de la pared del cilindro está dado por:

$$J_p^s = h_{WP}\left[T_W - T_P^s\right] A_p \qquad J_p^g = h_{WG}\left[T_W - T_P^g\right] A_p \tag{A-25}$$

A partir de las ecuaciones de continuidad y balance de energía y siguiendo un procedimiento similar al desarrollado en la sección 1.1.2 para los nodos internos, se pueden encontrar las expresiones para determinar las temperaturas de las fases sólida y gaseosa en el nodo analizado para el nuevo instante de tiempo:

Fase sólida

$$T_P^s = \frac{a_W^s T_W^s + a_E^s T_W^s + a_N^s T_N^s + a_S^s T_S^s + a_P^{0,s} T_P^{0,s} + a_{\text{esp}}^s \left(\frac{a_W^g T_W^g + a_E^g T_W^g + a_N^g T_N^g + a_P^{0,g} T_P^{0,g} + S^g}{a_P^g}\right) + S^s}{a_P^s} \tag{A-26}$$

Fase gaseosa

$$T_P^g = \frac{a_W^g T_W^g + a_E^g T_W^g + a_N^g T_N^g + a_P^{0,g} T_P^{0,g} + a_{\text{esp}}^g T_P^s + S^g}{a_P^g} \tag{A-27}$$

donde:

$$a_W^s = \frac{\lambda_w^s A_w}{\Delta r} \qquad a_E^s = h_{WS} A_p \qquad a_S^s = \frac{\lambda_s^s A(|\text{Pe}_s|) A_s}{\Delta z} \qquad a_N^s = \left[(cw_{ax})_n^s C_p + \frac{\lambda_n^s A(|\text{Pe}_n|)}{\Delta z}\right] A_n$$

$$a_W^g = \frac{D_{r,th_w}^g A_w}{\Delta r} \qquad a_E^g = h_{WG} A_p \qquad a_N^g = (cw_{ax})_n^g A_n C_p^g$$

$$a_P^{0,s} = \frac{(c^0 C_p)_P^s V}{\Delta t} \qquad a_P^{0,g} = \frac{(c^0 C_p)_P^g V}{\Delta t} \qquad a_{\text{esp}}^s = \frac{\varepsilon_b}{1-\varepsilon_b} h_{GP} A_{\text{esp}} V \qquad a_{\text{esp}}^g = h_{GP} A_{\text{esp}} V$$

$$a_P^s = a_W^s + a_E^s + a_N^s + a_S^s + a_P^{0,s} + a_{\text{esp}}^s \left(1 - \frac{a_{\text{esp}}^g}{a_p^g}\right) \qquad a_P^g = a_W^g + a_E^g + a_N^g + a_{\text{esp}}^g + a_P^{0,g}$$

1.1.4. Nodos internos centrales $(\mathbf{1 \leq n_P < n,\ m_p = 0})$

El volumen de control analizado se muestra en la Figura **A-4**. Las áreas correspondientes a cada una de las caras del volumen de control y el volumen del mismo son:

$$A_e = \Delta z \left[2\pi \left(\frac{\Delta r}{2}\right)\right]$$

$$A_n = A_s = \frac{\Delta r}{2} \left[2\pi \left(\frac{\Delta r}{4}\right)\right]$$

$$V = \Delta z \left(\frac{\Delta r}{2}\right) \left[2\pi \left(\frac{\Delta r}{4}\right)\right] \tag{A-28}$$

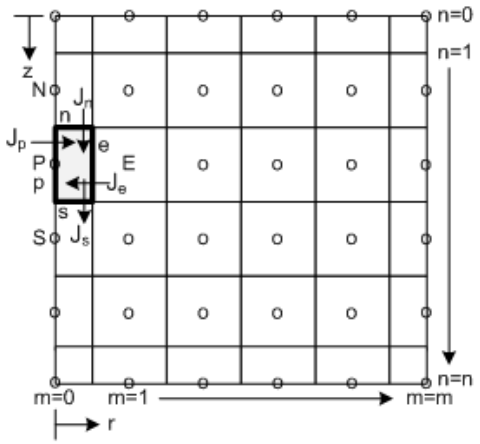


Figura A-4.: Volúmenes de control - Nodos internos centrales

Debido a la condición de simetría térmica, la transferencia de calor por la cara oeste del volumen de control será cero:

$$J_p^s = J_p^g = 0 \tag{A-29}$$

A partir de las ecuaciones de continuidad y balance de energía y siguiendo un procedimiento similar al desarrollado previamente en la sección 1.1.2 para los nodos internos, se pueden encontrar las expresiones para determinar las temperaturas de las fases sólida y gaseosa en el nodo analizado para el nuevo instante de tiempo:

Fase sólida

$$T_P^s = \frac{a_E^s T_E^s + a_N^s T_N^s + a_S^s T_S^s + a_P^{0,s} T_P^{0,s} + a_{\text{esp}}^s \left(\frac{a_E^g T_E^g + a_N^g T_N^g + a_P^{0,g} T_P^{0,g} + S^g}{a_P^g} \right) + S^s}{a_P^s} \tag{A-30}$$

Fase gaseosa

$$T_P^g = \frac{a_E^g T_E^g + a_N^g T_N^g + a_P^{0,g} T_P^{0,g} + a_{\text{esp}}^g T_P^s + S^g}{a_P^g} \tag{A-31}$$

donde:

$$a_E^s = \frac{\lambda_e^s A_e}{\Delta r} \qquad a_S^s = \frac{\lambda_s^s A(|\text{Pe}_s|) A_s}{\Delta z} \qquad a_N^s = \left[(cw_{ax})_n^s C_p + \frac{\lambda_n^s A(|\text{Pe}_n|)}{\Delta z} \right] A_n$$

$$a_E^g = \frac{D_{r,th_e}^g A_e}{\Delta r} \qquad a_N^g = (cw_{ax})_n^g A_n C_p^g$$

$$a_P^{0,s} = \frac{(c^0 C_p)_P^s V}{\Delta t} \qquad a_P^{0,g} = \frac{(c^0 C_p)_P^g V}{\Delta t} \qquad a_{\text{esp}}^s = \frac{\varepsilon_b}{1-\varepsilon_b} h_{GP} A_{\text{esp}} V \qquad a_{\text{esp}}^g = h_{GP} A_{\text{esp}} V$$

$$a_P^s = a_E^s + a_N^s + a_S^s + a_P^{0,s} + a_{\text{esp}}^s \left(1 - \frac{a_{\text{esp}}^g}{a_p^g} \right) \qquad a_P^g = a_E^g + a_N^g + a_{\text{esp}}^g + a_P^{0,g}$$

1.1.5. Nodos internos inferiores $(\mathbf{n_P = n,\ 1 \leq m_p \leq m})$

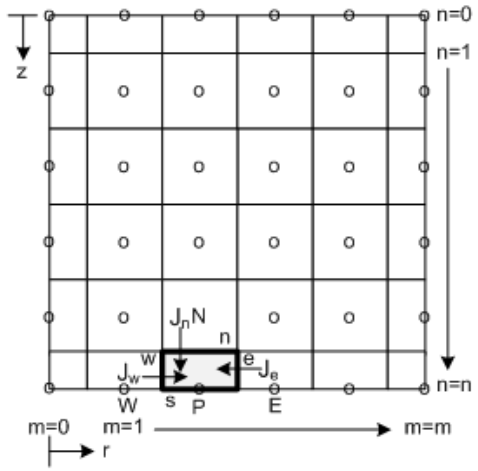


Figura A-5.: Volúmenes de control - Nodos internos inferiores

El volumen de control analizado se muestra en la Figura **A-4**. Las áreas correspondientes a cada una de las caras del volumen de control y el volumen del mismo son:

$$
\begin{aligned}
A_w &= \frac{\Delta z}{2}\left[2\pi\left(m_p\Delta r - \frac{\Delta r}{2}\right)\right] \\
A_e &= \frac{\Delta z}{2}\left[2\pi\left(m_p\Delta r + \frac{\Delta r}{2}\right)\right] \\
A_n &= A_s = \Delta r\left[2\pi\left(m_p\Delta r\right)\right] \\
V &= \Delta r\left(\frac{\Delta z}{2}\right)\left[2\pi\left(m_p\Delta r\right)\right]
\end{aligned}
\tag{A-32}
$$

Para la salida del fluido del reactor, no es necesario establecer ninguna condición de frontera como explica Patankar en [24], por lo tanto se tiene que:

$$J_s^s = J_s^g = 0 \tag{A-33}$$

A partir de las ecuaciones de continuidad y balance de energía y siguiendo un procedimiento similar al desarrollado en la sección 1.1.2 para los nodos internos, se pueden encontrar las expresiones para determinar las temperaturas de las fases sólida y gaseosa en el nodo analizado para el nuevo instante de tiempo:

Fase sólida

$$T_P^s = \frac{a_W^s T_W^s + a_E^s T_E^s + a_N^s T_N^s + a_P^{0,s} T_P^{0,s} + a_{\text{esp}}^s\left(\frac{a_W^g T_W^g + a_E^g T_E^g + a_N^g T_N^g + a_P^{0,g} T_P^{0,g} + S^g}{a_P^g}\right) + S^s}{a_P^s}$$

(A-34)

Fase gaseosa

$$T_P^g = \frac{a_W^g T_W^g + a_E^g T_E^g + a_N^g T_N^g + a_P^{0,g} T_P^{0,g} + a_{\text{esp}}^g T_P^s + S^g}{a_P^g} \tag{A-35}$$

donde:

$$a_W^s = \frac{\lambda_w^s A_w}{\Delta r} \qquad a_E^s = \frac{\lambda_e^s A_e}{\Delta r} \qquad a_N^s = \left[(cw_{ax})_s^s C_p + \frac{\lambda_n^s A(|\text{Pe}_n|)}{\Delta z}\right] A_n$$

$$a_W^g = \frac{D_{r,th_w}^g A_w}{\Delta r} \qquad a_E^g = \frac{D_{r,th_e}^g A_e}{\Delta r} \qquad a_N^g = (cw_{ax})_n^g A_n C_p^g$$

$$a_P^{0,s} = \frac{(c^0 C_p)_P^s V}{\Delta t} \qquad a_P^{0,g} = \frac{(c^0 C_p)_P^g V}{\Delta t} \qquad a_{\text{esp}}^s = \frac{\varepsilon_b}{1-\varepsilon_b} h_{GP} A_{\text{esp}} V \qquad a_{\text{esp}}^g = h_{GP} A_{\text{esp}} V$$

$$a_P^s = a_W^s + a_E^s + a_N^s + a_P^{0,s} + a_{\text{esp}}^s \left(1 - \frac{a_{\text{esp}}^g}{a_p^g}\right) \qquad a_P^g = a_W^g + a_E^g + a_N^g + a_{\text{esp}}^g + a_P^{0,g}$$

1.1.6. Nodo inferior - Frontera externa $(\mathbf{n_p = n},\ \mathbf{m_p = m})$

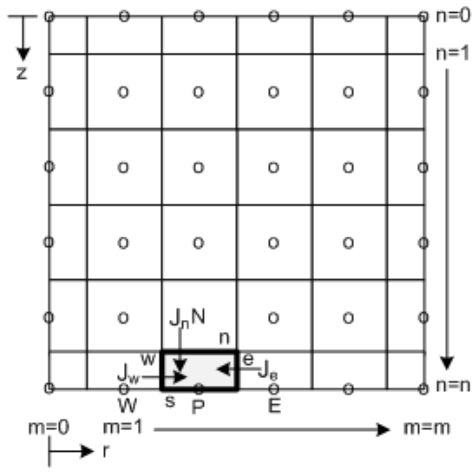


Figura A-6.: Volúmenes de control - Nodo inferior, Frontera externa

El volumen de control analizado se muestra en la Figura **A-6**. Las áreas correspondientes a cada una de las caras del volumen de control y el volumen del mismo son:

$$A_w = \frac{\Delta z}{2}\left[2\pi\left(m\Delta r - \frac{\Delta r}{2}\right)\right]$$

$$A_p = \frac{\Delta z}{2}\left[2\pi\left(m\Delta r\right)\right]$$

$$A_n = A_s = \frac{\Delta r}{2}\left[2\pi\left(m\Delta r - \frac{\Delta r}{4}\right)\right]$$
$$V = \left(\frac{\Delta z}{2}\right)\left(\frac{\Delta r}{2}\right)\left[2\pi\left(m\Delta r - \frac{\Delta r}{4}\right)\right] \tag{A-36}$$

Para la salida del fluido del reactor, no es necesario establecer ninguna condición de frontera como explica Patankar en [24], por lo tanto se tiene que:

$$J_s^s = J_s^g = 0 \tag{A-37}$$

El flujo de calor transferido a través de la pared del cilindro está dado por:

$$J_p^s = h_{WP}\left[T_W - T_P^s\right]A_p \qquad J_p^g = h_{WG}\left[T_W - T_P^g\right]A_p \tag{A-38}$$

A partir de las ecuaciones de continuidad y balance de energía y siguiendo un procedimiento similar al desarrollado en la sección 1.1.2 para los nodos internos, se pueden encontrar las expresiones para determinar las temperaturas de las fases sólida y gaseosa en el nodo analizado para el nuevo instante de tiempo:

Fase sólida

$$T_P^s = \frac{a_W^s T_W^s + a_E^s T_W^s + a_N^s T_N^s + a_P^{0,s} T_P^{0,s} + a_{\text{esp}}^s\left(\frac{a_W^g T_W^g + a_E^g T_W^g + a_N^g T_N^g + a_P^{0,g} T_P^{0,g} + S^g}{a_P^g}\right) + S^s}{a_P^s} \tag{A-39}$$

Fase gaseosa

$$T_P^g = \frac{a_W^g T_W^g + a_E^g T_W^g + a_N^g T_N^g + a_P^{0,g} T_P^{0,g} + a_{\text{esp}}^g T_P^s + S^g}{a_P^g} \tag{A-40}$$

donde:

$$a_W^s = \frac{\lambda_w^s A_w}{\Delta r} \qquad a_E^s = h_{WS}A_p \qquad a_N^s = \left[(cw_{ax})_n^s C_p + \frac{\lambda_n^s A(|\text{Pe}_n|)}{\Delta z}\right]A_n$$
$$a_W^g = \frac{D_{r,th_w}^g A_w}{\Delta r} \qquad a_E^g = h_{WG}A_p \qquad a_N^g = (cw_{ax})_n^g A_n C_p^g$$
$$a_P^{0,s} = \frac{(c^0 C_p)_P^s V}{\Delta t} \qquad a_P^{0,g} = \frac{(c^0 C_p)_P^g V}{\Delta t} \qquad a_{\text{esp}}^s = \frac{\varepsilon_b}{1-\varepsilon_b}h_{GP}A_{\text{esp}}V \qquad a_{\text{esp}}^g = h_{GP}A_{\text{esp}}V$$

$$a_P^s = a_W^s + a_E^s + a_N^s + a_P^{0,s} + a_{\text{esp}}^s\left(1 - \frac{a_{\text{esp}}^g}{a_p^g}\right) \qquad a_P^g = a_W^g + a_E^g + a_N^g + a_{\text{esp}}^g + a_P^{0,g}$$

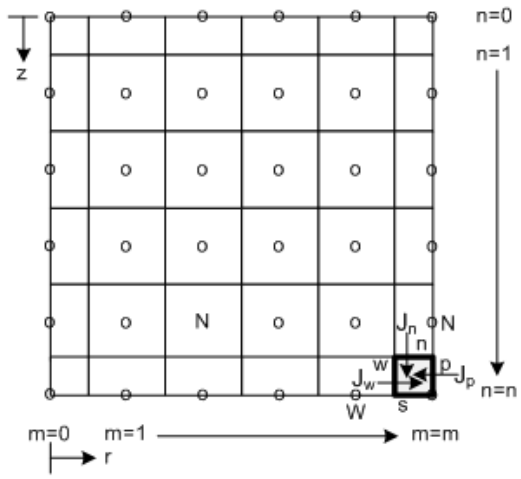


Figura A-7.: Volúmenes de control - Nodo inferior central

1.1.7. Nodo inferior central $(\mathbf{n_p = n},\ \mathbf{m_p = 0})$

El volumen de control analizado se muestra en la Figura **A-7**. Las áreas correspondientes a cada una de las caras del volumen de control y el volumen del mismo son:

$$A_e = \frac{\Delta z}{2}\left[2\pi\left(\frac{\Delta r}{2}\right)\right]$$
$$A_n = A_s = \frac{\Delta r}{2}\left[2\pi\left(\frac{\Delta r}{4}\right)\right]$$
$$V = \left(\frac{\Delta z}{2}\right)\left(\frac{\Delta r}{2}\right)\left[2\pi\left(\frac{\Delta r}{4}\right)\right] \tag{A-41}$$

Debido a la condición de simetría térmica, la transferencia de calor por la cara oeste del volumen de control será cero:

$$J_p^s = J_p^g = 0 \tag{A-42}$$

Para la salida del fluido del reactor, no es necesario establecer ninguna condición de frontera como explica Patankar en [24], por lo tanto se tiene que:

$$J_s^s = J_s^g = 0 \tag{A-43}$$

A partir de las ecuaciones de continuidad y balance de energía y siguiendo un procedimiento similar al desarrollado previamente en la sección 1.1.2 para los nodos internos, se pueden encontrar las expresiones para determinar las temperaturas de las fases sólida y gaseosa en el nodo analizado para el nuevo instante de tiempo:

Fase sólida

$$T_P^s = \frac{a_E^s T_E^s + a_N^s T_N^s + a_P^{0,s} T_P^{0,s} + a_{\text{esp}}^s \left(\frac{a_E^g T_E^g + a_N^g T_N^g + a_P^{0,g} T_P^{0,g} + S^g}{a_P^g}\right) + S^s}{a_P^s} \tag{A-44}$$

Fase gaseosa

$$T_P^g = \frac{a_E^g T_E^g + a_N^g T_N^g + a_P^{0,g} T_P^{0,g} + a_{\text{esp}}^g T_P^s + S^g}{a_P^g} \tag{A-45}$$

donde:

$$a_E^s = \frac{\lambda_e^s A_e}{\Delta r} \qquad a_N^s = \left[(cw_{ax})_n^s C_p + \frac{\lambda_n^s A(|\text{Pe}_n|)}{\Delta z} \right] A_n$$

$$a_E^g = \frac{D_{r,th_e}^g A_e}{\Delta r} \qquad a_N^g = (cw_{ax})_n^g A_n C_p^g$$

$$a_P^{0,s} = \frac{(c^0 C_p)_P^s V}{\Delta t} \qquad a_P^{0,g} = \frac{(c^0 C_p)_P^g V}{\Delta t} \qquad a_{\text{esp}}^s = \frac{\varepsilon_b}{1-\varepsilon_b} h_{GP} A_{\text{esp}} V \qquad a_{\text{esp}}^g = h_{GP} A_{\text{esp}} V$$

$$a_P^s = a_E^s + a_N^s + a_P^{0,s} + a_{\text{esp}}^s \left(1 - \frac{a_{\text{esp}}^g}{a_p^g} \right) \qquad a_P^g = a_E^g + a_N^g + a_{\text{esp}}^g + a_P^{0,g}$$

1.2. Discretización de las ecuaciones de balance de masa

La discretización de la ecuación de balance de masa para la fase gaseosa se realiza de manera similar a la mostrada anteriormente para las ecuaciones de balance de energía, teniendo en cuenta las ecuaciones de balance y condiciones de frontera planteadas en la sección 3.1.

Bibliografía

[1] Adler, R.: Stand der Simulation von heterogen-gaskatalytischen Reaktionsabläufen in Festbettrohrreaktoren. En: *Chemie Ingenieur Technik* (2000)

[2] Aureum, Miliarium. *Propiedades térmicas de materiales de construcción y aislantes.* www.miliarium.com, Revisado: Diciembre de 2010

[3] Bain, R. L.: An overview of biomass gasification. En: *American Institute of Chemical Engineers (AIChE)* (2004)

[4] Bridgwater, A. V.: The technical and economic feasibility of biomass gasification for power generation. En: *Butterworth Heinemann* (1994)

[5] Çengel, Y. A.: *Transferencia de calor.* Segunda Edición. McGraw-Hill, 2003

[6] Chopra, S. ; Jain, A.: A Review of Fixed Bed Gasification Systems for Biomass. En: *Agricultural Engineering International: the CIGR Ejournal.* Invited Overview No. 5. Vol. IX (2007)

[7] Superintendencia de servicios públicos domiciliarios: República de Colombia. *Agenda ciudadana nacional sobre servicios públicos domiciliarios de energía en Zonas no Interconectadas del país.* www.superservicios.gov.co, Revisado: Febrero de 2008

[8] Dixon, A. ; Cresswell, D.: Theorical Prediction of Effective Heat Transfer Parameters in Packed Beds. En: *AIChE Journal* 25-4 (1979), p. 663–676

[9] Estrada, C. ; Meneses, A.: Gasificación de biomasa para producción de combustibles de bajo poder calorífico y su utilización en generación de potencia y calor. En: *Scientia et Technica* (2004)

[10] Cap. Der strahlungsmässige Wärmetransport in Kontaktmassen En: Eucken, A. ; Jakob, M.: *Der Chemie-Ingenieur.* Vol. III. 1937, p. 445–447

[11] Gnielinski, V.: Berechnung mittlerer Wärme- und Stoffübergangskoeffizienten an laminar und turbulent überströmten Einzelkörpern mit Hilfe einer einheitlichen Gleichung. En: *Forsch. Ing.-Wes.* (1975), p. 41(5): 145–153

[12] Gómez, A. *Investigación del proceso de gasificación de biomasa en un gasificador en paralelo.* 2002

[13] Gunn, D. J.: Theory of axial and radial dispersion in packed beds. En: *Trans. Instn. Chem. Engrs.* 47 (1969)

[14] Hoby, J.: Interaction between fluids and particles. (1962)

[15] International Energy Agency IEA: *World Energy Outlook 2007, China and India Insights*. International Energy Agency, 2007

[16] Jensen, S.: *Zur Modellierung eines indirekt beheizten Festbettbiomassevergasers*, Universität Gh Kassel, Tesis de Doctorado, 2001

[17] Klein, A.: *Gasification: An alternative process for energy recovery and disposal of Municipal Solid Wastes*. Columbia University, 2002

[18] McKendry, P.: Energy production from biomass (part 1): overview of biomass. En: *Bioresource Technology* (2001)

[19] McKendry, P.: Energy production from biomass (part 2): conversion technologies. En: *Bioresource Technology* (2001)

[20] McKendry, P.: Energy production from biomass (part 3): gasification technologies. En: *Bioresource Technology* (2001)

[21] Moragues, J. ; Rapallini, A.: Energía de la biomasa. En: *Instituto Argentino de la Energía* (2007)

[22] Müller, R.: Die Annäherung der Temperaturabhängigkeit der Transportkoeffizienten von Gasen durch einen Potenzansatz. En: *Chemie Ingenieur Technik* (1968), p. 7: 344–348

[23] Food and Agriculture organization for the United Nations: Wood gas as engine fuel. En: *FAO Forestry Paper* (1986)

[24] Patankar, S. V.: *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Taylor and Francis, 1980

[25] Cap. 1 En: Perales, J. F.: *Desulfuración de gas de síntesis a alta temperatura y presión por absorción en óxidos regenerables*. Universitat Politecnica de Catalunya, 2002

[26] Reid, R. ; Poling, B. ; Prausnitz, J. M.: *The Properties of Gases and Liquids*. Fourth Edition. McGraw-Hill, 1987

[27] del Río, R.: Gasificación de biomasa. En: *Universidade de Vigo* (2006)

[28] Rummer, B. ; Petek, J. ; Staudinger, G.: Trocknung und Pyrolyse eines Einzelpartikels - Modellrechnung und experimentelle Verifikation. En: *VDI Berichte* (1997)

[29] Schlünder, U. E. ; Tsotsas, E.: *Wärmeübertragung in Festbetten, durchmischten Schüttgütern und Wirbelschichten.* Georg Thieme-Verlag, Stuttgart, 1988

[30] de Souza-Santos, M. L.: Comprehensive modelling and simulation of fluidized bed boilers and gasifiers. En: *Fuel* 68 (1989)

[31] Tsonopoulos, C. ; Heidman, J. L. ; Hwang, S. C.: *Thermodynamic and transport properties of coal liquids.* John Wiley and Sons, 1986

[32] Tsotsas, E.: Wärmeleitung und Dispersion in durchströmten Schüttungen. En: *VDI-Wärmeatlas* (1991)

[33] Unidad de Planeacion Minero Energética UPME. *Energías renovables: Descripción, tecnologías y usos finales.* www.upme.gov.co, Revisado: Febrero de 2008

[34] Unidad de Planeación Minero Energética UPME: *Potencialidades de los cultivos energéticos y cultivos agrícolas en Colombia.* UPME, 2002

[35] VDI, Hrsg.: *VDI-Wärmeatlas, Berechnung für den Wärmeübergang.* Neunte Edition. Springer, 1997

[36] Vervuert, M.: *Zur modellmässigen Erfassung der Kammerverkokung als wärmetransportbestimmte Reaktion*, Der Technischen Universität Berlin, Tesis de Doctorado, 1985

[37] Vortmeyer, D. ; Haidegger, E.: Discrimination of three approaches to evaluate heat fluxes for wall-cooles fixed bed chemical reactors. En: *Chemical Engineering Science* (1991)

[38] Wen, C. Y. ; Fan, L. T.: Models for flow systems and chemical reactors. En: *Marcel Dekker* (1975)

[39] Wiest, W.: *Zur Pyrolyse von Biomasse im Drehrohreaktor*, Universität Gh Kassel, Tesis de Doctorado, 1998

[40] Wölki, M.: *Über die wahre Reaktionsgeschwindigkeit der Vergasung von Biomassepyrolysat mit Kohlendioxid und Wasserdampf*, Universität Kassel, Tesis de Doctorado, 2004

[41] Wutti, R. ; Petek, J. ; Staudinger, G.: Transport limitations in pyrolysing coal particles. En: *Fuel* 75 (1996)

[42] Yagi, S. ; Wakao, N.: Heat and Mass Transfer from Wall to Fluid in Packed Beds. En: *AIChE Journal* 5 (1959)

Declaración

Me permito afirmar que he realizado la presente tesis de manera autónoma y con la única ayuda de los medios permitidos y no diferentes a los mencionados en la propia tesis. Todos los pasajes que se han tomado de manera textual o figurativa de textos publicados y no publicados, los he reconocido en el presente trabajo. Ninguna parte del presente trabajo se ha empleado en ningún otro tipo de tesis.

Bogotá, D.C., 20.01.2011

(Harold Jhair García Patiño)