



UNIVERSIDAD  
DE PIURA

**FACULTAD DE INGENIERÍA**

**Modelo matemático de un gasificador de lecho fluidizado  
burbujeante**

Tesis para optar el Título de  
Ingeniero Mecánico - Eléctrico

**Iván Merino Ortega**

**Asesor(es):  
Dr. Ing. Mario Daniel Marcelo Aldana**

**Piura, junio de 2022**



## **Dedicatoria**

A Dios y a mi hermana Patty por hacer esto posible

A mis abuelos, Alfonso y Reyna por sus buenos consejos y cariño

A mis padres, Jorge por su querer y Nancy por su constante apoyo y amor

A Daniela por su cariño, amor y confianza

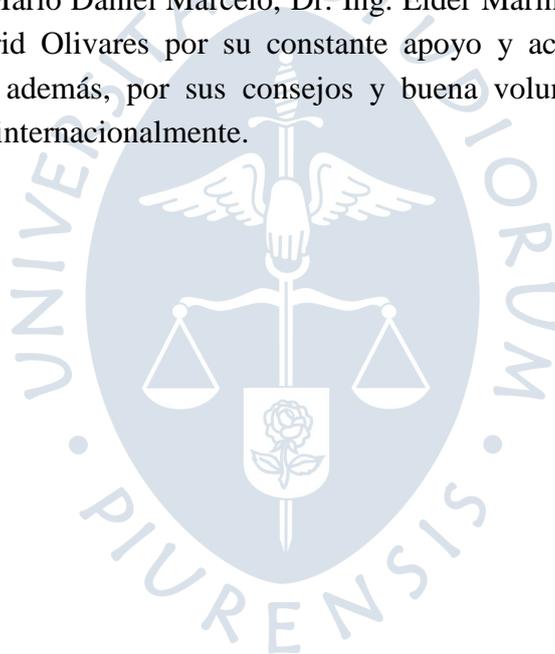
A toda mi familia y para aquellos presentes en mi corazón.





## **Agradecimientos**

Agradezco al Programa Nacional de desarrollo Científico, Tecnológico y de Innovación Tecnológica por financiar esta investigación bajo el contrato N°10-2019-FONDECYT-BM-INC.INV, en el proyecto “Estudio numérico-experimental para la generación de energía limpia con alta eficiencia utilizando residuos sólidos de biomasa y carbón mediante mediciones primarias de monitoreo térmico y diagnósticos de combustión”. Por último, al Dr. Ing. Mario Daniel Marcelo, Dr. Ing. Elder Marino Mendoza Orbegoso y al Dr. Ing. Raúl La Madrid Olivares por su constante apoyo y acompañamiento durante la realización de la tesis, además, por sus consejos y buena voluntad para lograr que este proyecto fuera revisado internacionalmente.





## Resumen

La innovación y mejora de procesos en el uso de energías renovables ha evolucionado, generando una reducción en las emisiones de dióxido de carbono y otros agentes contaminantes a la atmósfera. Un ejemplo son los biocombustibles que se producen a partir de residuos orgánicos o también llamada biomasa, que es toda aquella materia orgánica con la capacidad de ser aprovechada energéticamente mediante diferentes procesos. Tal como la gasificación, un proceso termoquímico donde la biomasa es calentada sin ser quemada, en un ambiente con un agente gasificante, que finalmente será transformada en un gas de síntesis.

Algunos parámetros de control e hidrodinámicos, tales como la velocidad de las reacciones químicas, velocidad del agente gasificante y temperatura del lecho, son muy importantes en un gasificador de lecho fluidizado burbujeante, pues determinan la calidad del *syngas*. Esta investigación se basó en el análisis y la revisión bibliográfica de modelos matemáticos de gasificadores de lecho fluidizado, con la finalidad de obtener un modelo matemático unidimensional, es decir, con respecto a la altura del reactor, basado en la teoría de las dos fases (llamadas fase emulsión y fase burbuja), para determinar la composición del *syngas* y su poder calorífico inferior (PCI) mediante ecuaciones empíricas, y conociendo la composición de la biomasa y geometría del reactor.

El modelo matemático de esta tesis fue validado con los datos experimentales encontrados en una fuente bibliográfica. Así mismo, el modelo matemático en código MATLAB permite obtener gráficas de la evolución de las fracciones molares a lo largo de la altura del reactor de los principales gases que componen al *syngas*. De esta manera, el modelo matemático de esta investigación presenta una precisión promedio del 71% con respecto a los valores experimentales de las fracciones molares del monóxido de carbono, hidrógeno y metano, debido a la incertidumbre que se tiene en el proceso de gasificación real. Por otro lado, se determinó teóricamente que el gasificador UDEP debe operar entre 750°C y 775°C con un *Equivalence Ratio* igual a 0.2 para alcanzar una mayor eficiencia energética entre 5.6 a 6.2 MJ/Nm<sup>3</sup>. Estos datos tienen la finalidad de mejorar y analizar dicho proceso para futuras implementaciones físicas de gasificadores en Piura y Perú.

Finalmente, los resultados de validación del modelo matemático se presentaron en un artículo científico, el cual fue aprobado en el 2021 *IEEE International Conference on Automation/XXIV Congress of the Chilean Association of Automatic Control*. Al momento, fue integrado en la base de datos de IEEE Explorer e indexado a SCOPUS con DOI: 10.1109/ICAACCA51523.2021.9465257. Así mismo, los resultados aplicados al análisis del

gasificador UDEP se presentaron en 16<sup>th</sup> SDEWES Conference DUBROVNIK 2021, realizado en Croacia octubre 10-15, 2021. Al momento, el artículo científico fue aceptado y presentado en la plataforma virtual de la conferencia.

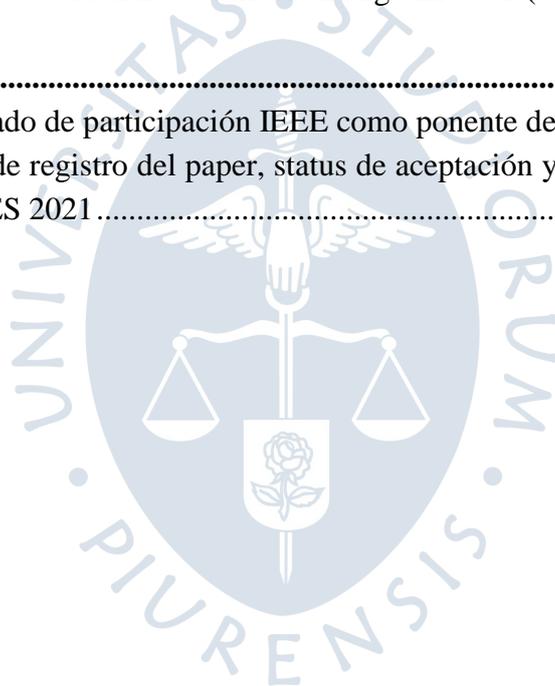


## Tabla de contenido

<b>Introducción.....</b>	<b>19</b>
<b>Capítulo 1 Biomasa y proceso de gasificación .....</b>	<b>21</b>
1.1 Biomasa .....	21
1.1.1 Tipos de biomasa .....	21
1.1.2 Ventajas y desventajas de la biomasa .....	26
1.1.3 Métodos de aprovechamiento energético de la biomasa.....	27
1.2 Biomasa de estudio: bagazo de caña de azúcar .....	31
1.2.1 Agroindustria de la caña de azúcar en Perú .....	31
1.2.2 Ciclo de vida de la caña de azúcar .....	33
1.2.3 Residuos del proceso de producción de etanol y azúcar.....	35
1.2.4 Caracterización del bagazo de caña de azúcar .....	35
1.3 Proceso de gasificación.....	36
1.3.1 Etapas del proceso de gasificación .....	36
1.4 Tipos de gasificadores .....	43
1.4.1 Gasificadores de lecho fijo.....	44
1.4.2 Gasificadores de lecho fluidizado.....	46
1.4.3 Comparativa de los tipos de gasificadores.....	50
1.5 Mecanismo de fluidización.....	50
1.5.1 Clasificación de Geldart.....	51
1.5.2 Velocidad de mínima fluidización .....	53
1.5.3 Regímenes de fluidización .....	58
1.5.4 Tipos de agente gasificante .....	59
<b>Capítulo 2 Modelación matemática .....</b>	<b>61</b>
2.1 Tipos de modelación matemática para gasificación .....	61
2.1.1 Black box models.....	61
2.1.2 Modelos basados en la Dinámica de fluidos computacional (CFD).....	61
2.1.3 Modelos de fluidización.....	63
2.1.4 Modelación de equilibrio estequiométrico.....	63
2.1.5 Modelación de equilibrio no estequiométrico.....	64
2.2 Selección del modelo matemático .....	65
2.2.1 Teoría de las dos fases .....	65

2.3	Hipótesis para el modelo matemático seleccionado .....	66
2.4	Descripción del modelado de la fase burbuja y fase emulsión .....	68
2.4.1	Modelo cinético de las reacciones químicas en ambas fases .....	68
2.4.2	Modelo hidrodinámico del lecho .....	77
2.4.3	Transferencia de masa entre fases.....	83
2.4.4	Ecuaciones de transformación de flujos molares .....	85
2.4.5	Flujo neto .....	87
2.4.6	Parámetros de influencia durante la fluidización para el modelo seleccionado .....	87
<b>Capítulo 3 Descripción del método de solución numérica.....</b>		<b>99</b>
3.1	Método numérico .....	99
3.1.1	Métodos de un solo paso .....	99
3.1.2	Métodos multipasos .....	101
3.1.3	Comparativa de métodos numéricos de solución para EDO en MATLAB .....	104
3.1.4	Criterios de convergencia y estabilidad del método numérico con respecto a las ecuaciones utilizadas del proceso de gasificación .....	108
3.2	Métodos numéricos para sistemas de ecuaciones .....	110
3.3	Algoritmo de cálculo del proceso de gasificación de lecho fluidizado burbujeante ...	110
3.3.1	Variables de entrada.....	113
3.3.2	Ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden para las ocho especies volátiles consideradas durante el proceso de gasificación .....	113
3.3.3	Condiciones iniciales para la validación del modelo matemático .....	116
3.3.4	Discretización del reactor.....	117
3.3.5	Funciones en código MATLAB.....	123
<b>Capítulo 4 Análisis de resultados.....</b>		<b>127</b>
4.1	Validación del modelo matemático .....	127
4.1.1	Preprocesamiento con xyExtract.....	127
4.1.2	Procesamiento para la extracción de puntos .....	128
4.1.3	Post procesamiento-resultados de extracción de puntos .....	129
4.1.4	Datos de entrada para la validación .....	130
4.1.5	Resultados de la validación.....	131
4.2	Análisis del gasificador UDEP .....	134
4.2.1	Ubicación del gasificador UDEP .....	135
4.2.2	Datos de entrada para la simulación numérica.....	135
4.2.3	Resultados y discusiones del gasificador UDEP .....	137
<b>Conclusiones .....</b>		<b>147</b>
<b>Recomendaciones .....</b>		<b>149</b>

<b>Referencias bibliográficas.....</b>	<b>151</b>
<b>Apéndices .....</b>	<b>159</b>
Apéndice A. Datos de entrada para iniciar el modelo matemático.....	161
Apéndice B. Datos de entrada para la validación .....	164
Apéndice C. Pesos moleculares de los compuestos gaseosos .....	166
Apéndice D. Cálculo de las propiedades del agente gasificante.....	167
Apéndice E. Hidrodinámica del lecho fluidizado burbujeante.....	168
Apéndice F. Desarrollo del proceso de devolatilización.....	171
Apéndice G. Cálculo de parámetros de la reacción inicial .....	172
Apéndice H. Función transferencia .....	176
Apéndice I. Prueba del modelo matemático para la validación .....	185
Apéndice J. Modelo matemático .....	194
Apéndice K. Resultados del balance de masa en el gasificador (Código validación) .....	197
<b>Anexos .....</b>	<b>199</b>
Anexo 1. Certificado de participación IEEE como ponente del paper #37 .....	201
Anexo 2. Correo de registro del paper, status de aceptación y presentación virtual SDEWES 2021 .....	202





## Lista de tablas

Tabla 1.	Grupos de biomasa y sus subclasificaciones .....	22
Tabla 2.	Listado de ventajas y desventajas del uso de biomasa como energía renovable .....	27
Tabla 3.	Proporciones típicas de los productos obtenidos por los diferentes modos de pirólisis de la madera.....	29
Tabla 4.	Producción anual de caña de azúcar según la región .....	32
Tabla 5.	Caracterización química del bagazo de caña de azúcar* .....	36
Tabla 6.	Principales tipos de gasificadores comerciales .....	43
Tabla 7.	Cuadro comparativo entre gasificadores de lecho fijo y lecho fluidizado .....	44
Tabla 8.	Comparativa de características de los tipos de gasificadores.....	51
Tabla 9.	Composición del syngas para diversos tipos de gasificadores usando madera.....	51
Tabla 10.	Constantes de Sutherland para diferentes gases .....	55
Tabla 11.	Resultados obtenidos para el $Remf = fAr$ .....	57
Tabla 12.	Resultados obtenidos para el $Remf = fAr, \epsilon mf, \phi s$ .....	58
Tabla 13.	Tipos de agentes gasificantes y características durante el proceso de gasificación.....	60
Tabla 14.	Velocidades de reacción para la oxidación del metano (R1) .....	70
Tabla 15.	Velocidades de reacción para la oxidación del monóxido de carbono (R2) .....	71
Tabla 16.	Velocidades de reacción para la oxidación del hidrógeno (R3).....	71
Tabla 17.	Velocidades de reacción Water Gas Shift conversion (R4) .....	72
Tabla 18.	Velocidades de reacción Steam Methane Reforming reaction (R5) .....	73
Tabla 19.	Velocidades de reacción Boudouard (R6).....	74
Tabla 20.	Velocidades de reacción Char Steam gasification (R7) .....	75
Tabla 21.	Velocidades de reacción química de metanización (R8).....	75
Tabla 22.	Coefficientes termodinámicos para temperaturas menores a 1000 K de diferentes especies volátiles .....	78
Tabla 23.	Coefficientes termodinámicos para temperaturas mayores a 1000 K de diferentes especies volátiles .....	78
Tabla 24.	Ecuaciones empíricas para calcular el diámetro de una burbuja.....	79
Tabla 25.	Comparación de las ecuaciones para determinar la velocidad de mínima fluidización para partículas irregulares .....	90
Tabla 26.	Balace de coeficientes molares y cantidad de agentes reactantes y productos .....	96

Tabla 27.	Comparativa de solvers en MATLAB para ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden .....	106
Tabla 28.	Cuadro resumen de las ecuaciones utilizadas en el modelo matemático .....	109
Tabla 29.	Datos de entrada para la validación del modelo matemático .....	130
Tabla 30.	Cuadro comparativo del error relativo en ambos modelos.....	134
Tabla 31.	Datos de entrada del experimento UDEP.....	136
Tabla 32.	Datos obtenidos a la salida del reactor para gasificación de bagazo de caña de azúcar.....	138
Tabla 33.	Características típicas del gas producido en gasificadores a presión atmosférica .....	139
Tabla 34.	Data teórica obtenida del modelo matemático para diferentes temperaturas del reactor UDEP.....	140
Tabla 35.	Data teórica obtenida del modelo matemático para diferentes valores de la ER.....	143



## Lista de figuras

Figura 1.	Clasificación de la biomasa de acuerdo con su origen .....	23
Figura 2.	Ciclo virtuoso: De la basura a la energía verde .....	25
Figura 3.	Alternativas para la recuperación y gestión de residuos urbanos.....	25
Figura 4.	Representación esquemática de la organización estructural de los diferentes biopolímeros de la pared celular de un material lignocelulósico .....	26
Figura 5.	Biomasa para generación de energía eléctrica y calor en ciclos combinados .....	28
Figura 6.	Porcentajes durante la cogeneración .....	28
Figura 7.	Esquema de las etapas del proceso de biodigestión de materia orgánica compleja .....	31
Figura 8.	Esquema del proceso de obtención de etanol a partir de caña de azúcar .....	34
Figura 9.	Etapas fenológicas del cultivo de caña de azúcar.....	34
Figura 10.	Vista esquemática del modelo de núcleo de contracción para pirólisis de carbón y biomasa.....	38
Figura 11.	Fracciones másicas de especies volátiles liberadas por el carbón.....	40
Figura 12.	Evolución del CO y CH <sub>4</sub> durante la devolatilización de la biomasa para diferentes temperaturas.....	41
Figura 13.	Gasificador de lecho fijo <i>Updraft</i> .....	45
Figura 14.	Gasificador de lecho fijo a) <i>Downdraft</i> y b) <i>Crossdraft</i> .....	46
Figura 15.	Diseño en 3D de un gasificador de lecho fluidizado burbujeante.....	47
Figura 16.	Gasificador UDEP de lecho fluidizado .....	48
Figura 17.	Esquema de un gasificador de lecho fluidizado circulante .....	49
Figura 18.	Gasificador de lecho arrastrado .....	50
Figura 19.	Clasificación Geldart de las partículas, para aire en condiciones ambientales .....	52
Figura 20.	Esquema de las propiedades de las partículas según la Clasificación Geldart.....	53
Figura 21.	Tipos de contacto de un sólido con un fluido al interior de un reactor .....	59
Figura 22.	Esquema de solución conceptual multi-box .....	62
Figura 23.	Zonas de contorno y mallado inicial para un lecho estático.....	62
Figura 24.	Esquema del estudio paramétrico del modelo trifásico.....	63
Figura 25.	Diagrama de flujo del modelo estequiométrico .....	65
Figura 26.	Clasificación de la modelación de lechos fluidizados.....	66
Figura 27.	Partícula esférica asumida para el modelo matemático.....	67
Figura 28.	Propagación de frentes de reacción durante la conversión de biomasa.....	67
Figura 29.	Esquema de la teoría de las dos fases .....	69

Figura 30. Crecimiento de las burbujas por coalescencia mediante un flujo de aire.....	80
Figura 31. Comparativa del diámetro teórico de una burbuja .....	81
Figura 32. Comparativa de la evolución de la velocidad de una burbuja libre.....	83
Figura 33. Esquema de ingreso y salida del flujo volumétrico entre fases en una burbuja.....	84
Figura 34. Relación entre la porosidad del lecho a mínima fluidización y la esfericidad en contraste con datos experimentales de las literaturas .....	90
Figura 35. Sistema de caída de presión con caja de viento y plato distribuidor de aire .....	92
Figura 36. Perfil axial de la fracción de volumen ocupado por los sólidos en un reactor de lecho fluidizado .....	94
Figura 37. Constantes para el cálculo de la pendiente mediante el método de RK4 .....	102
Figura 38. Funciones y representación del comando ODE en MATLAB.....	105
Figura 39. Diagrama de flujo del método predictor-corrector.....	107
Figura 40. Metodología para resolver el modelo matemático propuesto .....	111
Figura 41. Flujograma de entradas y salidas del modelo matemático desarrollado .....	112
Figura 42. Ajuste y medición de temperatura en un reactor de lecho fluidizado .....	118
Figura 43. (a) Reactor discretizado espacialmente en (b) volúmenes de control con variables de interconexión de los volúmenes de control contiguos .....	119
Figura 44. Esquema de un reactor de lecho fluidizado multietapa.....	120
Figura 45. (a) Esquema de la zona del distribuidor, zona de burbujas y freeboard de un gasificador de lecho fluidizado burbujeante descrito bajo (b) el esquema de flujo hidrodinámico trifásico .....	120
Figura 46. Esquema de un reactor de lecho fluidizado en régimen burbujeante discretizado en base a la Teoría de las dos fases.....	121
Figura 47. Detalle de los diferenciales de altura del reactor de lecho fluidizado en régimen burbujeante .....	122
Figura 48. Listado de funciones en código MATLAB .....	123
Figura 49. Workspace en xyExtract versión 5.1 .....	128
Figura 50. Captura en formato bmp de la evolución de las tres especies gaseosas .....	128
Figura 51. Parámetros para definir el sistema de extracción de puntos.....	129
Figura 52. Proyectos guardados con las coordenadas de las curvas a comparar .....	130
Figura 53. Evolución de la fracción molar del monóxido de carbono.....	132
Figura 54. Evolución de la fracción molar del hidrógeno .....	133
Figura 55. Evolución de la fracción molar del metano.....	133
Figura 56. Planta piloto para gasificación de biomasa en la Universidad de Piura .....	134
Figura 57. Ubicación en el plano de la planta piloto .....	135
Figura 58. Esquema geométrico del reactor preliminar (a) y con dimensiones finales (b) .....	137
Figura 59. Evolución del CO y H <sub>2</sub> producidos en el gasificador UDEP con bagazo de caña de azúcar .....	137
Figura 60. Evolución del CH <sub>4</sub> producido en el gasificador UDEP con bagazo de caña de azúcar.....	138

Figura 61. Evolución de la fracción molar de CO frente a la temperatura de operación del gasificador UDEP .....	141
Figura 62. Evolución de la fracción molar del CH <sub>4</sub> y el H <sub>2</sub> frente a la temperatura de operación del gasificador UDEP .....	141
Figura 63. Evolución del poder calorífico inferior frente a la temperatura de operación del gasificador UDEP .....	142
Figura 64. Evolución de la fracción molar del CO frente a la variación de la ER para el experimento UDEP.....	144
Figura 65. Evolución de la fracción molar del CH <sub>4</sub> y el H <sub>2</sub> frente a la variación de la ER para el experimento UDEP.....	144
Figura 66. Evolución del poder calorífico inferior frente a la variación de la ER para el experimento UDEP.....	145





## Introducción

La gasificación de biomasa es un proceso termoquímico que se produce con temperaturas inferiores a 1000°C y se ve influenciada por las condiciones de diseño, composición de la biomasa y parámetros de operación, por ejemplo, durante la conversión del carbono, la formación de alquitranes y la composición del gas de síntesis. Además, representa uno de los grandes retos durante los siguientes años para ser potencialmente comercializable, debido a las desventajas económicas de su acopio y distribución, así como a la complejidad para modelar el proceso, por ello, aunque la biomasa difiera del carbón en términos de composición, se han utilizado ciertas analogías del proceso de gasificación del carbón para tratar de comprender las reacciones de la biomasa.

En un gasificador de lecho fluidizado ocurren diferentes procesos y reacciones químicas como: pirólisis, oxidación, combustión, reducción, devolatilización y gasificación, además, tiene un comportamiento hidrodinámico muy complejo que ocurre dentro de un reactor de geometría variable, y su materia prima es la biomasa de segunda generación; aquella proveniente de residuos de la industria maderera, explotación forestal, desechos agrícolas y plantas herbáceas. Para lograr la gasificación, debe existir un material inerte, arena o alúmina precalentada por un quemador sobre una rejilla, posteriormente, la biomasa de alimentación debe ingresar al reactor con un tamaño de partícula pequeño sobre el material inerte, formándose un lecho. Posteriormente ingresa el agente gasificante, aire o vapor de aire, a una velocidad por encima de la velocidad de mínima fluidización, creando un ambiente en donde los sólidos suspendidos presentan el comportamiento de un fluido. Dentro de los gasificadores de lecho fluidizado existen dos tipos, el gasificador de lecho fluidizado circulante que tiene un ciclón para devolver la biomasa al proceso dentro del reactor y presenta una mayor velocidad de fluidización que el gasificador de lecho fluidizado burbujeante, en donde la velocidad de fluidización es menor y la mayor parte de los sólidos del lecho permanecen en el reactor.

Los intentos por mejorar los procesos que satisfacen una demanda con energías renovables (gasificación) ante un crecimiento exponencial de la población mundial van por buen camino, pues es posible pasar de una matriz energética tradicional basada en madera, carbón y combustibles fósiles a un suministro energético actual más diversificado. La tecnología de gasificación en países como Francia, Alemania, Suiza y Estados Unidos es altamente desarrollada y ampliamente utilizada como energía renovable para la generación de energía eléctrica y como combustible para ciertos automóviles. Dentro del Perú, las

investigaciones en el uso de biomasa son escasas, y la mayoría están financiadas por centros de desarrollo científico, por entidades privadas o por universidades, tal es el caso de la Universidad de Piura, que ha desarrollado algunos temas sobre el uso de diferentes tipos de biomasa en gasificadores como alternativa de energía renovable y limpia para uso particular o para poblaciones rurales donde no hay servicio eléctrico, siendo una gran oportunidad para el desarrollo del país.

Este trabajo de investigación tiene como objetivo realizar y aportar un estudio teórico del proceso de gasificación y de los parámetros de control que favorecen la calidad del gas de síntesis obtenido, además, de contrastar los modelos matemáticos propuestos para el comportamiento fluidodinámico en gasificadores de lecho fluidizado burbujeante para obtener un modelo matemático unidimensional con respecto a la altura del reactor, dicho modelo fue implementado en código MATLAB.

En el primer capítulo, se presentan los conceptos que definen a la biomasa como su clasificación, ventajas y desventajas, además, se explican los conceptos teóricos y algunas formulaciones matemáticas del proceso de gasificación. A continuación, se expone en el segundo capítulo, los tipos de modelación para gasificación, así como la formulación y explicación de los parámetros del modelo matemático utilizado con sus hipótesis. El tercer capítulo explica el método de solución numérica y el algoritmo de cálculo para determinar la composición del gas de síntesis. Los resultados y validación del modelo matemático de un gasificador de lecho fluidizado burbujeante se encuentran en el cuarto capítulo, así como el análisis del gasificador UDEP frente a la variación de sus dos principales parámetros de control.

## **Capítulo 1**

### **Biomasa y proceso de gasificación**

#### **1.1 Biomasa**

El potencial energético de la biomasa ha sido utilizado por el hombre desde principios de la prehistoria, mediante combustión directa con el descubrimiento del fuego para la cocción de alimentos y realizar otras actividades, hasta los días de la revolución industrial donde se empezó a desarrollar diferentes procesos para obtener fuentes de energía de mayor potencial calorífico utilizando los combustibles fósiles, donde la biomasa cobraría menor interés, pero no dejaría de ser tema de estudio.

Actualmente la biomasa se define como toda aquella materia formada por una parte orgánica, inorgánica y agua cuya fuente es renovable, y que tiene la capacidad de ser aprovechada energéticamente a través de diferentes procesos.

##### **1.1.1 Tipos de biomasa**

Existen diversas clasificaciones para la biomasa, por ejemplo, según la composición, según su estado o por su humedad. Según Basu (2010) existen dos grandes tipos de biomasa de acuerdo con la forma de origen: (i) la biomasa virgen y (ii) los desechos. Tal como se observa en la Tabla 1, la primera clasificación incluye la materia vegetal lignocelulósica, cultivos, algas y hortalizas, es decir, toda aquella biomasa que se produce de forma espontánea en la naturaleza o por la agricultura. En la segunda clasificación se encuentran los residuos que son generados por la actividad humana, entre ellos tenemos los de origen: municipal, animal e industrial, todos ellos con capacidad energética. También se clasifica la biomasa según la composición física o química, y para ello es necesario realizar un análisis elemental de compuestos como el carbono, hidrógeno, nitrógeno y azufre. Como se mencionó anteriormente, la biomasa contiene una parte de agua que puede ser medida en base seca o en base húmeda, además, está formada por una carga orgánica e inorgánica, la primera produce una conversión biológica y la segunda influye en el proceso de combustión y es responsable de la formación de las cenizas.

Al no existir una clasificación única, se optó por elaborar un esquema que engloba la mayor parte de criterios que toman los autores. Según la Figura 1, la biomasa se clasifica en tres grandes grupos de acuerdo con su origen primario: animal, vegetal y municipal, y a partir de ello, se subdividen en otras clasificaciones o categorías que serán explicados en los apartados 1.1.1.1, 1.1.1.2 y 1.1.1.3, además, en la última columna de la Figura 1 se nombran

los principales procesos o tratamientos que recibe la materia prima o biomasa para ser aprovechada energéticamente.

Tabla 1. Grupos de biomasa y sus subclasificaciones

<b>Biomasa virgen</b>	Biomasa terrestre	Pastos Cultivos Madera
	Biomasa acuática	Algas Plantas acuáticas
<b>Residuos</b>	Desechos municipales	Residuos sólidos urbanos Biosólidos Aguas residuales
	Desechos sólidos de la agricultura	Abono Residuos de la agricultura
	Residuos forestales	Cortezas Hojas
	Residuos industriales	Aserrín Residuos de grasas o aceites

Fuente: Obtenida de Basu (2010)

**1.1.1.1 Biomasa de origen animal.** Este tipo de biomasa es producida después que los animales de tipo vacuno o porcino han transformado la energía de diversos alimentos, por ejemplo, herbáceos, lignocelulósicos, cereales, mediante la digestión. El producto final con carácter energético son las excretas, esta biomasa es clasificada por Basu (2010) y De Lucas Herguedas et al (2012) como un residuo, sin embargo, una clasificación más adecuada es de acuerdo con su origen primario, ya que esta materia prima es un subproducto con valor económico y puede ser utilizada con fines energéticos y como fertilizante para los cultivos de la agricultura alimentaria.

La carga orgánica presente en las excretas del ganado es alta y para un correcto aprovechamiento energético es necesario un proceso de digestión anaeróbica, con ello se evita la contaminación ambiental y problemas de salud que conlleva el inadecuado tratamiento de esta biomasa. Durante la digestión, los microorganismos transforman la materia orgánica en ausencia de oxígeno en un biogás de alto contenido en metano, con un poder calorífico inferior estimado en  $23 \text{ MJ}/\text{m}^3$ , siendo útil en motores de combustión interna, en accionar turbinas de generación eléctrica o también para uso doméstico.

**1.1.1.2 Biomasa de origen municipal.** Dentro de esta clasificación se encuentra aquella biomasa generada directamente por actividades humanas biológicas y cotidianas.

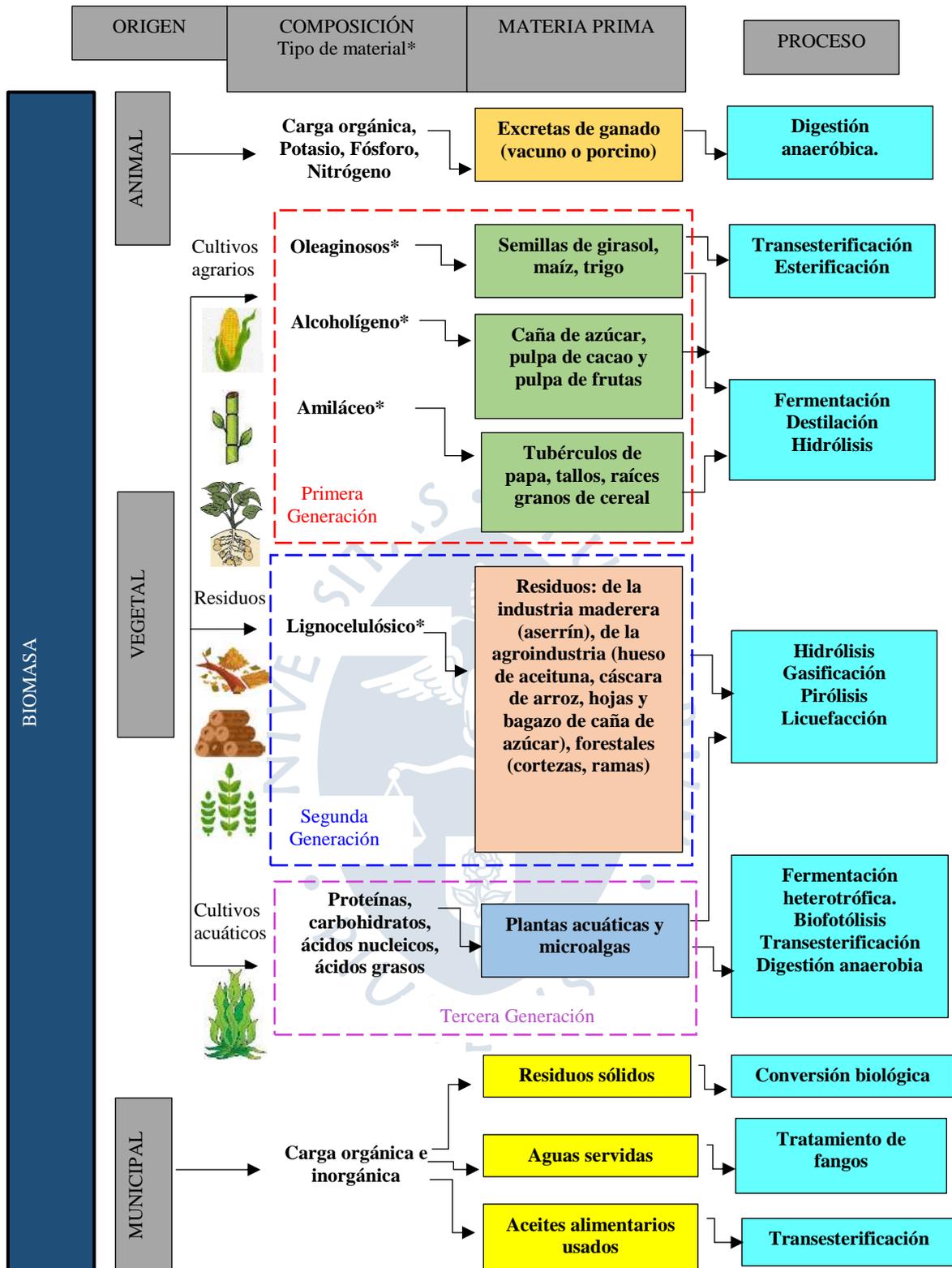


Figura 1. Clasificación de la biomasa de acuerdo con su origen  
Fuente: Basado en De Lucas Herguedas et al, (2012)

Como producto dentro de la primera actividad se encuentran las aguas servidas, por otro lado, las actividades cotidianas incluyen la generación de residuos sólidos<sup>1</sup> o comúnmente llamada basura y los aceites alimentarios residuales utilizados a gran escala en la industria de alimentos procesados.

El aprovechamiento energético de los residuos sólidos se puede dar de dos formas: mediante la separación de materiales aprovechables (orgánicos) y mediante rellenos sanitarios, cada uno de ellos utiliza diferentes procesos de conversión de la biomasa. La recuperación o separación de los residuos sólidos con fines energéticos crece lentamente, esta forma de aprovechamiento de la carga orgánica utiliza tecnologías como la gasificación, hidrólisis e incineración, pero presenta un inconveniente debido a una minuciosa separación de los residuos, ya que muchas veces es de forma manual. Por otro lado, existe el proceso de conversión biológica, esto se da en un relleno sanitario; que se diferencia de un botadero abierto, pues este último genera gases de efecto invernadero directamente a la atmósfera porque los residuos son dejados dentro de una fosa, mientras que el relleno sanitario es un espacio diseñado a cierta profundidad, con un fondo y lados revestidos, donde se deposita la basura de forma ordenada, es compactada y sellada con una capa de tierra, además, posee gasoductos para captar el biogás rico en metano y dióxido de carbono producido por la conversión biológica de la materia orgánica cada día.

En Perú existen pequeñas y medianas industrias que aprovechan la biomasa de manera independiente, dentro de este contexto, Petramás es una empresa peruana que desde hace más de 25 años se dedica a la gestión integral de residuos sólidos a gran escala, para la producción de energía eléctrica a partir de la biomasa o residuos sólidos de la población limeña con su propia central térmica de biomasa, generando un impacto positivo con respecto a los compromisos internacionales adquiridos por el Perú en la lucha mundial por el cambio climático. En la Figura 2 se muestra el ciclo de generación de energía mediante el aprovechamiento de los residuos sólidos en la planta Huaycoloro de Petramás, iniciando con la generación y distribución de la materia prima, seguidamente es depositada en el relleno sanitario por capas y cubiertos de tierra, luego mediante un sistema de succión el gas metano es captado para ser procesado y enviado a la central térmica para generar electricidad.

Existen diversos métodos para la gestión de los residuos urbanos, algunas de estas alternativas se muestran en la Figura 3. El primer grupo es llamado Reducción de residuos, donde se busca generar un sistema de reciclaje y tratamiento de los materiales orgánicos mediante el compostaje dentro del hogar. Aquellos materiales que no sean posibles de clasificar o reciclar conforman el segundo grupo llamado Recuperación de Energía de los desechos (RER), que deben ser tratados en un relleno sanitario mediante gasificación, incineración o combustión (Moratorio, Rocco, & Castelli, 2012)

---

<sup>1</sup> En su mayoría, son un conjunto de desechos orgánicos e inorgánicos domiciliarios generados a partir de las actividades de consumo del ser humano.



Figura 2. Ciclo virtuoso: De la basura a la energía verde

Fuente: Petramás (2021) <https://www.petramas.com/nosotros.html#>. 4/feb/2021



Figura 3. Alternativas para la recuperación y gestión de residuos urbanos

Fuente: Obtenida de Moratorio, Rocco & Castelli, (2012)

**1.1.1.3 Biomasa de origen vegetal.** Es el tipo de biomasa más antigua utilizada por el hombre. La biomasa de origen vegetal tiene como principales fuentes de generación a los residuos lignocelulósicos (biomasa forestal primaria), residuos agrícolas y a los subproductos generados por las industrias de transformación de la madera (De Lucas Herguedas *et al*, 2012).

- **Residuos lignocelulósicos**

Los residuos lignocelulósicos conforman la mayor parte de la biomasa existente en el planeta y poseen un alto interés económico por su contenido energético. La lignocelulosa

representa la parte fibrosa de las plantas (herbáceas o leñosas), y está compuesta por la celulosa, hemicelulosa y lignina (Ruiz Bermejo, 2013). En la Figura 4 se observa un esquema para representar la estructura celular de los residuos lignocelulósicos, donde la lignina es un polímero orgánico complejo y amorfo que funciona como un relleno para dar rigidez y soporte al tallo, por otro lado, las hemicelulosas son microfibras de estructuras amorfas que conforman la pared celular de las plantas, de forma similar la celulosa está formada por microfibras fuertemente empaquetadas y ordenadas (Prinsen, 2010). Dentro de los principales residuos lignocelulósicos en la naturaleza tenemos a las ramas secas, tallos secos y plantas.

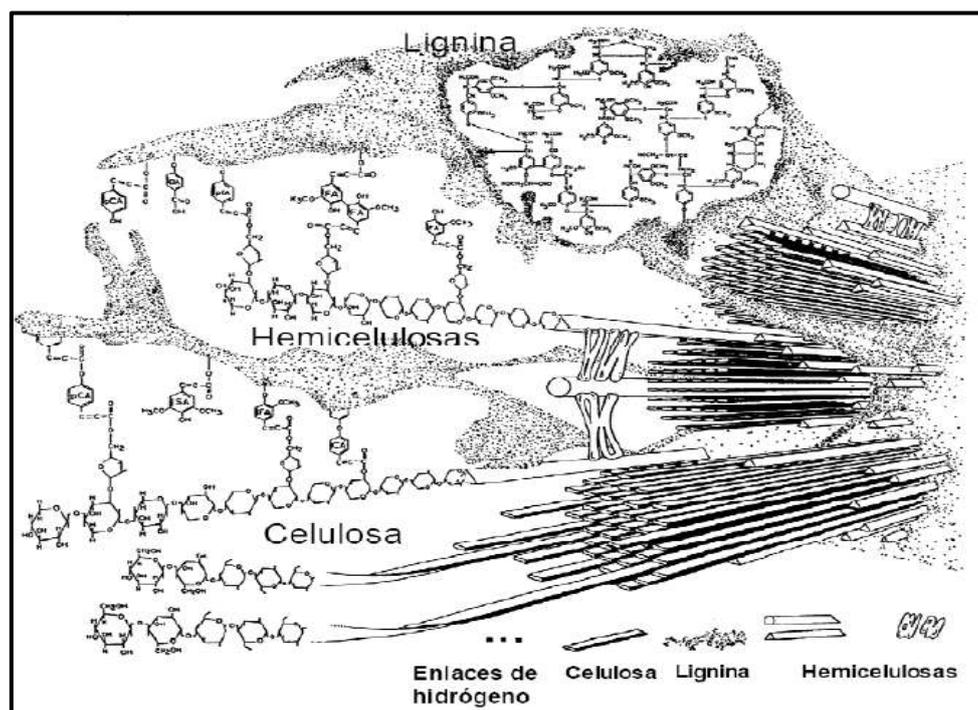


Figura 4. Representación esquemática de la organización estructural de los diferentes biopolímeros de la pared celular de un material lignocelulósico

Fuente: Obtenida de Prinsen, (2010)

- **Residuos agrícolas**

Dentro de la industria agrícola se generan residuos con cierta capacidad energética tales como tallos de caña, tallos de maíz, hojas de caña de azúcar, semillas, cáscaras.

- **Subproductos de la industria maderera**

La industria maderera genera subproductos como astillas, virutas o aserrín que necesitan de ciertos procesos como el de compresión o prensado para generar los pellets. El producto final es de mayor densidad y presenta un mejor poder calorífico inferior.

### 1.1.2 *Ventajas y desventajas de la biomasa*

El uso de biomasa de origen orgánico como materia prima representa una gran ventaja a nivel medioambiental, pues se utilizarían los principales residuos de diferentes actividades, además, permitiría la reducción de agentes contaminantes a la atmósfera. En contraparte, los inconvenientes de esta materia prima se centran en los costos de transporte y almacenamiento,

así mismo, en el bajo potencial energético en comparación con los combustibles fósiles. Sin embargo, estas desventajas podrían ser superadas fácilmente mediante mejoras de tecnología para el procesamiento de la biomasa, por ejemplo, para evitar grandes volúmenes se debería estudiar el proceso de compresión o palletizado en diferentes tipos de biomasa, para que la materia prima sea de mayor densidad y menor volumen. En la Tabla 2 se listan las principales desventajas y ventajas que representa el uso de la biomasa para la generación de energía.

Con respecto a las ventajas durante el proceso de gasificación, la biomasa presenta diferencias con respecto al carbón. Según Kaushal, Abedi y Mahinpey (2010) la biomasa presenta una pirólisis mucho más rápida, la liberación de especies volátiles es mayor, posee menor densidad energética y produce menor cantidad de cenizas y sulfuros. Johari *et al* (2014) señalan que la relación entre materia volátil y carbono fijo para la biomasa es mayor a 4, en comparación con el carbón que es menor a 1.

Tabla 2. Listado de ventajas y desventajas del uso de biomasa como energía renovable

Ventajas	Desventajas
- Fuente renovable.	- El almacenamiento requiere de grandes áreas.
- Menores emisiones de óxidos de azufre y nitrógeno.	- El transporte de grandes volúmenes de biomasa suele ser costoso.
- Utiliza el dióxido de carbono como fuente para almacenar energía mediante la fotosíntesis (ciclo neutro del $CO_2$ ).	- Se obtiene un gas de síntesis de bajo poder calorífico.
- Aprovechamiento de residuos agrícolas.	- La modelación para predecir su comportamiento es compleja.
- Oportunidades de mejora tecnológica en energía renovable.	- La biomasa posee una baja densidad energética.
- Desarrollo de las poblaciones rurales para acceder a servicios de electricidad y consumo de biogás.	- El proceso de filtrado y limpieza del gas de síntesis suele ser costoso en comparación a los combustibles fósiles.
- Independencia energética del exterior.	

Al analizar el sistema de utilización de la biomasa para la generación de energía, este combustible presenta una ventaja con respecto al costo y rentabilidad de la materia prima para la generación de dicha energía. En la Figura 5 se muestra una planta de cogeneración para producir energía eléctrica y energía térmica en forma de vapor, a partir de la biomasa como único medio combustible, sin embargo, esta aplicación presenta la desventaja de tener una capacidad de generación limitada (Mahmood AL-Farraji, 2017).

El sistema de cogeneración a partir de biomasa presenta ciertos porcentajes de generación para cada tipo de energía. La Figura 6 muestra que el 50% del potencial energético de la materia prima puede convertirse en energía térmica (en forma de vapor), además, un 30% del total se aprovecha para la generación de energía eléctrica, finalmente un 20% se pierde al ambiente debido a los mecanismos del proceso.

### 1.1.3 Métodos de aprovechamiento energético de la biomasa

Los procesos que se deben realizar para la conversión de la biomasa en energía aprovechable dependen de ciertos factores, por ejemplo, del tipo de biomasa utilizada, de la calidad energética del gas de síntesis, de las condiciones económicas, del tipo de combustible que se quiera obtener, entre otros.

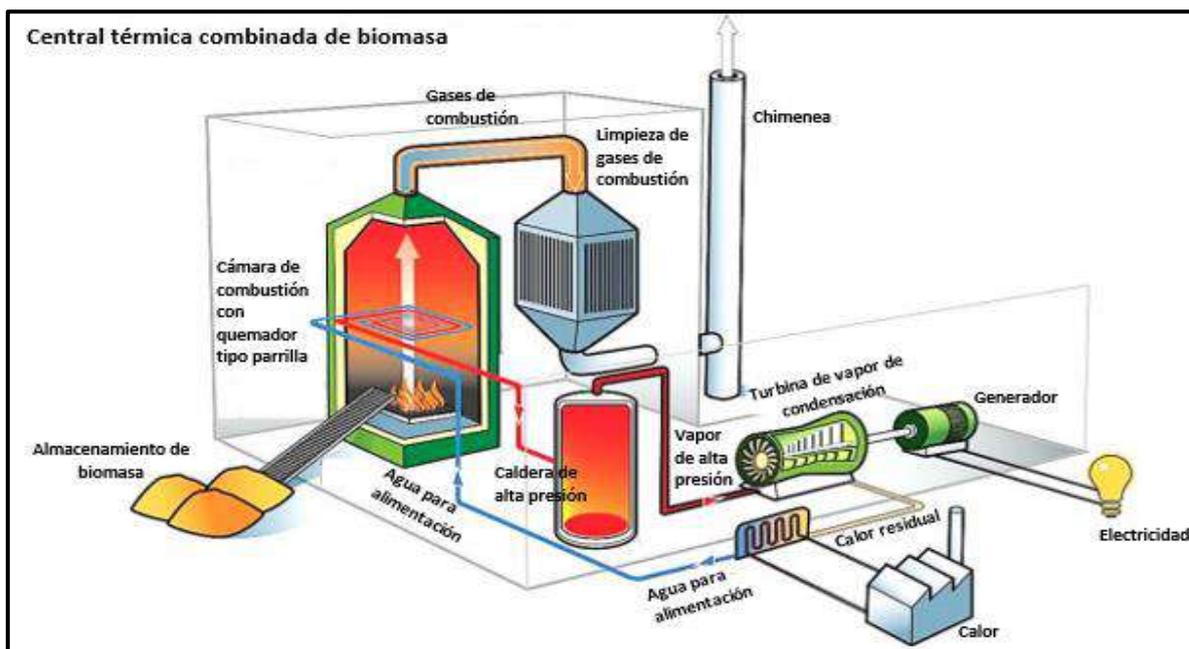


Figura 5. Biomasa para generación de energía eléctrica y calor en ciclos combinados

Fuente: Obtenida de Mahmood AL-Farraj, (2017)

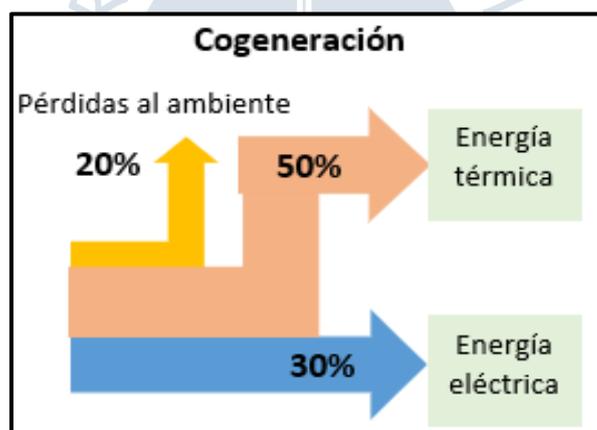


Figura 6. Porcentajes durante la cogeneración

Fuente: Obtenida de Moratorio, Rocco & Castelli, (2012)

En el apartado 1.1.1 se mencionaron de manera general algunos de los procesos que se utilizan para aprovechar esta materia prima (ver Figura 1). Estos procesos se pueden clasificar en dos grandes grupos: (i) aquellos que utilizan un sistema de conversión termoquímico o (ii) un sistema de conversión bioquímico/biológico.

El primer grupo está conformado por cuatro procesos mayormente conocidos: combustión directa, pirólisis, gasificación y licuefacción (todos presentan reacciones químicas irreversibles). Por otro lado, dentro de los sistemas biológicos están: el proceso de digestión anaeróbica para la producción de biogás, y el proceso de fermentación.

A continuación, se describen brevemente las características y conceptos de diversos procesos de conversión de la biomasa encontrados en bibliografías y que son comercialmente

utilizados en las industrias, así mismo, se toman en cuenta los procesos mencionados en el párrafo anterior.

### 1.1.3.1 Procesos termoquímicos

- **Pirólisis**

La pirólisis es un proceso de degradación térmica de la materia prima, que ocurre en un ambiente en ausencia de oxígeno a una temperatura controlada y cercana a 500°C. Como producto de esta degradación, se obtiene una separación de las fracciones sólidas (coque), líquidas (bio-aceite) y gaseosas (gas combustible). En la Tabla 3 se listan los tipos de pirólisis, donde cada una de ellas tiene diferentes condiciones de operación que favorecen o no en el contenido porcentual de los tres productos mencionados anteriormente (Klug, 2012).

Tabla 3. Proporciones típicas de los productos obtenidos por los diferentes modos de pirólisis de la madera

Modo	Condiciones	Líquido	Carbón	Gas <sup>2</sup>
Gasificación	800°C	5%	20%	85%
Flash/rápida	500°C, corto tiempo de residencia del vapor caliente (1 s)	75%	12%	13%
Intermedio	500°C, tiempo de residencia del vapor caliente entre 10-30 s	50%	25%	25%
Carbonización	400°C, largo tiempo de residencia del vapor caliente (horas-días)	30%	35%	35%
Torrefacción	290°C, tiempo de residencia de los sólidos (30 min)	-	82%	18%

Fuente: Obtenida de Klug, (2012)

- **Combustión directa**

Este mecanismo ocurre en presencia de oxígeno, mediante la quema de la biomasa, donde se libera la energía presente en esta debido a la oxidación del hidrógeno y el carbón del combustible, y así la energía química se convierte en calor, además, es un método ampliamente utilizado para generar vapor o gases calientes (entre 800°C y 1000°C) y ser utilizado en intercambiadores de calor.

- **Gasificación**

La gasificación consiste en someter a la biomasa del tipo orgánico a una combustión parcial a elevadas temperaturas (800°C a 900°C), para obtener un producto gaseoso con altos niveles de monóxido de carbono e hidrógeno, que puede ser quemado en turbinas de gas y

<sup>2</sup> La composición del gas puede variar dependiendo de las condiciones del proceso y de operación. Los contenidos porcentuales de los principales componentes del gas son:  $N_2$  (60%),  $CO_2$  (60%),  $H_2$  (5%),  $CO$  (35%) e hidrocarburos hasta un 10%.

motores de combustión interna. Este proceso termoquímico será visto a profundidad en el apartado 1.3, donde se describe todo el proceso y algunas formulaciones matemáticas.

- **Licuefacción**

Es un proceso de conversión muy complejo y costoso. Tiene lugar en un reactor a bajas temperaturas (entre 250°C y 450°C) y altas presiones (27 MPa), y se basa en la hidrogenación indirecta. Durante el proceso, las moléculas de celulosa y lignina son fragmentadas por efecto del calentamiento, se remueve el oxígeno y al mismo tiempo se adicionan átomos de hidrógeno, originando una reacción química. El producto final es una mezcla de hidrocarburos que al enfriarse se condensa en fase líquida. Una característica de este proceso es que el contenido de humedad presente en la biomasa no es un parámetro de interés como en los anteriores procesos (Afanasjeva, Castillo, & Sinisterra, 2017).

### 1.1.3.2 Procesos biológicos/bioquímicos

- **Fermentación**

Se conoce también como fermentación alcohólica y sirve para producir etanol a partir de la fermentación de los azúcares de la materia prima triturada rica en carbohidratos (frutas, vegetales, cereales y tubérculos).

- **Digestión anaeróbica**

Es un proceso bioquímico que ocurre en un ambiente sin oxígeno, debido la reducción o descomposición de componentes orgánicos de estructuras complejas (sustratos) a unos más simples, a esto se le conoce como catabolismo (Fernandez, 2020). Las reacciones bioquímicas tienen lugar en un biorreactor donde se obtienen tres compuestos: metano, debido a la reducción del carbono, dióxido de carbono, debido a la oxidación del carbono (Valladares, 2017) y un componente sólido que sirve para ser utilizado como abono, llamado digestato (biofertilizante). El proceso de digestión anaeróbica se divide en cuatro etapas que ocurren de manera secuencial: hidrólisis, acidogénesis (fermentación), acetogénesis y metanogénesis, esto se describe en la Figura 7, donde los números que aparecen representan el orden de aparición de los subprocesos debido a las colonias de bacterias presentes, sin embargo, estos subprocesos ocurren de manera simultánea en la realidad, por ello, el carácter secuencial no debe ser interpretado estrictamente (Merino, 2019).

### 1.1.3.3 Procesos químicos

- **Transesterificación**

La transesterificación es un proceso sencillo, donde un éster de los aceites orgánicos extraídos previamente de la biomasa se combina con alcohol y la mezcla se altera químicamente para obtener un éster etílico, que comercialmente recibe el nombre de biodiesel. Las reacciones tienen lugar en un reactor a presión atmosférica, a una temperatura controlada de 60°C y con un sistema de agitación constante durante todo el proceso, donde se agrega un 20% de agente esterificante y un 0.8% de hidróxido de sodio.



Figura 7. Esquema de las etapas del proceso de biodigestión de materia orgánica compleja

Fuente: Obtenida de Merino, (2019)

- **Esterificación**

Ocurre mediante la reacción química de equilibrio de un ácido carboxílico y un alcohol para producir un éster, mediante la eliminación de una molécula de agua. La esterificación mediante catálisis ácida y alcalina presenta mejores resultados cuando la materia prima son aceites alimentarios residuales en comparación con el proceso de transesterificación, pues no se necesitan elevadas temperaturas para las reacciones y largos tiempos de residencia, todo ello para producir biodiesel de calidad media, puesto que se necesita una purificación para ser comercializado (Medina, Ospino, & Tejada, 2014).

## 1.2 Biomasa de estudio: bagazo de caña de azúcar

### 1.2.1 Agroindustria de la caña de azúcar en Perú

Perú es un país con alta biodiversidad y posee microclimas óptimos para el crecimiento de diversos tipos de cultivos. Entre ellos se encuentra la caña de azúcar, que es la especie dentro del género *Saccharum*, que presenta un tallo grueso y fibroso, además, puede alcanzar una altura de 6 m en su etapa de cosecha. Por otro lado, es importante considerar que los cultivos presenten los mayores rendimientos o contenidos de sacarosa (el porcentaje cambia según la variedad), para ello se debe evitar la floración de la caña de azúcar.

Durante el primer trimestre del 2019 a nivel nacional, Perú alcanzó un nivel de volumen producido de 4.8 millones de toneladas de caña de azúcar, siendo Lambayeque el departamento con mayor producción anual (Ministerio de Agricultura y Riego, 2019). Los

valores de producción y superficie cosechada de los 5 principales departamentos productores de caña de azúcar durante los últimos cinco años se muestran en la Tabla 4, donde se observa que la cantidad de producción tiene un comportamiento dinámico, entre bajas y altas, debido a diversos temas ambientales y climáticos como el Fenómeno del Niño.

Tabla 4. Producción anual de caña de azúcar según la región

Región	2015	2016	2017	2018	2019 (ene-jun)
<b>Producción (t)</b>					
Nacional	10 211 856	9 791 699	9 399 617	10 336 178	4 755 850
Lambayeque	2 022 870	2 241 978	2 489 374	2 648 009	1 153 900
La Libertad	5 529 691	5 047 662	4 473 133	4 795 513	2 365 986
Ancash	988 272	1 001 408	904 749	870 729	410 731
Lima	1 614 043	1 459 303	1 480 137	1 528 325	688 031
Arequipa	56 980	41 348	52 224	55 859	30 950
<b>Superficie cosechada (ha)</b>					
Nacional	84 574	87 696	77 525	84 838	37 659
Lambayeque	23 430	25 874	24 065	27 600	10 904
La Libertad	40 928	41 776	34 078	35 055	17 267
Ancash	6 594	7 267	7 321	6 874	3 106
Lima	12 992	12 279	11 492	11 707	5 407
Arequipa	630	501	568	545	309

Fuente: Obtenida del Ministerio de Agricultura y Riego, (2019)

**1.2.1.1 Producción de etanol en Perú.** El etanol es conocido también con el nombre de bioetanol, así mismo puede ser llamado alcohol etílico rectificado, que es el producto final a partir de la fermentación de los azúcares. Este combustible presenta ciertas características, como un elevado índice de octanaje (105), su toxicidad es baja, no emite compuestos que contienen azufre, entre otros (Barrientos, 2014). En la zona norte del Perú se encuentra Caña Brava, que pertenece a tres empresas del Grupo Romero, dedicada exclusivamente a la producción de etanol y a la generación eléctrica a partir del bagazo de caña de azúcar. Esta empresa posee 9400 ha de caña cultivadas en una zona árida e irrigadas por un sistema de goteo, y su capacidad de generación es de 370 mil litros de etanol por día con un consumo de 4300 toneladas de caña de azúcar.

El método de producción de etanol mediante la fermentación de la caña de azúcar permite una reducción significativa de la cantidad de dióxido de carbono generado en el ciclo de producción industrial con respecto a los combustibles fósiles. Esto quiere decir, que por cada galón de etanol usado en un automóvil se emiten en promedio 6 kg de  $CO_2$ , y que, gracias al proceso de fotosíntesis durante el periodo de vida de la caña de azúcar, según Caña Brava (s.f.), éstas absorben 26 kg de  $CO_2$  del aire por cada galón de etanol producido, con ello se puede entender que el proceso contrarresta las emisiones contaminantes de manera positiva, a esto se le llama el ciclo de energía renovable del carbono.

El proceso de fermentación de caña de azúcar tiene ciertas etapas que se describen en la Figura 8 de forma esquemática. El primer paso es la recolección y distribución de la materia prima, acto seguido, la caña de azúcar es lavada y transportada para su molienda en un trapiche para obtener el jugo de caña rico en sacarosa. Luego se realiza el proceso de clarificación, con el objetivo de tener un pH adecuado mediante la adición de óxido de calcio y una pequeña porción de ácido sulfúrico (Montoya, Quintero, Sánchez, & Cardona, 2005), además, se remueven las impurezas precipitadas mediante un filtro rotativo vacío donde se genera la cachaza (conjunto de sólidos removidos húmedos). A continuación, el proceso de dilución tiene lugar, aquí se adiciona agua caliente a la mezcla para controlar los niveles de azúcar y alcohol. La fase siguiente es la conversión, proceso que se encarga de convertir la celulosa o almidón en azúcares, así mismo, el jugo de caña se concentra en los evaporadores para quitar el excedente de agua de la mezcla, que será enviada al proceso de fermentación. La fermentación es un proceso anaeróbico que se produce por el metabolismo de la levadura llamada *Saccharomyces cerevisiae*, dicha levadura es añadida al proceso para la producción de alcohol a partir de la glucosa y fructuosa del jugo de caña, y es recirculada mediante centrifugación hacia el tanque de fermentación contiguo (Estremadoyro, 2015).

Finalmente, los gases generados en la fermentación pasan por un proceso de destilación, esto se realiza con la finalidad de concentrar el etanol, mediante dos columnas o torres, la primera es llamada torre de absorción y se encarga de retirar el  $CO_2$  disuelto y el mayor porcentaje de  $H_2O$ , mientras que la segunda columna concentra el etanol rectificado de entre  $95^\circ$  o  $96^\circ$  de pureza. Para que el etanol pueda ser comercializado es necesario que pase por el proceso de deshidratación, donde se retira los pequeños porcentajes de agua para obtener una pureza de  $99.7^\circ$  (Uyazán, Gil, Aguilar, Rodríguez, & Caicedo, 2004).

### 1.2.2 Ciclo de vida de la caña de azúcar

La caña de azúcar es un cultivo semi perenne<sup>3</sup> de alto rendimiento, su periodo de crecimiento (en general de 12 a 18 meses) depende de la variedad y de la zona en donde se cultiva la caña de azúcar. Además, factores como la temperatura, la humedad del suelo, y la luminosidad solar controlan el desarrollo de la planta. Independientemente de los factores mencionados anteriormente, el ciclo de crecimiento de la caña de azúcar es el mismo, y esto se muestra en la Figura 9. Las etapas son las siguientes (Aguilar, 2015): la primera del ciclo es llamada establecimiento, e implica la germinación, donde aparecen los primeros brotes de caña, y la emergencia, que es el desarrollo inicial de la planta donde visualmente se aprecian hojas de 10 cm aproximadamente, todo ello en un periodo entre 30-40 días (ver Figura 9a), la segunda etapa está conformada por el crecimiento, donde se necesita de una buena humedad y fertilizante para nutrir el suelo (esto favorece el crecimiento y maduración del tallo), así mismo, el amacollamiento o ahijamiento tiene lugar, que es el proceso fisiológico de ramificación subterránea, además, aparecen cierta cantidad de hojas que le dan robustez a la

---

<sup>3</sup> Después de cada cosecha, surgen nuevas plantaciones con el mismo sistema de raíces iniciales. Sin embargo, el rendimiento de este sistema de brote disminuye con el tiempo, por ello después de 5 años las raíces se eliminan por completo.

planta entre los días 50 o 70 (ver Figura 9b). La tercera etapa es llamada crecimiento rápido, y por su mismo nombre se sobreentiende que el tallo de la planta de caña crece hasta su altura final, además, esta etapa se caracteriza porque la planta alcanza su máxima foliación o producción de hojas, así como por el aumento de número de tallos con un alto contenido de sacarosa (ver Figura 9c). La última etapa es la maduración, donde se debe controlar el contenido de humedad, pues debe ser bajo, y ocurre en un periodo de dos a tres meses antes de la cosecha<sup>4</sup>, donde la planta de caña de azúcar deja de desarrollarse y sus hojas empiezan a marchitarse (ver Figura 9d).

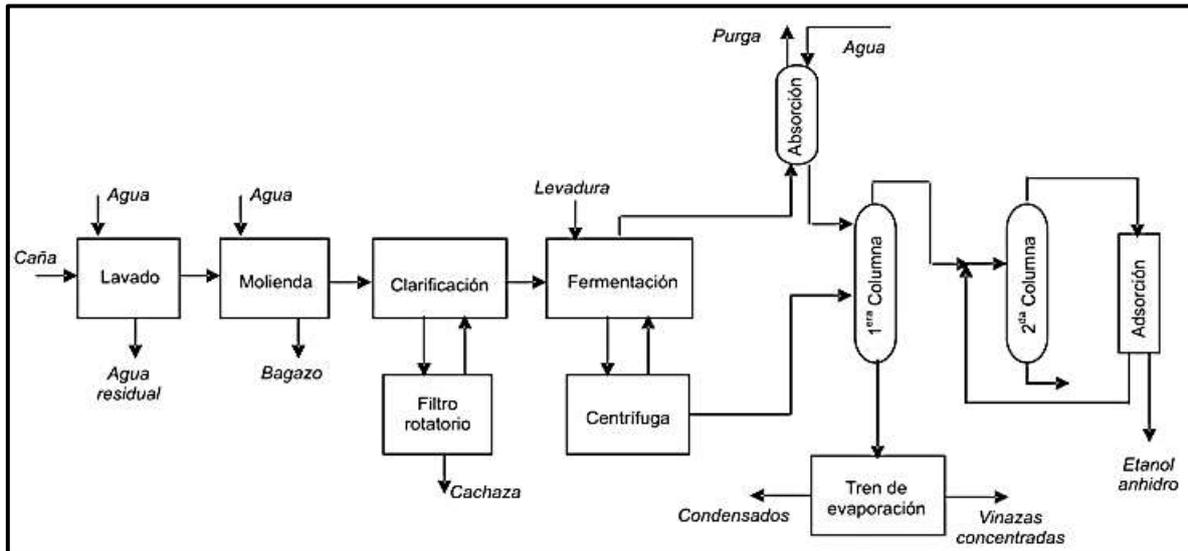


Figura 8. Esquema del proceso de obtención de etanol a partir de caña de azúcar  
Fuente: Obtenida de Montoya, Quintero, Sánchez & Cardona, (2005)

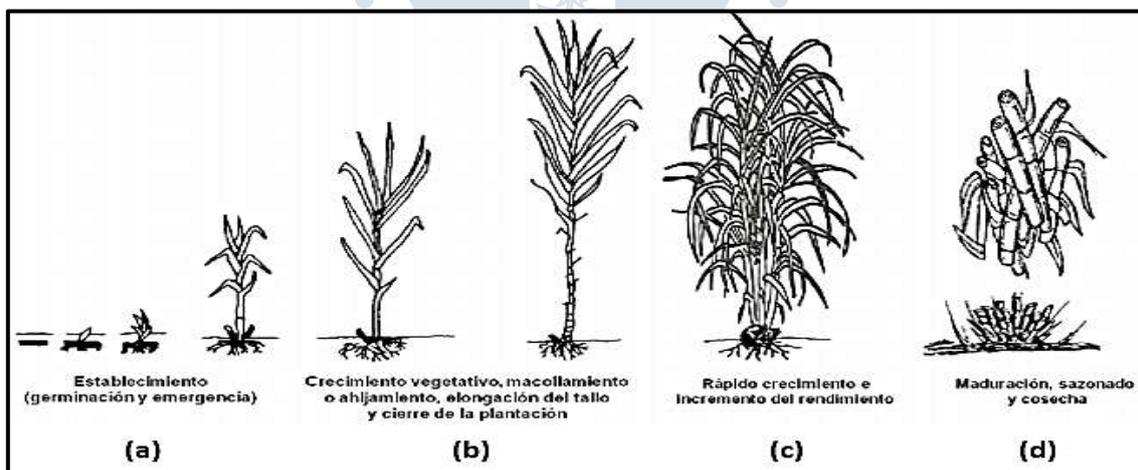


Figura 9. Etapas fenológicas del cultivo de caña de azúcar  
Fuente: Obtenida de Aguilar, (2015)

<sup>4</sup> La cosecha ocurre durante los 12 o 16 meses después de la plantación, dependiendo de la variedad de caña de azúcar.

### 1.2.3 *Residuos del proceso de producción de etanol y azúcar*

La problemática con la gestión de residuos después del proceso de cosecha para pequeños y medianos agricultores radica en los espacios para su almacenamiento. Ante ello, la facilidad que encuentran los agricultores para solucionar el problema de los residuos es la quema inmediata, esto es una práctica ampliamente utilizada por ser un método de eliminación rápida. Sin embargo, el método mencionado anteriormente repercute en los nutrientes de la tierra y además genera contaminación ambiental por la liberación de los gases de combustión.

Durante el proceso de producción de etanol y azúcar a partir de la caña de azúcar a gran escala, se generan ciertos residuos lignocelulósicos con capacidad energética. Estos residuos se pueden clasificar en dos grupos: aquellos que provienen de la planta de caña de azúcar y aquellos residuos finales del proceso de producción de etanol. Dentro del primer grupo mencionado se encuentran las hojas verdes, hojas secas y el cogollo de la caña de azúcar, cada uno de estos residuos presentan diferentes porcentajes de humedad, concentración de alcalinos y otras características físicas, sin embargo, su composición básica en carbono, hidrógeno, oxígeno y nitrógeno son semejantes. El segundo grupo lo conforma el bagazo de caña de azúcar, un residuo con alto contenido de humedad y que se utiliza para la cogeneración y producción de vapor en procesos industriales (Estremadoyro, 2015).

### 1.2.4 *Caracterización del bagazo de caña de azúcar*

La caracterización de la biomasa se basa en analizar principalmente su composición básica (C, H, O, N), tamaño de partícula y contenido de material volátil que presenta durante el proceso de gasificación, con la finalidad de predecir la calidad energética del gas de síntesis. Para ello son necesarios ciertos procedimientos o ensayos que se describen a continuación.

- **Ensayos de granulometría**

Este ensayo permite conocer las fracciones en peso de cada componente de la biomasa.

- **Análisis inmediato**

Con este análisis se puede conocer el contenido porcentual de humedad, de cenizas y material volátil presente en la biomasa de trabajo.

- **Análisis elemental**

Determina el contenido porcentual respecto al peso de carbono, hidrógeno, oxígeno y azufre. Dependiendo del tipo de biomasa, el contenido de nitrógeno puede ser insignificante en comparación con las cuatro especies mencionadas anteriormente, por ello no se toma en cuenta.

- **Análisis del poder calorífico**

Permite tener una noción de la calidad energética de la biomasa de trabajo durante cualquier proceso para su aprovechamiento.

Es necesario conocer la composición química del bagazo de caña de azúcar para poder predecir la composición del gas de síntesis durante la gasificación, mediante el modelo matemático desarrollado en el Capítulo 2. La Tabla 5 agrupa los porcentajes obtenidos durante el análisis último e inmediato practicados al bagazo de caña de origen mexicano.

Tabla 5. Caracterización química del bagazo de caña de azúcar\*

Parámetro	Magnitud (en peso)
<b>Análisis elemental (base seca)</b>	
C	44.62%
H	5.99%
N	0.51%
S	0.25%
O	48.62%
<b>Análisis próximo</b>	
Humedad	4.42%
Materia volátil	81.66%
Carbón fijo	8.82%
Cenizas	5.41%

\*Muestras obtenidas del ingenio Mahuixtlán, Veracruz

Fuente: Obtenida de Neri, (2002)

### 1.3 Proceso de gasificación

La gasificación es una tecnología de conversión de la biomasa mediante un proceso termoquímico, donde el combustible sólido es transformado por oxidación parcial en un gas de síntesis. El producto está conformado por las siguientes especies gaseosas:  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $H_2O$ ,  $H_2$ ,  $O_2$ ,  $CH_4$ ,  $N_2$ , *char* (carbón) y *tars* (alquitranes), y para ser utilizado con fines industriales, el gas de síntesis debe someterse previamente a un proceso de filtrado.

A continuación, en los siguientes apartados se describe la naturaleza y comportamiento de las etapas que conforman el proceso de gasificación, así mismo, los mecanismos hidrodinámicos que tienen lugar al interior de un reactor de geometría variable, pues esto dependerá del comportamiento del lecho.

#### 1.3.1 Etapas del proceso de gasificación

Las etapas en gasificadores de lecho fluidizado no tienen un límite de distinción y estas se superponen entre ellas (Ruiz Bermejo, 2013). Sin embargo, durante la modelación matemática es necesario considerar que las etapas ocurren una a continuación de otra.

**1.3.1.1 Secado.** El secado es la primera etapa, donde la biomasa sólida contiene siempre cierto porcentaje de humedad después del secado manual o inducido. Durante la gasificación se recomienda que la biomasa tenga entre 20% al 30% de humedad, para evitar que la energía liberada durante la combustión tenga que evaporar el agua contenida en la biomasa. La etapa de secado se puede considerar como una acción externa al proceso de

gasificación, sin embargo, durante un instante de tiempo cuando la biomasa es alimentada y llega al lecho fluidizado, ocurre un proceso de secado al estar expuesta a una temperatura de 100°C a 200°C. Durante ese periodo se libera vapor de agua, siendo este un proceso irreversible y considerado para efectos de esta investigación instantáneo, además no existe ninguna reacción química.

**1.3.1.2 Devolatilización o pirólisis.** En esta etapa ocurren una serie de reacciones químicas endotérmicas muy complejas y transformaciones físicas de la biomasa de trabajo, como pérdida de masa debido al calor cedido en la etapa de combustión. En teoría, este proceso tiene lugar entre 200-500°C en una atmósfera ausente de oxígeno, donde los sólidos se descomponen en: volátiles, alquitranes y carbón, debido a la difusión de los gases en el interior de los sólidos. Los volátiles liberados reaccionan con el agente gasificante para producir las especies principales que componen al gas de síntesis. El carbón o char es un compuesto sólido, cuya estructura posee micro y macro poros, además, la distribución y forma de estos dependerá del tipo de biomasa. Durante la temperatura de devolatilización, el área superficial de los microporos en el char aumenta, permitiendo liberar una mayor cantidad de volátiles de los que había inicialmente, favoreciendo a la formación de las reacciones heterogéneas que serán vistas en el apartado 2.4.1.2.

Para modelar la pirólisis del carbón o char y la pirólisis de la biomasa se utiliza el modelo de núcleo de contracción<sup>5</sup> representado en la Figura 10, donde la partícula se ha dividido en dos regiones de acuerdo con la secuencia de conversión física de la biomasa, es decir, la primera región representa la formación de una capa char a partir de un núcleo de biomasa, a continuación, el núcleo de biomasa es carbonizado y la capa exterior de char reacciona para formar una capa de cenizas (ash) con un núcleo de carbón.

El proceso de carbonización y pirólisis de la biomasa ocurre en una superficie infinitesimal, donde el calentamiento de la partícula inicia desde la superficie hacia el centro, por ello existirá un gradiente de temperatura hacia el interior de la partícula sólida. Además, a medida que la conversión se complete, se irán formando capas de cierto espesor (normalmente considerado infinitesimal), que están directamente influenciadas por la tasa o velocidad de difusión de oxígeno y de los gases liberados en la devolatilización (Fatehi, 2014).

La mayoría de las literaturas coinciden en analizar la composición del combustible o biomasa utilizada para asumir que los volátiles están formados por dicha composición: carbono, hidrógeno, oxígeno, nitrógeno y azufre.

---

<sup>5</sup> Este modelo se basa en la disminución o contracción de la partícula inicial a una temperatura constante, debido a la pérdida de masa y de volátiles, por lo tanto, las propiedades del sólido cambiarán.

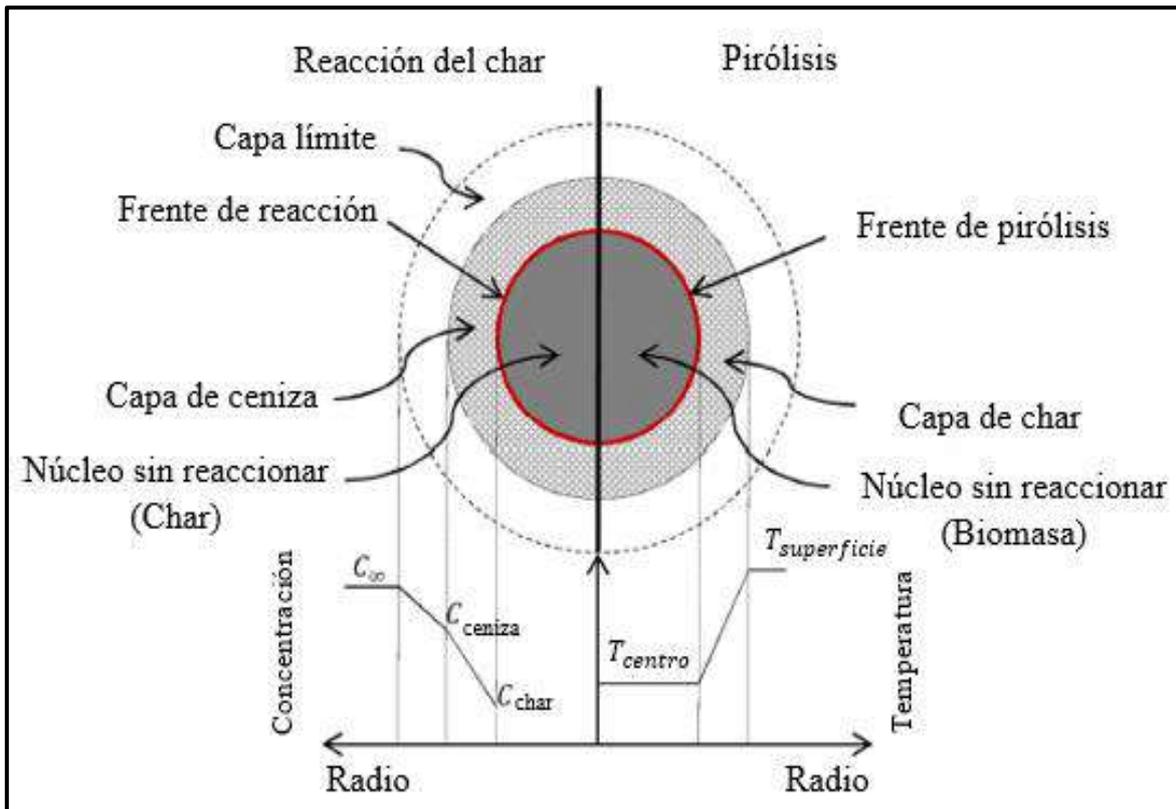


Figura 10. Vista esquemática del modelo de núcleo de contracción para pirólisis de carbón y biomasa

Fuente: Obtenida de Fatehi, (2014)

Para algunos autores, este proceso lo consideran instantáneo y produce gases libres de alquitranes, esto ocurre después de la etapa de secado. Autores como De Souza-Santos (1989) y Jiang & Morey (1992) modelaron de forma simplificada la devolatilización para carbón y biomasa de maíz respectivamente, y determinaron el rendimiento y la composición de los volátiles durante el periodo en donde ocurre esta etapa, mediante las relaciones de Arrhenius, tamaño de partícula del lecho y la transferencia de masa y calor. Por otra parte, en la investigación de Bates *et al* (2017), hace referencia que existen autores que consideran que la devolatilización es instantánea para partículas con un tamaño menor a 0.5 mm, y para aquellas partículas que son mayores a 6 mm la devolatilización ocurre en un determinado tiempo.

En general, se puede decir que la pirólisis es instantánea, ya que al calcular el tiempo en que esta etapa sucede, no representa un periodo muy significativo, además, la composición de los gases de pirólisis varía con el tipo de biomasa y las condiciones de operación. Este parámetro se puede modelar de forma experimental. Las correlaciones de Loison y Chauvin (1964) sobre los volátiles del carbón se presentan en la investigación de Yan, Heidenreich y Zhang (1997), y son aceptadas por algunas literaturas (Tosina, 2013), (Torres, 2012) para la biomasa (ver Ecuaciones 1-6), sin embargo, se considera que al utilizar estas correlaciones se adquiere cierto error de cálculo, porque la proporción de materia volátil contenida en la biomasa será mucho mayor que para el carbón.

$$x_{mv-CO} = 0.428 - 2.653x_{mv} + 4.845x_{mv}^2 \quad (1)$$

$$x_{mv-CO_2} = 0.135 - 0.9x_{mv} + 1.906x_{mv}^2 \quad (2)$$

$$x_{mv-H_2} = 0.157 - 0.868x_{mv} + 1.388x_{mv}^2 \quad (3)$$

$$x_{mv-H_2O} = 0.409 - 2.389x_{mv} + 4.554x_{mv}^2 \quad (4)$$

$$x_{mv-CH_4} = 0.201 - 0.469x_{mv} + 0.241x_{mv}^2 \quad (5)$$

$$x_{mv-char} = 1 - \sum x_{mv-i} \quad (6)$$

Donde:

$x_{mv}$  : Fracción másica de materia volátil [–]

$x_{m-i}$  : Fracción másica por especie volátil del carbón [–]

Las Ecuaciones (1)-(6) mencionadas, describen un comportamiento válido para valores entre 0.05 y 0.5 correspondientes a la fracción másica de materia volátil ( $x_{mv}$ ) del carbón como fuente de energía. El comportamiento de cada ecuación se describe en la Figura 11, donde se observa que para valores intermedios de  $x_{mv}$  la especie de mayor proporción será el alquitrán o *tar*, por el contrario, si este valor aumenta hasta su valor máximo ( $x_{mv} = 0.5$ ); acercándose a los valores típicos que posee la biomasa ( $x_{mv} = 0.6 - 0.82$ ), las especies dominantes liberadas serán: vapor de agua ( $H_2O$ ), monóxido de carbono ( $CO$ ) y dióxido de carbono ( $CO_2$ ), así mismo, especies como el metano ( $CH_4$ ), hidrógeno ( $H_2$ ) y *tar* tienden a disminuir su contenido durante la devolatilización.

El estudio del proceso de devolatilización de biomasa debe ser directamente dependiente de la temperatura interna del proceso, pues es aquella energía que permite la liberación de las especies volátiles. Esto se refleja en la investigación de Pauls, J. (2015), donde se proponen una serie de ecuaciones empíricas desarrolladas en investigaciones sobre pirólisis de biomasa en un rango de temperaturas, además, estas ecuaciones son válidas para una gran variedad de combustibles (biomasa).

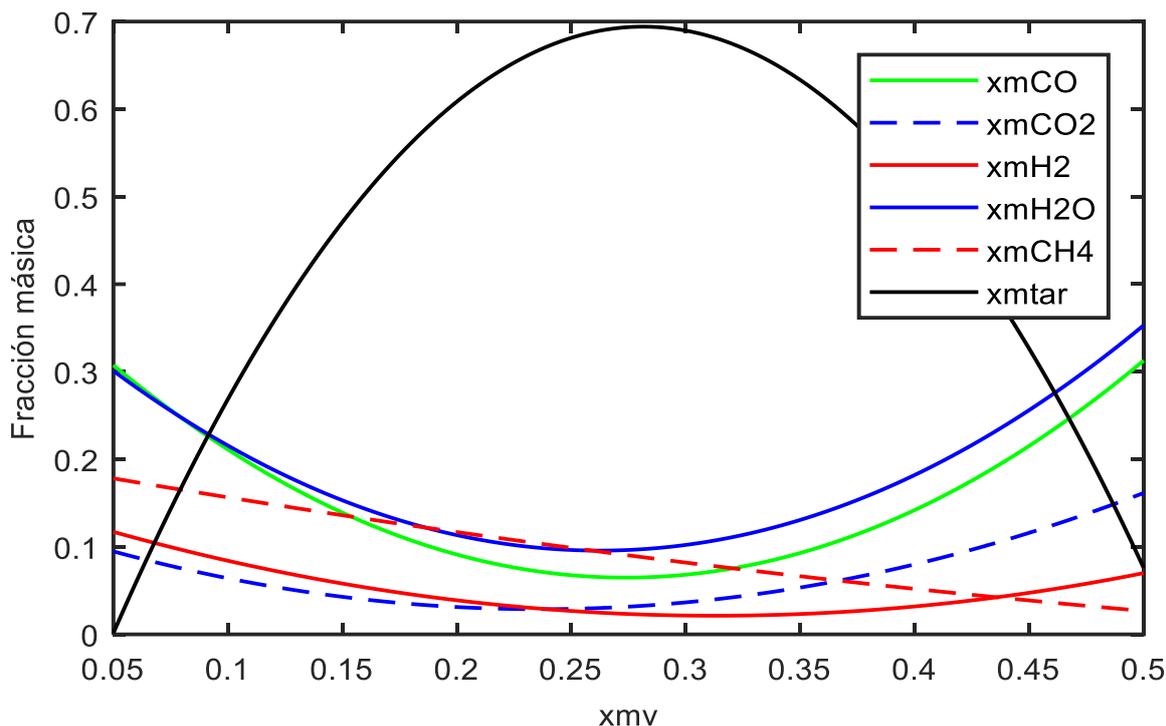


Figura 11. Fracciones másicas de especies volátiles liberadas por el carbón  
Fuente: Basado en Tosina, (2013)

Las Ecuaciones (7) y (8) determinan las fracciones másicas de material volátil del metano y del dióxido de carbono (especies volátiles) liberado durante la pirólisis en función de la temperatura. La Figura 12 muestra la evolución de las dos especies mencionadas, así mismo, se observa que la liberación del  $CO$  aumenta al incrementar la temperatura de operación, y el  $CH_4$  tiene un ligero aumento, pero se puede decir que su variación es baja.

$$y_{mv-CO} = 2.55 * 10^{-6}(T^2) - 0.0025T + 0.8247 \quad (7)$$

$$y_{mv-CH_4} = 3.75 * 10^{-7}(T^2) - 0.0004T + 0.1414 \quad (8)$$

Donde:

$T$ : Temperatura interna del reactor o del proceso [°C]

$y_{mv-i}$ : Fracción másica por especie volátil de la biomasa [-]

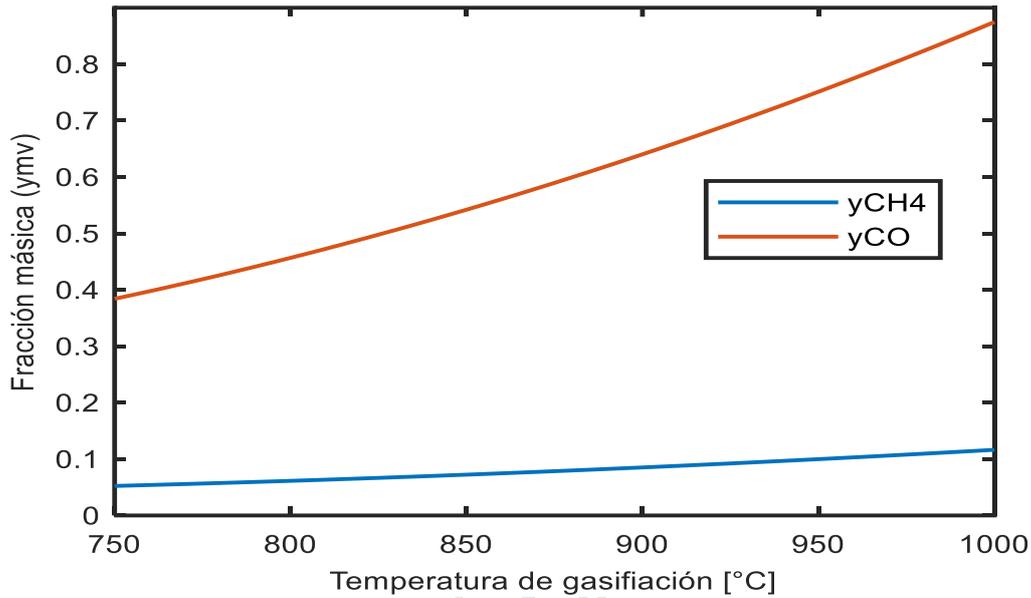


Figura 12. Evolución del CO y CH<sub>4</sub> durante la devolatilización de la biomasa para diferentes temperaturas

Fuente: Basado en las ecuaciones de Pauls, (2015)

Otra consideración válida para determinar la cantidad de material volátil liberado es relacionando la caracterización química de la biomasa en base seca (ver apartado 1.2.4), las fracciones de material volátil ( $y_{mv-i}$ ) y la fracción másica de materia volátil ( $x_{mv}$ ). Esto se realiza mediante un modelo de tendencias dominantes, analizando los productos gaseosos de la pirólisis, obteniendo las Ecuaciones (9)-(11) (Wojnicka, Ściażko, & Schmid, 2019).

$$y_{mv-H_2O} = 0.0065 \left( \frac{O_{bio}}{H_{bio}} \right) \frac{1}{x_{mv}} \quad (9)$$

$$y_{mv-CO_2} = \frac{11}{8} \left[ O_{bio} - 0.1(1 - x_{mv}) - \left( \frac{4y_{mv-CO}}{7} + \frac{8y_{mv-H_2O}}{9} \right) x_{mv} \right] \frac{1}{x_{mv}} \quad (10)$$

$$y_{mv-H_2} = \frac{H_{bio}}{x_{mv}} - \frac{y_{mv-CH_4}}{4} - \frac{y_{mv-H_2O}}{9} \quad (11)$$

Donde:

$H_{bio}$ : Fracción porcentual de hidrógeno contenido en la biomasa [–]

$O_{bio}$ : Fracción porcentual de oxígeno contenido en la biomasa [–]

Es necesario mencionar que las Ecuaciones (10) y (11) han sido simplificadas, pues esta investigación no considera la formación de especies volátiles como amoníaco ( $NH_3$ ), ácido sulfúrico ( $H_2S$ ), etano ( $C_2H_6$ ) y alquitranes, para más información revisar la investigación de Wojnicka, Ściażko, & Schmid, (2019).

**1.3.1.1 Combustión u oxidación.** El material inerte precalentado a cierta temperatura actúa como auto sustento para generar la combustión, en donde se producen reacciones exotérmicas entre el combustible (biomasa) y el oxidante para generar calor, que será cedido para: las reacciones del tipo endotérmicas, la etapa de secado y la pirólisis. Los principales gases producidos en esta etapa son el dióxido de carbono y el vapor de agua cuando se alcanzan temperaturas entre 800 y 1000°C, así mismo, la cantidad de aire suministrada al interior del reactor debe ser adecuada, pues un exceso de aire enfriará los productos de la combustión, y dicho parámetro está directamente relacionado con las características físicas y químicas de la biomasa (Mahmood AL-Farraji, 2017).

Como se mencionó en el párrafo anterior, la etapa de combustión genera dos compuestos gaseosos principales. Dicha formación tiene su origen después de la devolatilización o pirólisis, donde la biomasa es convertida en una partícula carbonosa que posee cierta porosidad que permite el ingreso de un flujo o corriente de oxígeno, así mismo, la proporción del monóxido de carbono y el dióxido de carbono dependerá estrictamente del tamaño de partícula inicial de la biomasa. El análisis cinético de los productos se realiza mediante las correlaciones utilizadas en la gasificación del carbón en reactores de lecho fluidizado, debido a la similitud del proceso.

Para optimizar el proceso de oxidación, se deberá controlar el ingreso del agente oxidante, de la relación aire-combustible, las condiciones de temperatura, y el tipo de biomasa o combustible (Estremadoyro, 2015).

**1.3.1.2 Gasificación o reducción.** Durante esta etapa propiamente se habla del proceso de gasificación debido a las reacciones de reducción endotérmicas en ausencia de oxígeno, y se habla así porque en la etapa de combustión el oxígeno se ha consumido, por lo tanto, la biomasa estará sometida a una reacción de oxidación parcial con el agente oxidante, con la finalidad de obtener un gas de síntesis que puede ser utilizado para determinadas aplicaciones ingenieriles.

La gasificación se realiza a diferentes temperaturas, puede ocurrir entre los 500 y 1100°C y a presiones entre la atmosférica hasta los 3.3 MPa. Los gases resultantes de esta etapa son: el monóxido de carbono, dióxido de carbono, nitrógeno y el hidrógeno. Durante esta etapa se puede llegar a producir un gas de síntesis que posee un poder calorífico inferior entre 4 a 7 MJ/m<sup>3</sup>. Normalmente es utilizado para el funcionamiento de calderas, motores de combustión interna y turbinas de baja potencia.

El proceso de reducción o gasificación está constituido por dos pasos previos: (1) La pirólisis descrita en el punto 1.3.1.2, que representa un proceso químico de descomposición de la biomasa debido a una velocidad de calentamiento que dependiendo de su magnitud y del tiempo de residencia producirá cierta cantidad de material carbonizado (char) más un material reactivo gaseoso y líquido. (2) El segundo paso es una serie de reacciones químicas paulatinas del tipo exotérmicas y endotérmicas producidas entre: el agente gasificante, una temperatura relativamente alta y los materiales producidos en la pirólisis.

Durante esta etapa la temperatura juega un rol importante. A medida que ésta incrementa, la proporción entre  $H_2$  y  $CO$  aumentará, por el contrario, los niveles de  $CO_2$  y  $CH_4$  disminuyen. En general, se busca obtener en el proceso de gasificación el máximo rendimiento o proporción de hidrógeno y monóxido de carbono en el gas de síntesis, al utilizar un determinado agente gasificante (Mahmood AL-Farraji, 2017). Además, se busca que el contenido estequiométrico de oxígeno sea el adecuado para dar prioridad al proceso de gasificación y así favorece la producción de las especies mencionadas.

#### 1.4 Tipos de gasificadores

A lo largo de los años se ha visto necesario el uso de reactores de geometría variable para mejorar el proceso de gasificación. En sus inicios, los pioneros en la construcción de gasificadores fueron los científicos alemanes, específicamente fue Gustav Bischof, quien en 1840 construyó un gasificador utilizando la madera como biomasa y lo introdujo comercialmente a gran escala en una fábrica de hierro de Audincourt, en Francia. Después de largos años de trabajo en la mejora del proceso de gasificación, la empresa Siemens en 1861 produjo una unidad eficiente y comercial de gasificador de lecho fijo con vapor de aire como agente gasificante, a una temperatura de trabajo de  $900^\circ C$ . Años más tarde, en 1926 la compañía alemana Rheinbraun AG desarrolló el gasificador Winkler, introduciendo un nuevo método de gasificación con un lecho fluidizado a una temperatura del reactor menor a  $900^\circ C$ , esto representaba una gran ventaja, pues se trabajaba con cualquier tipo de biomasa y con tamaños de partícula más flexibles. Actualmente, se utilizan ciertas tecnologías de gasificación resumidas en la Tabla 6.

Tabla 6. Principales tipos de gasificadores comerciales

Proceso		Presión	Agente Gasificante
Lecho fijo	Sin fusión de cenizas	Lurgi	Aire-oxígeno
		Foster Wheeler Stoic	Aire
		Babcock W-D	Aire-oxígeno
	Con fusión de cenizas	Lurgi British Gas	Oxígeno
Lecho fluidizado	Sin aglomeración	Winkler	Aire-oxígeno
	Con aglomeración	Westinghouse	Aire-oxígeno
Lecho de arrastre	Alimentación seca	KBW	Oxígeno
		Shell	Aire-oxígeno
		Combustion Engineering	Aire-oxígeno
	Alimentación slurry	Texaco	Aire-oxígeno
	Medio de reacción fundido	Saaberg-Otto	Aire-oxígeno
Reactor rotativo	KILnGAS	8 bar	Aire

Fuente: Obtenida de Sánchez, Gallardo & Edo, (2014)

Existen diversos modos de clasificar los gasificadores, por ejemplo, según el agente gasificante, según la dirección de la corriente del agente gasificante, según la geometría del gasificador o según el modo de operación. Algunas clasificaciones incluyen la presión de funcionamiento del gasificador, aquellos que funcionan a presiones medias o elevadas permiten incrementar las interacciones entre la fase volátil y la fase sólida, mejorando la

extracción de volátiles de la biomasa (Gómez, Klose, Rincón, & Wiest, 2004). Las elevadas presiones permiten incrementar la concentración de metano y dióxido de carbono, mientras que las concentraciones de hidrógeno y monóxido de carbono disminuyen. Operar a altas presiones tiene sus ventajas, pues los requerimientos de compresión de la energía son menores (Sánchez, Gallardo, & Edo, 2014).

Para efectos de esta investigación, se clasificaron según el comportamiento que presenta el lecho durante el proceso de gasificación. Además, en la Tabla 7 se comparan de manera general las diversas ventajas y desventajas de las propiedades que presenta realizar la gasificación con un lecho fijo o de lecho fluidizado, y en los puntos 1.4.1 y 1.4.2 se ahondará en las diferentes configuraciones geométricas y de operación que presentan los gasificadores.

Tabla 7. Cuadro comparativo entre gasificadores de lecho fijo y lecho fluidizado

	Lecho fijo	Lecho fluidizado
<b>Ventajas</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- El costo de fabricación es menor.</li> <li>- Mayor conversión de char.</li> <li>- Son eficientes con biomasa de alta densidad.</li> <li>- Pueden trabajar a presiones medias o a presión atmosférica.</li> <li>- Mayor tiempo de residencia de las partículas sólidas.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Excelente contacto entre partículas y gas.</li> <li>- Mayor transferencia de calor.</li> <li>- Comportamiento isotérmico en el reactor.</li> <li>- La relación aire-combustible es controlable.</li> <li>- Se trabaja con diversos tipos de biomasa.</li> <li>- El gas de síntesis presenta bajo contenido de alquitrán y cenizas.</li> <li>- Altas velocidades de reacción.</li> </ul>
<b>Desventajas</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- No se puede controlar la temperatura del lecho.</li> <li>- Menor eficiencia térmica.</li> <li>- El gas de síntesis presenta mayor contenido de alquitrán.</li> <li>- Bajas temperaturas de reacción.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Mayor complejidad del diseño.</li> <li>- Se necesita de un material inerte.</li> <li>- No se pueden distinguir las zonas de las reacciones o etapas.</li> <li>- Mayor costo de fabricación.</li> </ul>

### 1.4.1 Gasificadores de lecho fijo

**1.4.1.1 Gasificador de contracorriente o Updraft.** Este diseño de gasificador utiliza la gravedad como sistema de alimentación de la biomasa, al igual que al gasificador Downdraft, el sistema de alimentación está ubicado en la parte superior. En forma simultánea el agente gasificante ingresa con una dirección (ascendente) contraria al del sistema de alimentación. Como se observa en la Figura 13, debido a esta configuración geométrica, al interior del reactor se pueden distinguir las zonas o etapas del proceso de gasificación. El producto final es un gas de síntesis de baja temperatura y de elevado contenido en alquitrán, por ello se necesita de un sistema de filtrado.

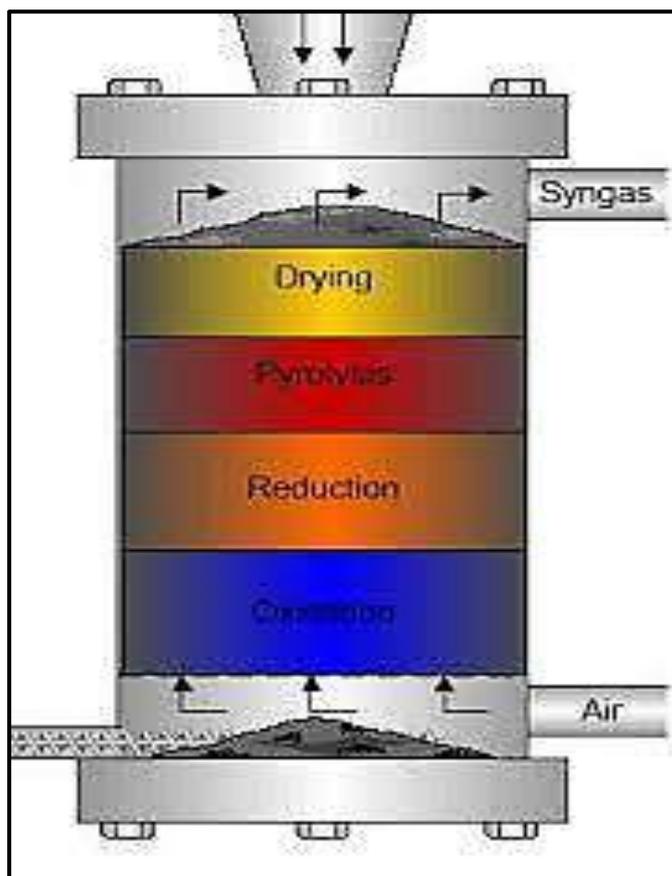


Figura 13. Gasificador de lecho fijo *Updraft*

Fuente: Obtenida de Sánchez, Gallardo & Edo, (2014)

**1.4.1.2 Gasificador de corriente paralela o Downdraft.** El gasificador Downdraft difiere en diseño y ubicación de los sistemas de entradas y salida en comparación con el diseño Updraft, además de la dirección del agente gasificante (paralelo a la dirección de la alimentación). Las cuatro etapas también se diferencian, sin embargo, debido a la inyección del agente gasificante en la parte media o garganta del reactor, la zona de combustión se ubica en el tercer nivel (ver Figura 14a), esto favorece a la obtención de un gas de alta temperatura (700°C) limpio de alquitranes con una elevada conversión del carbono o char, liberándose por la parte baja del gasificador.

**1.4.1.3 Gasificador de corriente cruzada o Crossdraft.** La configuración y diseño geométrico de este gasificador es de complejidad media-baja, puesto que el agente gasificante ingresa por la parte lateral media del reactor y el gas de síntesis sale por el lateral contrario a una alta velocidad. Debido al diseño, las etapas de gasificación ocurren de manera concéntrica a la zona de entrada del medio gasificante (ver Figura 14b), y la escala de los reactores es pequeña, a nivel de laboratorio, cuyo producto gaseoso presenta un alto contenido en alquitrán y se puede afirmar que el syngas presenta características intermedias con respecto al gasificador de contraflujo (Updraft) o flujo directo (Downdraft).

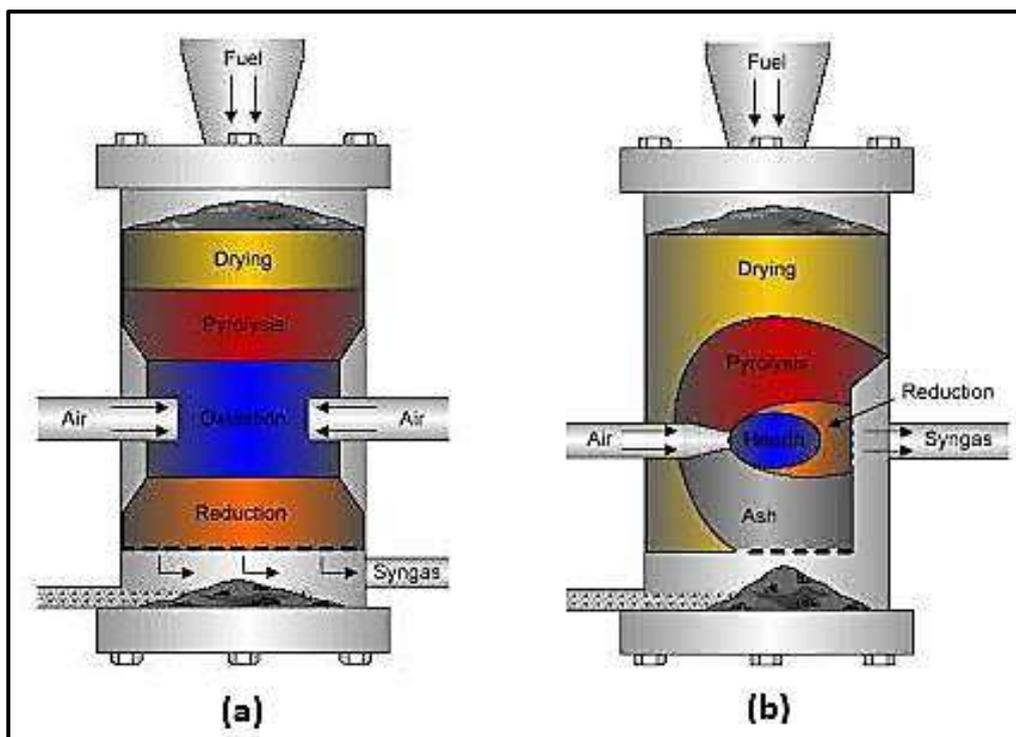


Figura 14. Gasificador de lecho fijo a)Downdraft y b)Crossdraft  
Fuente: Obtenida de Sánchez, Gallardo & Edo, (2014)

### 1.4.2 Gasificadores de lecho fluidizado

En los gasificadores de lecho fluidizado el comportamiento de los sólidos se asemeja a los fluidos, debido a que el agente gasificante ingresa al reactor con cierta velocidad, ello permite que los sólidos queden suspendidos. Además, para lograr la gasificación, debe existir un material inerte (arena o alúmina) precalentado por un quemador sobre una rejilla, posteriormente, la biomasa de alimentación ingresa al reactor con un tamaño de partícula pequeño y cae sobre el material inerte, formándose un lecho. Una característica por la que se diferencia de los gasificadores de lecho fijo es que las etapas del proceso de gasificación no se pueden distinguir a lo largo de la altura del reactor, por el intenso movimiento fluido del lecho, además, en este tipo de gasificador se puede variar la relación aire-combustible para controlar la temperatura del lecho.

La ventaja de este tipo de gasificadores radica en que pueden manejar mayores flujos máxicos de biomasa en comparación con los de lecho fijo (Sánchez, Gallardo, & Edo, 2014). Según la geometría del gasificador se pueden encontrar los siguientes tipos:

**1.4.2.1 Gasificador de lecho fluidizado burbujeante.** La velocidad de fluidización dentro del reactor de este gasificador es menor y la mayor parte de los sólidos permanecen en el lecho, en comparación al gasificador de lecho circulante. Además, la conversión de char o carbono no es completa. En este sentido, se ha demostrado que a temperaturas entre 850-950°C la conversión de carbono está entre el 30-70%, y que el metano representa el 4-12% del total del producto del gas de síntesis (Bates et al, 2017). El diseño de este gasificador se puede observar en la Figura 15.

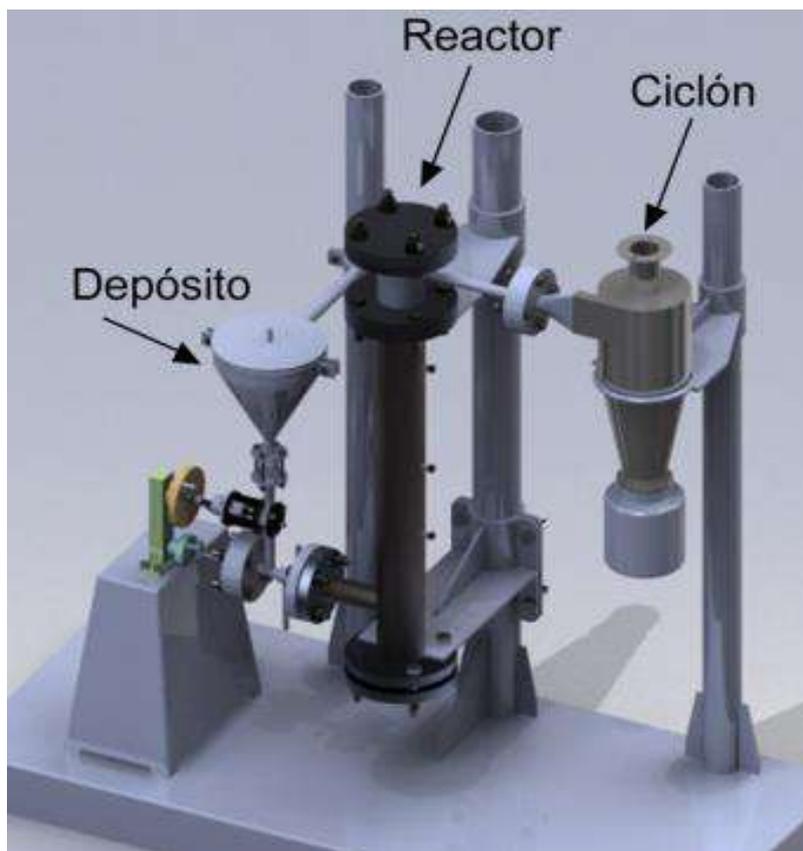


Figura 15. Diseño en 3D de un gasificador de lecho fluidizado burbujeante  
Fuente: Obtenida de Klug, (2012)

- Gasificador UDEP

El gasificador que se encuentra en la Universidad de Piura es del tipo de lecho fluidizado burbujeante (ver Figura 16) y ha permitido realizar diversas investigaciones en el uso de biomasa residual producida en la ciudad de Piura. Esta tecnología tiene sus inicios en los años 2003-2005 donde se desarrolló un prototipo de gasificador con la participación de grupos internacionales y profesionales del área, y se utilizó cascarilla de arroz como materia prima para la parte experimental. Esto permitió a Héctor Rivera Pinzás en 2004, el desarrollo de una investigación orientada al balance energético de un gasificador de tiro invertido, para determinar de manera práctica sus parámetros de operación y establecer una serie de mejoras para incrementar la eficiencia del gasificador. Años más tarde, en 2010, Carlos Quispe estudió la mejora de parámetros energéticos de cogeneración con ciclo combinado y gasificación de una planta azucarera.

La investigación en 2015 del entonces bachiller Jorge Estremadoyro logró un estudio de factibilidad y aprovechamiento energético de las hojas de caña de azúcar en un prototipo de gasificador. Esto comprendió el diseño, dimensionamiento y mejoras a futuro de un gasificador de lecho fluidizado en base a un modelo matemático de caja negra. Durante el 2017 se realizaron dos investigaciones, una de ellas a cargo de Pedro Alegría, quien realizó el proceso de instalación y puesta en marcha de un gasificador de lecho fluidizado burbujeante

basado en la geometría obtenida en la tesis de Jorge Estremadoyro. Por otro lado, Ricardo García, validó la planta piloto del gasificador de lecho fluidizado burbujeante con el cálculo de las potencias de los equipos auxiliares.



Figura 16. Gasificador UDEP de lecho fluidizado

La última investigación del prototipo de gasificador en la Universidad de Piura fue realizada en el 2018 por Favio Suarez, quien realizó un estudio de caracterización de la cáscara del café como biomasa alternativa y además realizó mejoras en el diseño y geometría del gasificador, pues se encontraron algunas deficiencias, por ejemplo, la obstrucción de biomasa en el sistema de alimentación. La mejora de la tecnología de gasificación continúa hasta el momento.

**1.4.2.2 Gasificador de lecho fluidizado circulante.** El gasificador de lecho fluidizado circulante tiene un ciclón para devolver la biomasa en forma de partículas sólidas al proceso dentro del reactor, porque presenta una mayor velocidad de fluidización (entre 4.5-6.5  $m/s$ ) que el gasificador de lecho fluidizado burbujeante, además, de tener una mejor conversión de los sólidos sin reaccionar, por la incorporación del sistema de recirculación (ver Figura 17).

Este tipo de gasificadores es comercialmente utilizado en la industria para la gasificación de biomasa y carbón, por ello se puede afirmar que presenta una gran flexibilidad con respecto a la conversión de diversos tipos de biomasa con tamaños de partícula finos de

distribución uniforme, lo que requiere de un procesamiento previo. Las desventajas de este gasificador radican en el costo de inversión, así como la complejidad del diseño y los problemas de erosión del material de construcción del gasificador (Mahmood AL-Farraj, 2017).

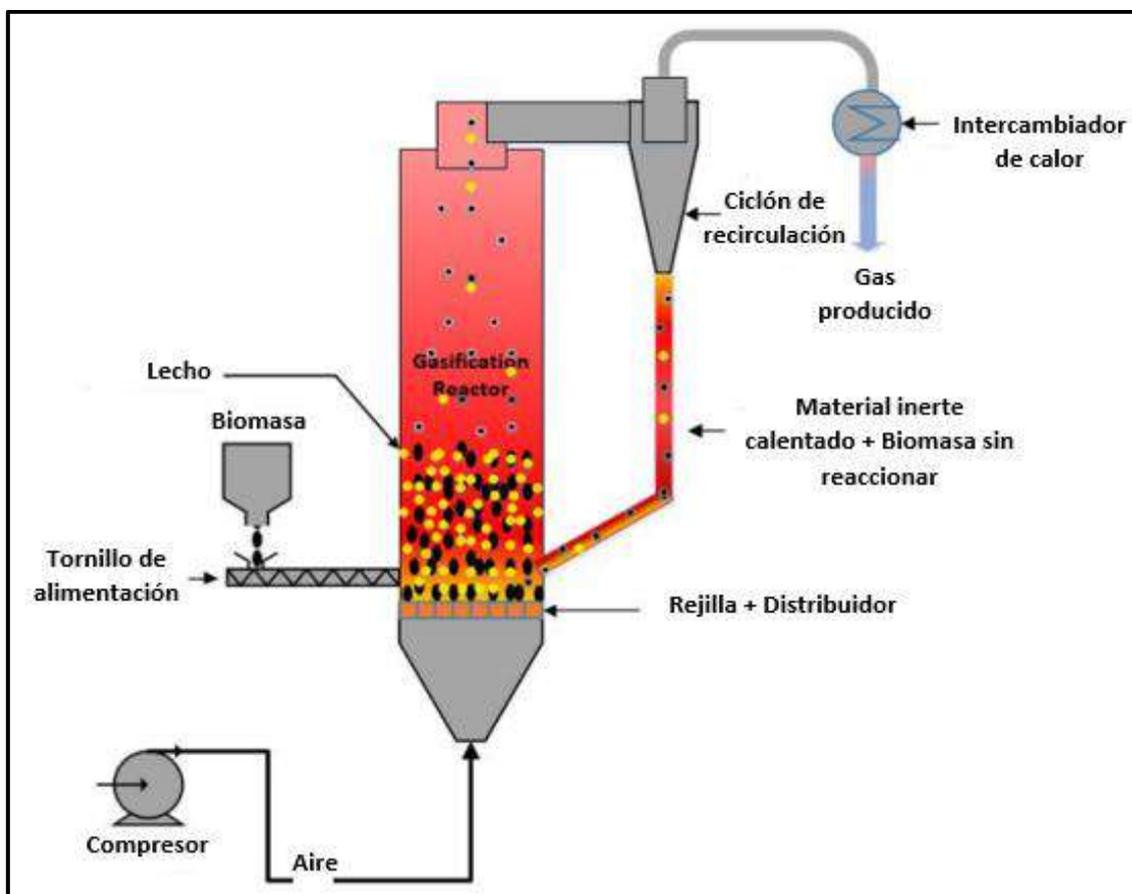


Figura 17. Esquema de un gasificador de lecho fluidizado circulante

Fuente: Obtenida de Mahmood, AL-Farraj, (2017)

**1.4.2.3 Gasificador de lecho arrastrado.** Los gasificadores de lecho arrastrado operan como calderas de carbón pulverizado con un tamaño de partícula muy fino (diámetro menor a 0.2 mm), por ello el tiempo de residencia es muy bajo. Además, al interior del reactor la temperatura de operación es alta, y como resultado se obtienen altas conversiones del carbón y un gas de síntesis con un porcentaje casi nulo de alquitranes (Sánchez, Gallardo, & Edo, 2014). La desventaja de este tipo de gasificador es la poca diversidad de materia prima como combustible, pues no hay estudios al respecto de su funcionamiento con biomasa, debido al tamaño de partícula requerido. La Figura 18 muestra la geometría poco convencional de este gasificador, pues presenta un sistema de doble inyección de aire (un sistema para transportar el carbón y otro para la combustión) y de carbón, además, el gasificador está recubierto de un material refractario para soportar las altas temperaturas (Fonseca, 2003). Es necesario mencionar que en este tipo de gasificador se pueden distinguir tres zonas del proceso de gasificación en el siguiente orden: combustión, pirólisis y gasificación del carbón.

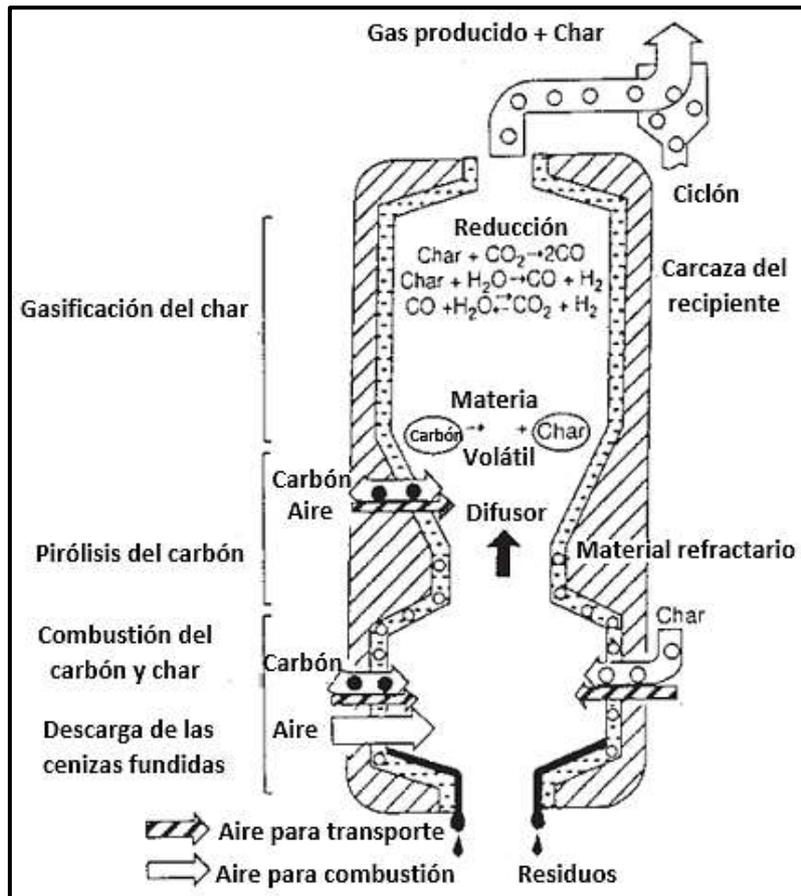


Figura 18. Gasificador de lecho arrastrado  
Fuente: Obtenida de Fonseca, (2003)

### 1.4.3 Comparativa de los tipos de gasificadores

En la Tabla 8 se establece una serie de características generales que permiten establecer ciertos criterios de utilización con respecto a los tipos de gasificadores comerciales cuyo combustible es la biomasa de segunda generación.

Como se mencionó en la parte introductoria de esta investigación, la composición del gas de síntesis también depende de un fenómeno físico relacionado al tipo de lecho a gasificar. Esto se demuestra en la Tabla 9, donde se observan los valores obtenidos de forma experimental de las principales especies gaseosas que componen al gas de síntesis, utilizando madera como biomasa en gasificadores de lecho fijo y de lecho fluidizado.

### 1.5 Mecanismo de fluidización

Este mecanismo tiene lugar en gasificadores de lecho fluidizado, y sucede cuando la fuerza de arrastre o fuerza de fricción entre el gas con dirección ascendente que fluye por la superficie de la partícula se iguala al peso de esta, entonces, se dice que la partícula logra fluidizar. Este evento se produce debido a la velocidad de mínima fluidización con la que se ingresa el agente gasificante, así mismo, al incrementar la velocidad se logrará llegar a determinados regímenes explicados en el apartado 1.5.3. Así mismo, este mecanismo favorece a la transferencia de masa y energía entre las partículas sólidas del lecho y los gases.

Tabla 8. Comparativa de características de los tipos de gasificadores

Características	Gasificador de lecho fijo			Gasificador de lecho fluidizado	
	Updraft	Downdraft	Crossdraft	Burbujeante	Circulante
Tipo de biomasa	Moderado	Específico	Moderado	Flexible	Flexible
Temperatura de reacción	1000°C	1000°C	900°C	800°C	850°C
Mezclado del combustible	Pobre	Pobre	Pobre	Muy bueno	Excelente
Alquitrán en el gas	Muy alto	Muy bajo	Muy alto	Moderado	Bajo
Polvo en el gas	Moderado	Moderado	Alto	Muy alto	Muy alto
Potencial para escalar	Alto	Bajo	Bajo	Alto	Muy alto
Facilidad de control	Media	Media	Media	Muy bueno	Muy bueno
Conversión de carbón	Muy alto	Muy bajo	Bajo	Intermedio	Muy alto
Eficiencia térmica	Excelente	Alta	Media	Media	Alta
PCI del <i>syngas</i>	Bajo	Bajo	Bajo	Bajo	Medio

Fuente: Obtenida de Estremadoyro, (2015)

Tabla 9. Composición del *syngas* para diversos tipos de gasificadores usando madera

Composición del <i>syngas</i>	Lecho Fijo		Lecho Fluidizado	
	Updraft	Downdraft	Burbujeante	Circulante
<i>Tar</i> (mg/Nm <sup>3</sup> )	10-6000	10000-150000	-	2000-30000
PCI (MJ/Nm <sup>3</sup> )	4-5.6	3.7-5.1	3.7-8.4	3.6-5.9
H <sub>2</sub> (%)	15-21	10-14	5-16.3	15-22
CO (%)	10-22	15-20	9.9-22.4	13-15
CO <sub>2</sub> (%)	11-13	8-10	9-19.4	13-15
CH <sub>4</sub> (%)	1-5	2-3	2.2-6.2	2-4

Fuente: Obtenida de Mahmood AL-Farraj, (2017)

### 1.5.1 Clasificación de Geldart

La clasificación de Geldart es un criterio más para predecir el comportamiento de fluidización que presentan ciertos tipos de partículas en base a su diámetro promedio y a la diferencia de densidades de la partícula y el gas, esta relación se presenta en la Figura 19, donde se observan zonas que corresponden a cuatro diferentes grupos que se describen a continuación:

- **Grupo A**

Las partículas que pertenecen a este grupo presentan las mejores condiciones para fluidizar fácilmente a bajas velocidades. Usualmente, estos sólidos poseen bajas densidades, inferiores a  $1.4 \text{ g/cm}^3$  y tamaños de partícula intermedios (ver Figura 20) entre  $30$  y  $125 \mu\text{m}$ .

- **Grupo B**

Es el grupo que tiene partículas de tamaños adecuados ( $100$  y  $1000 \mu\text{m}$ ) para iniciar la formación de burbujas en gasificadores de lecho fluidizado, tan pronto como se supere la velocidad de mínima fluidización. Las partículas presentan un tamaño intermedio entre los grupos A y D (ver Figura 20), y su densidad es similar a las partículas de arena de sílice.

- **Grupo C**

Son llamadas también partículas cohesivas por presentar diámetros promedios muy finos (menores a  $30 \mu\text{m}$ ), por lo tanto, este grupo representa aquellas partículas que son difíciles de fluidizar porque las fuerzas entre partículas superan a las fuerzas de acción del agente gasificante (ver Figura 20), además la porosidad del lecho es muy baja. Para superar este inconveniente, se agregan al lecho sólidos del Grupo B.

- **Grupo D**

En este grupo se considera que existen partículas de gran tamaño, largas y densas (ver Figura 20). El mecanismo de fluidización se puede tornar difícil si la distribución del agente gasificante es irregular, además de requerir mayor energía en el gas debido al peso de las partículas, en consecuencia, se forman grandes burbujas que crean niveles o slugging.

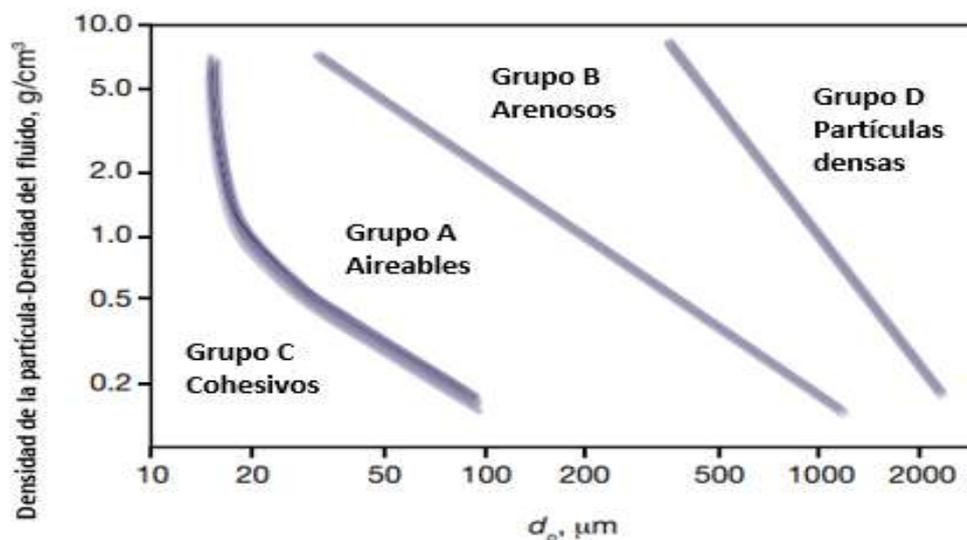


Figura 19. Clasificación Geldart de las partículas, para aire en condiciones ambientales

Fuente: Obtenido de Coco, Reddy Karri & Knowlton, (2014)

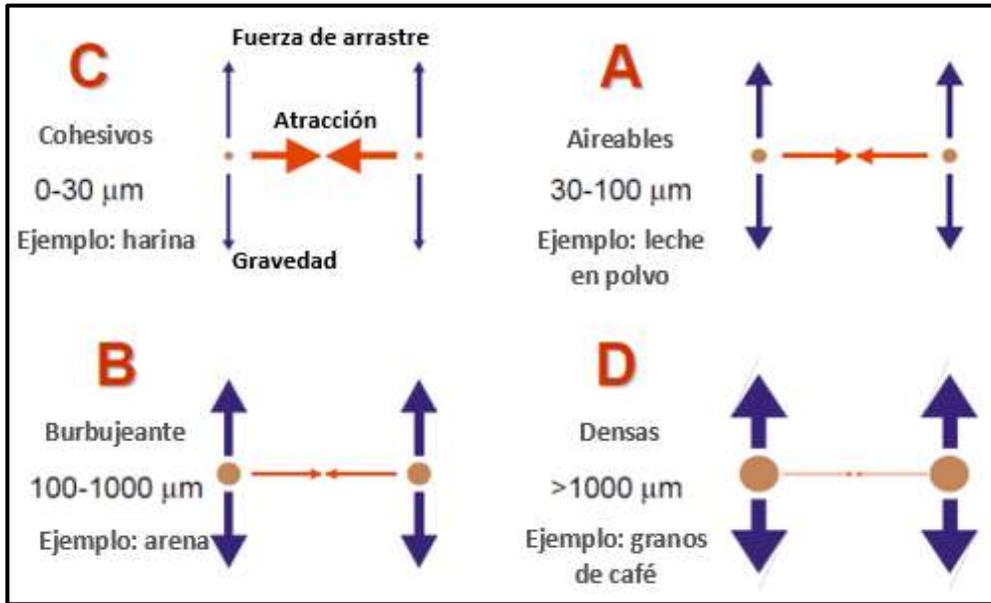


Figura 20. Esquema de las propiedades de las partículas según la Clasificación Geldart

Fuente: Obtenida de Mouronte, (2014)

### 1.5.2 Velocidad de mínima fluidización

Es aquella velocidad que permite mantener el lecho suspendido sin llegar a generar turbulencia o burbujas, ni la expansión significativa del lecho. Esta variable llamada también velocidad de fluidización incipiente, depende de las características del lecho, entre ellas destacan la esfericidad ( $\phi$ ) y la porosidad ( $\varepsilon$ ) que describen el comportamiento hidrodinámico bajo las condiciones de mínima fluidización, por ello deben formar parte de la ecuación del Número de Reynolds que a su vez forma parte en la estimación de la velocidad de mínima fluidización (Delebarre, 2004).

La simplificación de las ecuaciones semi-empíricas con respecto a las dos variables mencionadas anteriormente incurren en un error medio para la aproximación de la velocidad de mínima fluidización, sin embargo, en algunos casos puede ser válida. Para efectos prácticos de la presente investigación, se tomará en cuenta diferentes ecuaciones propuestas por los autores y en el Capítulo 3 se verá cuál es la mejor ecuación que se ajusta según los datos experimentales de la literatura consultada y a la convergencia del código MATLAB.

Autores como Kunii y Levenspiel (1991) proponen la Ecuación (12) de forma directa para estimar la velocidad de mínima fluidización asociando las características del lecho.

$$u_{mf} = \frac{d_p^2 (\rho_p - \rho_f) g}{150 \mu_f} \times \frac{\varepsilon_{mf}^3 \phi_s^2}{1 - \varepsilon_{mf}} \rightarrow Re_{mf} < 20 \quad (12)$$

Así mismo, autores como Gómez-Barea y Leckner (2010) estiman este parámetro de una forma simplificada (ver Ecuación 13), relacionando el Número de Reynolds en condiciones de mínima fluidización en función del Número de Arquímedes, tal y como se

describen en las Ecuaciones (18)-(21). No obstante, la Ecuación (13) también es válida cuando el Número de Reynolds está en función de las características físicas del lecho.

$$u_{mf} = Re_{mf} \left( \frac{\mu_f}{d_p \rho_f} \right) \quad (13)$$

En general, la predicción de este parámetro debe estar basado en las características del fluido y los sólidos del lecho. Además, esta velocidad es importante para la selección de equipos como los sopladores, que permiten generar un determinado caudal del medio gasificante para iniciar el régimen burbujeante.

**1.5.2.1 Número de Arquímedes.** Este número adimensional representa la relación entre las fuerzas gravitacionales y las fuerzas viscosas durante el movimiento de algún fluido. Para efectos del mecanismo de fluidización, se reemplazan ciertas variables de la ecuación original como: la longitud por el tamaño de partícula del lecho, y las densidades corresponden a los sólidos de la biomasa y al medio gasificante, obtenido la Ecuación (14).

$$Ar = d_p^3 \rho_f * g \frac{(\rho_p - \rho_f)}{\mu_f^2} \quad (14)$$

Donde:

- $d_p$ : Diámetro de partícula del lecho [m]
- $\rho_f$ : Densidad del agente fluidizante a la temperatura del lecho [ $kg/m^3$ ]
- $\rho_p$ : Densidad del material inerte del lecho [ $kg/m^3$ ]
- $g$ : Aceleración de la gravedad [ $m/s^2$ ]
- $\mu_f$ : Viscosidad dinámica del agente fluidizante [ $kg/m s$ ]

- **Cálculo de la viscosidad dinámica**

Para estimar este parámetro que es una propiedad del agente gasificante se usará la Ley de Sutherland. La Ecuación (15) relaciona la temperatura de un gas ideal junto con la constante de Sutherland que varía de acuerdo con el fluido evaluado (ver Tabla 10), logrando predecir el comportamiento de la viscosidad dinámica con un margen de error aceptable.

$$\mu = \mu_0 \left( \frac{T_0 + C_s}{T + C_s} \right) \left( \frac{T}{T_0} \right)^{1.5} \quad (15)$$

Donde  $T_0$  es la temperatura de referencia en Kelvin,  $\mu_0$  es la viscosidad dinámica a la temperatura de referencia en  $kg/m s$ , T es la temperatura del gas en Kelvin y  $C_s$  es la Constante de Sutherland en Kelvin.

Tabla 10. Constantes de Sutherland para diferentes gases

Gas	Aire	Nitrógeno	Oxígeno	Dióxido de Carbono	Monóxido de Carbono
$C_s$	120	111	127	240	118
Gas	Helio	Hidrógeno	Argón	Amoniaco gaseoso	Dióxido de azufre
$C_s$	79.4	72	165	370	416

Fuente: Obtenido de Wikipedia, (2019)

Para establecer el cálculo de la viscosidad dinámica del agente gasificante seleccionado para la presente investigación (aire), se ha tomado los valores de referencia a 273.15 K de la Tabla A-15 del libro Termodinámica de Yunus y Cengel, obteniendo la Ecuación (16) en función de la temperatura en Kelvin (T) del proceso de gasificación.

$$\mu = (1.729 \times 10^{-5}) \left( \frac{273.15 + 120}{T + 120} \right) \left( \frac{T}{273.15} \right)^{1.5} \quad (16)$$

- **Cálculo de la densidad del agente fluidizante**

Para estimar esta propiedad, utilizando aire como medio gasificante, se usará la Ecuación (17).

$$\rho_f = \frac{P}{R_{air} T} \quad (17)$$

Donde P es la presión del proceso en Pascales,  $R_{air}$  es la constante particular del aire igual a 286.9 J/kg K. Por último, T es la temperatura del aire en Kelvin que se considera igual a la temperatura del proceso de gasificación.

**1.5.2.2 Número de Reynolds bajo condiciones de mínima fluidización.** El Número de Reynolds permite caracterizar bajo qué régimen se encuentra un fluido<sup>6</sup>, ya sea laminar o turbulento. Para el proceso de gasificación en lechos fluidizados la formulación matemática para el Número de Reynolds será diferente, ya que tendrá que obedecer a las condiciones de mínima fluidización.

Algunas referencias relacionadas a la gasificación en lechos fluidizados de biomasa en régimen burbujeante consideran válidas las correlaciones simplificadas presentadas desde la

<sup>6</sup> Un fluido es aquella sustancia en fase líquida o en fase gaseosa que adopta la forma del recipiente que lo contiene.

Ecuación (18) hasta la Ecuación (21), donde muestran que dicho número es función únicamente del Número de Arquímedes,  $Re_{mf} = f(Ar)$ .

Según Wen y Yu (1966) para determinados tamaños de partículas:

$$Re_{mf} = \sqrt{33.7^2 + 0.0408Ar} - 33.7 \rightarrow (d_p < 100\mu m) \quad (18)$$

$$Re_{mf} = \sqrt{28.7^2 + 0.0494Ar} - 28.7 \rightarrow (d_p \geq 100\mu m) \quad (19)$$

Según Grace (1986) para régimen burbujeante:

$$Re_{mf} = \sqrt{27.2^2 + 0.0408Ar} - 27.2 \quad (20)$$

Según Richardson (1979) para una porosidad ( $\varepsilon_{mf}$ ) igual o cercana a 0.4:

$$Re_{mf} = \sqrt{25.7^2 + 0.0365Ar} - 25.7 \quad (21)$$

Donde:

$Re_{mf}$ : Número de Reynolds en condiciones de mínima fluidización [–]

$Ar$ : Número de Arquímedes [–]

$d_p$ : Diámetro de partícula del lecho [m]

En contraparte, otros autores defienden la postura que el Número de Reynolds debe estar en función de tres parámetros que definen por completo al sistema hidrodinámico en gasificadores de lecho fluidizado: el Número de Arquímedes, la porosidad del lecho a mínima fluidización (ver apartado 2.4.6.4) y la esfericidad,  $Re_{mf} = f(Ar, \varepsilon_{mf}, \phi_s)$ , con ello el error de cálculo disminuye y el valor se aproxima más a la realidad.

Por ejemplo, la Ecuación (22) propuesta por Delebarre (2004), relaciona la porosidad del lecho con la ecuación del Número de Reynolds propuesta por Wen y Yu (1966), ambas bajo condiciones de mínima fluidización. La validación de dicha ecuación se realizó con 85 datos experimentales para biomasa, obteniendo un 12% de desviación estándar.

$$24.5Re_{mf}^2 + 29.4\varepsilon_{mf}^3(1 - \varepsilon_{mf})Re_{mf} = Ar \quad (22)$$

En la literatura descrita por Kunii y Levenspiel (1991), se relaciona la ecuación de la caída de presión por fricción de Ergun (1952) para lechos fijos, con un análisis basado en

condiciones de mínima fluidización, dando origen a una formulación cuadrática para el cálculo del Número de Reynolds, descrita por la Ecuación (23).

$$\frac{1.75}{\varepsilon_{mf}^2 \phi_s} Re_{mf}^2 + \frac{150(1 - \varepsilon_{mf})}{\varepsilon_{mf}^3 \phi_s^2} Re_{mf} = Ar$$

Si se despeja el número de Reynolds a mínima fluidización:

$$Re_{mf} = \sqrt{\left(42.857 \frac{C_2}{C_1}\right)^2 + \frac{Ar}{1.75 C_1}} - 42.857 \frac{C_2}{C_1} \quad (23)$$

$$C_1 = \frac{1}{\phi_s \varepsilon_{mf}^3} \quad C_2 = \frac{(1 - \varepsilon_{mf})}{\phi_s^2 \varepsilon_{mf}^3}$$

Donde:

$\varepsilon_{mf}$ : Porosidad del lecho en condiciones de mínima fluidización [–]

$\phi_s$ : Esfericidad [–]

Para tener una noción de los resultados de las diferentes ecuaciones propuestas por los autores para el cálculo del Número de Reynolds en condiciones de mínima fluidización, se asumirá un caso hipotético con ciertos valores para los parámetros del lecho y del agente gasificante: temperatura de trabajo igual a 950 K, tamaño de partícula ( $d_p$ ) igual a 0.0034 m, densidad del agente gasificante (aire) a la temperatura de trabajo ( $\rho_f$ ) igual a 0.3705 kg/m<sup>3</sup>, densidad el material inerte del lecho ( $\rho_p$ ) igual a 935 kg/m<sup>3</sup>, viscosidad dinámica del aire a la temperatura de trabajo ( $\mu_f$ ) igual a 4.05 \* 10<sup>-05</sup> kg/m s, la porosidad del lecho a mínima fluidización ( $\varepsilon_{mf}$ ) igual a 0.5 y, por último, la esfericidad del material inerte ( $\phi_s$ ) igual a 0.9. Los resultados estimados cuando se conoce el Número de Arquímedes calculado con los datos anteriores ( $Ar \approx 81429$ ) se encuentran en la Tabla 11, por otro lado, en la Tabla 12 se estiman los valores del Número de Reynolds de mínima fluidización cuando se consideran otras características del lecho.

Tabla 11. Resultados obtenidos para el  $Re_{mf} = f(Ar)$

Referencia	Ecuación	$Re_{mf} = f(Ar)$
Wen y Yu (1966)	(19)	40.9152
Grace (1986)	(20)	36.5349
Richardson (1979)	(21)	34.5715

Tabla 12. Resultados obtenidos para el  $Re_{mf} = f(Ar, \epsilon_{mf}, \phi_s)$ 

Referencia	Ecuación	$Re_{mf} = f(Ar, \epsilon_{mf}, \phi_s)$
Delebarre (2004)	(1.14)	57.6135
Kunii y Levenspiel (1991)	(1.15)	52.3589

Los resultados obtenidos demuestran que al considerar las variables  $\epsilon_{mf}$  y  $\phi_s$  el Número de Reynolds de mínima fluidización aumenta, por lo tanto, la velocidad del agente gasificante debe incrementar.

### 1.5.3 Regímenes de fluidización

El mecanismo de fluidización (ver apartado 1.5) depende estrictamente de la velocidad con la que ingresa el medio o agente gasificante al reactor. La clasificación de estos regímenes o mecanismos sólido-gaseoso se muestran en la Figura 21, además, se observa el comportamiento del lecho en cada caso. El primer tipo o régimen de fluidización se caracteriza por tener una velocidad de ingreso del agente muy baja, en comparación a la velocidad de mínima fluidización, por ello, el gas se filtrará por los intersticios de las partículas sólidas sin generar movimiento visible (ver Figura 21a). Por el contrario, si el medio gasificante ingresa a la velocidad de mínima fluidización, las partículas sólidas se mantendrán suspendidas, permitiendo que la altura del lecho aumente ligeramente (ver Figura 21b), además, el comportamiento de los sólidos en este punto adquiere las características de un fluido gaseoso.

La Figura 21c muestra el comportamiento de un lecho fluidizado homogéneo, donde el mecanismo de fluidización es provocado por el ingreso de un caudal de líquido a una velocidad por encima de la velocidad de mínima fluidización, además, se observa una altura final del lecho mayor en comparación a la Figura 21b, donde las partículas sólidas tienen mayor separación. El comportamiento de los sistemas gas-sólido a velocidades mayores de mínima fluidización, tema de estudio de esta investigación, presentan diferencias como burbujeo, turbulencia o formación de planos. El burbujeo se produce por acción de la velocidad de ingreso del gas, explicado anteriormente, que pasa por un distribuidor de flujo permitiendo la formación de burbujas de tamaños moderados (ver Figura 21d) que crecen por coalescencia, así mismo, este efecto de burbujeo o borboteo permite un contacto eficiente entre partículas sólidas y gas durante el proceso de gasificación.

Para reactores de diámetro pequeño y gran longitud, ocurre un fenómeno conocido como *slugging* (ver Figura 21e), donde el tamaño de las burbujas coalescentes llega a superar el diámetro interno del reactor, y las partículas sólidas de mayor tamaño ascienden rápidamente mientras que las de menor tamaño caen como una lluvia por las paredes del reactor (durante el proceso de gasificación se desintegran rápidamente). Un caso similar ocurre cuando las partículas sólidas tienen tamaños grandes, por ejemplo, la Figura 21f muestra el fenómeno de *slugging* con formación de planos o camas, esto ocurre por el

crecimiento rápido de la burbuja así como por la cantidad de material sólido que tiene en la parte superior, por ello, cuando la burbuja se rompe genera un mecanismo de empuje tipo pistón que lleva los sólidos a cierta distancia, formándose un piso que desaparece a cierta altura del reactor, después de ello, se vuelve a repetir el mismo proceso.

Si se supera ampliamente la velocidad de mínima fluidización se corre el riesgo de generar un flujo turbulento al interior del reactor (ver Figura 21g), donde las partículas sólidas serán arrastradas fuera del reactor. El caso extremo del mecanismo de fluidización se observa en la Figura 21h, donde la velocidad del fluido es mayor que en el caso anterior (fluidización turbulenta) provocando el transporte neumático de los sólidos fuera del reactor, quedando prácticamente con un pequeño porcentaje de material sólido suspendido.

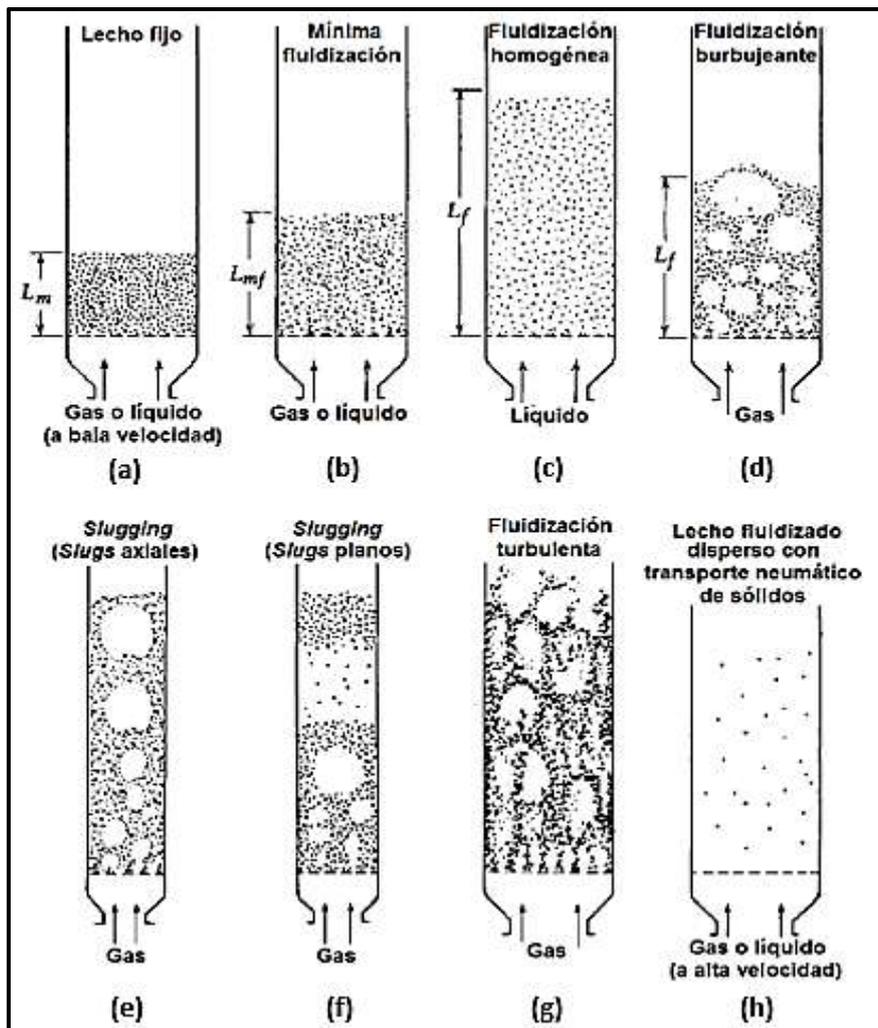


Figura 21. Tipos de contacto de un sólido con un fluido al interior de un reactor

Fuente: Obtenido de Kunii & Levenspiel, (1991)

#### 1.5.4 Tipos de agente gasificante

La selección del agente gasificante tendrá un efecto significativo sobre la calidad energética del gas de síntesis durante la gasificación. Entre los principales agentes gasificantes

utilizados en diversas literaturas se tiene: aire, oxígeno, vapor de agua, hidrógeno, catalizadores o una mezcla en proporción de estos gases para mejorar algunas características del gas producido durante la gasificación. Sin embargo, esto conlleva a establecer una relación económica y energética entre los sistemas auxiliares del gasificador si se utilizan dichos fluidos con respecto a la cantidad y calidad del gas producido.

A continuación, se presenta en la Tabla 13 un cuadro comparativo entre los principales agentes gasificantes encontrados.

Tabla 13. Tipos de agentes gasificantes y características durante el proceso de gasificación

Aire	Vapor de agua	Oxígeno
- Se obtiene de forma directa, por lo tanto, no hay un costo de generación.	- Necesita una fuente de energía externa para el cambio de estado.	- Se utiliza en la gasificación directa.
- El gas de síntesis presenta bajos niveles de hidrógeno.	- Incrementa el contenido de hidrógeno del gas de síntesis.	- El costo aumenta considerablemente.
- El PCI del gas de síntesis resultante está entre 4 y 7 $MJ/Nm^3$ .	- El PCI del gas de síntesis resultante está entre 15 y 20 $MJ/Nm^3$ .	- El PCI del gas de síntesis resultante está entre 10 y 12 $MJ/Nm^3$ .

**1.5.4.1 Aire y oxígeno.** El empleo de estos gases permite conseguir que el proceso de gasificación dentro del reactor sea autotérmico (Romero, 2010), es decir, que la reacción de gasificación se puede mantener o auto sustentar debido a la energía aportada por el oxígeno en la combustión parcial. El inconveniente es el costo de producción y generación de oxígeno. Vapor de agua. Utilizar vapor como agente gasificante produce que la temperatura del lecho se reduzca y además promueve o aumenta la generación de hidrógeno y monóxido de carbono.

**1.5.4.2 Aire/oxígeno y catalizadores.** El uso de catalizadores<sup>7</sup> integrado al aire u oxígeno mejora la calidad del gas de síntesis, sin embargo, su uso no es necesario para el proceso de gasificación (Acevedo, Zapata, Arenas, & Posso, 2019). La principal ventaja de su uso es la eliminación total de alquitranes u otros gases indeseados y el aumento del contenido de hidrógeno ( $H_2$ ).

**1.5.4.3 Hidrógeno.** El hidrógeno como medio gasificante permite obtener un gas de síntesis con un contenido energético similar al del gas natural, hasta 30  $MJ/Nm^3$ . Sin embargo, el costo de este gas es elevado, por ello solo es utilizado en reactores de laboratorio (De Lucas Herguedas, y otros, 2012), en general, no se recomienda su uso.

<sup>7</sup> Es una sustancia que puede ser añadida a un proceso para acelerar las velocidades de reacción química, mediante la disminución de la energía de activación, y estos deben ser desactivados mediante ciertos procesos una vez obtenido el beneficio.

## Capítulo 2 Modelación matemática

### 2.1 Tipos de modelación matemática para gasificación

Los modelos matemáticos han llevado a simplificar y entender ciertos procesos, por ejemplo, físicos, químicos, eléctricos, que son muy complejos en la realidad. Un modelo matemático se puede definir como un conjunto de ecuaciones que relacionan variables conocidas para lograr describir cierto comportamiento que acontece en la realidad. En este sentido, se analizan los tipos de modelos para la tecnología de gasificación de lechos fluidizados.

#### 2.1.1 *Black box models*

Este tipo de modelos no determinan el comportamiento al interior del reactor, ya que solo existen inputs y outputs y todo el proceso se realiza dentro de una caja negra. Para determinar las salidas del proceso se usan balances de masa o calor generalizados alrededor del reactor, además, la cinética de las reacciones se determina mediante equilibrios químicos que no consideran la hidrodinámica del lecho.

**2.1.1.1 Multi-box.** Es un tipo de modelación matemática en cascada, es decir, que se utiliza el concepto de caja múltiple para dividir las etapas del proceso de gasificación en cajas negras pequeñas o sub cajas, basadas en el equilibrio térmico. Este método no requiere del entendimiento o conocimiento de todo el mecanismo complejo de gasificación, en otras palabras, no considera la hidrodinámica del lecho ni la cinética de las reacciones químicas, además, posee la gran ventaja de no necesitar un código robusto ni sistemas que requieran de gran memoria o tiempos grandes de compilación (Vakalis, Patuzzi, Prando, & Baratieri, 2014). La Figura 22 muestra la lógica de solución del modelo multi-box, donde la entrada es la composición elemental del combustible o biomasa y la entalpía de formación, y cada cuadro representa un sistema de caja negra o black-box para las etapas del proceso de gasificación (ver apartado 1.3), que será resuelto en paralelo y en forma secuencial, para obtener finalmente la composición del gas de síntesis.

#### 2.1.2 *Modelos basados en la Dinámica de fluidos computacional (CFD)*

Este modelo es ampliamente utilizado para diversos procesos de simulación, por ejemplo, para simulaciones aerodinámicas, hidráulicas, entre otras. La complejidad de la solución está limitada por el mallado o tamaño geométrico y el tiempo de simulación. La Figura 23 muestra las condiciones de contorno y mallado para un reactor de lecho fluidizado

burbujeante, en donde la simulación por CFD utiliza ecuaciones de conservación de masa y cantidad de movimiento para describir la hidrodinámica del lecho, además, puede seguir modelos de comportamiento del agente gasificante como flujo laminar o flujo turbulento, y junto con las condiciones de contorno y demás ecuaciones o parámetros de entrada, este método puede obtener detalles físicos en 3D para analizar el comportamiento del gasificador, que están determinados por un rango de tiempo de simulación bastante corto

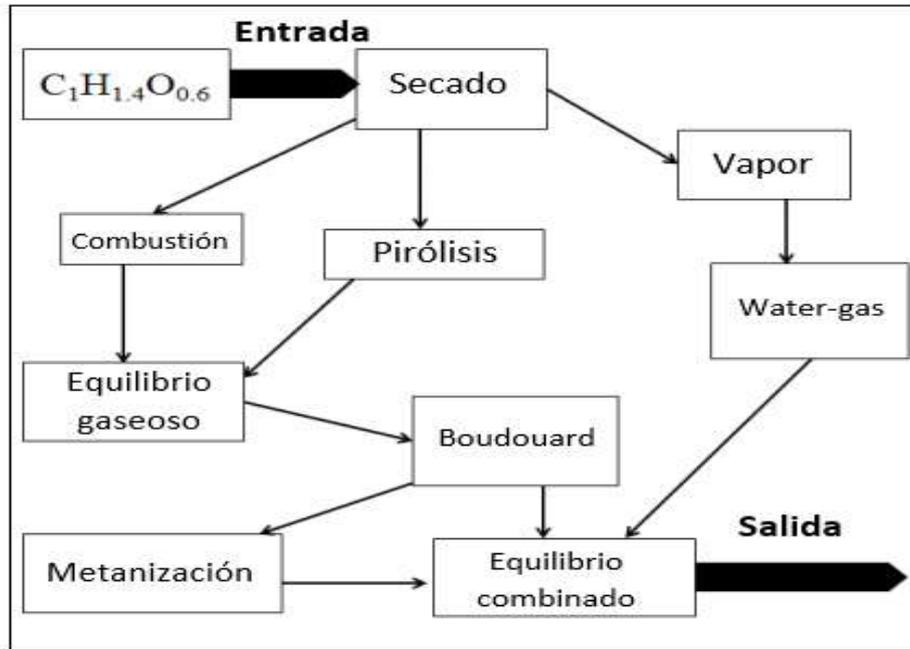


Figura 22. Esquema de solución conceptual multi-box

Fuente: Obtenido de Valkalis, Patuzzi, Prando & Baratieri, (2014)

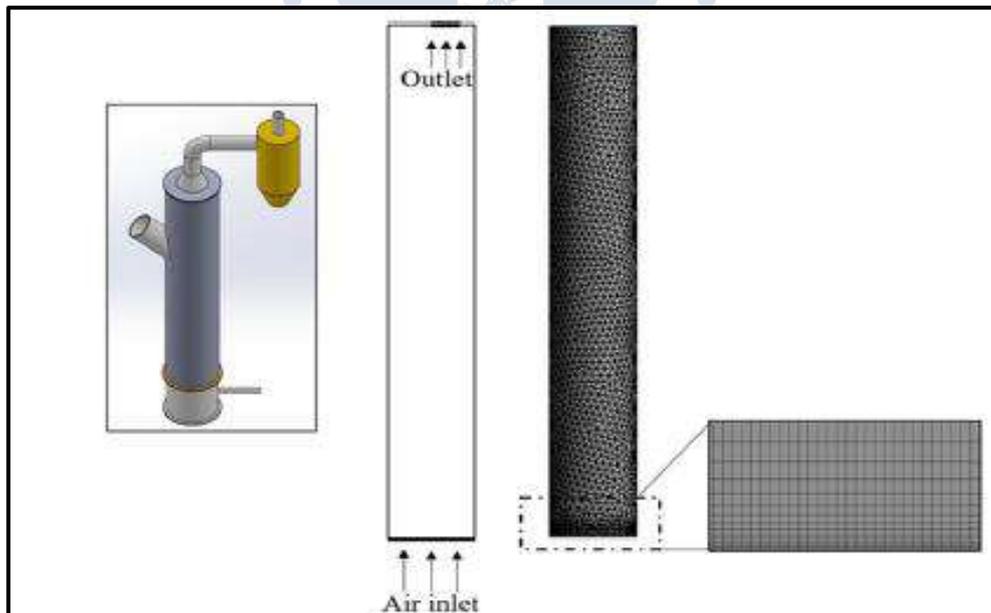


Figura 23. Zonas de contorno y mallado inicial para un lecho estático

Fuente: Obtenido de Khezri et al, (2019)

### 2.1.3 Modelos de fluidización

Los modelos de fluidización o fluidodinámicos son los de mayor complejidad, pues asumen un patrón multifásico (bifásico o trifásico) de lecho fluidizado, y esto dependerá de las condiciones o resultados que se quieran obtener. En la actualidad, este tipo de modelación ha mejorado con respecto a las fases para describir el proceso de gasificación mediante ecuaciones semi-empíricas. Esto es reflejado al estimar o calcular la división del flujo de gas entre fases, la fracción de volumen ocupado por las burbujas en el lecho, la porosidad de las partículas, la velocidad superficial del agente gasificante, tamaño de la burbuja, entre otros (Gómez Barea & Leckner, 2010). Autores como Davidson (1995), Kunii & Levenspiel (1991) introdujeron las características mencionadas con anterioridad.

Este tipo de modelación, además, permite obtener un modelo unidimensional en estado estable y régimen permanente, es decir, que el sistema de alimentación de biomasa debe funcionar en todo momento para asegurar las reacciones químicas gas-sólido al interior del reactor. Así mismo, la dinámica de fluidos de este modelo se basa en la Teoría de las dos Fases (emulsión y burbuja), además, permite modelar el sistema trifásico utilizado por algunos autores, donde se considera una tercera fase llamada cloud (Kunii & Levenspiel, 1991) que analiza las interacciones del tipo gas-gas en la región del freeboard del gasificador. El esquema para la modelación trifásica se describe en la Figura 24, donde inicia con una serie de ecuaciones empíricas que describen el comportamiento de cada etapa del proceso de gasificación: pirólisis, conversión de los sólidos carbonosos y por último la etapa de reacciones gas-gas.

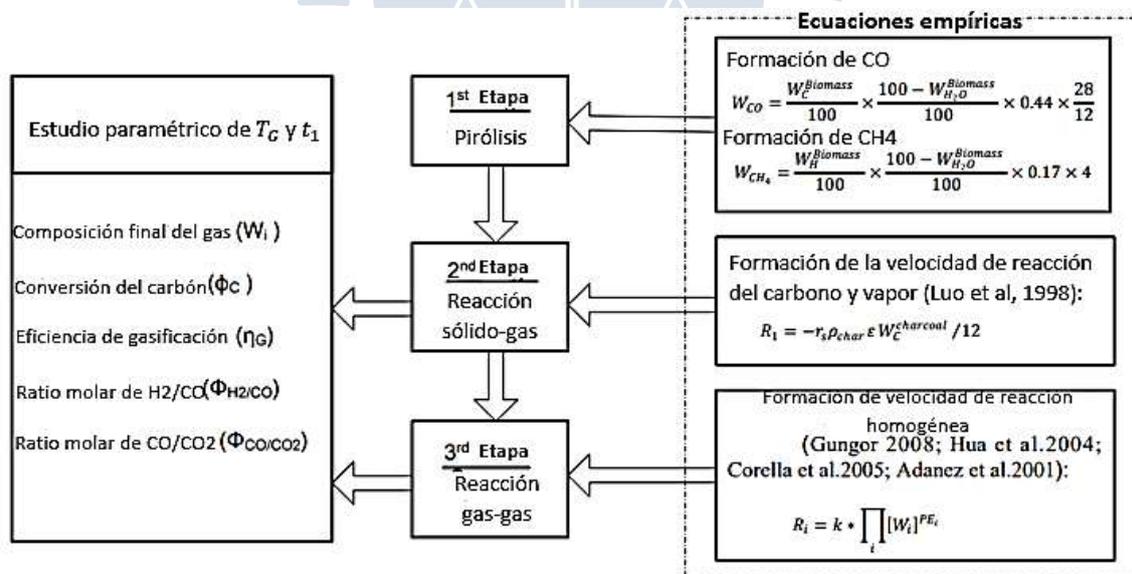


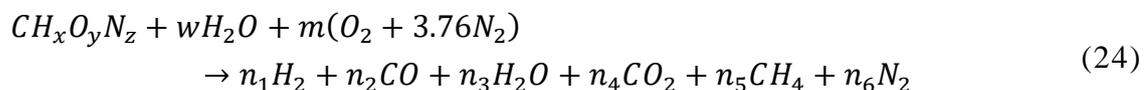
Figura 24. Esquema del estudio paramétrico del modelo trifásico

Fuente: Obtenido de Chao et al, (2014)

### 2.1.4 Modelación de equilibrio estequiométrico

La modelación de equilibrio estequiométrica como su propio nombre lo dice, se basa en las constantes de equilibrio de las reacciones químicas durante el proceso de gasificación, y

se formula mediante una única ecuación de reacción de gasificación global. La Ecuación (24) demuestra lo mencionado anteriormente, y se traduce de la siguiente forma; un mol de biomasa en “m” moles de aire reacciona en una combustión completa más la humedad (agua) contenido en la biomasa.



**Donde:**

- $n_1 - n_6$  : Coeficientes estequiométricos  
 $x$  : Número de átomos de hidrógeno presentes en la biomasa  
 $y$  : Número de átomos de oxígeno presentes en la biomasa  
 $z$  : Número de átomos de nitrógeno presentes en la biomasa  
 $w$  : Cantidad de humedad molar presente en la biomasa

Acto seguido, se deben formular los balances estequiométricos (ver Ecuaciones 25-28) de los principales compuestos elementales de la biomasa. Luego, se definen las constantes de equilibrio mediante una adecuada selección de las reacciones químicas durante el proceso de gasificación (boudouard, reacción endotérmica agua-gas, metanización, etc.), esto determinará la composición del gas de síntesis, finalmente se aplica un balance de energía conociendo la temperatura del proceso (se considera un reactor adiabático), toda esta lógica se representa en la Figura 25 de forma esquemática, y el método iterativo de solución de todas las incógnitas es por Newton-Rapson (Ferreira, Monteiro, Brito, & Vilarinho, 2019).

$$C \rightarrow n_2 + n_4 + n_5 = 1 \quad (25)$$

$$H \rightarrow 2n_1 + 2n_3 + 4n_5 = x + 2w \quad (26)$$

$$O \rightarrow n_2 + n_3 + 2n_4 = y + w + 2m \quad (27)$$

$$N \rightarrow 2n_6 = z + 7.52m \quad (28)$$

### 2.1.5 Modelación de equilibrio no estequiométrico

El modelo no estequiométrico se basa en minimizar la Energía Libre de Gibbs (mediante multiplicadores de Lagrange) para determinar las constantes de equilibrio de un

conjunto de reacciones químicas que pueden ser conocidas o no. El enfoque conceptual de modelación matemática es similar que, en el caso estequiométrico, con la diferencia que no existe una reacción química global.

## 2.2 Selección del modelo matemático

Si se considera analizar los diferentes parámetros que intervienen en el proceso de gasificación de lecho fluidizado burbujeante, relacionándolos con ecuaciones semi-empíricas propuestas por diferentes literaturas, y, además, relacionar la altura del reactor con la evolución de las especies volátiles liberadas en el proceso de gasificación, es conveniente utilizar el modelo de fluidización mediante dos métodos conocidos: modelos de equilibrio o modelos cinéticos, la clasificación de estos modelos se puede observar en la Figura 26. Se utilizará el modelo cinético al ser más aproximado a la realidad; mediante la teoría de las dos fases.

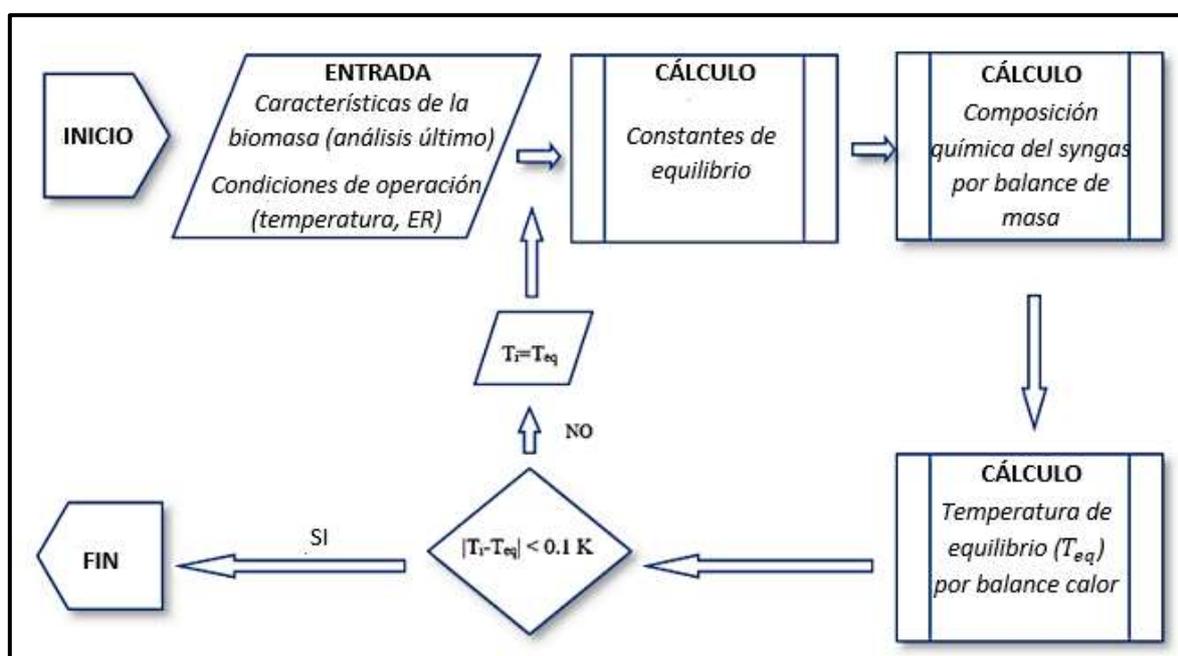


Figura 25. Diagrama de flujo del modelo estequiométrico

Fuente: Obtenido de Ferreira, Monteiro, Brito & Vilarinho, (2019)

### 2.2.1 Teoría de las dos fases

Los modelos matemáticos de forma unidimensional propuestos en algunas literaturas sobre la gasificación de un lecho burbujeante se pueden desarrollar de dos formas: con la teoría de las dos fases (emulsión y burbuja) o con la separación de dos zonas del reactor (zona inferior del lecho denso, donde se analiza la teoría de las dos fases, zona superior o *freeboard*, y la zona de salida). Para efectos prácticos, la influencia del *freeboard* no será tomada en consideración, ya que su análisis no afecta significativamente a los valores de las concentraciones de las especies volátiles obtenidas del *syngas*. Esta investigación abarca el estudio de la teoría de las dos fases y las diferentes propuestas que tienen algunos autores para su modelado.

La metodología seleccionada asume que hay un exceso de flujo gaseoso con respecto a una fluidización incipiente. Además, se basa en: modelos cinéticos para describir el comportamiento y evolución de las diferentes reacciones de equilibrio que ocurren en las etapas de la gasificación, utiliza balances de masa y energía, por último, se basa en la descripción de la hidrodinámica del lecho durante la fluidización en régimen burbujeante.

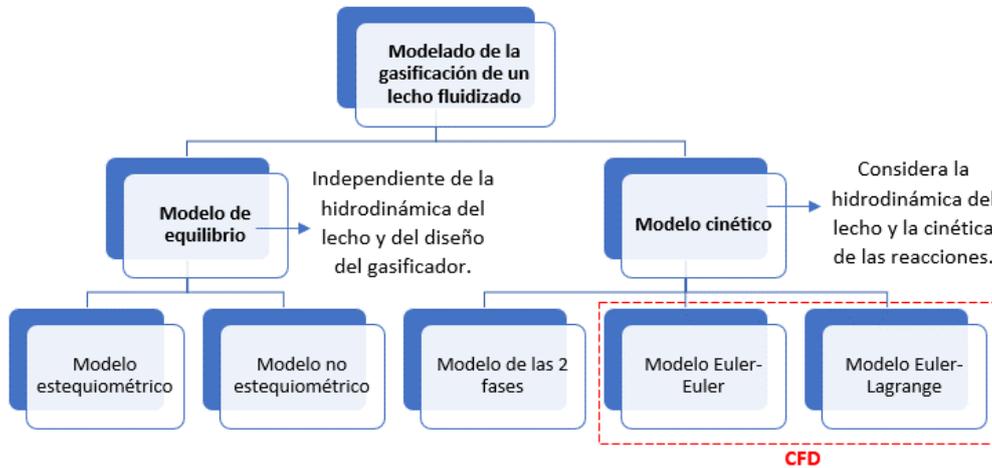


Figura 26. Clasificación de la modelación de lechos fluidizados

Fuente: Basado en Loha et al, (2014)

### 2.3 Hipótesis para el modelo matemático seleccionado

- La temperatura del lecho es constante, debido al régimen burbujeante, explicado en el apartado 1.4.2.1. Para efectos de la simulación, se tomará un comportamiento isotérmico en todo el reactor.
- Las propiedades geométricas y físicas como esfericidad, densidad o tamaño de partícula del lecho son referidas para el material inerte.
- Se analiza la biomasa solo por su composición elemental (C, H, O, N) para efectos del cálculo de las fracciones de material volátil.
- Se asume que todas las burbujas tienen una forma casi esférica para trabajar con un diámetro promedio (ver Figura 27) a lo largo de la sección transversal del reactor, esto permite que durante la simulación se obtienen diámetros de burbuja promedio en cada piso del reactor.
- Algunas ecuaciones de la gasificación del carbón guardan relación si se utiliza la biomasa como medio combustible.
- Se considera que no hay intercambio de calor con el exterior, por lo tanto, el reactor es adiabático.
- El tiempo de residencia de las partículas es lo suficientemente grande para asegurar la conversión de la biomasa.
- No se evalúa la producción de alquitranes, ni la pirólisis primaria donde ocurren mezclas complejas de compuestos oxigenados como ácido acético, metanol, debido a que su

formación es insignificante en relación con las proporciones de las especies volátiles que componen al gas de síntesis ( $CO$ ,  $CO_2$ ,  $H_2O$ ,  $H_2$ ,  $O_2$ ,  $CH_4$ ,  $N_2$ ).

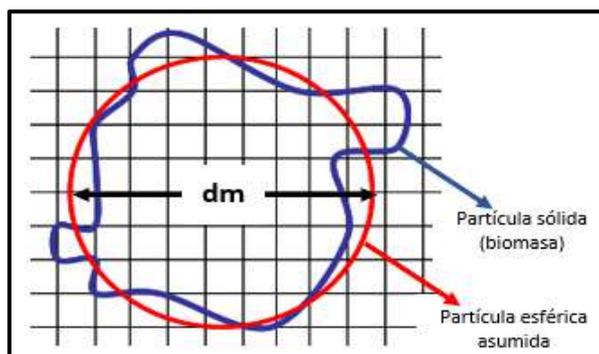


Figura 27. Partícula esférica asumida para el modelo matemático

Fuente: CONICET Bahía Blanca, (2007)

- i) Las burbujas están libres de sólidos en su interior, sin embargo, se toma en cuenta una fase emulsión para el análisis de las reacciones gas-sólidos.
- j) Las etapas de secado y devolatilización ocurren de forma instantánea a la altura del sistema de alimentación de biomasa (Fatehi, 2014). A una altura inferior, se considera que no hay formación de los productos de gasificación. Esto se sustenta en la Figura 28, donde se obtuvo de forma experimental los frentes o zonas de secado y devolatilización para diferentes tamaños de partícula con respecto al tiempo en que ocurre estas etapas de forma aproximada. Se observa que la zona o frente de secado ocurre dentro de los primeros 25 s, después ocurre el frente de devolatilización a un tiempo mayor.

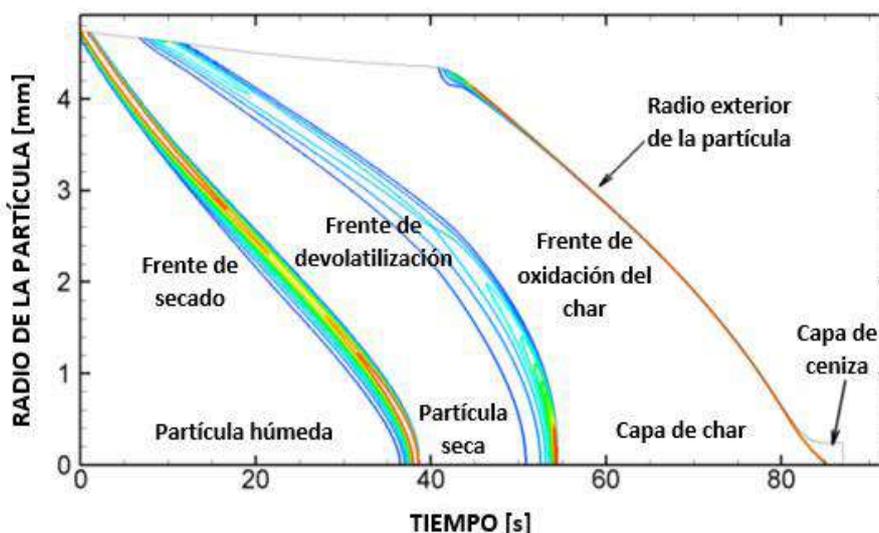


Figura 28. Propagación de frentes de reacción durante la conversión de biomasa

Fuente: Obtenido de Fatehi, (2014)

- k) Las propiedades del agente gasificante permanecen constantes a lo largo de todo el reactor.

- l) Las fases emulsión y burbuja ocurren a lo largo de la altura del reactor ( $z$ ). Se considera esto para la continuidad de los cálculos matemáticos en todos los pisos discretizados del reactor.
- m) Todas las reacciones químicas llegan al equilibrio térmico (Alves Moya, 2017).
- n) Los gases liberados durante el proceso de gasificación que rodean y penetran las partículas sólidas obedecen a la Ley de los Gases Ideales.
- o) Se asume una proporción de equilibrio con respecto a la interacción de gases, donde la mitad del flujo total reacciona en cada fase (emulsión y burbuja).
- p) Todo el oxígeno presente en el agente gasificante se consume en la etapa de combustión y en la producción de vapores condensable en la etapa de pirólisis (Alves Moya, 2017).
- q) El carbón producido y las cenizas serán arrastradas fuera del lecho y del reactor por acción de los gases, además, se asume una adecuada conversión del carbón o char durante la pirólisis a la temperatura de operación.

## 2.4 Descripción del modelado de la fase burbuja y fase emulsión

En la fase burbuja existe una interacción del tipo gas-gas, esto quiere decir que los gases liberados durante la devolatilización de la biomasa interactúan con el gas del agente gasificante para la formación y coalescencia de las burbujas, además, ayuda a la transferencia de energía entre el gas del proceso y las partículas sólidas durante la fase emulsión o también llamada fase densa. Ambas fases interactúan entre sí, pero están gobernadas por diferentes ecuaciones y reacciones químicas, y en cuanto al modelado de la fase burbuja es necesario decir que se basa en analizar las propiedades individuales de las burbujas.

Para un mejor entendimiento del modelado de ambas fases, la Figura 29 muestra el principio esquemático de esta teoría, iniciando con caudal  $Q$  de aire que es inyectado en dirección ascendente y con una velocidad ascendente  $U$ , esto permite que una fracción del flujo o caudal pueda producir la fase burbuja ( $Q_b$ ) y fase emulsión ( $Q_e$ ), cada una con sus características. Para un mejor entendimiento del esquema de solución de la Teoría de las Dos Fases es necesario consultar el Capítulo 3. A continuación, se explican las ecuaciones que gobiernan los diversos mecanismos que ocurren durante el proceso de gasificación, modelado mediante dicha teoría.

### 2.4.1 Modelo cinético de las reacciones químicas en ambas fases

La conversión de la biomasa en un gas de síntesis involucra ciertas reacciones químicas complejas que pueden suceder de forma paralela o en serie (Gómez, Klose, Rincón, & Wiest, 2004), principalmente gobernadas por la temperatura del proceso, además, están influenciadas por la composición orgánica e inorgánica del combustible (biomasa) y por el tipo de reactor, por ello, se puede afirmar que no existe una estequiometría exacta durante el proceso de gasificación (Sánchez, Gallardo, & Edo, 2014). Sin embargo, para representar las reacciones dentro de un modelo matemático en el proceso de gasificación estas se dividen en dos tipos de reacciones: homogéneas y heterogéneas.

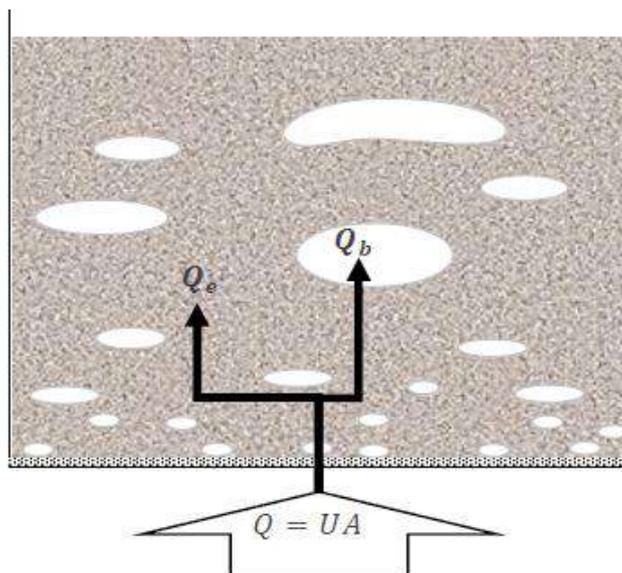


Figura 29. Esquema de la teoría de las dos fases  
Fuente: Obtenido de Cluet, (2014)

Las reacciones heterogéneas del tipo gas-sólido ocurren en la fase emulsión y las reacciones del tipo homogéneas (gas-gas) suceden en ambas fases. De acuerdo con ciertos modelos matemáticos y resultados experimentales, las reacciones del tipo heterogéneas son más lentas en comparación con las reacciones homogéneas durante la gasificación.

Con respecto a las velocidades de reacción, estas se asocian a los valores de las concentraciones molares de las especies volátiles para estimar su variación durante el proceso de gasificación. En términos generales la velocidad de reacción se puede representar mediante la siguiente relación y ecuación de Arrhenius:



$$r_n = K_h C_i = -A^* e^{\left(\frac{-E_A}{RT}\right)} C_{i1}^{\zeta} C_{i2}^{\vartheta} C_{i3}^{\gamma} \quad (30)$$

Donde:

$E_A$ : Energía de activación [J/mol] o [cal/mol]

$A^*$ : Factor pre – exponencial<sup>8</sup> [1/s] o [ $m^3/\text{mol s}$ ] o [ $(\text{mol}/m^3)^m s^{-1}$ ]

$R$ : Constante universal de los gases ideales [J/mol K] o [cal/mol K]

$C_i$ : Concentración molar de especies volátiles [ $\text{mol}/m^3$ ]

<sup>8</sup> El término “m” hace referencia a la resta de los valores de los exponentes que tienen las concentraciones de las especies ( $m = 1 - \zeta - \vartheta - \gamma$ ) para obtener las unidades en  $\text{mol}/m^3 s$  de la velocidad de reacción. Para más información se recomienda revisar Gómez-Barea & Leckner (2010). *Progress in Energy and Combustion Science*, 36, 444-509, p. 487.

$T$ : Temperatura del proceso [K]

$r_n$ : Velocidad de reacción [ $mol/m^3 s$ ]

**2.4.1.1 Reacciones homogéneas.** Autores como Dryer y Glassman (1973) proponen velocidades cinéticas para algunas reacciones homogéneas en reactores de flujo turbulento, que han sido adaptadas con los años por otros autores para describir la cinética de las reacciones en gasificadores de lecho burbujeante alimentados por biomasa. Las ecuaciones presentadas en las tablas determinan la velocidad de reacción química, que dan una noción de que tan rápido ocurren durante el proceso de gasificación.

En la Tabla 14 se muestra una recopilación de las diferentes formulaciones, desde la Ecuación (31) hasta la Ecuación (33) para determinar la velocidad de reacción química de la oxidación del metano, donde el producto dominante es el vapor de agua y el producto secundario es la generación de dióxido de carbono.

Tabla 14. Velocidades de reacción para la oxidación del metano (R1)

$CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$ (R1)			
Velocidad de reacción ( $mol/m^3 s$ )	$E_A$	Fuente	Ecuación
$r_{R1} = k_{CO} C_{O_2} C_{CO}^2$ (modif.)		(Yan, Heidenreich, & Zhang, 1997)	(31)
$k_{CO} = 2.402 * 10^{-12} \exp\left(\frac{-21137}{T} + 24.744\right) T^3$	-		
Velocidad de reacción ( $mol/m^3 s$ )	$E_A$	Fuente	
$r_{R1} = 1.585 * 10^{10} e^{\left(\frac{-202505}{RT}\right)} C_{CH_4}^{0.7} C_{O_2}^{0.8}$	[J/mol]	(Bates <i>et al</i> , 2017)	(32)
Velocidad de reacción ( $mol/m^3 s$ )	$E_A$	Fuente	
$r_{R1} = 1.58 * 10^{10} e^{\left(\frac{-203000}{RT}\right)} C_{O_2} C_{CH_4}$	[J/mol]	(Gómez Barea & Leckner, 2010)	(33)

Las velocidades de reacción propuestas por diversos autores para la oxidación del monóxido de carbono cuyo el producto es la formación de dióxido de carbono, se presentan en la Tabla 15, desde la Ecuación (34) hasta la Ecuación (37) . En la parte superior se han colocado las dos formas diferentes mayormente utilizadas para representar la ecuación química de oxidación (R2), pero esto no influye significativamente en la formulación de las velocidades de reacción.

La tercera reacción química de oxidación (R3) se muestra en la Tabla 16. Esta reacción contribuye al flujo neto solo en la fase emulsión (Tosina Fernández, 2013). Además,

es recomendable que no se consuma gran cantidad de hidrógeno, pues disminuye la calidad del gas de síntesis. Así mismo, se muestran las velocidades de reacción desde la Ecuación (38) hasta la Ecuación (42), encontradas en diversas literaturas.

La reacción química observada en la Tabla 17 aumenta la proporción de hidrógeno en el gas de síntesis, por ello es muy deseable tener un gran rendimiento, además, depende fuertemente de la temperatura del proceso. Basu (2013) menciona que a temperaturas menores de  $1000^{\circ}\text{C}$  la reacción R4 tiene un mayor equilibrio constante, por ende, un mayor rendimiento de  $\text{H}_2$ , y al aumentar la temperatura el rendimiento disminuye. Las velocidades de reacción se pueden calcular con la Ecuación (43) o la Ecuación (44).

Tabla 15. Velocidades de reacción para la oxidación del monóxido de carbono (R2)

$2\text{CO} + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{CO}_2 \wedge \text{CO} + 0.5\text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2$ (R2)			
Velocidad de reacción ( $\text{mol}/\text{m}^3\text{s}$ )	$E_A$	Fuente	Ec.
$r_{R2} = 1.259 * 10^{10} e^{\left(\frac{-40000}{RT}\right)} C_{\text{CO}} C_{\text{O}_2}^{0.25} C_{\text{H}_2\text{O}}^{0.5}$	[cal/mol]	(Groppi, Tronconi, Forzatti, & Berg, 2000)	(34)
Velocidad de reacción ( $\text{mol}/\text{m}^3\text{s}$ )	$E_A$	Fuente	
$r_{R2} = 1.093 * 10^6 e^{\left(\frac{-66900}{RT}\right)} C_{\text{CO}} C_{\text{O}_2}^{0.3} C_{\text{H}_2\text{O}}^{0.5}$	[J/mol]	(Gómez Barea & Leckner, 2010)	(35)
Velocidad de reacción ( $\text{mol}/\text{m}^3\text{s}$ )	$E_A$	Fuente	
$r_{R2} = 1 * 10^7 e^{\left(\frac{-126000}{RT}\right)} C_{\text{CO}} C_{\text{O}_2}^{0.5} C_{\text{H}_2\text{O}}^{0.5}$	[J/mol]	(Gómez Barea & Leckner, 2010)	(36)
Velocidad de reacción ( $\text{mol}/\text{m}^3\text{s}$ )	$E_A$	Fuente	
$r_{R2} = k_{\text{CO}} C_{\text{CO}_2} C_{\text{CO}}^2$	-	(Yan, Heidenreich, & Zhang, 1997)	(37)

Tabla 16. Velocidades de reacción para la oxidación del hidrógeno (R3)

$2\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{H}_2\text{O} \wedge \text{H}_2 + 0.5\text{O}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}$ (R3)			
Velocidad de reacción ( $\text{mol}/\text{m}^3\text{s}$ )	$E_A$	Fuente	Ecuación
$r_{R3} = 2.196 * 10^{18} e^{\left(\frac{-26100}{RT}\right)} C_{\text{H}_2} C_{\text{O}_2}$	[cal/mol]	(Gungor, 2011)	(38)
Velocidad de reacción ( $\text{mol}/\text{m}^3\text{s}$ )	$E_A$	Fuente	

$r_{R3} = 1.8 * 10^{10} e^{\left(\frac{-146408}{RT}\right)} C_{H2} C_{O2}^{0.5}$	[J/mol]	(Bates <i>et al</i> , 2017)	(39)
Velocidad de reacción ( $mol/m^3s$ )	$E_A$	Fuente	
$r_{R3} = 2.2 * 10^6 e^{\left(\frac{-109000}{RT}\right)} C_{H2} C_{O2}$	[J/mol]	(Gómez Barea & Leckner, 2010)	(40)
Velocidad de reacción ( $mol/m^3s$ )	$E_A$	Fuente	
$r_{R3} = 1.08 * 10^{10} e^{\left(\frac{-125000}{RT}\right)} C_{H2} C_{O2}$	[J/mol]	(Gómez Barea & Leckner, 2010)	(41)
Velocidad de reacción ( $mol/m^3s$ )	$E_A$	Fuente	
$r_{R3} = k_{H2} C_{O2} C_{H2}^2$	[J/mol]	(Yan, Heidenreich, & Zhang, 1997)	(42)
$k_{H2} = 2.86 k_{CO}$		(Haslam, 1923)	

Tabla 17. Velocidades de reacción Water Gas Shift conversion (R4)

$CO + H_2O \leftrightarrow H_2 + CO_2$ (Water Gas Shift conversion – R4)			
Velocidad de reacción ( $mol/m^3s$ )	$E_A$	Fuente	Ecuación
$r_{R4} = 2.78 * 10^3 e^{\left(\frac{-12600}{RT}\right)} [C_{CO} C_{H2O} - (C_{CO2} C_{H2}/K)]$	[J/mol]	(Gómez Hernández, 2010)	(43)
$K = 0.0265 e^{(-65800/RT)}$			
Velocidad de reacción ( $mol/m^3s$ )	$E_A$	Fuente	Ecuación
$r_{R4} = 95 e^{\left(\frac{-57000}{RT}\right)} f(C_{1i}) - 5 * 10^3 e^{\left(\frac{-67300}{RT}\right)} f(C_{2i})$			
$f(C_{1i}) = \frac{C_{CO2} C_{H2}^{0.5}}{1 + (3.6 * 10^{-3} C_{CO})}$	[J/mol]	(Pecate, 2017)	(44)
$f(C_{2i}) = \frac{C_{H2O} C_{CO}^{0.5}}{1 + (1.2 * 10^{-3} C_{H2})}$			

La reacción de vapor de metano reformado presentada al inicio de la Tabla 18 es endotérmica, y produce hidrógeno y monóxido de carbono mediante el consumo de metano producido en la etapa inicial de la pirólisis. La velocidad de reacción R5, estimada en la Ecuación (45) y Ecuación (46), suele ser la más lenta entre todas las reacciones endotérmicas y el consumo neto de  $H_2O$  es bajo (Gopalakrishnan, 2013).

Tabla 18. Velocidades de reacción Steam Methane Reforming reaction (R5)

$CH_4 + H_2O \rightarrow CO + 3H_2$ (Steam Methane Reforming reaction – R5)			
Velocidad de reacción ( $mol/m^3s$ )	$E_A$	Fuente	Ecuación
$r_{R5} = 3 * 10^5 e^{\left(\frac{-125000}{RT}\right)} C_{CH_4} C_{H_2O}$	[J/mol]	(Gómez Barea & Leckner, 2010)	(45)
Velocidad de reacción ( $mol/m^3s$ )	$E_A$	Fuente	
$r_{R5} = k_5 * \left( P_{H_2O} * P_{CH_4} - \frac{P_{H_2}^3 * P_{CO}}{K_{equi,R5}} \right)$	[J/mol]	(Tosina Fernández, 2013)	(46)
$k_5 = 7.3 * 10^{-2} e^{\left(\frac{-36150}{RT}\right)}$			
$K_{equil-R5} = e^{-\left(\frac{\bar{g}_{CO}^0(T)}{RT} + 3\frac{\bar{g}_{H_2}^0(T)}{RT} - \frac{\bar{g}_{H_2O}^0(T)}{RT} - \frac{\bar{g}_{CH_4}^0(T)}{RT}\right)}$			

\*Para el cálculo del término  $\bar{g}_{f,i}^0(T)$  ver apartado 2.4.1.4

Es importante mencionar que las reacciones químicas escritas en las tablas 14-17 son del tipo exotérmicas, y son de vital importancia durante el proceso de gasificación, pues proveen de energía a los procesos endotérmicos (tabla 18) durante la conversión del carbono. Así mismo, las velocidades de reacción son las mismas en ambas fases, lo único que cambia es el valor de las concentraciones de cada especie de acuerdo con la fase (emulsión o burbuja) analizada.

**2.4.1.2 Reacciones heterogéneas.** Las reacciones heterogéneas ocurren en la superficie de la biomasa carbonizada o char, por lo tanto, se esperaría una cinética lenta, donde la conversión del char es mayor debido a la temperatura media del proceso, si por el contrario la temperatura es alta (mayor a 600°C) el char tendrá menor reactividad. Estas reacciones ocurren solo en la fase emulsión.

La reacción de Boudouard (ver Tabla 19) es considerada altamente endotérmica entre los reactivos: carbono y dióxido de carbono. A temperaturas superiores a 700°C la variación de la Energía Libre de Gibbs se vuelve negativa, favoreciendo la formación de monóxido de carbono, por ello, la velocidad de reacción depende de dicha energía, y se puede estimar

mediante la Ecuación (47) que utiliza las concentraciones molares o con la Ecuación (48) que utiliza las presiones parciales ( $P_i$ ) y el factor de reactividad del char ( $Cr_f$ ).

Tabla 19. Velocidades de reacción Boudouard (R6)

$C + CO_2 \rightarrow 2CO$ (Reacción de Boudouard – R6)			
Velocidad de reacción ( $mol/m^3s$ )	$E_A$	Fuente	Ecuación
$r_{R6} = 36.16 * 10^3 e^{\left(\frac{-77.39}{RT}\right)} \left(C_{CO2} - \frac{C_{CO}^2}{K_{equil-R6}}\right)$	[kJ/mol]	(Gopalakrishnan, 2013)	(47)
$K_{equil-R6} = e^{-\left(\frac{2\bar{g}_{CO}^0(T)}{RT} - \frac{\bar{g}_{CO2}^0(T)}{RT} - \frac{\bar{g}_{Char}^0(T)}{RT}\right)}$			
Velocidad de reacción ( $mol/m^3s$ )	$E_A$	Fuente	
$r_{R6} = Cr_f * k_6 \left(P_{CO2} - \frac{P_{CO}^2}{K_{equil-R6}}\right)$	[J/mol]	(Tosina Fernández, 2013)	(48)
$k_6 = 36.16 * e^{\left(\frac{-77390}{RT}\right)}$			
$Cr_f = 4.0012 * (10z) - 3.0012$			

La reacción R7 (ver Tabla 20) es del tipo heterogénea y se trata de la gasificación del carbono, que ocurre entre dicho elemento y el vapor de agua sobrecalentado a altas temperaturas (mayores a 600°C), donde los productos gaseosos son una mezcla de hidrógeno y monóxido de carbono, principales compuestos del gas de síntesis. Para asegurar la continuidad de esta reacción endotérmica, es necesario que el calentamiento de la biomasa sea adecuado y controlado para obtener las especies producidas en proporciones óptimas. La velocidad de dicha reacción se puede estimar con las Ecuaciones (49)-(51).

En la investigación de Nanou (2013) la reacción R8 mostrada en la Tabla 21 se clasifica como exotérmica. La conversión de un mol de carbono con dos moles de hidrógeno produce metano, esto favorece la composición del gas de síntesis final, sin embargo, la reacción de metanización es significativa cuando se tienen las siguientes condiciones: bajas temperaturas y altas presiones. Las Ecuaciones (52) y (53) estiman la velocidad de reacción.

A modo de resumen, la tasa o velocidad de reacción más alta es la combustión del carbono (ver apartado 2.4.1.3), en comparación a las tres reacciones anteriores (R6-R8). La reacción R9 consume rápidamente el oxígeno presente en el reactor, dejando una proporción casi nula de oxígeno para las otras reacciones. En cuanto a orden de magnitud, la velocidad de reacción R7 es tres a cinco veces más lento que la velocidad R9. La Ecuación (54) muestra el orden de magnitud (de mayor a menor) de las velocidades de reacción (Basu, 2013).

$$R_{C+O_2} \gg R_{C+H_2O} > R_{C+CO_2} \gg R_{C+H_2} \quad (54)$$

Tabla 20. Velocidades de reacción Char Steam gasification (R7)

$C + H_2O \rightarrow CO + H_2$ (Char Steam gasification – R7)			
Velocidad de reacción ( $mol/m^3 s$ )	$E_A$	Fuente	Ecuación
$r_{R7} = 6.28 * 10^8 e^{\left(\frac{-217714}{RT}\right)} C_{H_2O}^{0.7} C_C^{0.5}$	[J/mol]	(Cluet, 2014)	(49)
Velocidad de reacción ( $mol/m^3 s$ )	$E_A$	Fuente	
$r_{R7} = 1.517 * 10^7 e^{\left(\frac{-12162}{RT}\right)} \left( C_{H_2O} - \frac{C_{CO} C_{H_2}}{K_{equil-R7}} \right)$	[J/mol]	(Gopalakrishnan, 2013)	(50)
$K_{equil-R7} = e^{-\left(\frac{\bar{g}_{CO}^0(T)}{RT} + \frac{\bar{g}_{H_2}^0(T)}{RT} - \frac{\bar{g}_{H_2O}^0(T)}{RT} - \frac{\bar{g}_{char}^0(T)}{RT}\right)}$			
Velocidad de reacción ( $mol/m^3 s$ )	$E_A$	Fuente	
$r_{R7} = Crf * k_7 \left( P_{H_2O} - \frac{P_{CO} P_{H_2}}{K_{equil-R7}} \right)$	[J/mol]	(Tosina Fernández, 2013)	(51)
$k_7 = 1.517 * 10^4 e^{\left(\frac{-121620}{RT}\right)}$			
$Crf = 4.0012 * (10z) - 3.0012$			

Tabla 21. Velocidades de reacción química de metanización (R8)

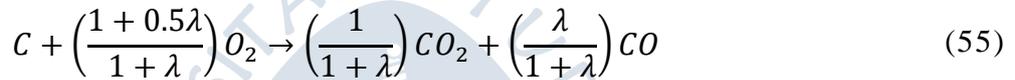
$C + 2H_2 \rightarrow CH_4$ (Metanización – R8)			
Velocidad de reacción ( $mol/m^3 s$ )	$E_A$	Fuente	Ecuación
$r_{R8} = 4.189 * e^{\left(\frac{-19.21}{RT}\right)} \left( C_{H_2}^2 - \frac{C_{CH_4}}{K_{equil-R8}} \right)$	[kJ/mol]	(Gopalakrishnan, 2013)	(52)
$K_{equil-R8} = e^{-\left(\frac{\bar{g}_{CH_4}^0(T)}{RT} - 2\frac{\bar{g}_{H_2}^0(T)}{RT} - \frac{\bar{g}_{char}^0(T)}{RT}\right)}$			
Velocidad de reacción ( $mol/m^3 s$ )	$E_A$	Fuente	

$$r_{R8} = Crf * k_8 \left( P_{H2}^2 - \frac{P_{CH4}}{K_{equil-R8}} \right)$$

$$k_8 = 4.189 * 10^{-3} e^{\left(\frac{-19210}{RT}\right)} \quad [J/mol] \quad \text{(Tosina Fernández, 2013)} \quad (53)$$

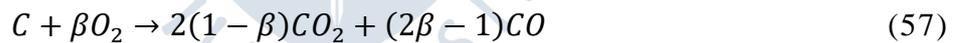
$$Crf = 4.0012 * (10z) - 3.0012$$

**2.4.1.3 Combustión del carbono.** Es una reacción heterogénea que ocurre en la fase emulsión y es de alta velocidad de reacción. Jiang y Moray (1992) proponen en su modelo matemático, que el carbono reacciona con cierta cantidad de moles de oxígeno presente en el agente gasificante (ver Ecuación 55-56) en base a la temperatura del lecho expresado en Kelvin.



$$\lambda = 10^{3.4} e^{-6241/T} \quad (56)$$

Para Yan, Heidenreich y Zhang (1997) la oxidación del *char* o combustión del *char* (ver Ecuación 57) se forma por una reacción química en donde el número de moles de oxígeno que actúan en la reacción para temperaturas entre 1000-1200 K queda definido por un término constante cuyo valor es  $\beta = 0.8$ . La velocidad de reacción (ver Ecuación 58), en el rango de temperaturas indicadas, es controlada por el fenómeno de difusión que transporta el oxígeno para generar la oxidación.



$$r_{O2} = a_s * \dot{C}_{E-O2} * \left[ \frac{D_G}{d_p} \left( 2\varepsilon_{mf} + 0.69(Sc)^{1/3} \left( \frac{Re_p}{\varepsilon_B} \right)^{1/2} \right) \right] \quad (58)$$

Donde:

$\dot{C}_{E-O2}$  : Concentración molar en la fase emulsión del oxígeno [ $mol/m^3$ ]

$D_G$ : Difusividad másica del gas – especies volátiles [ $m^2/s$ ]

$Sc$ : Número de Schmidt [–]

$Re_p$ : Número de Reynolds de la partícula [–]

$r_{O2}$ : Velocidad de oxidación del char [ $mol/m^3s$ ]

Algunos parámetros que integran la velocidad de oxidación del char como, el área superficial por unidad de volumen (a), diámetro de partícula ( $d_p$ ) y la fracción de volumen

ocupado por las burbujas ( $\varepsilon_B$ ) serán explicados más adelante. Así mismo, el número de Schmidt es un parámetro adimensional que relaciona la viscosidad cinemática con la difusión de masa y su valor cuando se analizan gases es cercano a 1, para el proceso de gasificación este número indica el espesor relativo entre la capa límite formada alrededor de la superficie del char y el gradiente de concentración de transferencia de masa entre el agente gasificante y la biomasa carbonizada o char debido al fenómeno de difusión, y se calcula mediante la Ecuación (59). Con respecto al número de Reynolds de partícula, se utiliza para describir el comportamiento del fluido gaseoso que rodea la superficie de los sólidos fluidizados del lecho, relacionando las características del agente gasificante y el diámetro de partícula (ver Ecuación 60).

$$Sc = \frac{\nu}{D_G} = \frac{\mu_f}{\rho_f D_G} \quad (59)$$

$$Re_p = \frac{d_p u_o \rho_f}{\mu_f} \quad (60)$$

Coefficientes termoquímicos para la Energía Libre de Gibbs. La energía Libre de Gibbs permite comprender cómo interactúa la entropía ( $\Delta S$ ), la entalpía ( $\Delta H$ ) y la temperatura ( $T$ ), además, es un potencial químico que se minimiza cuando un sistema cerrado alcanza el equilibrio a una presión y temperatura constante. El cambio o variación de dicha energía puede ser negativo o positivo. Cuando el valor es negativo significa que la reacción química se verá favorecida por la liberación de energía, por el contrario, si la variación es positiva, la energía en forma de trabajo tendría que agregarse al sistema para dar origen a las reacciones químicas deseadas. Esta energía permite obtener las constantes de equilibrio que ayudan a determinar las velocidades de reacción durante el proceso de gasificación, por ello, en la Tabla 22 y 23 se muestran los principales coeficientes de las especies volátiles liberadas durante el proceso de gasificación, para un rango de temperatura determinado en base a las ecuaciones que se muestran a continuación.

$$\frac{\bar{H}^0(T)}{RT} = a_1 + a_2 \frac{T}{2} + a_3 \frac{T^2}{3} + a_4 \frac{T^3}{4} + a_5 \frac{T^4}{5} + \frac{a_6}{T}$$

$$\frac{\bar{S}^0(T)}{RT} = a_1 \ln T + a_2 T + a_3 \frac{T^2}{2} + a_4 \frac{T^3}{3} + a_5 \frac{T^4}{4} + a_7$$

$$\Delta \bar{G}_{f,i}^0 = \Delta \bar{H}_{f,i}^0 - T \Delta \bar{S}_{f,i}^0 = a_1 (1 - \ln T) - a_2 \frac{T}{2} - a_3 \frac{T^2}{6} - a_4 \frac{T^3}{12} - a_5 \frac{T^4}{20} + \frac{a_6}{T} + a_7$$

#### 2.4.2 Modelo hidrodinámico del lecho

Los parámetros hidrodinámicos que se mencionan dependen de las propiedades del material del lecho y del agente gasificante. Todo esto ocurre durante la fluidización.

Tabla 22. Coeficientes termodinámicos para temperaturas menores a 1000 K de diferentes especies volátiles

	$a_1$	$a_2$	$a_3$	$a_4$	$a_5$	$a_6$	$a_7$
$CO_2$	2.36E+00	8.98E-03	-7.12E-06	2.46E-09	-1.44E-013	-4.84E+04	9.9E+00
$CO$	3.58E+00	-6.1E-04	1.02E-06	9.07E-01	-9.04E-013	-1.43E+04	3.51E+00
$H_2$	2.34E+00	7.98E-03	-1.95E-05	2.02E-08	-7.38E-012	-9.18E+02	6.83E-01
$CH_4$	5.15E+00	-1.4E-02	4.92E-05	-4.9E-08	1.67E-011	-1.02E+04	-4.6E+00
$H_2O$	4.2E+00	-2.1E-03	6.52E-06	-5.5E-09	1.77E-012	-3.03E+04	-8.5E-01
<b>Char</b>	2.55E+00	-3.2E-04	7.34E-07	-7.3E-01	2.67E-013	8.54E+04	4.53E+00

Fuente: Obtenido de Khonde, Hedaoo & Deshmukh, (2019)

Tabla 23. Coeficientes termodinámicos para temperaturas mayores a 1000 K de diferentes especies volátiles

	$a_1$	$a_2$	$a_3$	$a_4$	$a_5$	$a_6$	$a_7$
$CO_2$	4.64E+00	2.74E-03	-9.96E-07	1.6E-01	-9.16E-015	-4.9E+04	-4.9E+04
$CO$	3.05E+00	1.35E-03	-4.86E-07	7.89E-11	-4.7E-015	-1.43E+04	-1.4E+04
$H_2$	2.93E+00	8.27E-04	-1.46E-07	1.54E-11	-6.89E-016	-8.13E+02	-8.1E+02
$CH_4$	1.64E+00	1.01E-02	-3.37E-06	5.35E-01	3.16E-014	-1E+04	-1E+04
$H_2O$	2.68E+00	2.97E-03	-1.11E-05	9.44E-11	-4.3E-015	-2.99E+04	-2.9E+04
<b>Char</b>	2.61E+00	-1.9E-04	1.07E-07	-1.6E-11	8.19E-016	8.54E+04	8.54E+04

Fuente: Obtenido de Khonde, Hedaoo & Deshmukh, (2019)

**2.4.2.1 Velocidad visible.** Es aquella velocidad que tiene el gas del proceso cuando circula entre los espacios vacíos de las burbujas que se forman durante el régimen de fluidización. Si esta velocidad se multiplica con el área transversal del reactor, se obtiene el caudal de gas circulante, entonces para asociar este parámetro con la teoría de las dos fases, se introduce un factor de corrección llamado fracción de burbujas visibles “Y”, para determinar la proporción de gas liberado en la fase burbuja. Esta velocidad se calcula con la Ecuación (61).

$$u_{vis} = Y(u_o - u_{mf}) \quad (61)$$

El factor de corrección puede tomar ciertos valores de acuerdo con la clasificación de Geldart: 0.8, 0.7 y 0.3 para el grupo A, B y D respectivamente. Autores como Toomey y Johnstone (1952) citados en el trabajo de Grace (1986) consideran que el valor de “Y” debe

ser 1, sin embargo, este supuesto es poco usado, ya que originaría que  $u_{vis} = u_{mf}$  cuando el estado de fluidización (EF) se le asigna el valor de 2 (ver ecuación 69).

**2.4.2.2 Diámetro de una burbuja.** Es aquel diámetro promedio que corresponde a cada burbuja formada durante el régimen burbujeante, a una determinada altura por encima del plato distribuidor. Cabe resaltar que, durante cualquier proceso real en el régimen mencionado, las burbujas formadas para una misma altura pueden presentar diferentes diámetros.

Las ecuaciones (62) y (63) empíricas para este parámetro se presentan en la Tabla 24 y son citadas en la investigación de Gómez -Barea y Leckner (2010), además, sus variables dependientes serán explicadas en los próximos párrafos.

Tabla 24. Ecuaciones empíricas para calcular el diámetro de una burbuja

Fórmula	Referencia	Ecuación
$d_B = 0.54(u_o - u_{mf})^{0.4}(z + 4\sqrt{A})^{0.8}g^{-0.2}$	(Darton, LaNauze, Davidson & Harrison, 1977)	(62)
$d_B = d_{Bmáx} - \left[ (d_{Bmáx} - d_{Bo})e^{\frac{-0.3z}{D_t}} \right]$	(Mori & Wen, 1975)	(63)

Fuente: Obtenido de Gómez Barea & Leckner, (2010)

La primera ecuación de la Tabla 24 se basa en la coalescencia de las burbujas producidas en la base del lecho, y conforme se incrementa la altura del reactor ( $z$ ), el diámetro de la burbuja crece hasta cierto valor teórico, la Figura 30 ayuda a entender que  $d_B$  corresponde al diámetro final de la burbuja superior y  $A_D = A$  representa al área de la sección transversal.

La segunda ecuación de la Tabla 24 es válida cuando  $0.3 < D_t < 1.3 m$  (siendo  $D_t$  el diámetro de la base del lecho que suele coincidir con el diámetro interno del reactor). Así mismo, relaciona el diámetro promedio de una burbuja con respecto a dos variables: un diámetro de burbuja inicial formado por las erupciones en la base del lecho con distribuidor perforado y un diámetro máximo formado por la coalescencia de un tren de burbujas ascendentes, ambas se definen mediante las Ecuaciones (64) y (65) (Mori & Wen, 1975).

$$d_{Bo} = 0.347 \left[ \frac{A(u_o - u_{mf})}{n_d} \right]^{0.4} \quad (64)$$

$$d_{Bmáx} = 0.652 [A(u_o - u_{mf})]^{0.4} \quad (65)$$

Donde:

$n_d$ : Número de orificios en el plato distribuidor [-]

Autores como Kunii y Levenspiel (1991) proponen la Ecuación (66) para el diámetro de burbuja inicial:

$$d_{Bo} = \frac{1.3}{g^{0.2}} \left[ \frac{A(u_o - u_{mf})}{n_d} \right]^{0.4} \quad (66)$$

Por otro lado, Gungor (2011) propone las Ecuaciones (67) y (68):

$$d_{Bo} = 0.8716 \left[ \frac{A(u_o - u_{mf})}{n_d} \right]^{0.4} \quad (67)$$

$$d_{Bm\acute{a}x} = 0.9394 [\pi D_i^2 (u_o - u_{mf})]^{0.4} \quad (68)$$

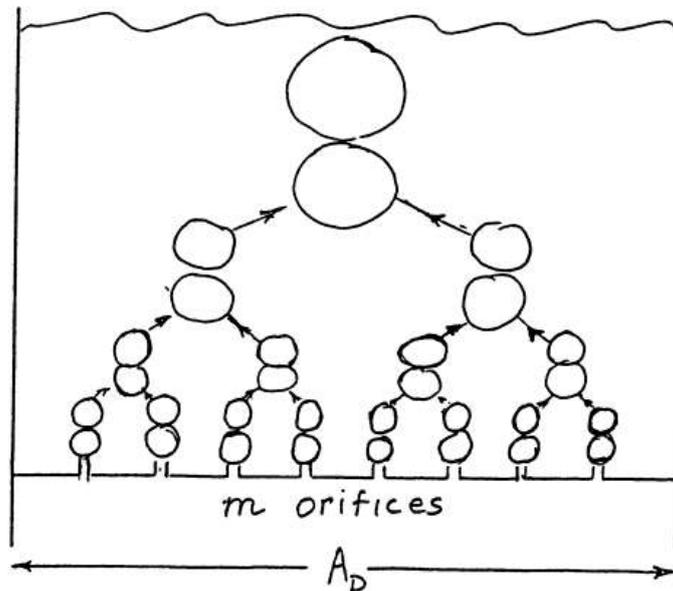


Figura 30. Crecimiento de las burbujas por coalescencia mediante un flujo de aire

Fuente: Obtenido de Davidson, (1995)

En algunas investigaciones se considera que el diámetro de la burbuja puede superar el diámetro interno del reactor debido a que es un diámetro medio teórico, tal y como ocurre en la Ecuación (62). La Figura 31 permite comparar la tendencia de los valores de dicho parámetro a lo largo de la altura del reactor en base a las dos correlaciones propuestas en la Tabla 24. Sin embargo, para establecer que las ecuaciones son una buena aproximación en lechos fluidizados burbujeantes se tendrá en cuenta los siguientes criterios:

$$d_{Bo} < d_B < d_{Bm\acute{a}x}$$

$$d_B < D_i \gg d_{Bm\acute{a}x}$$

Estos criterios se fundamentan en que si el diámetro medio de la burbuja ( $d_B$ ) resulta mayor que 0.6 veces el diámetro del lecho; que usualmente coincide con el diámetro interno del reactor, entonces se trabajaría en un régimen *slugging* (ver apartado 1.5.3).

Los valores de las variables utilizadas para generar la Figura 31 según las ecuaciones propuestas en la Tabla 24, de ahora en adelante se asociarán a un ejemplo llamado Caso 1, donde se asignó valores típicos de ciertas variables durante un proceso de gasificación, tales como: diámetro interno del del reactor ( $D_i$ ) igual a 0.7 m, velocidad de mínima fluidización ( $u_{mf}$ ) igual a 1.3 m/s, Estado de Fluidización ( $EF$ ) igual a 5, el número de agujeros en el plato distribuidor ( $n_d$ ) igual a 200, aceleración de la gravedad ( $g$ ) igual a  $9.8 \text{ m/s}^2$ . Para el cálculo del diámetro de la burbuja inicial ( $d_{Bo}$ ) se utilizó la Ecuación (66), así mismo para calcular el diámetro máximo teórico de una burbuja ( $d_{Bm\acute{a}x}$ ) se utilizó la Ecuación (65).

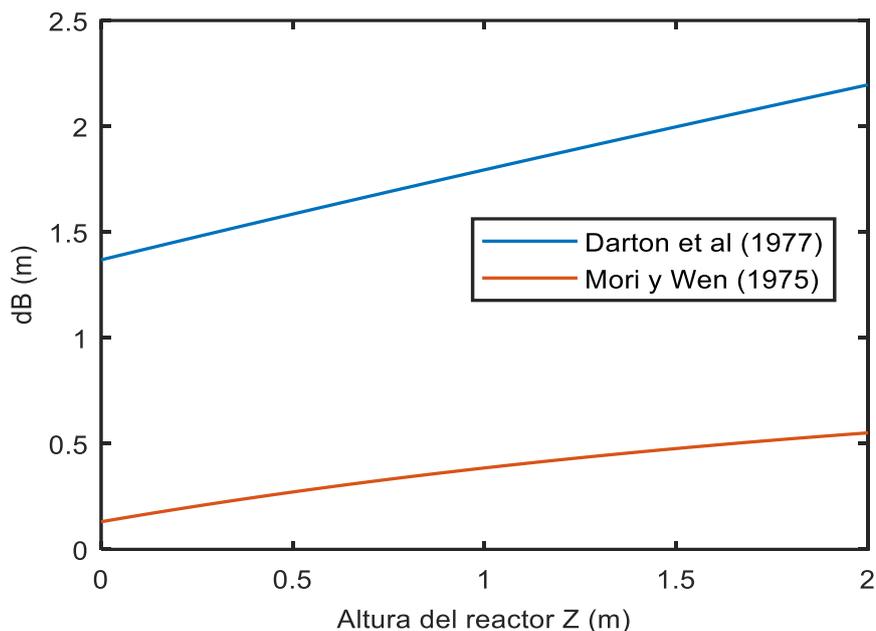


Figura 31. Comparativa del diámetro teórico de una burbuja

**2.4.2.3 Velocidad superficial del gas.** Para generar un régimen burbujeante es necesario poder superar la velocidad de mínima fluidización, por ello, la velocidad superficial del gas es aquella que asegura que esto ocurra.

Esta velocidad define como tal el régimen burbujeante que se espera tener en el interior del reactor, sin llegar a generar turbulencia ni pérdidas de biomasa por el ciclón. Si la velocidad superficial del gas es muy alta, se corre el riesgo que los volátiles y partículas del lecho lleguen a la zona superior o *freeboard* dificultando la conversión de las especies volátiles, del *tar* y del carbono en  $H_2$ , disminuyendo la eficiencia y calidad del *syngas* (Gungor, 2011).

Se puede estimar este parámetro mediante dos ecuaciones: una ecuación convencional que se usa en la Teoría de las Dos Fases, donde se asume que este parámetro es constante, además, la Ecuación (69) sirve para estimar la velocidad superficial inicial del gas en  $z=0 \text{ m}$  en función del estado de fluidización ( $EF$ ), por otro lado, la Ecuación (70) es una ecuación diferencial que describe la evolución de la velocidad superficial con respecto a la altura del reactor dependiente de las concentraciones y flujos molares, propuesta por Yan, Heidenreich y Zhang (1997) y sus variables serán descritas en el apartado 2.4.4.

$$u_o = EF * u_{mf} \quad (69)$$

$$\frac{du_o}{dz} = \left( 1/A \sum_{i=1}^N \dot{C}_{B-i} + \dot{C}_{E-i} \right) \left( \sum_{i=1}^{NB} \dot{f}_{B-i} + \sum_{i=1}^{NE} \dot{f}_{E-i} \right) \quad (70)$$

**2.4.2.4 Velocidad de una burbuja libre en un lecho infinito.** Este parámetro supone que una única burbuja con un diámetro determinado ( $d_B$ ) asciende en un lecho fluidizado infinito en régimen burbujeante, a una determinada velocidad, y su incremento es independiente de la densidad del fluido. La relación matemática fue propuesta en el modelo original de Davidson y Harrison (1963), y es descrita en la Ecuación (71).

$$u_{B,\infty} = 0.711 \sqrt{g * d_B} \quad (71)$$

Por otro lado, en la investigación de Cluet (2014) se presenta una variación de la ecuación formulada por Wallis (1969), obteniendo la Ecuación (72).

$$u_{B,\infty} = 0.711 \sqrt{g * d_B} * 1.2e^{\left(\frac{-1.49d_B}{D_i}\right)} \quad (72)$$

Para establecer el comportamiento de las Ecuaciones (71) y (72) con respecto a la altura del reactor; en base a los datos del Caso 1, y considerando los resultados de la Figura 31 según la propuesta en Mori y Wen (1975), se obtiene la Figura 32, donde se observa dos tendencias diferentes. Según la Ecuación (71) del modelo original de Davidson y Harrison (1963) la evolución de esta velocidad irá en aumento, esta hipótesis es válida para algunas literaturas porque la burbuja se encuentra en un lecho infinito donde no existen fuerzas que logren disminuir dicha velocidad, por el contrario, Cluet (2014) utiliza la formulación de Wallis (1969) porque intenta obtener unos valores aproximados a la realidad, la tendencia de este parámetro es de disminuir conforme se incrementa la altura del reactor, y esta hipótesis es completamente válida porque al reemplazar  $u_{B,\infty}$  en la Ecuación (73) de la velocidad de ascenso de una burbuja ( $u_B$ ) se obtendrán valores que disminuyen pero no llegan a cero, porque las burbujas dentro del lecho fluidizado en régimen burbujeante tienden a explotar a cierta altura del reactor con cierta velocidad, pero nunca siguen incrementando su velocidad.

**2.4.2.5 Velocidad de ascenso de una burbuja.** El modelo original de la Teoría de las Dos Fases propuesto por Davidson y Harrison plantea una ecuación simplificada para estimar la velocidad de ascenso que tienen las burbujas a lo largo del reactor (ver Ecuación 73).

$$u_B = Y(u_o - u_{mf}) + u_{B,\infty} \quad (73)$$

### 2.4.3 Transferencia de masa entre fases

El coeficiente de intercambio o transferencia entre fases se define como la relación entre el caudal volumétrico de gas que va desde la fase burbuja hacia la fase emulsión (ver Ecuación 74 -  $\dot{V}_{BE}$ ), y viceversa, por unidad de volumen de la burbuja formada. La Figura 33 permite comprender este mecanismo, donde se observa que en una burbuja de cierto volumen ( $V_b$ ) existen zonas de ingreso y salida de líneas de flujo volumétrico, esto hace referencia al intercambio del caudal volumétrico desde la fase emulsión hacia la fase burbuja (líneas de ingreso hacia la burbuja) y de la fase burbuja hacia la fase emulsión (líneas que salen de la burbuja); y la cantidad de veces que existe la recirculación del flujo volumétrico entre fases a medida que la burbuja asciende se denomina flujo cruzado, además, se considera que la velocidad de la burbuja está ubicada en el centro de la misma (Hernández-Jiménez, Gómez-García, Santana, & Acosta-Iborra, 2012).

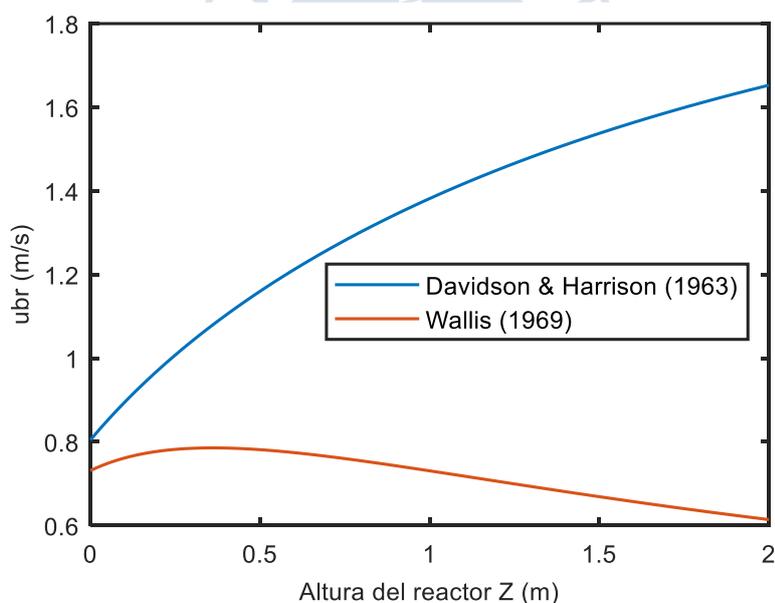


Figura 32. Comparativa de la evolución de la velocidad de una burbuja libre

$$K_{BE} = \frac{\dot{V}_{BE}}{V_b} \quad (74)$$

Para el cálculo matemático del coeficiente de transferencia entre fases cuando se conocen las componentes horizontales y verticales de la velocidad del gas y la velocidad de ascenso de la burbuja, se puede asumir que la integral del flujo de gas desde la fase burbuja hacia la fase emulsión es similar a la integral del flujo de gas que va desde la fase emulsión

hacia la fase burbuja en módulo, esto es posible debido al movimiento lento de las burbujas en ascenso; porque el fenómeno de crecimiento y coalescencia entre burbujas es relativamente lento en comparación con la velocidad del gas, la Ecuación (75) expresa lo mencionado anteriormente.

Donde  $\Omega_b$  expresa la línea de contorno de la burbuja formada,  $\alpha$  representa la porosidad del lecho,  $u_g$  y  $u_b$  son las componentes verticales (altura del reactor) de la velocidad del gas y de ascenso de la burbuja respectivamente,  $v_g$  y  $v_b$  son las componentes horizontales (longitud del distribuidor o diámetro del reactor) de la velocidad del gas y de ascenso de la burbuja respectivamente. Es necesario mencionar que la Ecuación (75) se utiliza para modelos bidimensionales.

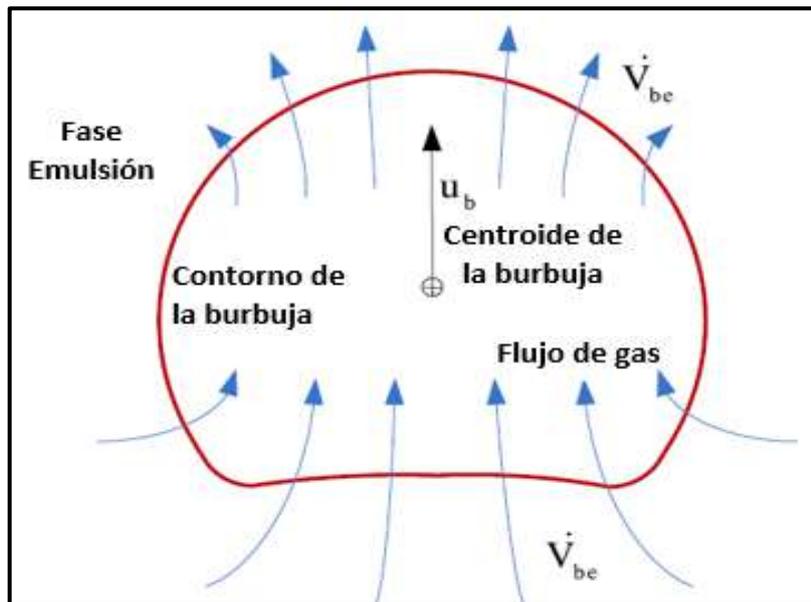


Figura 33. Esquema de ingreso y salida del flujo volumétrico entre fases en una burbuja

Fuente: Obtenido de Hernández, Gómez, Santana & Acosta, (2012)

$$\dot{V}_{BE} = \int_{\Omega_b} \alpha [-(u_g - u_b)dy + (v_g + v_b)dx] \quad (75)$$

La transferencia de masa entre fases ocurre durante las reacciones del tipo gas-sólido. Se entiende que durante el proceso de gasificación las burbujas interactúan entre sí favoreciendo el contacto entre las partículas sólidas y el gas. Por ello, existe una variable propuesta por Sit y Grace (1981) que mide la velocidad con la cual se transmiten los reactivos gaseosos provenientes de la fase burbuja hacia la fase emulsión, mediante los mecanismos de convección, difusión y la hidrodinámica de la burbuja (ver Ecuación 76).

$$K_{B \rightarrow E} \approx \frac{u_{mf}}{3} + \sqrt{\frac{4D_G * \varepsilon_{mf} * u_B}{\pi * d_B}} \quad (76)$$

**Donde:**

$D_G$ : Difusividad másica del gas – especies volátiles [ $m^2/s$ ]

La investigación sobre un modelo matemático para gasificación de Jiang y Morey (1992) estima el coeficiente de transferencia de masa entre fases con la Ecuación (77):

$$K_{B \rightarrow E} \approx 1.19u_{mf} + \left[ \left( \frac{0.91\varepsilon_{mf}D_G^{0.5}}{1 + \varepsilon_{mf}} \right) \left( \frac{g}{d_B(z)} \right)^{1/4} \right] \quad (77)$$

- **Cálculo de la difusividad másica del gas-especies volátiles**

El fenómeno de difusión en materiales sólidos, líquidos o gaseosos es generado por el movimiento aleatorio de los átomos o moléculas debido a su energía interna. La facilidad de transporte de dichas moléculas se representa por el coeficiente de difusión o también llamado difusividad másica que depende de la temperatura, presión y naturaleza de las especies bifásicas. Durante el fenómeno de gasificación en régimen burbujeante se analiza la difusividad másica que presenta el gas o agente gasificante (aire) con respecto a las especies volátiles presentes en la fase burbuja mediante la Ecuación (78) presentada en la investigación de Tosina (2013).

$$D_G = 8.677 \times 10^{-5} \left( \frac{T^{1.75}}{P} \right) \quad (78)$$

Donde T es la temperatura del proceso de gasificación en Kelvin y P es la presión en el reactor en Pascales.

#### 2.4.4 Ecuaciones de transformación de flujos molares

Las ecuaciones diferenciales ordinarias de transformación de la fase gaseosa y fase densa (ver Ecuaciones 79-80 cuyos términos serán descritos en apartados posteriores), analizadas para un volumen de control, representan la evolución de los flujos molares con respecto a la altura del reactor. Dichas ecuaciones se componen de tres partes: un primer término que asocia la transferencia de masa entre fases, un segundo término que incorpora el flujo neto, por último, una función que asocia la influencia de las velocidades de reacción.

$$\frac{df_{B-i}}{dz} = A \left[ \left( a_s * K_{B \rightarrow E} * (\dot{C}_{e-i} - \dot{C}_{b-i}) \right) + \Delta F_{e-i} + (\varepsilon_b * \sum a^{r_{b-j-GG_i}} * r_{b-j-GG}) \right] \quad (79)$$

$$\begin{aligned} \frac{df_{E-i}}{dz} = A \left[ \left( a_s * K_{B \rightarrow E} * (\dot{C}_{b-i} - \dot{C}_{e-i}) \right) - \Delta F_{e-i} + ((1 - \varepsilon_b) \right. \\ \left. * \left( \varepsilon_{mf} * \sum \alpha^{r_{e-j-GG}_i} * r_{e-j-GG} \right) \right. \\ \left. + (1 - \varepsilon_{mf}) \sum \alpha^{r_{e-j-GS}_i} * r_{e-j-GS} \right) \right] \end{aligned} \quad (80)$$

Para resolver las 16 ecuaciones diferenciales correspondientes a las 8 especies volátiles liberadas en cada fase, se deben conocer algunas condiciones iniciales de contorno con respecto a las concentraciones molares, que dependen de la evolución de los flujos molares, para ello se deben desarrollar las siguientes ecuaciones para la fase emulsión y burbuja:

Para estimar los flujos molares de las especies volátiles cuando  $z=0$  se usará la Ecuación (81), además, se supondrá la repartición del flujo de cada especie, es decir que el flujo de cada especie volátil se repartirá por igual para reaccionar en la fase burbuja y en la fase emulsión. Dicha ecuación está en función del flujo másico de cada especie volátil entre su peso molecular.

$$\dot{f}_i = \frac{\dot{m}_i}{PM_i} \quad (81)$$

Además, se presentan ciertas condiciones con la finalidad de acotar la influencia de la fracción de volumen ocupada por las burbujas ( $\varepsilon_B$ ). Las Ecuaciones (82)-(85) permiten calcular las concentraciones molares en  $mol/m^3$ , mediante la división del flujo molar de cada especie respecto al área de la sección transversal ( $A$ ) multiplicada por la velocidad.

- Para  $0 \leq z \leq H_{fixed-bed}$  (altura del lecho fijo)

$$\dot{C}_{E-i} = \frac{\dot{f}_{E-i}}{A * u_{mf}} \quad (82)$$

$$\dot{C}_{B-i} = \frac{\dot{f}_{B-i}}{A * u_B} \quad (83)$$

- Para  $z > H_{fixed-bed}$  hasta la altura del reactor

$$\dot{C}_{E-i} = \frac{\dot{f}_{E-i}}{A * u_{mf} * (1 - \varepsilon_B)} \quad (84)$$

$$\dot{C}_{B-i} = \frac{\dot{f}_{B-i}}{A * u_B * \varepsilon_B} \quad (85)$$

### 2.4.5 Flujo neto

El concepto de flujo neto hace referencia a la cantidad de moles del gas generado durante la fase emulsión como consecuencia de la devolatilización del char y a las reacciones homogéneas y heterogéneas (Yan, Heidenreich, & Zhang, 1997). Las especies volátiles contribuyen de forma independiente a la generación de dicho flujo durante la fase emulsión, y se representa en la Ecuación (86)-(87).

$$\Delta F_{E-i} = \left( \dot{C}_{E-i} / \sum_{i=1}^N \dot{C}_{E-i} \right) \Delta F_E \quad (86)$$

$$\Delta F_E = \sum_{i=1}^N \left[ (1 - \varepsilon_B) \left( \varepsilon_{mf} \sum_{i=1}^N \alpha_{ij} r_{E-j} + (1 - \varepsilon_{mf}) \left( \sum_{n=1}^{Nc} \alpha_{ij} r_{Ec-n} a + \sum_{n=1}^{Ng} \alpha_{ij} r_{Eg-n} + \sum_{n=1}^{Nv} \alpha_{ij} r_{Ev-n} \right) \right) \right] \quad (87)$$

Donde:

$\alpha_{ij}$ : Matriz de coeficientes estequiométricos de  $i$  especies en la reacción  $j$  [-]

$r_{E-j}$ : Velocidades de reacción en fase emulsión [ $mol/m^3s$ ]

$r_{Ec-n}$ : Velocidades de reacción de combustión en fase emulsión [ $mol/m^3s$ ]

$r_{Eg-n}$ : Velocidades de reacción de gasificación en fase emulsión [ $mol/m^3s$ ]

$r_{Ev-n}$ : Velocidades de reacción de volatilización en fase emulsión [ $mol/m^3s$ ]

### 2.4.6 Parámetros de influencia durante la fluidización para el modelo seleccionado

Se ha enfocado en el modelo de fluidización para describir el comportamiento de las especies durante la devolatilización de la biomasa en un gasificador de lecho fluidizado burbujeante. Por lo tanto, es importante conocer aquellas variables que influyen de manera positiva o negativa en dicho proceso de devolatilización, donde algunos parámetros han sido definidos mediante ecuaciones semi-empíricas para estimar su valor.

**2.4.6.1 Temperatura del lecho.** La temperatura del lecho marca el comportamiento químico y cinético de las diferentes reacciones que ocurren durante el proceso de gasificación. La temperatura del lecho se recomienda ser de alrededor 1000°C para mejorar la conversión o craqueo secundario del char o material carbonoso, porque a valores muy inferiores (menor a 600°C) la producción de alquitranes en la composición del *syngas* será mayor, disminuyendo su calidad energética. Este parámetro se considerará constante como se ha explicado en la sección 1.2.4. Sin embargo, se debe tener una adecuada selección de la temperatura, porque la composición final del gas de síntesis a la salida del reactor puede variar, debido a que algunos hidrocarburos pueden ser consumidos, disminuyendo el potencial energético del gas.

**2.4.6.2 Esfericidad.** Puede considerarse como un factor de corrección o una característica del lecho, porque por lo general las partículas presentan una forma irregular. El valor se puede estimar mediante la Ecuación (88) que relaciona el área de una esfera con el área de una partícula donde ambas presentan el mismo volumen, obteniendo valores adimensionales entre 0-1 para partículas totalmente irregulares y perfectamente esféricas respectivamente.

$$\phi_s = \left( \frac{\text{área de la esfera}}{\text{área de la partícula}} \right)_{\text{igual volumen}} \quad (88)$$

Este parámetro ayuda a determinar el diámetro de partícula y la porosidad del lecho a mínima fluidización cuando no se dispone de un análisis granulométrico, y busca asumir una misma área superficial en todas las partículas del lecho para que el flujo del agente gasificante tenga la misma resistencia a la fricción durante la fluidización.

**2.4.6.3 Diámetro de partícula.** Se entiende como el diámetro promedio o equivalente de las partículas del material inerte como resultado de un análisis de granulometría. En general, si las partículas son esféricas se usa el mismo diámetro de la partícula. Si no, se realiza un análisis de granulometría, y se recurre la Ecuación (89), que relaciona el diámetro equivalente esférico con la esfericidad para determinar el diámetro de partícula.

$$d_p = \phi_s d_{esf} \quad (89)$$

Donde:

$d_p$ : Diámetro de partícula del lecho [m]

$\phi_s$ : Esfericidad [-]

$d_{esf}$ : Diámetro de la esfera que tiene el mismo volumen que la partícula [m]

Este parámetro determina la superficie de contacto entre el lecho y el agente gasificante durante la fluidización e influye en su velocidad superficial, además interviene durante la etapa de pirólisis para la transferencia de calor en la matriz del sólido, puesto que al

incrementar el diámetro de la partícula desfavorece a este mecanismo de transferencia, por ello se debe tener un tamaño de partícula adecuado, en otras palabras, para partículas pequeñas la pirólisis es controlada por la cinética de las reacciones, pero al incrementar el tamaño de la partícula, la pirólisis se controlada por la difusión del gas.

**2.4.6.4 Porosidad a mínima fluidización.** La porosidad son los intersticios o espacios vacíos en el lecho y esto dependerá de la esfericidad de las partículas. Dicha porosidad es importante cuando se trabaja con gasificadores de lecho fijo.

Para los gasificadores de lecho fluidizado, caso de estudio de la presente investigación, es de especial interés conocer la porosidad a mínima fluidización. Se define como la porosidad que existe en el lecho durante el ingreso del flujo del agente gasificante a la velocidad de mínima fluidización, visto en el apartado 1.5.2. Los valores estimados para este parámetro serán mayores en comparación con la porosidad de un lecho fijo y es importante para el cálculo de la velocidad de mínima fluidización.

En el análisis realizado por Delebarre (2004) sobre las relaciones semi-empíricas para calcular la velocidad de mínima fluidización trabajadas por Wen y Yu (1966), resalta que la viabilidad del método depende de ciertas condiciones que se deben cumplir para que las ecuaciones que relacionan la porosidad del lecho a mínima fluidización y la esfericidad de la partícula sean una buena aproximación. Una de las condiciones es que el diámetro de partícula debe estar entre  $50 \mu m$  hasta  $50 mm$ , además, se debe trabajar u obtener valores para la porosidad de mínima fluidización entre 0.385-0.935 y para la esfericidad entre 0.136 hasta 1.

La validación de las Ecuaciones (90) y (91) planteadas por Wen y Yu (1966) se pueden observar en la Figura 34, donde las ecuaciones presentan una desviación estándar del 95% y un 67% respectivamente, con relación a los datos experimentales de diversas literaturas. Ambas son ampliamente utilizadas en los temas de gasificación de lechos fluidizados cuando se conoce la esfericidad de la partícula del lecho.

$$\frac{(1 - \varepsilon_{mf})}{(\phi_s^2 \varepsilon_{mf}^3)} \approx 11 \quad (90)$$

$$\frac{1}{(\phi_s \varepsilon_{mf}^3)} \approx 14 \quad (91)$$

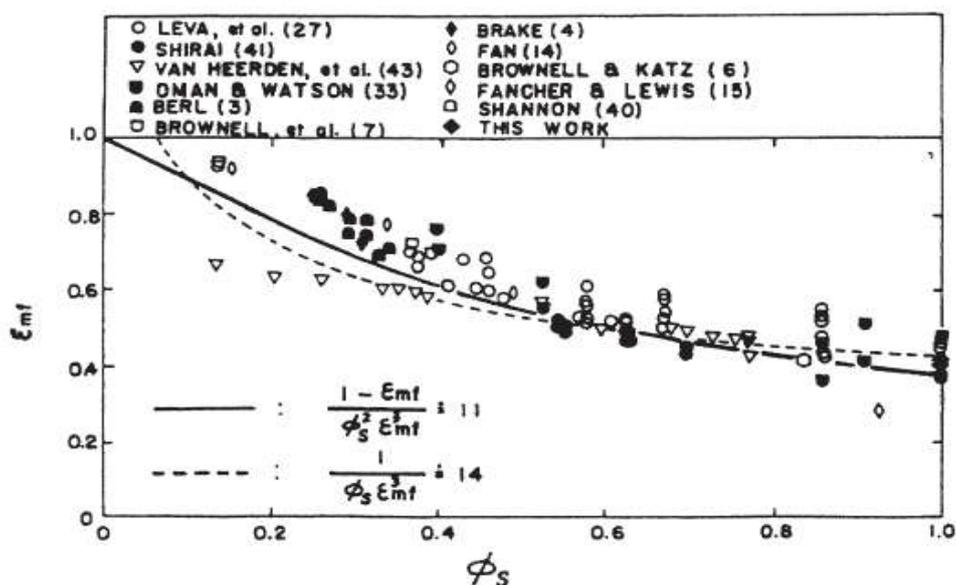


Figura 34. Relación entre la porosidad del lecho a mínima fluidización y la esfericidad en contraste con datos experimentales de las literaturas

Fuente: Obtenido de Wen & Yu, (1966)

La investigación de Reina, Velo y Puigjaner (2000) sobre la fluidización de residuos de madera, menciona el trabajo de Lucas *et al* (1986) sobre los cambios de las constantes en las ecuaciones propuestas por Wen y Yun (1966), además, en dicha investigación se proponen nuevas constantes con menor desviación estándar promedio cuando se cumplen ciertas características de las partículas, esto se puede analizar mejor en la Tabla 25 con los datos resumidos.

Tabla 25. Comparación de las ecuaciones para determinar la velocidad de mínima fluidización para partículas irregulares

Ecuación	Características de la partícula	Data experimental	$C_1$	$C_2$	Desviación promedio (%)
Wen y Yu	$d_p > 0.508 \text{ mm}$	9	11	14	$\pm 14.95$
Lucas et al	$0.1 < \phi < 0.5$	6	5	8.5	$\pm 74.12$
Reina, Velo y Puigjaner	$1 < d_p < 2 \text{ (mm)}$	18	14.03	12.58	$\pm 6.22$

Fuente: Obtenido de Reina, Velo & Puigjaner, (2000)

**2.4.6.5 Caída de presión en el lecho en condiciones de mínima fluidización.** La caída de presión en el lecho es un parámetro matemático que determina la calidad de la fluidización. Cuando se ingresa el agente gasificante a la velocidad de mínima fluidización en dirección ascendente, el fluido se mueve entre los espacios vacíos de las partículas del lecho, generando una caída de presión, y puede ser estimada mediante la Ecuación (92), además, conforme la velocidad del fluido sea mayor a la de mínima fluidización, mayor será la caída de presión y la fuerza de rozamiento entre partículas.

$$\Delta P_{bed-mf} = g(1 - \varepsilon_{mf})(\rho_p - \rho_f)H_{mf} \quad (92)$$

Donde:

$H_{mf}$ : Altura del lecho en condiciones de mínima fluidización [m]

**2.4.6.6 Estado de fluidización.** Es un parámetro adimensional que relaciona de forma inversamente proporcional la velocidad superficial del agente gasificante con respecto a la velocidad de mínima fluidización (ver Ecuación 93). Este valor suele definir el régimen de fluidización en un gasificador de lecho fluidizado, tomando valores entre 2 y 6 para régimen burbujeante. La variación de este parámetro influirá en el contacto entre las partículas sólidas y el gas durante las reacciones heterogéneas y la generación de burbujas o turbulencias. A valores más altos del estado de fluidización, supone un incremento del contenido de nitrógeno y bajos tiempos de residencia.

$$EF = \frac{u_o}{u_{mf}} \quad (93)$$

Donde:

$EF$ : Estado de fluidización [–]

$u_{mf}$ : Velocidad de mínima fluidización [m/s]

**2.4.6.7 Factor de expansión del lecho.** Cuando inicia el fenómeno de fluidización, el lecho se expande ligeramente, sin embargo, se utiliza el factor de expansión del lecho (se conocerá como  $f_{bex}$ ) para determinar la altura máxima que alcanza el lecho con la velocidad superficial del agente fluidizante. Con las Ecuaciones empíricas (94)-(95) de Babu & Talwalker (1978) para gasificación del carbón citadas por Gómez-Barea & Leckner (2010) se puede estimar este valor para la biomasa, debido a que la ecuación depende de las características del lecho y no del tipo de material.

$$f_{bex} = 1 + \frac{1.032(u_o - u_{mf})^{0.57} \rho_f^{0.083}}{\rho_p^{0.166} u_{mf}^{0.063} D_t^{0.445}} \rightarrow D_t < 0.0635 \text{ m} \quad (94)$$

$$f_{bex} = 1 + \frac{14.31(u_o - u_{mf})^{0.738} d_p^{1.006} \rho_p^{0.376}}{\rho_f^{0.126} u_{mf}^{0.937}} \rightarrow D_t > 0.0635 \text{ m} \quad (95)$$

Donde:

$D_t$ : Diámetro de la base del lecho [m]

**2.4.6.8 Diseño del distribuidor.** El plato distribuidor está ubicado en la parte interna inferior, a unos centímetros del sistema de inyección del agente gasificante (ver Figura 35), y es una parte importante en el diseño del gasificador. Por ello, el diámetro, el número y la disposición de los agujeros en el plato distribuidor de flujo influyen en el proceso de fluidización, debido a que estos parámetros ayudan a la correcta distribución del fluido gaseoso (medio gasificante) con dirección ascendente, para generar una interacción homogénea entre partículas sólidas del lecho y gas. Además, se debe considerar que la caída de presión alrededor del plato distribuidor nunca debería ser menor que 2500 Pa (Cocco, Reddy Karri, & Knowlton, 2014). Para el modelo matemático desarrollado en la presente investigación es necesario conocer el número de agujeros en el plato distribuidor con la finalidad de calcular el diámetro inicial de las burbujas.

**2.4.6.9 Área interfacial entre las fases burbuja y emulsión por unidad de volumen de lecho.** Se asocia o se asume que el área superficial de las partículas por unidad de volumen representa la misma área entre los espacios intersticiales que forman las burbujas durante la fluidización en dicho régimen (Davidson, 1995) y se define mediante la Ecuación (96).

$$a_s = \frac{6\varepsilon_B}{d_B} \quad (96)$$

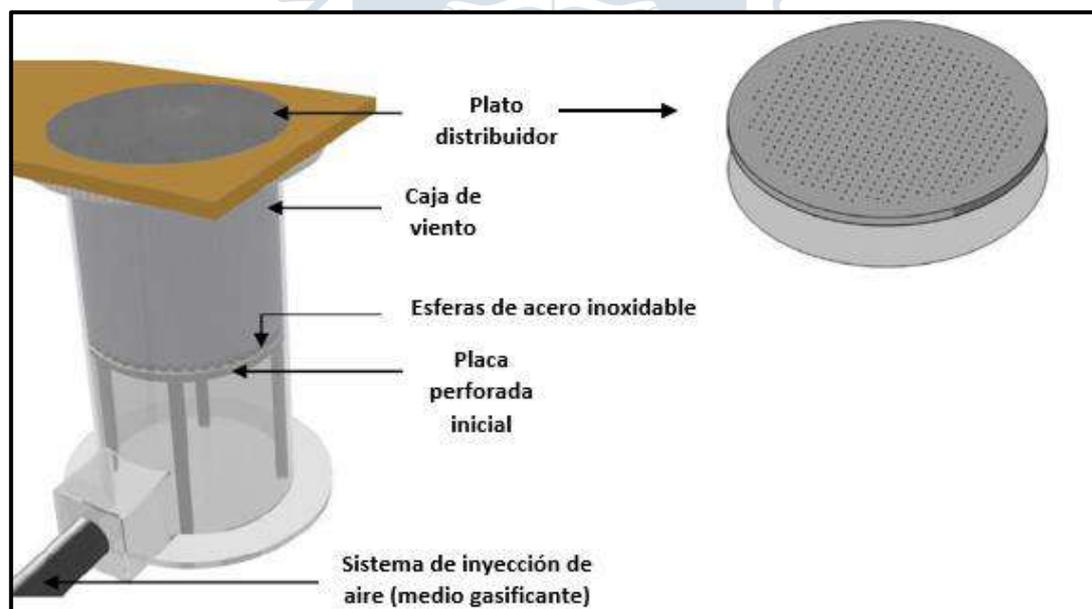


Figura 35. Sistema de caída de presión con caja de viento y plato distribuidor de aire  
Fuente: Obtenido de Cluet, (2014)

**2.4.6.10 Fracción de volumen ocupado por las burbujas.** Este parámetro representa la fracción de volumen ocupado por las burbujas con respecto al volumen formado en el interior del reactor. Si se obtienen valores mayores, entre 0.4 y 0.5, o excesivamente mayores cuando se estima este parámetro, se caería en un serio error de aproximación cuando

se trabaja en lechos fluidizados burbujeantes, ya que supondría la transición a un régimen turbulento (Grace, 1986). Según Kaushal et al (2010) cuando se quiere analizar este parámetro en función de la altura expandida del lecho, se debe calcular mediante la Ecuación (97):

$$\varepsilon_B(z) = \frac{Y(u_o - u_{mf})}{u_B} \quad (97)$$

Por otro lado, Kunii & Levenspiel (1991) proponen la Ecuación (98):

$$\varepsilon_B(z) = \frac{u_o - u_{mf}}{u_B - u_{mf}} \quad (98)$$

Autores como Gómez-Barea & Leckner (2010) citan las Ecuaciones (99)-(100) simplificadas, que fueron formuladas por Johnsson, Andersson & Leckner (1990) para estimar este parámetro como una constante, en función de la velocidad superficial del medio gasificante ( $u_o$ ) y la velocidad de mínima fluidización ( $u_{mf}$ ).

$$\varepsilon_B = \frac{1}{1 + \left[ \frac{1.3}{f} (u_o - u_{mf})^{-0.8} \right]} \quad (99)$$

$$f = (0.26 + 0.7e^{-3.3d_p})(0.15 + u_o - u_{mf})^{-0.33} \quad (100)$$

Así mismo, en la investigación de Tosina (2013) se señala la siguiente relación en base al factor de expansión del lecho fluidizado (ver Ecuación 101).

$$\varepsilon_B = 1 - \frac{1}{f_{bex}} \quad (101)$$

La presente investigación está enfocada en formular un modelo matemático unidimensional, por esta razón es comprensible analizar las ecuaciones propuestas en diversas literaturas para el cálculo de  $\varepsilon_B$ . Sin embargo, para efectos de simplificación matemática, y suponiendo que la formación de burbujas es continua y de un tamaño similar a determinada altura axial del reactor, se puede suponer que este parámetro es constante, por ello se usará la Ecuación (101).

Es necesario mencionar que la fracción de volumen ocupado por las burbujas en un sistema real debería incrementar ligeramente, debido al aumento del tamaño de la burbuja por coalescencia (Fotovát & Chaouki, 2013), sin embargo, para estimar el valor de  $\varepsilon_B$  se utilizan correlaciones empíricas, por ello, siempre existirán variaciones significativas o no significativas, debido a las hipótesis y condiciones que consideran los autores, pero el uso de cada ecuación dependerá del tipo de modelación y del grado de precisión que se quiera obtener la fracción de vacío en el lecho. Este parámetro se calcula mediante la Ecuación

(102), propuesta por Gómez-Barea & Leckner (2010), y no interviene en los cálculos sobre la hidrodinámica del lecho fluidizado, sin embargo, permite identificar la zona axial en donde existe mayor formación de burbujas y la zona a partir de la cual las burbujas empiezan a explosionar y desaparecen como una formación gaseosa o de vacío al interior del reactor, esto ocurre cuando  $\varepsilon_f$  se calcula en función de la fracción de volumen ocupado por las burbujas  $\varepsilon_B(z)$ .

$$\varepsilon_f = \varepsilon_B + (1 - \varepsilon_B)\varepsilon_{mf} \quad (102)$$

**2.4.6.11 Fracción de volumen ocupado por los sólidos del lecho.** La fracción de volumen ocupado por los sólidos del lecho hace referencia a la cantidad de material sólido de lecho (biomasa + material inerte) presente al interior del reactor durante la fluidización en régimen burbujeante. Al igual que la fracción de vacío en el lecho, este parámetro ( $\varepsilon_s$ ) presenta una región; con la diferencia que los sólidos se encuentran altamente concentrados cerca de la pared del reactor, y a medida que incrementa la altura del reactor, el valor de  $\varepsilon_s$  disminuye rápidamente (Alvarez, Mori, & Martignoni, 2015), esto sucede cuando la fracción de volumen ocupado por los sólidos se calcula en función de la altura axial del reactor  $\varepsilon_s(z)$ , sin embargo, su valor puede ser considerado constante (ver Ecuación 103) cuando la altura del reactor no excede los 2.5 m, esto se observa en la Figura 36, donde los valores calculados no presentan una variación significativa con los datos experimentales que fueron comparados con diversos tipos de modelación.

$$\varepsilon_s = 1 - \varepsilon_f \quad (103)$$

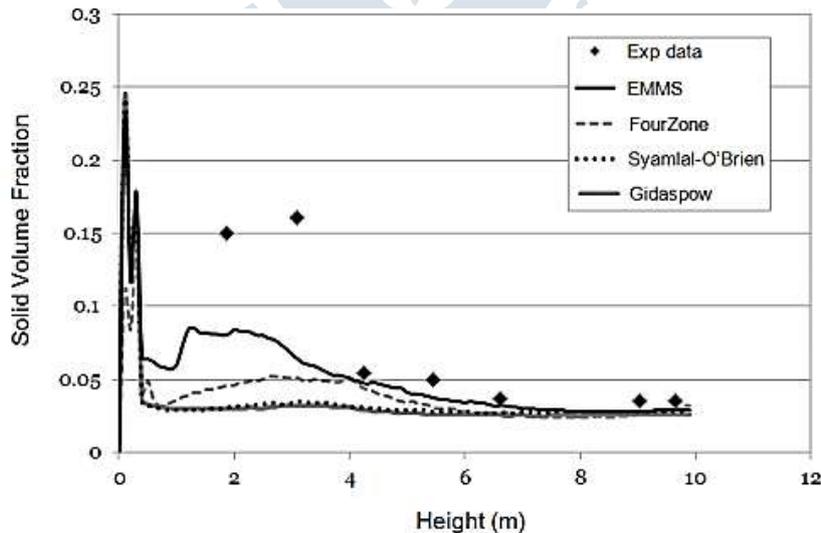


Figura 36. Perfil axial de la fracción de volumen ocupado por los sólidos en un reactor de lecho fluidizado

Fuente: Obtenido de Álvarez, Mori & Martignoni, (2015)

**2.4.6.12 Altura del lecho en condiciones de mínima fluidización.** Es el valor de la altura del lecho fluidizado en condiciones de mínima fluidización y es ligeramente mayor (40%) a la altura del lecho fijo ( $H_{fixed-bed}$ ). Convencionalmente se utiliza la Ecuación (104) para determinar la altura cuando las fuerzas de arrastre se igualan al peso de la cama del lecho.

$$H_{mf} = 1.4H_{fixed-bed} \quad (104)$$

**2.4.6.13 Altura del lecho expandido.** Se define como la altura que llega el lecho durante el régimen burbujeante generado por la velocidad superficial del agente gasificante, esta altura es menor que la altura del reactor. En la investigación de Grace (1986) se plantea la Ecuación (105) para estimar este parámetro en función del factor de expansión del lecho ( $f_{bex}$ ) y la altura de mínima fluidización ( $H_{mf}$ ).

$$H_{exp} = \frac{H_{mf}}{1 - \varepsilon_B} = f_{bex} \times H_{mf} \quad (105)$$

En algunas investigaciones para estimar el valor de  $H_{exp}$  consideran el uso de la fracción de volumen ocupado por las burbujas como variable, sin embargo, es válido separar este parámetro y considerar únicamente el factor de expansión del lecho fluidizado; para obtener un valor fijo de la altura del lecho fijo (ver apartado 2.4.6.7).

**2.4.6.14 Razón de equivalencia.** La razón de equivalencia es un factor adimensional utilizado en el proceso de conversión térmica y se define como la relación entre el flujo másico real de aire-biomasa en  $kg/s$  y el flujo de aire-biomasa estequiométrico expresados en  $kg/mol$  (ver Ecuación 106); necesario para generar una combustión completa. En el informe de Gungor (2011) menciona ciertos rangos para la razón de equivalencia (ER) establecidos en diversas literaturas, por ejemplo, Narvaez et al (1999) establece un rango entre 0.25-0.45, autores como Skoulou et al (2009) acotan un poco este rango entre 0.2-0.4. Cuando el valor incrementa, la combustión tiene mayor intensidad al tener gran cantidad de flujo de aire, por lo tanto, se producirán mayores niveles  $CO_2$  y se favorecen las reacciones de oxidación y dilución producidas por el nitrógeno presente en el aire inyectado, generando menores concentraciones de  $CO$ ,  $H_2$ ,  $CH_4$  y conversión de tar; en consecuencia, se disminuye el poder calorífico inferior del gas de síntesis, en otras palabras, este parámetro (ER) determina la fracción de biomasa que se gasifica y la fracción que se quema.

Por el contrario, si se toman valores muy pequeños del  $ER$ , las temperaturas de reacción serán menores, desfavoreciendo al proceso de gasificación. Por lo tanto, es necesario establecer un rango de valores para encontrar un  $ER$  óptimo para el proceso analizado en la presente investigación. Se trabajará en un rango de 0.19-0.32.

$$ER = \frac{\left(\frac{\dot{m}_{aire}}{\dot{m}_{biomasa}}\right)_{real}}{\left(\frac{\dot{m}_{aire}}{\dot{m}_{biomasa}}\right)_{estequiométrico}} \quad (106)$$

**2.4.6.15 Gasto másico de biomasa.** Este parámetro se determina mediante un balance estequiométrico simplificado propuesto por Tosina (2013) y basado en la Ecuación (24) del apartado 2.1.4, además, la reacción química ocurre en un proceso de combustión completa, según las hipótesis del modelo estequiométrico. Donde  $x_C$ ,  $x_H$ ,  $x_O$  y  $x_N$  representan las fracciones másicas del carbono, hidrógeno, oxígeno y nitrógeno respectivamente, y son calculadas en función de los valores obtenidos en el análisis elemental (ver apartado 1.2.4). Como se observa en la reacción química, los principales productos de gasificación u oxidación parcial serán el monóxido de carbono, vapor de agua y nitrógeno, y la cantidad de moles se muestran en la Tabla 26. Así mismo, en la Ecuación (107) se muestra la relación entre el balance estequiométrico biomasa-aire necesario para la reacción.



Tabla 26. Balance de coeficientes molares y cantidad de agentes reactantes y productos

Especie	Cantidad de reactante	Cantidad de producto	Coefficiente molar
C	$x_C$	$b$	$b = x_C$
H	$x_H$	$2c$	$c = x_H/2$
O	$2a + x_O$	$2b + c$	$a = x_C + x_H/4 - x_O/2$
N	$7.52a + x_N$	$2d$	$d = 3.76a + x_N/2$

Fuente: Obtenido de Tosina, (2013)

$$\left(\frac{\dot{m}_{biomasa}}{\dot{m}_{aire}}\right)_{estequiométrico} = \frac{x_C PM_C + x_H PM_H + x_O PM_O + x_N PM_N}{(x_C + x_H/4 - x_O/2)(2PM_O + 7.52PM_N)} \quad (107)$$

Si se reemplaza la ecuación (107) en la ecuación para calcular la razón de equivalencia ( $ER$ ), y se despejan las variables en función del flujo másico de aire real y la relación estequiométrica, se obtiene la Ecuación (108).

$$(\dot{m}_{biomasa})_{real} = \frac{(\dot{m}_{aire})_{real}}{ER \left(\frac{\dot{m}_{aire}}{\dot{m}_{biomasa}}\right)_{estequiométrico}} \quad (108)$$

Para estimar el gasto másico de aire real en  $kg/s$  es necesario conocer la velocidad superficial del agente gasificante en  $m/s$ , su densidad en  $kg/m^3$  y el área de la sección transversal del reactor en  $m^2$  (ver Ecuación 109).

$$(\dot{m}_{aire})_{real} = u_o \rho_{gas} \left( \frac{\pi D_i^2}{4} \right) \quad (109)$$

- **Cálculo del gasto másico de biomasa seca**

Este parámetro es de vital importancia, pues estima el valor de la biomasa alimentada libre de cenizas y de humedad que reacciona en el proceso de gasificación, y se usa solo en el caso que el análisis elemental se haya calculado en base húmeda, mediante la Ecuación (110).

$$\dot{m}_{biomasa-seca} = (\dot{m}_{aire})_{real} (1 - w) (1 - ash) \quad (110)$$

- **Cálculo del gasto másico por especie volátil**

Para estimar este parámetro, se utilizan las fracciones molares de las especies producidas en la devolatilización (ver apartado 1.3.1.2), donde “i” representa las ocho especies volátiles producidas (CO, CO<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, CH<sub>4</sub>, N<sub>2</sub>, char). El parámetro se estima con la Ecuación (111).

$$\dot{m}_i = \dot{m}_{biomasa-seca} Y_{mv-i} \quad (111)$$



## Capítulo 3

### Descripción del método de solución numérica

#### 3.1 Método numérico

Esta investigación se enfoca en el análisis de los parámetros que influyen en la calidad del gas de síntesis obtenido en un gasificador de lecho fluidizado burbujeante basado en ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO) de balance de masa. Por ello, el método para implementar el modelo matemático debe ser una herramienta intuitiva que ayude a predecir el comportamiento del lecho fluidizado bajo condiciones estacionarias de operación, y bajo hipótesis consideradas anteriormente. Mediante el uso de un método numérico ideal se puede reducir el error, y hacer fiable la aproximación de resultados debido a la cantidad de iteraciones predeterminadas, así mismo es posible detectar las variables que ejercen un efecto sobre los resultados de un caso particular, como lo es el proceso de gasificación. Cabe resaltar que el método de solución numérica es económico en comparación con la experimentación y es factible antes de operar algún equipo para tener una noción de los posibles resultados. Dentro de las principales clasificaciones de los métodos numéricos tenemos aquellos que son de un solo paso y los de multipasos.

##### 3.1.1 Métodos de un solo paso

Este tipo de cálculo necesita de un solo valor anterior ( $y_k$ ) extrapolado mediante el valor de una pendiente, para estimar el valor futuro ( $y_{k+1}$ ) en una distancia o mayormente llamado iteración. Por ello, las fórmulas se aplican paso a paso para calcular el valor posterior con la finalidad de trazar o estimar la trayectoria de la solución de la EDO. Todos los métodos de un solo paso solo difieren en la manera que se estima la pendiente (Chapra & Canale, 2011).

**3.1.1.1 Método de Euler.** El método de Euler es el más simple e intuitivo para resolver ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden, sin embargo, este método posee la desventaja de aplicarse a cierto tipo de problemas, pues converge muy lento hacia la solución.

Para resolver la EDO se necesita de una condición inicial, además, se debe dividir el intervalo en  $N$  partes iguales (ver Ecuación 112). Además, se debe definir un intervalo para el análisis de la siguiente forma:  $[t_0, t_0 + \alpha]$ , donde  $t_0$  representa el valor inicial del intervalo y  $\alpha$  representa el valor del incremento para llegar al valor final. Al definir el valor de  $\alpha$  y el número de divisiones ( $N$ ) se puede calcular el paso para las iteraciones (ver Ecuación 113).

$$t_1 = t_0 + h, \quad t_2 = t_0 + 2h, \quad \dots, \quad t_N = t_0 + Nh = t_0 + \alpha \quad (112)$$

$$h = \alpha/N \quad (113)$$

Mediante el concepto de la derivada de una función y considerando que el paso ( $h$ ) es lo suficientemente pequeño se demuestra con las Ecuaciones (114)-(116) la Ecuación (117) para estimar el valor futuro ( $y_{k+1}$ ), esto se conoce como la ecuación de Euler.

$$y'(t_k) = \lim_{h \rightarrow \infty} \frac{y(t_k + h) - y(t_k)}{h} \quad (114)$$

$$y'(t_k) = f(t_k, y(t_k)) \approx \frac{y(t_k + h) - y(t_k)}{h} \quad (115)$$

$$y(t_{k+1}) \approx y(t_k) + hf(t_k, y(t_k)), \quad k = 0, 1, 2, \dots, N - 1 \quad (116)$$

$$y_{k+1} = y_k + hf(t_k, y_k), \quad k = 0, 1, 2, \dots, N - 1 \quad (117)$$

**3.1.1.2 Método de la Serie de Taylor.** Las Series de Taylor sirven como punto de partida para la formulación de otros métodos numéricos, tal es el caso del método de Euler que toma el polinomio de grado uno. Sin embargo, la formulación de Taylor no es de forma estricta un método numérico (Chaillou, 2008).

Al tener una ecuación diferencial de la forma  $\frac{dy}{dx} = f(x, y)$ , se puede establecer una relación entre las variables de la función  $f(x, y)$  al estimar los coeficientes de la Serie de Taylor (ver Ecuación 118), sin embargo, es necesario mencionar que no siempre se obtiene una solución. Además, al incrementar el orden ( $n$ ) del método, se obtiene mayor precisión, pero no se recomienda esto porque las expresiones se tornan complejas y poco prácticas para la solución de ecuaciones diferenciales ordinarias.

$$f(x_{k+1}) = f(x_k) + f'(x_k)(x_{k+1} - x_k) + \frac{f''(x_k)}{2!}(x_{k+1} - x_k)^2 + \dots \quad (118)$$

$$+ \frac{f^n(x_k)}{n!}(x_{k+1} - x_k)^n$$

Al cambiar las variables  $f(x_k)$  por  $y(t_k)$  y  $(x_{k+1} - x_k)$  por  $h$ , y se trunca la Serie de Taylor hasta el tercer término, el método se denomina de segundo orden, obteniendo la Ecuación (119), siendo una ecuación de referencia para otros métodos.

$$y(x_{k+1}) = y(x_k) + y'(x_k)h + \frac{y''(x_k)}{2!}h^2 \quad (119)$$

**3.1.1.3 Métodos de Runge-Kutta.** Los métodos de Runge-Kutta alcanzan un grado de precisión mayor que los métodos anteriores, debido a que requieren de múltiples evaluaciones de la función  $f(x, y)$  en cada intervalo  $[t_0, t_f]$ . Dentro de esta familia de métodos se encuentran dos variantes mayormente utilizadas: el método de Runge-Kutta de segundo orden, desde ahora RK2, y el método de Runge-Kutta de cuarto orden, desde ahora RK4 (Ezquerro, 2012).

- **Método de Runge-Kutta de segundo orden**

Es una variante del método de las Series de Taylor de orden dos (ver Ecuación 120). Este método no es muy preciso en comparación con el método de RK4, la ventaja radica en el fácil desarrollo manual (ver Ecuación 121). Los coeficientes se estiman con las Ecuaciones (122)-(123).

$$y(x_{k+1}) = y(x_k) + f(x_k, y_k)h + \frac{f(x_k, y_k)}{2!}h^2 \quad (120)$$

$$y_{k+1} = y_k + \frac{1}{2}(b_1 + b_2)h \quad (121)$$

$$b_1 = f(x_k, y_k) \quad (122)$$

$$b_2 = f(x_k + h, y_k + b_1h) \quad (123)$$

Donde  $t_0$  representa el valor inicial de la variable independiente,  $t_f$  representa el valor final de la variable independiente,  $h$  representa el valor paso o incremento que puede ser asignado de forma directa o estimado mediante la cantidad de divisiones igualmente espaciadas ( $N$ ), por último,  $y_k$  representa el valor de la variable dependiente en la iteración  $k = 0, 1, 2, \dots, N$ .

- **Método de Runge-Kutta de cuarto orden**

El método de RK4 introduce dos pasos intermedios o dos constantes extra para la evaluación de la derivada, en comparación al método de segundo orden con la finalidad de obtener una mejor pendiente promedio en el intervalo dado. Debido a esto, se garantiza que la evaluación y el ajuste presente una mayor exactitud, disminuyendo el error global.

Las Ecuaciones (124)-(128) presentadas a continuación, intentan predecir el comportamiento de una función con tres puntos (ver Figura 37), en base a valores iniciales de una determinada función.

### 3.1.2 Métodos multipasos

En el apartado 3.1.1 se describió algunos de los métodos numéricos de un solo paso mayormente utilizados para resolver ecuaciones diferenciales ordinarias, cuya característica principal es el cálculo de forma recursiva a partir de un término anterior. La idea de los métodos multipasos radica en incluir en el método algunas aproximaciones previas, es decir, incluir varios pasos anteriores para predecir o estimar el valor futuro.

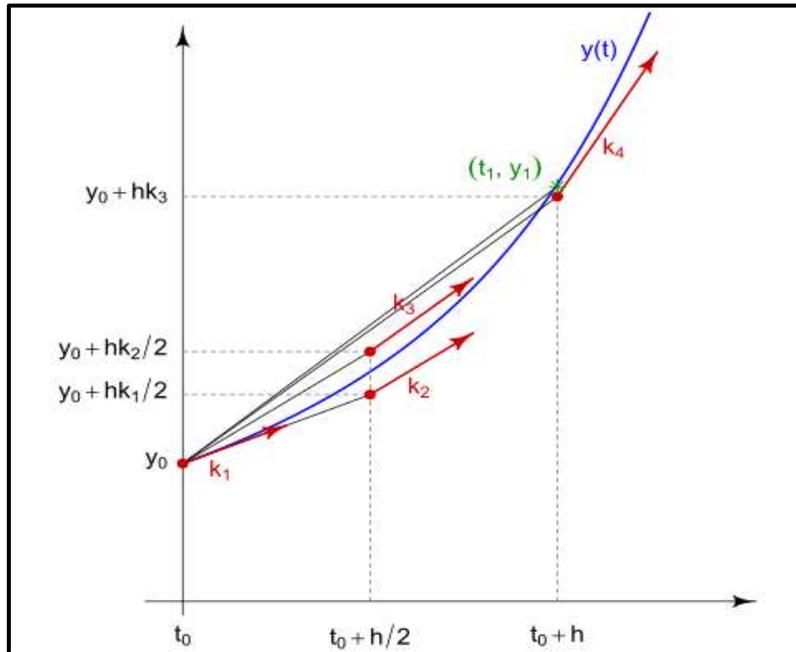


Figura 37. Constantes para el cálculo de la pendiente mediante el método de RK4

Fuente: <http://progfortran.pbworks.com/w/page/130183938>

$$y_{k+1} = y_k + \left(\frac{h}{6}\right) (b_1 + 2b_2 + 2b_3 + b_4) \quad (124)$$

$$b_1 = f(x_k, y_k) \quad (125)$$

$$b_2 = f\left(x_k + \frac{h}{2}, y_k + \frac{b_1 h}{2}\right) \quad (126)$$

$$b_3 = f\left(x_k + \frac{h}{2}, y_k + \frac{b_2 h}{2}\right) \quad (127)$$

$$b_4 = f(x_k + h, y_k + hb_3) \quad (128)$$

**3.1.2.1 Método Adams-Bashforth.** El método de Adams-Bashforth se deduce a partir de la integración numérica, y al ser un método explícito; el cálculo del valor futuro ( $y_{k+1}$ ) no necesita de la evaluación de la función analizada con las variables futuras  $f(x_{k+1}, y_{k+1})$ . Además, este método necesita de dos valores para iniciar el cálculo numérico,  $y_{k+1}$  y  $y_k$  con la finalidad de estimar el valor de  $y_{k+2}$ . Por ello, este método multipaso necesita de los métodos de un solo paso vistos en el apartado 3.1.1; como el método de Euler, debido a que solo se conoce el valor inicial.

La deducción de las fórmulas de este método inicia con un polinomio de interpolación de grado  $m - 1$ , y se integra entre los límites  $y_k$  y  $y_{k+1}$ , inferior y superior respectivamente (ver ecuaciones 119-120). La resolución y demostración de las fórmulas o expresiones para

diferentes pasos o número de orden del método Adams-Bashforth no serán tema de interés de la presente investigación, sin embargo, se presentan las ecuaciones finales que permitirán solucionar una EDO y servirán para explicar el método de solución en código MATLAB.

$$\int_{t_k}^{t_{k+1}} y'(t)dt = \int_{t_k}^{t_{k+1}} f(t, y(t))dt \quad (119)$$

$$y(t_{k+1}) = y(t_k) + \int_{t_k}^{t_{k+1}} f(t, y(t))dt \quad (120)$$

- **Método Adams-Bashforth de dos pasos**

Intenta predecir el segundo punto de la función evaluada, considerando un valor de  $i = 1$ , es decir, se necesita conocer el punto anterior. Esto se estima con la Ecuación (121).

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2} [3f(x_i, y_i) - f(x_{i-1}, y_{i-1})] \quad (121)$$

- **Método Adams-Bashforth de tres pasos**

Intenta predecir el tercer punto de la función evaluada, considerando un valor de  $i = 2$ , es decir, se necesita conocer los dos puntos anteriores. Esto se estima con la Ecuación (122).

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{12} [23f(x_i, y_i) - 16f(x_{i-1}, y_{i-1}) + 5f(x_{i-2}, y_{i-2})] \quad (122)$$

- **Método Adams-Bashforth de cuatro pasos**

Intenta predecir el cuarto punto de la función evaluada, considerando un valor de  $i = 3$ , es decir, se necesita conocer los tres puntos anteriores. Esto se estima con la Ecuación (123).

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24} [55f(x_i, y_i) - 59f(x_{i-1}, y_{i-1}) + 37f(x_{i-2}, y_{i-2}) - 9f(x_{i-3}, y_{i-3})] \quad (123)$$

- **Método Adams-Bashforth de cinco pasos**

Intenta predecir el quinto punto de la función evaluada, considerando un valor de  $i = 4$ , es decir, se necesita conocer los cuatro puntos anteriores. Esto se estima con la Ecuación (124).

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{720} [190f(x_i, y_i) - 2774f(x_{i-1}, y_{i-1}) - 2616f(x_{i-2}, y_{i-2}) - 1274f(x_{i-3}, y_{i-3}) + 251f(x_{i-4}, y_{i-4})] \quad (124)$$

El método de Adams-Bashforth de cuatro pasos (ver Ecuación 123) es el más utilizado para la resolución de sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias, junto con el método de RK4 para estimar los tres puntos anteriores, porque ambos métodos tienen el mismo error local (Ezquerro, 2012).

**3.1.2.2 Método de Adams-Moulton.** Los métodos de Adams-Moulton son del tipo implícitos, es decir, que sí necesitan de la evaluación de la función analizada con las variables futuras  $f(x_{k+1}, y_{k+1})$ . Al igual que el método multipaso anterior, la deducción de las ecuaciones se basa en la integración numérica de la EDO, con la diferencia que el polinomio de interpolación de Lagrange pasa por un nuevo punto  $(t_{k+1}, f(x_{k+1}, y_{k+1}))$  correspondiente al valor futuro.

Las ecuaciones (125)-(127) resultantes según el grado del polinomio de interpolación se presentan a continuación. Tomar en cuenta que, al reemplazar el grado igual a uno, se obtiene la Ecuación (125) y esta resulta ser igual a la Regla del Trapecio, la desventaja radica en que la precisión del valor predécido disminuye considerablemente. Por el contrario, a partir del grado dos ( $i = 1$ ) hasta el grado cuatro ( $i = 3$ ) la precisión aumenta.

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2} [f(x_{i+1}, \bar{y}_{i+1}) + f(x_i, y_i)] \quad (125)$$

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{12} [5f(x_{i+1}, \bar{y}_{i+1}) + 8f(x_i, y_i) - f(x_{i-1}, y_{i-1})] \quad (126)$$

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24} [9f(x_{i+1}, \bar{y}_{i+1}) + 19f(x_i, y_i) - 5f(x_{i-1}, y_{i-1}) + f(x_{i-2}, y_{i-2})] \quad (127)$$

Nótese que en las Ecuaciones (125), (126) y (127) aparece un nuevo término  $\bar{y}_{i+1}$ , esto corresponde al valor predécido anteriormente mediante el método de Adams-Bashforth. Como se verá en el apartado 3.1.3.1, el método de solución numérica para el modelo matemático desarrollado implica el uso de métodos multipasos y de un solo paso para mejorar la precisión de los resultados.

### 3.1.3 Comparativa de métodos numéricos de solución para EDO en MATLAB

MATLAB es un programa computacional con múltiples aplicaciones ingenieriles, y su nombre significa laboratorio de matrices. Este software posee un paquete para resolver ecuaciones diferenciales de primer orden, que usualmente se designan como ODE solvers.

La Figura 38 describe la forma de llamar al comando ODE en código MATLAB. Al empezar a describir el comando de izquierda a derecha, en primer lugar, la variable de salida  $t$  representa una matriz de puntos de evaluación en función al rango de solución, del mismo modo, la variable  $y$  representa un *array* con los valores de salida o soluciones de la ecuación diferencial ordinaria de primer orden. En el lado derecho encontramos propiamente el comando de la función ODE, que dependerá del tipo de método que se desea aplicar y de la precisión en los resultados, esto se explica de manera más detallada en la Tabla 29. Internamente, el método ODE seleccionado depende de cuatro parámetros: *odefun* representa el nombre de la función a resolver, *tspan* representa los límites de integración o el rango en que se analizarán las soluciones; estos valores deben escribirse entre corchetes y separados por un espacio, por último,  $y0$  representa la condición o condiciones iniciales que pueden ser representadas en forma matricial.

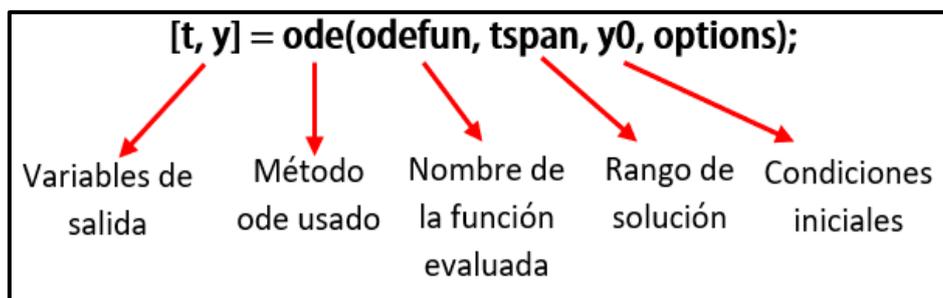


Figura 38. Funciones y representación del comando ODE en MATLAB

Los tipos de ODE *solvers* básicos se presentan en la Tabla 27 con sus características fundamentales. De forma general, el método ODE usado en primera instancia para la solución de una ecuación diferencial de primer orden sería *ode45*, sin embargo, el uso de un método en específico dependerá de la precisión de los resultados, del tiempo de respuesta y de la complejidad de la ecuación diferencial (Mañas & Pinta, 2018).

Para comprender la clasificación de los *solvers* es necesario tener claro los dos tipos de problemas que pueden ser resueltos mediante el comando ODE. Los problemas rígidos o *stiff* son aquellos en los que el valor de la derivada o solución de la EDO varía lentamente, y, además, existen soluciones que varían rápidamente, es decir, la ecuación resulta ser numéricamente inestable, a menos que el método numérico tenga un paso muy pequeño para obtener errores aceptables. Por el contrario, los modelos no rígidos o *nonstiff* presentan una solución rápida y estable. Por ello, se debe aplicar el método numérico correcto para resolver un modelo matemático mediante ecuaciones diferenciales. Esta clasificación de los dos tipos de problemas mencionados se presenta en la Tabla 27 con sus respectivos *solvers*.

Una estrategia rápida para escoger el *solver* adecuado que resuelva una ecuación diferencial de algún modelo matemático es identificar el tipo de problema, y en base a ello se debe probar que método ofrece una solución adecuada con baja cantidad de iteraciones en el menor tiempo posible. Así mismo, se pueden comparar las soluciones de los *solvers* de forma gráfica para observar la convergencia rápida de los resultados.

Tabla 27. Comparativa de solvers en MATLAB para ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden

ODE solver	Tipo de método	Método	Tipo de problema	Exactitud	Uso
ode45	Explícito	Runge-Kutta (RK4 o RK5)	No rígido	Media	La mayoría de las veces converge
ode23		Runge-Kutta (RK2 o RK3)		Baja	Bajas tolerancias de error y problemas rígidos moderados
ode113		Adams-Bashforth Moulton		Baja-Alta	Tolerancias de error estrictas
ode15s	Implícito	Numerical differentiation formulas (NFDs)	Rígido	Baja-Media	Cuando ode45 no converge.
ode23s		Rosenbrock de segundo orden		Baja	Tolerancias de error estrictas
ode23t		Regla del Trapecio con interpolación libre		Baja	Para problemas moderadamente rígidos y para ecuaciones diferenciales algebraicas
ode23tb		Fórmula implícita de Runge-Kutta (TR-BDF2)		Baja	Más eficiente que ode15s y para tolerancias de error estrictas
ode15i		Tamaño de paso variable y orden variable (VSVO)		Totalmente implícito	Baja

Fuente: Adaptado de Mathworks The Language of Technical Computing

**3.1.3.1 Selección del método numérico.** Los métodos multipasos normalmente se utilizan junto con otras fórmulas y métodos para aumentar la precisión de la aproximación numérica, así como la rapidez del cálculo iterativo, además, presentan la característica de poder agrupar las fórmulas implícitas y explícitas. Por ejemplo, un tipo específico recibe el nombre de método predictor-corrector, donde se predice mediante el método de Adams-Bashforth y el valor se corrige mediante el método de Adams-Moulton, además, ambos tienen que ser del mismo orden.

La característica principal del método predictor-corrector es que en cada paso utilizan operaciones matriciales para resolver un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden de forma simultánea, con la finalidad de predecir la evolución de la solución. Este método es muy robusto para diferentes aplicaciones ingenieriles, por ejemplo, en la solución de modelos matemáticos, por ello se tendrá en cuenta el uso de este método para la solución de las ecuaciones de transformación de flujo molar durante el proceso de gasificación.

La solución numérica del método de interés mencionado anteriormente, en código MATLAB está representado por el comando `ode113`, y el esquema de solución se describe en la Figura 39.

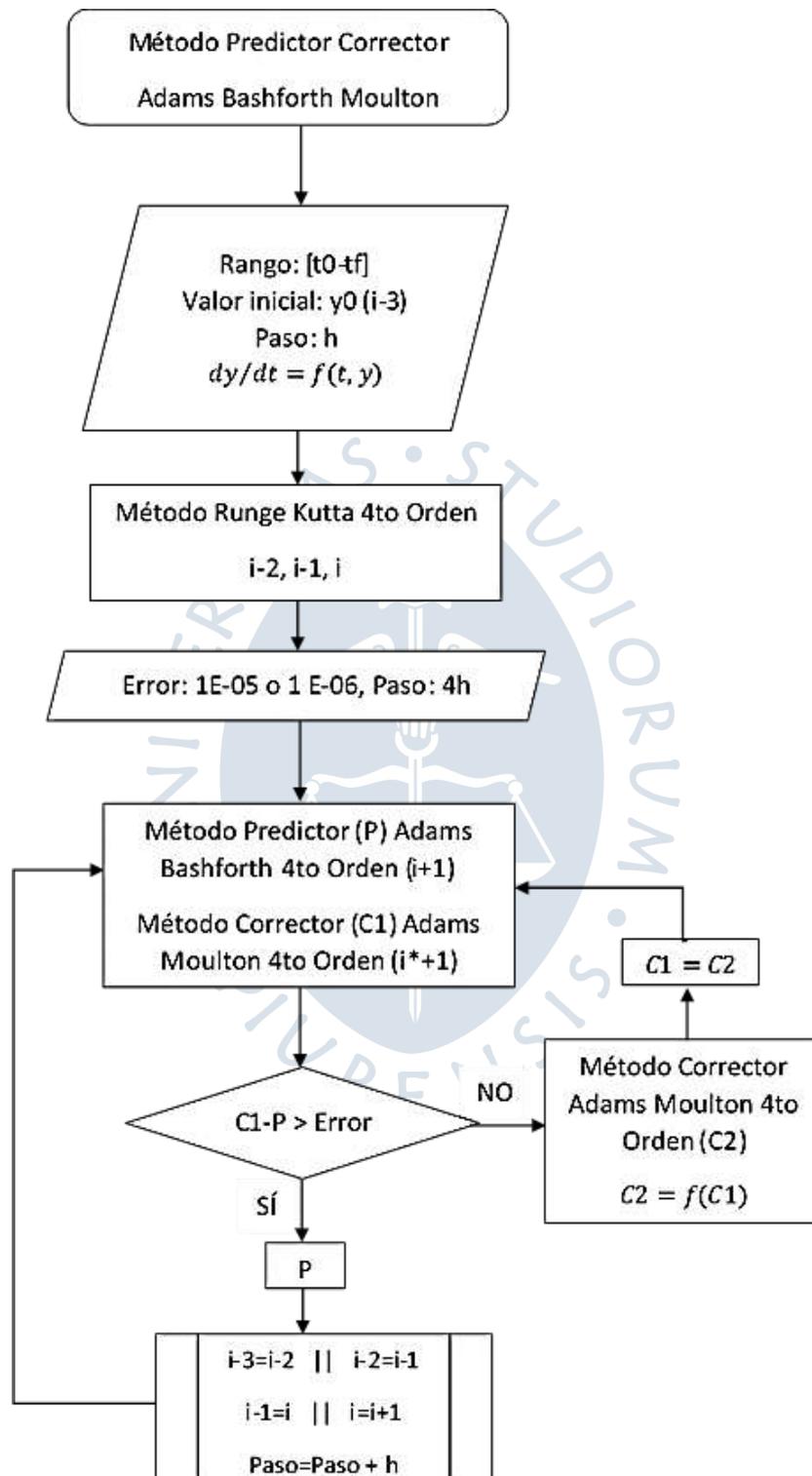


Figura 39. Diagrama de flujo del método predictor-corrector

### 3.1.4 *Criterios de convergencia y estabilidad del método numérico con respecto a las ecuaciones utilizadas del proceso de gasificación*

Los criterios vistos a continuación serán aquellos que busquen que la solución numérica pueda funcionar correctamente al resolver un conjunto de funciones de forma secuencial escritas en código MATLAB (ver apartado 3.3). En base a ello, se consideró necesario iniciar la solución de los tres primeros valores predecidos mediante el método de Runge-Kutta de cuarto orden, así se puede asegurar una convergencia preliminar del método numérico; pues no solo dependerá de los valores iniciales estimados, sino también de las diversas ecuaciones planteadas para describir el proceso de gasificación, por ello se plantean algunos criterios que permitan una correcta aproximación.

- I. De forma general, a una determinada cantidad de iteraciones, las aproximaciones resultan cada vez más cercanas al valor real, por ende, el sistema converge.
- II. Los métodos multipasos pueden ser estables para todos los valores de  $h$  (paso) o para una clase de valores de  $h$ , es decir, que el paso puede ser variable para asegurar una estabilidad. La presente investigación utiliza un comando definido en MATLAB (ode113) para la solución numérica, y está demostrado en la investigación de Narváez (2014) que el método predictor-corrector siempre será estable para todo valor de  $h$  que tienda a cero. Por ello, al utilizar el *solver* ode113 obtendremos un paso predeterminado que asegura la estabilidad.
- III. Para asegurar la convergencia, es necesario elegir adecuadamente las velocidades de reacción, pues para el modelo desarrollado, dichas ecuaciones dominan el proceso de gasificación en lechos fluidizados burbujeantes. Si el sistema en código MATLAB no llega a converger, es necesario analizar las ecuaciones seleccionadas que describen el proceso de gasificación, teniendo especial énfasis en las velocidades de reacción.

Los tres criterios mencionados anteriormente son importantes durante el desarrollo del modelo matemático, y fueron verificados mediante diferentes intentos hasta obtener resultados óptimos, que serán analizados en el Capítulo 4. Además, en la Tabla 28 se presenta la lista de ecuaciones utilizadas para estimar cada parámetro que predice el comportamiento del proceso de gasificación en lechos fluidizados burbujeantes.

Tabla 28. Cuadro resumen de las ecuaciones utilizadas en el modelo matemático

Nombre	Parámetro	Unidad	Ecuación
Fracción másica de monóxido de carbono	$y_{mv-CO}$	[-]	7
Fracción másica de metano	$y_{mv-CH_4}$	[-]	8
Fracción másica de vapor de agua	$y_{mv-H_2O}$	[-]	9
Fracción másica de dióxido de carbono	$y_{mv-CO_2}$	[-]	10
Fracción másica de hidrógeno	$y_{mv-H_2}$	[-]	11
Velocidad de mínima fluidización	$u_{mf}$	[m/s]	13
Número de Arquímedes	$Ar$	[-]	14
Viscosidad dinámica del agente gasificante	$\mu$	[kg/m s]	15
Número de Reynolds de mínima	$Re_{mf}$	[-]	23
Velocidad de reacción para la oxidación del metano (R1)	$r_{R1}$	[mol/m <sup>3</sup> s]	31
Velocidad de reacción para la oxidación del monóxido de carbono (R2)	$r_{R2}$	[mol/m <sup>3</sup> s]	37
Velocidad de reacción para la oxidación del hidrógeno (R3)	$r_{R3}$	[mol/m <sup>3</sup> s]	42
Velocidad de reacción <i>Water Gas Shift conversion</i> (R4)	$r_{R4}$	[mol/m <sup>3</sup> s]	43
Velocidad de reacción <i>Steam Methane Reforming reaction</i> (R5)	$r_{R5}$	[mol/m <sup>3</sup> s]	46
Velocidad de reacción Boudouard (R6)	$r_{R6}$	[mol/m <sup>3</sup> s]	48
Velocidad de reacción <i>Char Steam gasification</i> (R7)	$r_{R7}$	[mol/m <sup>3</sup> s]	51
Velocidad de reacción para la metanización (R8)	$r_{R8}$	[mol/m <sup>3</sup> s]	53
Velocidad de reacción para la combustión del carbono (R9)	$r_{R9}$	[mol/m <sup>3</sup> s]	58
Velocidad visible	$u_{vis}$	[m/s]	61
Diámetro promedio de una burbuja	$d_B$	[m]	63
Diámetro de burbuja inicial	$d_{Bo}$	[m]	66
Diámetro de burbuja máximo	$d_{Bmáx}$	[m]	65
Velocidad superficial del agente gasificante	$u_o$	[m/s]	69
Velocidad de ascenso de una burbuja en un lecho infinito	$u_{B,\infty}$	[m/s]	72
Velocidad de ascenso de una burbuja	$u_B$	[m/s]	73
Velocidad de transferencia de masa entre fases	$K_{B \rightarrow E}$	[m/s]	76
Flujo molar por especie	$\dot{f}_i$	[mol/s]	81
Concentración molar en la fase emulsión por especie	$\dot{C}_{E-i}$	[mol/m <sup>3</sup> ]	82
Concentración molar en la fase emulsión por especie	$\dot{C}_{B-i}$	[mol/m <sup>3</sup> ]	83
Flujo neto por especie	$\Delta F_{E-i}$	[-]	86
Porosidad del lecho a mínima fluidización	$\varepsilon_{mf}$	[-]	91
Estado de fluidización	$EF$	[-]	93
Área interfacial entre fases	$a_s$	[1/m]	96
Fracción de volumen ocupado por las burbujas	$\varepsilon_B$	[-]	101

### 3.2 Métodos numéricos para sistemas de ecuaciones

Diversos problemas de ingeniería requieren el desarrollo de forma simultánea de ecuaciones diferenciales ordinarias para describir algún comportamiento físico, mecánico químico, etc. Los métodos numéricos vistos anteriormente son aplicables para resolver dichos sistemas de ecuaciones diferenciales de primer orden.

Los sistemas de ecuaciones son aplicables durante el proceso de gasificación de biomasa, porque puede ser modelado de diversas formas, como se explicó en el apartado 2.1, sin embargo, esta investigación se enfocó en modelar el proceso mediante ecuaciones de transformación de flujo molar de las principales especies volátiles que componen al gas de síntesis y por balance másico. Por ello es necesario entender la representación de un sistema de ecuaciones, que posteriormente podrá ser resuelto mediante métodos numéricos. Así mismo, se verá con mayor detalle en el apartado 3.3.2 las ecuaciones de transformación de flujo de las ocho especies volátiles durante la Fase Burbuja y Fase Emulsión.

$$\frac{dy_1}{dx} = f_1(x, y_1, y_2, \dots, y_n)$$

$$\frac{dy_2}{dx} = f_2(x, y_1, y_2, \dots, y_n)$$

$$\frac{dy_3}{dx} = f_3(x, y_1, y_2, \dots, y_n)$$

⋮

$$\frac{dy_n}{dx} = f_n(x, y_1, y_2, \dots, y_n)$$

### 3.3 Algoritmo de cálculo del proceso de gasificación de lecho fluidizado burbujeante

Para estimar la composición del gas de síntesis a la salida del reactor, en base a los parámetros hidrodinámicos del lecho fluidizado y el comportamiento físico químico de la biomasa durante la oxidación parcial, es necesario seguir una metodología de trabajo bajo el algoritmo de la Figura 40.

Esta figura muestra el resumen de una secuencia de etapas que deben suceder para desarrollar el modelo matemático propuesto.

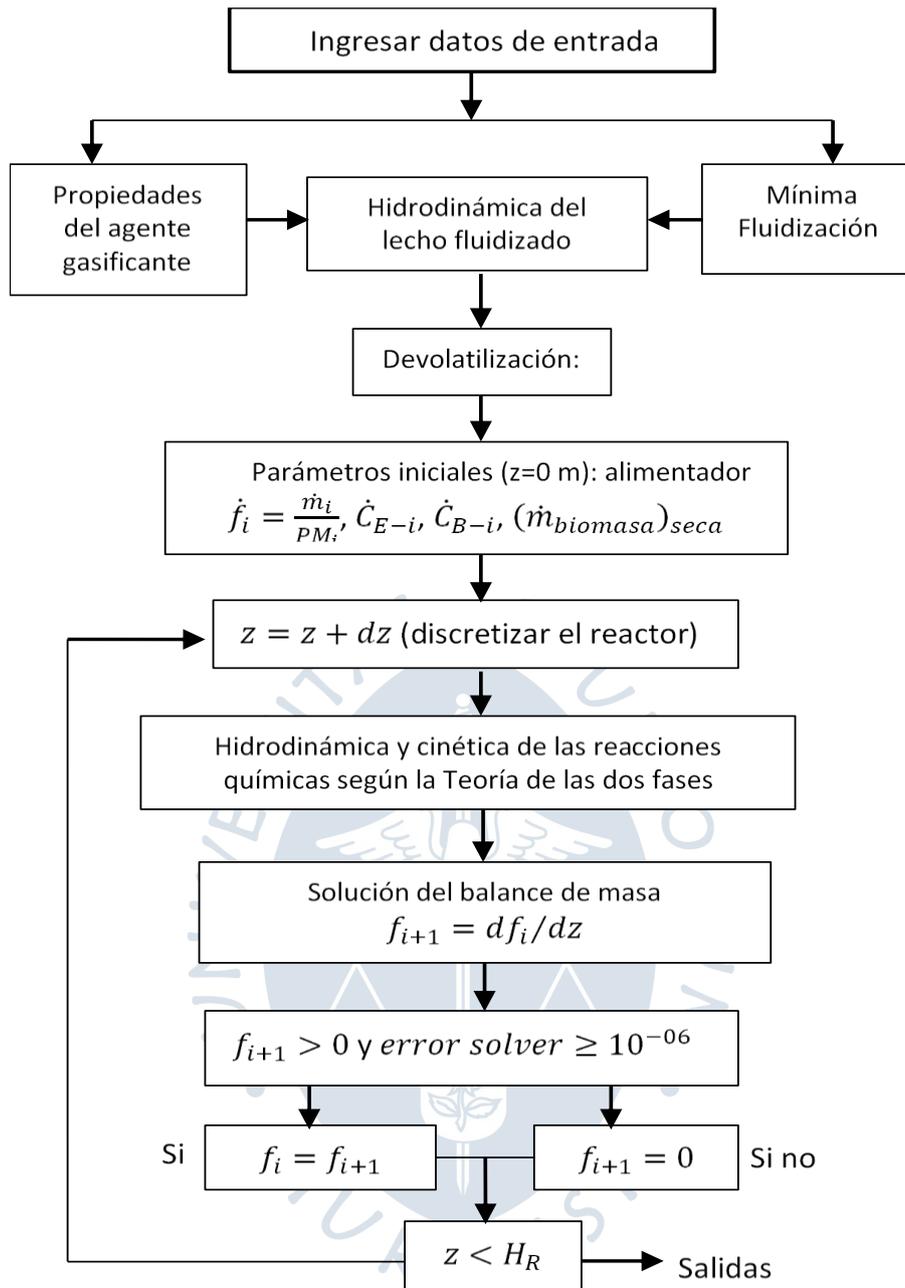


Figura 40. Metodología para resolver el modelo matemático propuesto

Fuente: Basado en Tosina, (2013)

La Figura 41 muestra la secuencia a detalle de la solución del modelo, iniciando con el ingreso de los datos de entrada ya conocidos, y que será tema de interés en el apartado 3.3.1, en segundo lugar, se debe calcular la hidrodinámica del lecho fluidizado que depende de las propiedades del agente gasificante y de las condiciones de mínima fluidización. En tercer lugar, es necesario el análisis de la etapa de pirólisis o devolatilización de la biomasa para el cálculo de las fracciones máxicas de las ocho especies volátiles seleccionadas; que servirán para el cálculo de las condiciones iniciales del proceso de gasificación (ver apartado 3.3.3.). Finalmente, se debe discretizar el reactor en pequeños diferenciales de altura donde se analiza y calcula la cinética de las reacciones químicas según la Teoría de las dos Fases.

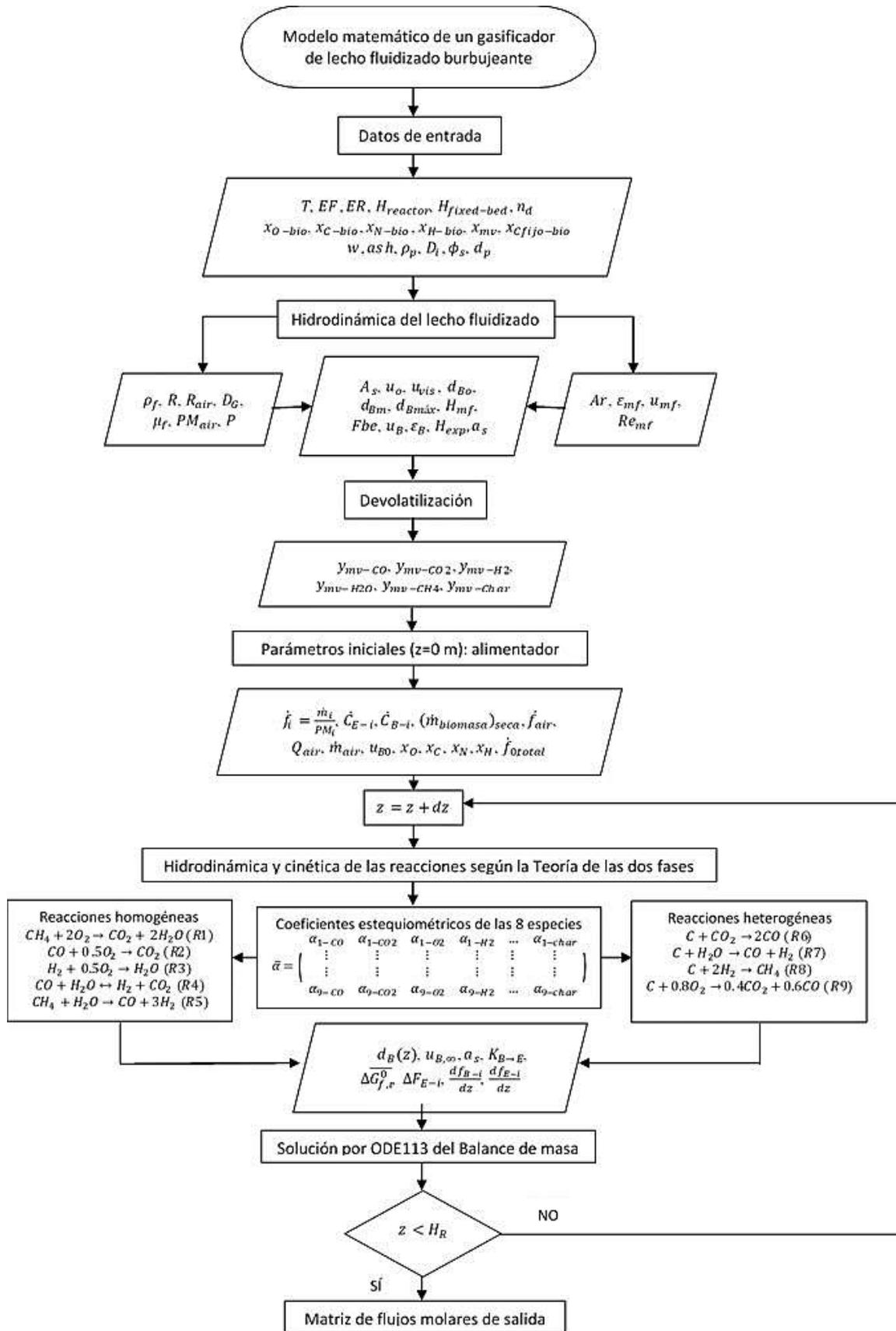


Figura 41. Flujo de entradas y salidas del modelo matemático desarrollado

### 3.3.1 Variables de entrada

Las variables de entrada son los datos necesarios para iniciar el cálculo numérico de ciertas etapas del proceso de gasificación en lechos fluidizados, como la devolatilización y fluidización. Dichas variables pueden ser visualizadas en la Figura 41, donde se observa que son 18 datos conocidos, sin embargo, es necesario resaltar que la variable llamada esfericidad del material inerte ( $\phi_s$ ) puede o no aparecer como dato conocido. Esto se justifica porque dicha variable no siempre es calculada mediante un análisis de laboratorio, por ello se puede asumir que tiene el valor de 1 (partícula perfectamente esférica).

A continuación, se presenta el desglose de las variables de entrada de acuerdo con la categoría a las que pertenecen, para mayor detalle, consultar el Apéndice A – Datos de entrada.

- **Características del proceso**

Aquí se encuentran variables como temperatura del proceso de gasificación ( $T$ ) en Kelvin, y variables bajo condiciones de régimen burbujeante, como el estado de fluidización ( $EF$ ) y la razón de equivalencia ( $ER$ ).

- **Geometría del reactor**

Estas variables dependen del diseño del reactor, por ejemplo, la altura del reactor ( $H_{reactor}$ ) que concierne la distancia entre el punto de alimentación de biomasa y el punto de salida del gas de síntesis, el diámetro interno del reactor ( $D_i$ ) en metros, que es igual al diámetro de la rejilla que contiene al lecho, por último, es necesario conocer el número de agujeros del plato distribuidor de flujo ( $n_d$ ) del agente gasificante.

- **Características del lecho**

El lecho está formado por una parte de material inerte, que sirve como auto sustento para la combustión parcial, y por una parte de biomasa, que es alimentada a cierta altura. Dentro de esta clasificación, se encuentran variables conocidas como la altura del lecho fijo ( $H_{fixed-bed}$ ), que se consideró aproximadamente igual al valor de la altura del alimentador, el contenido porcentual de humedad de la biomasa ( $w$ ), el contenido porcentual de cenizas ( $ash$ ). Así mismo, las variables procedentes del análisis último de la biomasa son necesarias para conocer su contenido porcentual de las especies básicas como carbono ( $x_{C-bio}$ ), oxígeno ( $x_{O-bio}$ ), nitrógeno ( $x_{N-bio}$ ), e hidrógeno ( $x_{H-bio}$ ), por otro lado, según el análisis próximo se puede conocer el valor del contenido porcentual de material volátil presente en la biomasa ( $x_{mv}$ ) y el contenido porcentual de carbono fijo ( $x_{Cfijo-bio}$ ). Finalmente, al analizar el material inerte se debe conocer el tamaño promedio de partícula ( $d_p$ ), su densidad ( $\rho_p$ ) y la esfericidad ( $\phi_s$ ), esta última variable es mencionada al inicio de este apartado.

### 3.3.2 Ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden para las ocho especies volátiles consideradas durante el proceso de gasificación

Como se mencionó en el apartado 2.4.4, se utilizan dos ecuaciones de transformación de flujo molar según la Teoría de las dos Fases (fase emulsión y fase burbuja). Dichas

ecuaciones son utilizadas en diversas literaturas como Torres Moyano (2012), Abdollahi, Guy & Chaouki (2010), Moreno (2010), Tosina (2013) y en la publicación de Li (2016), para evaluar la gasificación de biomasa.

Las Ecuaciones (128)-(143) son del tipo diferenciales ordinarias y deben ser resueltas en código MATLAB (consultar Apéndice A – Función transferencia) mediante el comando ODE113. Así mismo, las ocho especies volátiles consideradas en el modelo matemático serán resueltas en el siguiente orden:  $i = [CO, CO_2, O_2, H_2, H_2O, CH_4, N_2, char]$ .

### 3.3.2.1 Ecuaciones de transformación de flujo molar en Fase Burbuja.

$$\frac{df_{B-CO}}{dz} = A \left[ \left( a_s K_{B \rightarrow E} (\dot{C}_{e-CO} - \dot{C}_{b-CO}) \right) + \Delta F_{e-CO} + (\varepsilon_b \sum \alpha^{r_{b-j-GG}_i} * r_{b-j-GG}) \right] \quad (128)$$

$$\frac{df_{B-CO_2}}{dz} = A \left[ \left( a_s K_{B \rightarrow E} (\dot{C}_{e-CO_2} - \dot{C}_{b-CO_2}) \right) + \Delta F_{e-CO_2} + (\varepsilon_b \sum \alpha^{r_{b-j-GG}_i} * r_{b-j-GG}) \right] \quad (129)$$

$$\frac{df_{B-O_2}}{dz} = A \left[ \left( a_s K_{B \rightarrow E} (\dot{C}_{e-O_2} - \dot{C}_{b-O_2}) \right) + \Delta F_{e-O_2} + (\varepsilon_b \sum \alpha^{r_{b-j-GG}_i} * r_{b-j-GG}) \right] \quad (130)$$

$$\frac{df_{B-H_2}}{dz} = A \left[ \left( a_s K_{B \rightarrow E} (\dot{C}_{e-H_2} - \dot{C}_{b-H_2}) \right) + \Delta F_{e-H_2} + (\varepsilon_b \sum \alpha^{r_{b-j-GG}_i} * r_{b-j-GG}) \right] \quad (131)$$

$$\frac{df_{B-H_2O}}{dz} = A \left[ \left( a_s K_{B \rightarrow E} (\dot{C}_{e-H_2O} - \dot{C}_{b-H_2O}) \right) + \Delta F_{e-H_2O} + (\varepsilon_b \sum \alpha^{r_{b-j-GG}_i} * r_{b-j-GG}) \right] \quad (132)$$

$$\frac{df_{B-CH_4}}{dz} = A \left[ \left( a_s K_{B \rightarrow E} (\dot{C}_{e-CH_4} - \dot{C}_{b-CH_4}) \right) + \Delta F_{e-CH_4} + (\varepsilon_b \sum \alpha^{r_{b-j-GG}_i} * r_{b-j-GG}) \right] \quad (133)$$

$$\frac{df_{B-N_2}}{dz} = A \left[ \left( a_s K_{B \rightarrow E} (\dot{C}_{e-N_2} - \dot{C}_{b-N_2}) \right) + \Delta F_{e-N_2} + (\varepsilon_b \sum \alpha^{r_{b-j-GG}_i} * r_{b-j-GG}) \right] \quad (134)$$

$$\frac{df_{B-char}}{dz} = A \left[ \left( a_s K_{B \rightarrow E} (\dot{C}_{e-char} - \dot{C}_{b-char}) \right) + \Delta F_{e-char} + (\varepsilon_b \sum \alpha^{r_{b-j-GG}_i} * r_{b-j-GG}) \right] \quad (135)$$

### 3.3.2.2 Ecuaciones de transformación de flujo molar en Fase Emulsión

$$\begin{aligned} \frac{df_{E-CO}}{dz} = A \left[ \left( a_s K_{B \rightarrow E} (\dot{C}_{b-CO} - \dot{C}_{e-CO}) \right) - \Delta F_{e-CO} \right. \\ \left. + \left( (1 - \varepsilon_b) \left( \varepsilon_{mf} \sum \alpha^{r_{e-j-GG}_i} * r_{e-j-GG} \right) \right. \right. \\ \left. \left. + (1 - \varepsilon_{mf}) \sum \alpha^{r_{e-j-GS}_i} * r_{e-j-GS} \right) \right] \end{aligned} \quad (136)$$

$$\begin{aligned} \frac{df_{E-CO_2}}{dz} = A \left[ \left( a_s K_{B \rightarrow E} (\dot{C}_{b-CO_2} - \dot{C}_{e-CO_2}) \right) - \Delta F_{e-CO_2} \right. \\ \left. + \left( (1 - \varepsilon_b) \left( \varepsilon_{mf} \sum \alpha^{r_{e-j-GG}_i} * r_{e-j-GG} \right) \right. \right. \\ \left. \left. + (1 - \varepsilon_{mf}) \sum \alpha^{r_{e-j-GS}_i} * r_{e-j-GS} \right) \right] \end{aligned} \quad (137)$$

$$\begin{aligned} \frac{df_{E-O_2}}{dz} = A \left[ \left( a_s K_{B \rightarrow E} (\dot{C}_{b-O_2} - \dot{C}_{e-O_2}) \right) - \Delta F_{e-O_2} \right. \\ \left. + \left( (1 - \varepsilon_b) \left( \varepsilon_{mf} \sum \alpha^{r_{e-j-GG}_i} * r_{e-j-GG} \right) \right. \right. \\ \left. \left. + (1 - \varepsilon_{mf}) \sum \alpha^{r_{e-j-GS}_i} * r_{e-j-GS} \right) \right] \end{aligned} \quad (138)$$

$$\begin{aligned} \frac{df_{E-H_2}}{dz} = A \left[ \left( a_s K_{B \rightarrow E} (\dot{C}_{b-H_2} - \dot{C}_{e-H_2}) \right) - \Delta F_{e-H_2} \right. \\ \left. + \left( (1 - \varepsilon_b) \left( \varepsilon_{mf} \sum \alpha^{r_{e-j-GG}_i} * r_{e-j-GG} \right) \right. \right. \\ \left. \left. + (1 - \varepsilon_{mf}) \sum \alpha^{r_{e-j-GS}_i} * r_{e-j-GS} \right) \right] \end{aligned} \quad (139)$$

$$\begin{aligned} \frac{df_{E-H_2O}}{dz} = A \left[ \left( a_s K_{B \rightarrow E} (\dot{C}_{b-H_2O} - \dot{C}_{e-H_2O}) \right) - \Delta F_{e-H_2O} \right. \\ \left. + \left( (1 - \varepsilon_b) \left( \varepsilon_{mf} \sum \alpha^{r_{e-j-GG}_i} * r_{e-j-GG} \right) \right. \right. \\ \left. \left. + (1 - \varepsilon_{mf}) \sum \alpha^{r_{e-j-GS}_i} * r_{e-j-GS} \right) \right] \end{aligned} \quad (140)$$

$$\begin{aligned} \frac{df_{E-CH_4}}{dz} = A & \left[ \left( a_s K_{B \rightarrow E} (\dot{C}_{b-CH_4} - \dot{C}_{e-CH_4}) \right) - \Delta F_{e-CH_4} \right. \\ & + \left( (1 - \varepsilon_b) \left( \varepsilon_{mf} \sum \alpha^{r_{e-j-GG}_i} * r_{e-j-GG} \right) \right. \\ & \left. \left. + (1 - \varepsilon_{mf}) \sum \alpha^{r_{e-j-GS}_i} * r_{e-j-GS} \right) \right] \end{aligned} \quad (141)$$

$$\begin{aligned} \frac{df_{E-N_2}}{dz} = A & \left[ \left( a_s K_{B \rightarrow E} (\dot{C}_{b-N_2} - \dot{C}_{e-N_2}) \right) - \Delta F_{e-N_2} \right. \\ & + \left( (1 - \varepsilon_b) \left( \varepsilon_{mf} \sum \alpha^{r_{e-j-GG}_i} * r_{e-j-GG} \right) \right. \\ & \left. \left. + (1 - \varepsilon_{mf}) \sum \alpha^{r_{e-j-GS}_i} * r_{e-j-GS} \right) \right] \end{aligned} \quad (142)$$

$$\begin{aligned} \frac{df_{E-char}}{dz} = A & \left[ \left( a_s K_{B \rightarrow E} (\dot{C}_{b-char} - \dot{C}_{e-char}) \right) - \Delta F_{e-char} \right. \\ & + \left( (1 - \varepsilon_b) \left( \varepsilon_{mf} \sum \alpha^{r_{e-j-GG}_i} * r_{e-j-GG} \right) \right. \\ & \left. \left. + (1 - \varepsilon_{mf}) \sum \alpha^{r_{e-j-GS}_i} * r_{e-j-GS} \right) \right] \end{aligned} \quad (143)$$

### 3.3.3 Condiciones iniciales para la validación del modelo matemático

Las ecuaciones mencionadas en el apartado anterior y el método seleccionado de Adams Moulton Bashforth (representado por el comando ODE113 en MATLAB) necesitan de valores iniciales que son estimados de forma aproximada para un determinado punto de partida o referencia (alimentador de biomasa  $z = 0$  m); bajo las hipótesis consideradas en esta investigación (ver apartado 2.3).

En primer lugar, se debe calcular los parámetros de caudal y flujo másico del agente gasificante. Según la investigación de Radmanesh, Chaouki & Guy (2006), que fue seleccionada para la validación, el medio gasificante será aire. Para ello se utilizan las ecuaciones 144 y 145, y con dichos valores se calcula el flujo molar de aire real que ingresa al reactor. Acto seguido, se calculan los flujos molares de las especies gaseosas en mayor proporción (nitrógeno y oxígeno), mediante la división entre el flujo másico y el peso molecular.

$$Q_{air} = u_0 * A_s = 9.958 \times 10^{-4} \text{ m}^3/\text{s}$$

$$\dot{m}_{air} = Q_{air} \times \rho_{air@T} = 3.292 \times 10^{-4} \text{ kg/s}$$

$$\dot{f}_{air} = \frac{\dot{m}_{air}}{PM_{air}} = 0.0113 \text{ mol/s}$$

$$\dot{f}_{O_2} = 0.21\dot{f}_{air} = 0.0024 \text{ mol/s}$$

$$\dot{f}_{N_2} = 0.79\dot{f}_{air} = 0.0089 \text{ mol/s}$$

Con las ecuaciones de devolatilización seleccionadas (ver apartado 1.3.1.2) se calculan las fracciones molares iniciales de las principales especies gaseosas analizadas, que serán multiplicados por el flujo másico de biomasa libre de cenizas y humedad, para seguir con la relación mencionada anteriormente para el cálculo del flujo molar.

$$\dot{f}_{0-CO} = \frac{\dot{m}_{CO}}{PM_{CO}} = 0.0027 \text{ mol/s}$$

$$\dot{f}_{0-CO_2} = \frac{\dot{m}_{CO_2}}{PM_{CO_2}} = 0.0011 \text{ mol/s}$$

$$\dot{f}_{0-H_2} = \frac{\dot{m}_{H_2}}{PM_{H_2}} = 0.0047 \text{ mol/s}$$

$$\dot{f}_{0-CH_4} = \frac{\dot{m}_{CH_4}}{PM_{CH_4}} = 6.3 \times 10^{-4} \text{ mol/s}$$

$$\dot{f}_{0-H_2O} = \frac{\dot{m}_{H_2O}}{PM_{H_2O}} = 5.204 \times 10^{-4} \text{ mol/s}$$

$$\dot{f}_{0-char} = \frac{\dot{m}_{char}}{PM_{char}} = 0.0025 \text{ mol/s}$$

Los valores estimados anteriormente se calculan de forma automática mediante un código MATLAB (consultar el Apéndice A – Parámetros reacción inicial) y permiten iniciar el cálculo repetitivo a lo largo de la altura del reactor, así mismo, estos valores permiten el cálculo del gasto molar inicial a la entrada del reactor ( $z = 0 \text{ m}$ ).

$$gm_0 = \dot{f}_{air} + \dot{f}_{CO} + \dot{f}_{CO_2} + \dot{f}_{H_2} + \dot{f}_{CH_4} + \dot{f}_{H_2O} + \dot{f}_{char} = 0.0234 \text{ mol/s}$$

### 3.3.4 Discretización del reactor

El mecanismo de fluidización se considera uniforme cuando el agente gasificante tiene bajas velocidades (menor o igual a la velocidad de mínima fluidización). Al superar dicha velocidad, se forman dos fases separadas al interior del reactor: una fase continua que recibe el nombre de fase densa o emulsión, y una fase discontinua llamada fase burbuja (Conesa, 2010).

En el Capítulo 1 se describió el comportamiento fluidodinámico del mecanismo de fluidización. Para entender el modelo de discretización del reactor, es necesario recordar que, durante la fluidización, el lecho toma el comportamiento de un líquido en ebullición; con un movimiento vigoroso de los sólidos suspendidos, además, las burbujas generadas ascienden a cierta velocidad. Este último suceso de borboteo o burbujeo corresponde al exceso de gas generado que pasa a través del lecho en forma de burbujas. Así mismo, la transferencia de calor en el lecho es muy rápida, debido a la temperatura uniforme que se consigue obtener con este tipo de reactores de lecho fluidizado. La Figura 42 describe la tendencia de uniformidad de temperatura en un reactor de laboratorio de lecho fluidizado, así como la caída de temperatura en la zona del *freeboard*.

Una vez explicado a rasgos generales el comportamiento al interior del reactor durante la fluidización es necesario mencionar algunos ejemplos de discretización de reactores para gasificación, encontrados en ciertas literaturas que utilizan como combustible a la biomasa, con la finalidad de comprender el método de discretización del reactor en régimen burbujeante de la presente investigación.

- **Semidiscretización por medio de volumen finito**

En la investigación de Badillo Hernández (2009) se presenta el diseño y esquema dinámico de control de un gasificador de lecho fijo bajo el proceso de las dos fases, de forma unidimensional utilizando el método de discretización por volumen finito para el reactor. Este método toma una fracción de volumen cilíndrico del reactor a lo largo de la altura del reactor (ver Figura 43a), donde se analizan ciertas variables algebraicas como las velocidades del gas y del sólido ( $v_{g,i}$ ,  $v_{s,i}$ ), mientras que se resuelven variables de estado como temperaturas, composición de la biomasa y del aire, y densidad del medio gasificante ( $T_s$ ,  $T_g$ ,  $Y_{kg}$ ,  $\rho_{js}$ ). Además, el modelo de control utiliza variables de entrada con valores pasados y futuros para predecir el volumen finito que se desea analizar (ver Figura 43b).

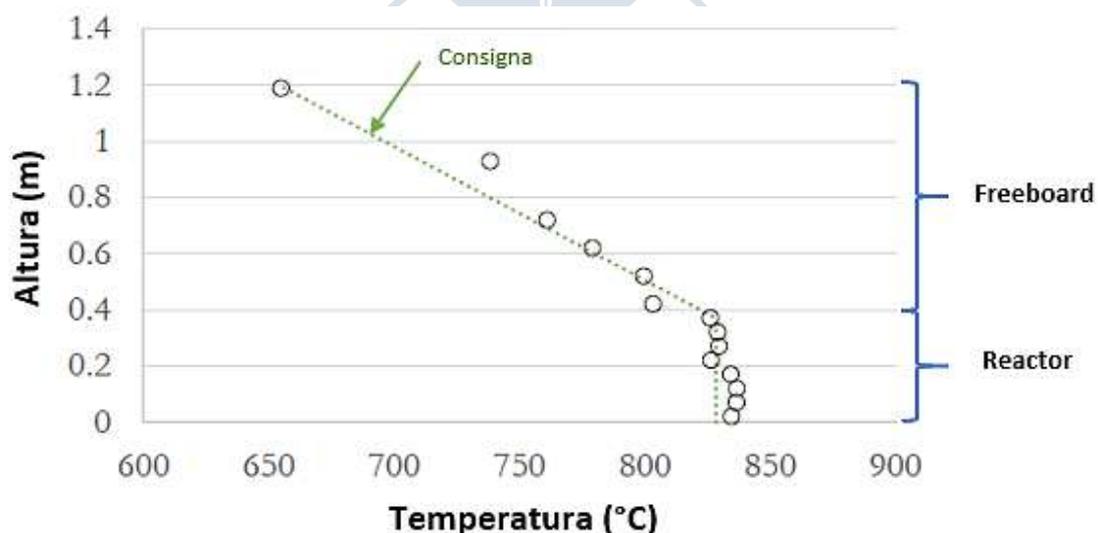


Figura 42. Ajuste y medición de temperatura en un reactor de lecho fluidizado  
Fuente: Obtenido de Cluet, (2014)

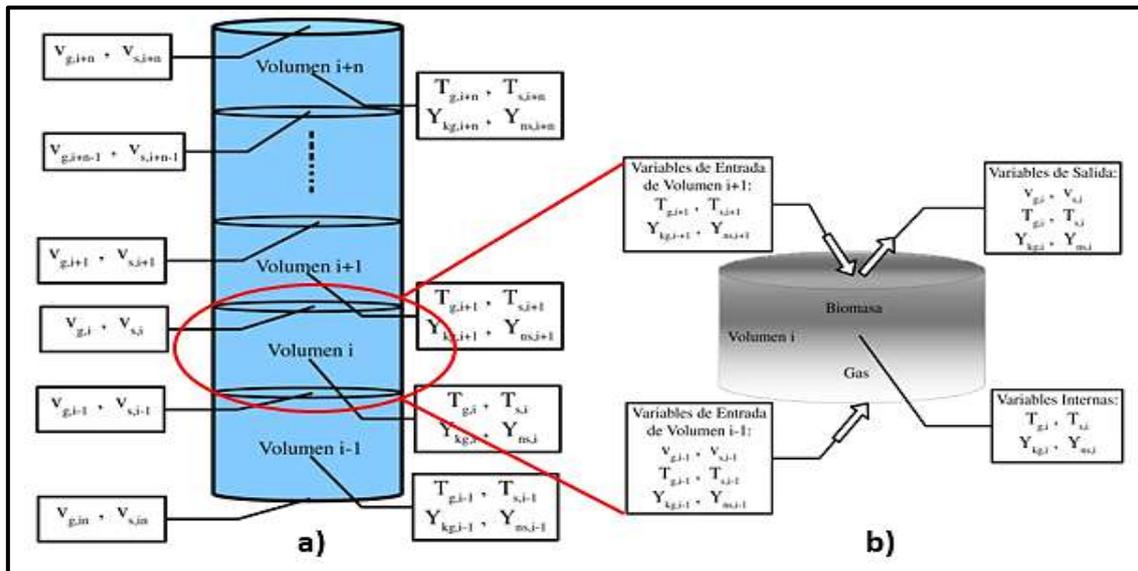


Figura 43. (a) Reactor discretizado espacialmente en (b) volúmenes de control con variables de interconexión de los volúmenes de control contiguos

Fuente: Obtenido de Badillo Hernández, (2009)

- **Reactor de lecho fluidizado burbujeante multietapa en contracorriente**

Es un modelo desarrollado en la investigación de Perales Lorente (2002) sobre las reacciones gas-sólido con deposiciones de productos sólidos al interior de reactores de lecho fluidizado. Así mismo, se incluye el análisis de discretización de un reactor en régimen burbujeante, que utiliza un material inerte para el auto soporte de energía, considerando los efectos cinéticos, difusivos, de transferencia de masa entre fases, y geometría de la partícula sólida. Mientras que los algoritmos de resolución numérica de las ecuaciones de balance de materia de gas-sólido y velocidades del gas en el distribuidor (modelo fluidodinámico) fueron desarrollados mediante ecuaciones implícitas y explícitas, en cada uno de los nodos del reactor. En este sentido, para desarrollar el reactor, se discretizó considerando diferentes pisos o etapas de reacción en serie con tres zonas principales, de tal forma que el funcionamiento se asemeja a un flujo en pistón<sup>9</sup>. Además, las partículas sólidas que no reaccionaron pasan por un ciclón ubicado en la parte superior media y son devueltas al exterior por los laterales del reactor (ver Figura 44). Las zonas se detallan en la Figura 45a, donde se observa que la primera zona representa al lecho de partículas que existe sobre el distribuidor, la segunda zona es llamada lecho fluidizado, donde ocurre la evolución de las burbujas de gas y su ascensión basado en el modelo trifásico de Kunii & Levenspiel (1991) representado en la Figura 45b, finalmente, la tercera zona es llamada freeboard, donde se produce ciertas reacciones adicionales del tipo gas-sólido y se recuperan los sólidos que no reaccionaron durante la gasificación.

<sup>9</sup> El modelo de flujo en pistón trabaja bajo la hipótesis que cada elemento diferencial de volumen de fluido se desplaza a lo largo de la longitud del reactor sin intercambio de masa con los elementos siguientes ni con los elementos anteriores.

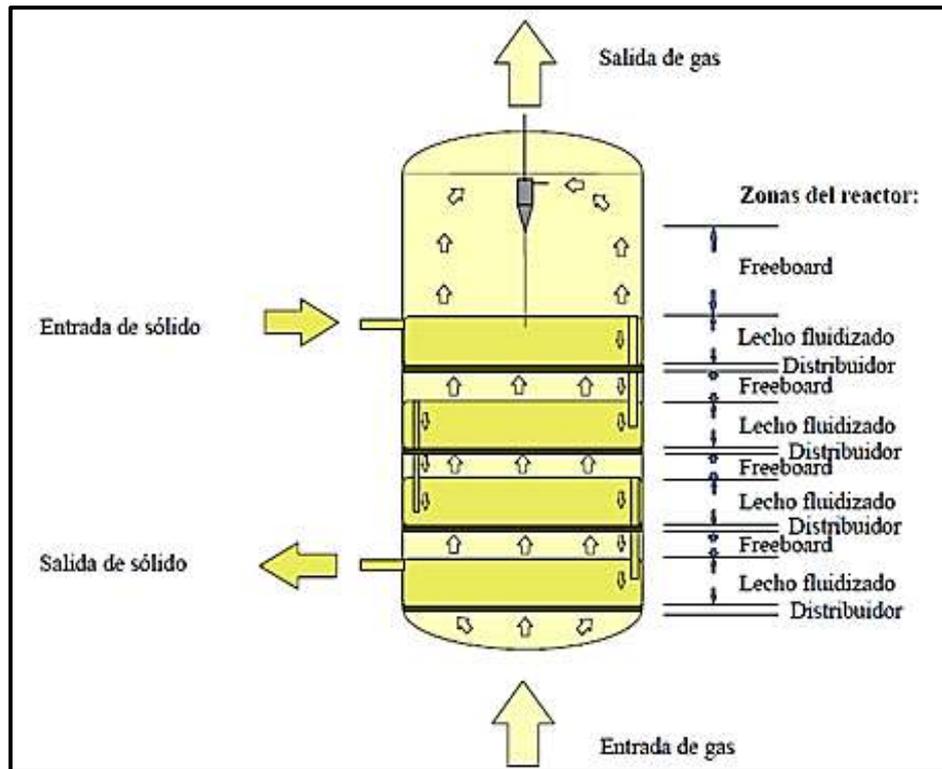


Figura 44. Esquema de un reactor de lecho fluidizado multietapa  
Fuente: Obtenido de Perales Lorente, (2002)

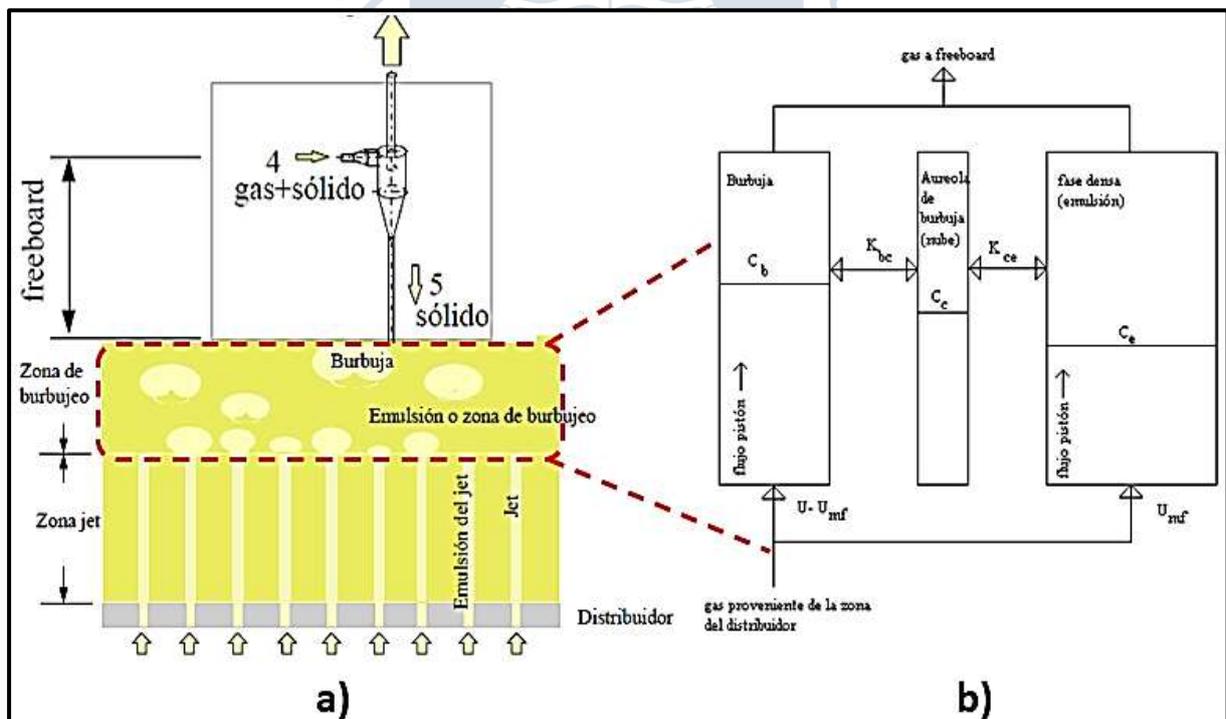


Figura 45. (a) Esquema de la zona del distribuidor, zona de burbujas y freeboard de un gasificador de lecho fluidizado burbujeante descrito bajo (b) el esquema de flujo hidrodinámico trifásico

Fuente: Obtenido de Perales Lorente, (2002)

**3.3.4.1 Modelo de discretización del reactor en régimen burbujeante.** Después de analizar los modelos de discretización de algunas literaturas, la presente investigación consideró necesario modelar el reactor con una geometría cilíndrica, que será dividido en elementos cilíndricos diferenciales con la misma área transversal, para estimar los flujos molares en cada subregión o volumen de control con las ecuaciones diferenciales de transformación vistas en el Capítulo 2, donde las variables dependientes son aproximadas en cada volumen de control y sustituidas en dichas ecuaciones diferenciales. Además, el volumen de control es un espacio compartido por las dos fases (emulsión y burbuja) y son separadas por una superficie infinitesimal que permite la interacción entre ambas fases, además, cada una ocupa cierto espacio, descrito por los valores constantes de las variables como fracción de vacío en el lecho ( $\varepsilon_f$ ), fracción de volumen ocupado por las burbujas ( $\varepsilon_B$ ) y por la fracción de volumen ocupado por los sólidos del lecho ( $\varepsilon_s$ ).

Es necesario resaltar que el modelo seleccionado para describir el comportamiento en el volumen de control será en base al modelo cinético de la Teoría de las dos Fases, bajo el supuesto que todos los sólidos están perfectamente mezclados debido al estado de fluidización en régimen burbujeante y a las hipótesis mencionadas en el apartado 2.3. Para una mejor comprensión, la Figura 46 muestra el diseño de un gasificador de lecho fluidizado, donde se analiza solo la parte del reactor que será discretizado mediante  $n$  pisos definidos por el comando ODE113, cuya cantidad de pasos obtenido representa en cualquier caso un valor significativo para obtener una buena precisión con un error de cálculo de  $10E-06$ .

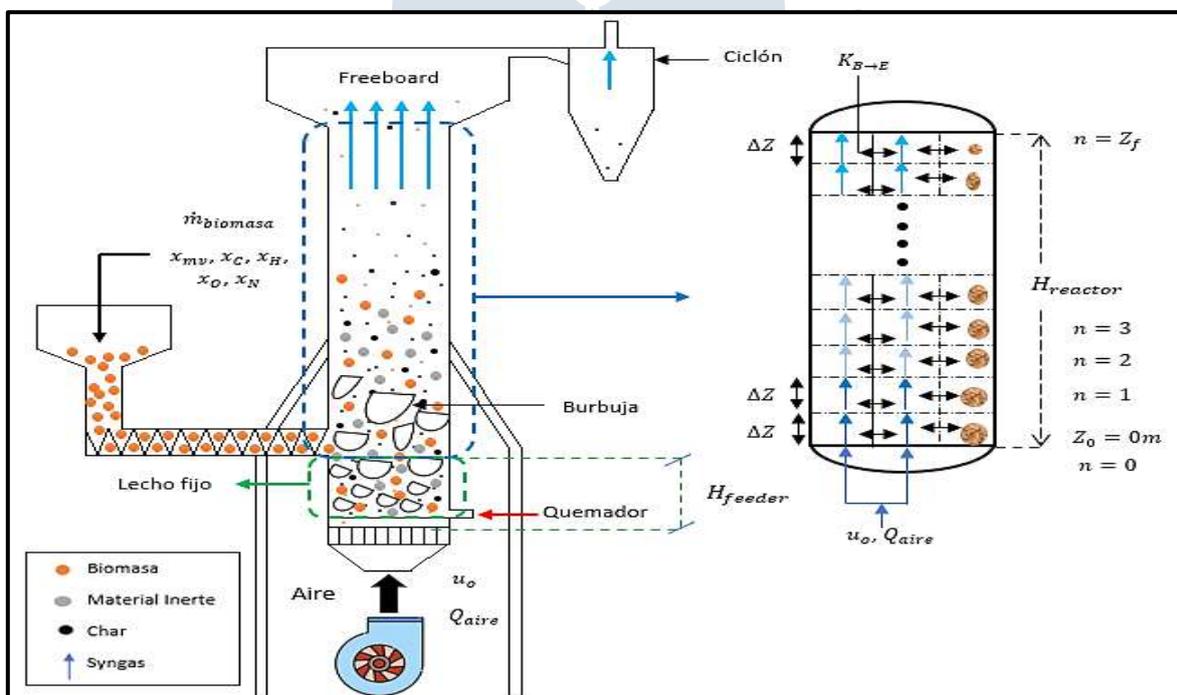


Figura 46. Esquema de un reactor de lecho fluidizado en régimen burbujeante discretizado en base a la Teoría de las dos fases

El modelo cinético describe una separación al interior del reactor de las fases burbuja y fase emulsión, estas regiones se observan en la Figura 46 divididas por una línea sólida que representa una superficie infinitesimal que permite la interacción entre ambas fases. Además,

la fase burbuja tiene una menor proporción (lado izquierdo del reactor discretizado) y la fase emulsión posee una mayor proporción debido a las interacciones físicas (pérdida de masa del combustible) y reacciones químicas del tipo gas-sólido. Así mismo, se observan flechas verticales con dirección ascendente en cada fase y piso del reactor discretizado, que representan un conjunto de gases liberados y distribuidos en igual proporción, considerando que inicialmente es aire que ingresa a una velocidad  $u_0$ ; y a medida que la altura del reactor aumenta este conjunto de gases formarán el *syngas*.

Por otro lado, la Figura 47 muestra a detalle dos regiones diferenciales o pisos del reactor, iniciando en la altura de referencia ( $Z_0 = 0 \text{ m}$ ), donde se conocen los flujos molares iniciales que permiten estimar las concentraciones molares, cuya principal utilidad radica en el cálculo de los flujos del siguiente piso ( $n = 1$ ). La primera zona representa la fase burbuja, modelada como un flujo en pistón, donde se analiza la formación de una burbuja que viaja a cierta velocidad. Además, se muestra el sentido bidireccional del coeficiente de transferencia de masa entre fases ( $K_{B \rightarrow E}$ ), siendo un valor importante, pues representa la velocidad de cierto flujo de gases de alta concentración provenientes de la fase burbuja que difunden y penetran en los sólidos de la fase densa o emulsión, y viceversa, porque los gases en igual proporción, pero en sentido contrario (desde la fase emulsión) también pueden interactuar con los gases de la fase burbuja, cabe resaltar que esto ocurre en cada piso. De forma similar ocurre en la zona de la fase emulsión, donde la transferencia de masa se da en ambos sentidos, debido a que el modelo contempla un reactor continuamente agitado con interacciones del tipo gas-sólido, por ello el sólido (biomasa) presenta una transformación física a medida que incrementa la altura del reactor. Esto se trabajó bajo las ecuaciones del proceso de devolatilización y las reacciones químicas heterogéneas. Finalmente, se observa el sentido del flujo neto ( $\Delta F_{E-i}$ ), desde la fase emulsión hacia la fase burbuja, cuyo valor debe ser calculado para las ocho especies volátiles consideradas en esta investigación durante el proceso de gasificación.

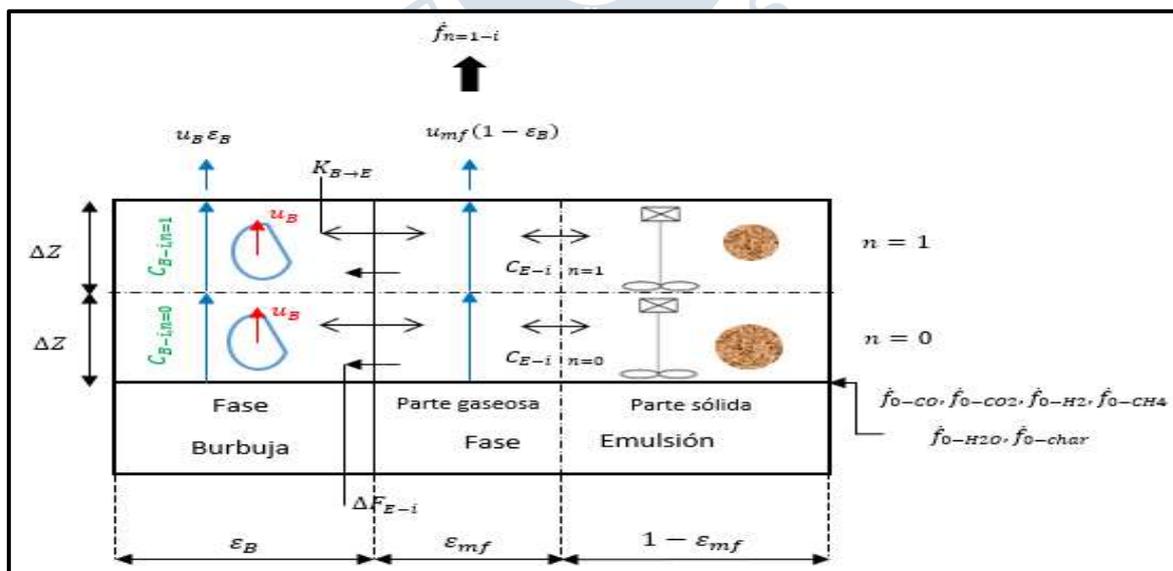


Figura 47. Detalle de los diferenciales de altura del reactor de lecho fluidizado en régimen burbujeante

Fuente: Basado en Yan, Heidenreich & Zhang, (1997)

### 3.3.5 Funciones en código MATLAB

Para desarrollar numéricamente el modelado de un gasificador de lecho fluidizado en régimen burbujeante de esta investigación, es necesario tener funciones en código MATLAB que resuelvan las etapas del proceso de gasificación bajo la Teoría de las Dos Fases, esto se muestra en la Figura 48.

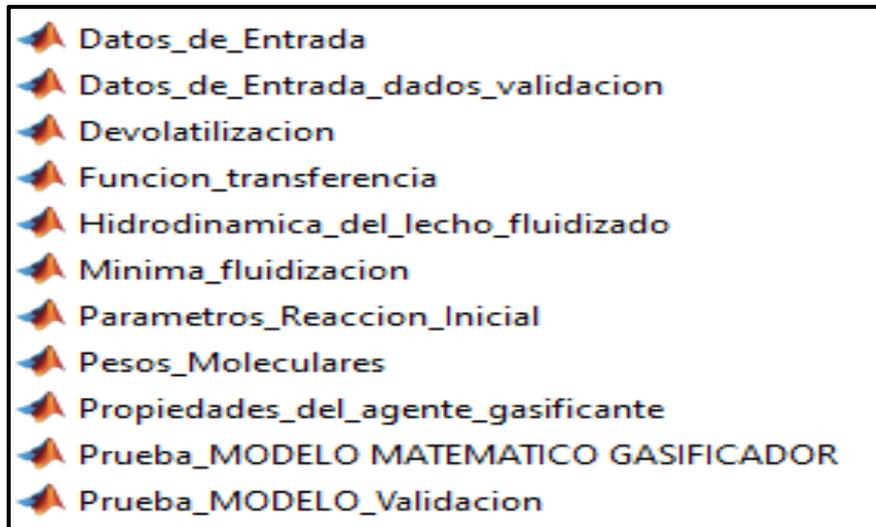


Figura 48. Listado de funciones en código MATLAB

A continuación, se describe el contenido de las funciones y los códigos principales de forma ordenada, según el procedimiento de cálculo descrito en los diagramas de flujo (ver Figura 40 y 41). Para mayor detalle, es necesario consultar los apéndices adjuntos con las designaciones de la Figura 48, además, es necesario mencionar que las variables de salida en cada función se definen como variables globales (*global*), y eventualmente se almacenan ciertas variables en matrices para un análisis posterior.

- **Datos\_de\_entrada**

Este script contiene todas las variables necesarias para iniciar los cálculos numéricos del modelo matemático (ver apartado 3.3.1).

- **Datos\_de\_entrada\_datos\_validacion**

Es un script que contiene los valores conocidos de las variables de entrada en base a la bibliografía consultada, para iniciar la validación del modelo matemático.

- **Pesos\_moleculares**

Representa la primera función que debe ser llamada por el código principal, con la finalidad de utilizar los pesos moleculares de los elementos básicos que componen a la biomasa (C, H, O, N) para calcular las ocho especies volátiles consideradas en esta investigación.

- **Propiedades\_del\_agente\_gasificante**

La presente investigación consideró analizar el aire como medio gasificante, al igual que lo utiliza la bibliografía para la validación por ser un recurso que se obtiene fácilmente.

Esta función calcula, en función a los datos de entrada, parámetros como la viscosidad dinámica según la Ley de Sutherland, la densidad a la temperatura del proceso, y la difusividad.

- **Minima\_fluidizacion**

Es la tercera función que debe ser llamada por el código principal, pues necesita de las funciones anteriores para poder iniciar el cálculo numérico de las variables como el Número de Arquímedes, la porosidad del lecho y el Número de Reynolds en condiciones de mínima fluidización, finalizando con el cálculo de la velocidad de mínima fluidización, referida al medio gasificante.

- **Hidrodinamica\_del\_lecho\_fluidizado**

Esta función contiene ciertas ecuaciones que no dependen de la altura del reactor, y sirven para estimar variables como diámetros de burbuja, velocidades de la burbuja y la altura del lecho expandido.

- **Devolatilizacion**

Representa una de las funciones más importantes del modelo matemático, pues contiene las ecuaciones empíricas que permiten calcular las fracciones másicas de especies volátiles iniciales producidas durante la etapa de pirólisis o devolatilización, y posteriormente servirán para estimar los flujos molares iniciales.

- **Parámetros\_reaccion\_inicial**

Es la quinta función que debe iniciar, y depende de las variables de las funciones anteriores. En esta función se calculan todos los parámetros iniciales como flujos molares de los gases que componen al aire, el flujo másico de biomasa que reacciona durante la gasificación, en función de la ecuación del Equivalence Ratio o razón de equivalencia (ER). Además, se calculan las concentraciones molares en la Fase Burbuja y Fase Emulsión, en función de los flujos molares iniciales que se calcularon en unas líneas de código anterior.

- **Funcion\_transferencia**

Este código representa a la función que será llamada por el comando ODE113, tantas veces sea necesario al momento de discretizar el reactor mediante diferenciales de altura, para resolver las ecuaciones diferenciales ordinarias de transformación de flujos molares de las ocho especies volátiles analizadas. Para ello, se calcula la hidrodinámica del lecho que está en función de la altura del reactor ( $z$ ), así mismo, se calculan las concentraciones molares, fracciones másicas y presiones parciales en las fases emulsión y burbuja; de forma simultánea para las ocho especies volátiles. En segundo lugar, se desarrolla un bloque donde se analizan las nueve reacciones químicas mediante sus coeficientes estequiométricos, velocidades de reacción y el cálculo de la Energía Libre de Gibbs. Finalmente, se resuelve el aporte del flujo neto en la fase emulsión por especie, para ser reemplazado junto a otras variables en las ecuaciones de transformación de flujo molar.

- **Prueba\_MODELO\_validacion**

Es el código principal, cuya función es el llamado de forma ordenada de las funciones descritas en los puntos anteriores, además, tiene la función de llamar al comando ODE113 para calcular la matriz de dimensión  $[16 \times n]$ , siendo  $n$  el número de pisos de flujos molares. Por otro lado, este script contiene los puntos de los resultados experimentales para la validación del modelo matemático, que serán graficados y comparados con los valores de las fracciones másicas obtenidas. Finalmente, se verifica la Ley de Conservación de masa, mediante la sumatoria de los flujos másicos a la entrada y salida del reactor.

- **Prueba\_MODELO\_MATEMATICO\_GASIFICADOR**

Este script es similar al código anterior, con la diferencia que no posee los datos experimentales de validación, pues se considera que es el código final del modelo matemático desarrollado en esta investigación. Obteniendo así, las tres gráficas principales de la evolución de las fracciones másicas de dióxido de carbono ( $CO$ ), hidrógeno ( $H_2$ ) y metano ( $CH_4$ ) con respecto a la altura del reactor, siendo estos gases los que componen al syngas y permitirían estimar su poder calorífico inferior (PCI).





## **Capítulo 4**

### **Análisis de resultados**

Este capítulo contiene la validación del modelo matemático desarrollado en la presente investigación mediante datos experimentales extraídos de una investigación científica. Además, presenta una data numérica y gráfica obtenida del modelo matemático con respecto a las principales variables de control que influyen durante el proceso de gasificación, orientadas al análisis del prototipo de gasificador de lecho fluidizado en régimen burbujeante construido en la Universidad de Piura.

#### **4.1 Validación del modelo matemático**

La investigación de Radmanesh, Chaouki & Guy (2006) presenta dos modelos matemáticos dinámicos y unidimensionales, desarrollados para el análisis experimental de un gasificador de lecho fluidizado burbujeante (BFBG) de laboratorio para biomasa. El primer modelo utiliza una ecuación para describir una cinética con alta velocidad de calentamiento durante la pirólisis, por el contrario, el segundo modelo utiliza una ecuación de primer orden obtenida en base a datos empíricos para velocidades de calentamiento moderadas. Además, la modelación contempla la hidrodinámica del lecho, análisis de la pirólisis secundaria y la influencia del *freeboard* para la formación de ciertas reacciones químicas. Así mismo, la fase sólida de carbono utiliza el modelo de contracorriente de mezcla inversa con la finalidad de describir la mezcla de partículas de carbón.

Se utilizó el primer modelo de Radmanesh, Chaouki & Guy (2006) para comparar los resultados obtenidos en esta investigación, debido a que presentó un mejor comportamiento y cercanía con los valores experimentales. Es necesario mencionar que la metodología de modelación de un gasificador de lecho fluidizado burbujeante desarrollado y validado en esta investigación tuvo una publicación SCOPUS, al exponer los resultados en 2021 *IEEE International Conference on Automation (IEEE ICA-ACCA2021)*. Para más información se recomienda revisar el Anexo 1.

##### **4.1.1 Preprocesamiento con xyExtract**

Se utilizó el software xyExtract *Graph Digitizer* para obtener las coordenadas o puntos de las gráficas del modelo matemático resultante en la investigación de Radmanesh, Chaouki & Guy (2006) de forma detallada. Este software permite extraer datos de un gráfico 2D mediante la importación previa de una imagen en formato mapa de bits (bmp). Además,

permite extraer hasta 1500 puntos, para ello es necesario conocer el entorno de trabajo para iniciar un nuevo proyecto, tal y como se observa en la Figura 49.

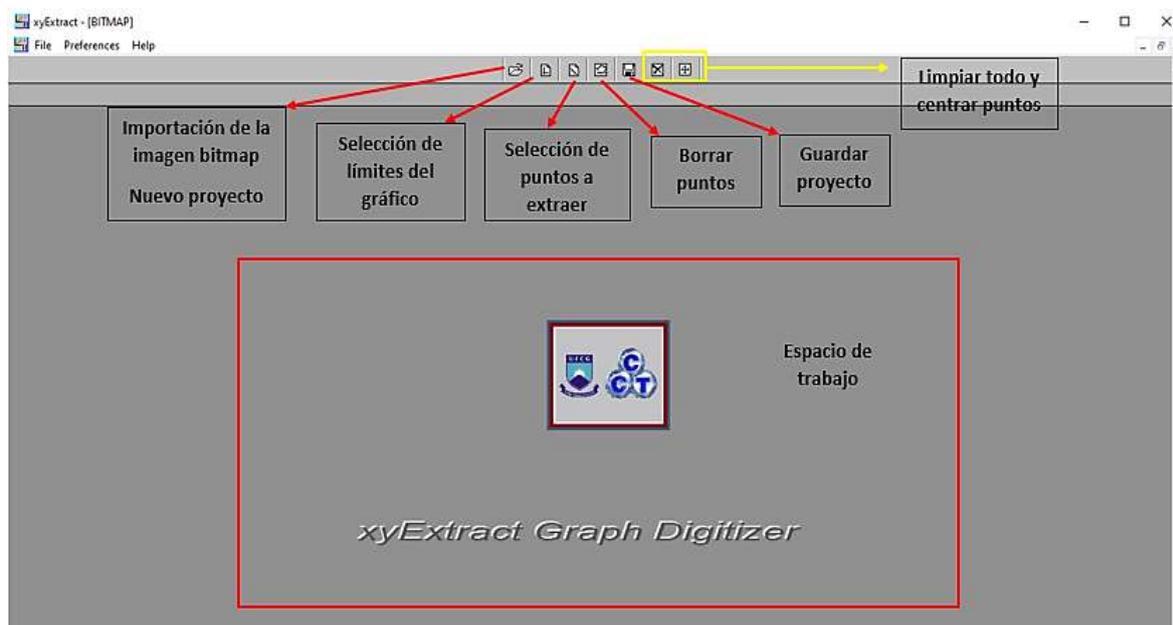


Figura 49. Workspace en xyExtract versión 5.1

Previamente se procedió a extraer las gráficas correctamente delimitadas en forma de captura y se guardaron en formato bmp, esto se observa en la Figura 50.

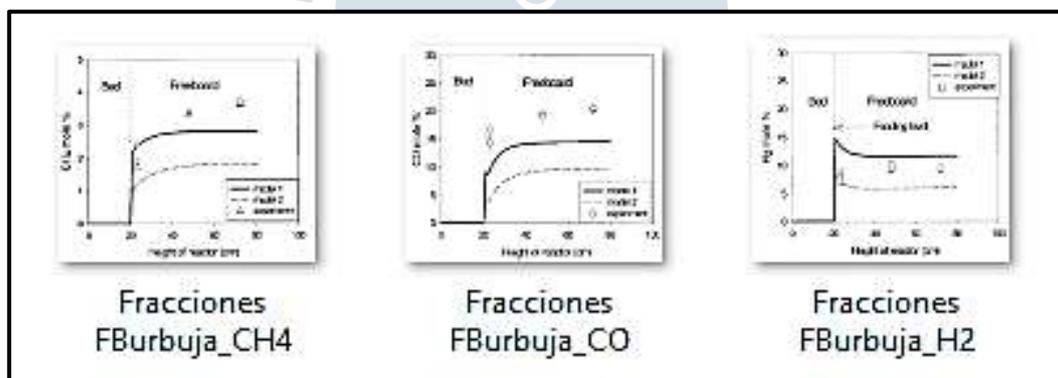


Figura 50. Captura en formato bmp de la evolución de las tres especies gaseosas

#### 4.1.2 Procesamiento para la extracción de puntos

Con las imágenes de la Figura 50 se procede a importar cada una de ellas para realizar el procesamiento de la información a extraer. Los pasos que se realizan en el software *xyExtract Graph Digitizer* son consecutivos, y deben ser realizados de forma correcta para continuar, pues el programa no permitirá seguir si detecta algún error o incoherencia. En primer lugar, una vez importada la imagen en un nuevo proyecto, se debe delimitar correctamente los ejes x e y dando sus valores máximos y mínimos, siendo el último valor coincidente en ambos casos (valor de referencia igual al origen). En segundo lugar, se debe seleccionar la opción *points*, y utilizando el cursor se debe hacer clic a lo largo de la gráfica

que se desea extraer sus coordenadas o puntos, donde aparecerán pequeños puntos de color celeste que indican la cantidad de datos a extraer (ver Figura 51).

Los pasos mencionados anteriormente se realizaron para cada curva donde se desea extraer sus puntos. En otras palabras, el proceso para obtener los puntos del modelo y datos experimentales de la investigación de Radmanesh, Chaouki & Guy (2006) se realizó seis veces, considerando las fracciones molares en Fase Burbuja del monóxido de carbono ( $CO$ ), hidrógeno ( $H_2$ ) y metano ( $CH_4$ ), siendo los principales compuestos gaseosos del *syngas*.

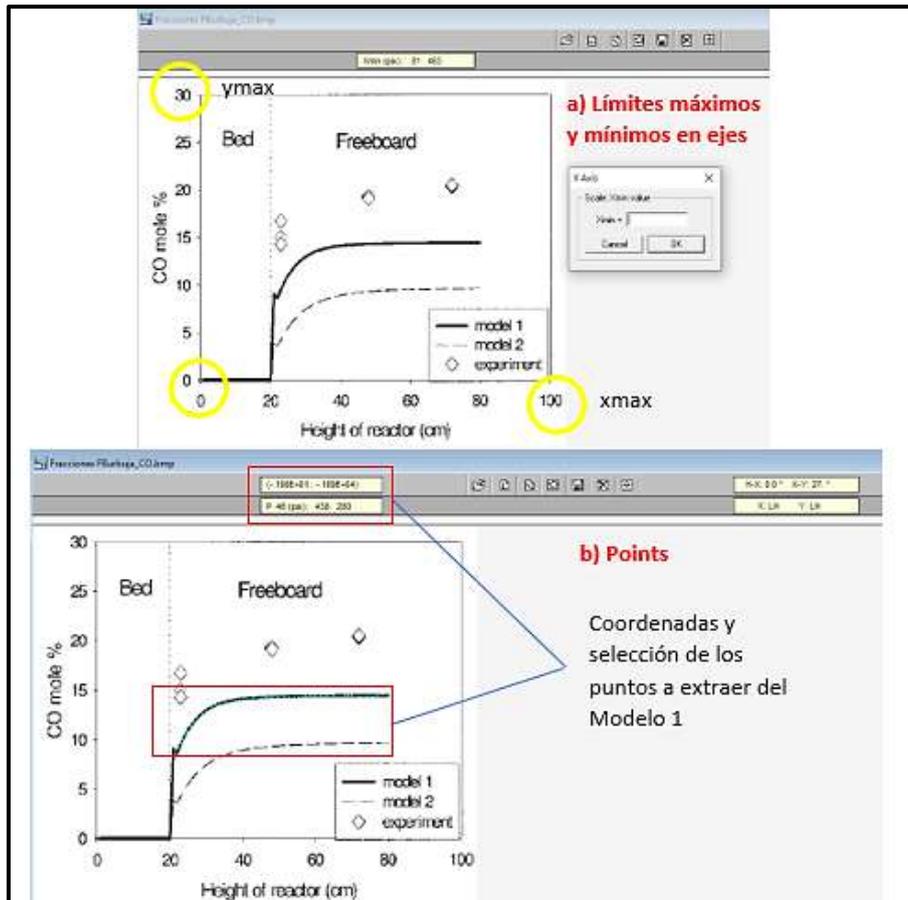


Figura 51. Parámetros para definir el sistema de extracción de puntos

#### 4.1.3 Post procesamiento-resultados de extracción de puntos

Para conocer las coordenadas de las curvas es necesario guardar el proyecto, siendo el paso final. Al realizar esto, automáticamente se genera un archivo en formato txt, cuyo contenido son los puntos en los ejes x e y (ver Figura 52) de forma ordenada. La cantidad de puntos para los datos experimentales fueron 6 y alrededor de 65 puntos para las curvas del Modelo 1. Esto permitir ingresar dicha data al código en MATLAB y generar las mismas curvas y datos experimentales frente a la respuesta del modelo matemático de esta investigación (ver Apéndice I).

Experimental-data-CH4		
Experimental-data-CO	X	Y
Experimental-data-H2	0.230996E+02	0.141270E+02
Model1-CH4	0.231072E+02	0.150000E+02
Model1-CO	0.231211E+02	0.165873E+02
Model1-H2	0.480873E+02	0.189683E+02
	0.721698E+02	0.203968E+02

Figura 52. Proyectos guardados con las coordenadas de las curvas a comparar

#### 4.1.4 Datos de entrada para la validación

A continuación, se presentan los datos de entrada necesarios para iniciar el modelo matemático (ver Tabla 29), extraídos en base a la investigación de Radmanesh *et al* (2005) y al experimento 1 presentado por Radmanesh, Chaouki & Guy (2006).

Tabla 29. Datos de entrada para la validación del modelo matemático

Biomasa	<i>Beech Wood</i>
Temperatura de operación	$T = 1073 \text{ K}$
Presión de operación	$P = 1 \text{ atm}$
Estado de fluidización	$EF = 7$
Diámetro de partícula del material inerte	$d_p = 0.00025 \text{ m}$
Densidad del material inerte ( <i>silica sand</i> )	$\rho_p = 2650 \text{ kg/m}^3$
Altura del reactor	$H_R = z = 0.8 \text{ m}$
Diámetro interno del reactor	$D_i = 0.078 \text{ m}$
Número de orificios en distribuidor	$n_d = 30$
Razón de equivalencia	$ER = 0.32$
Composición másica en base seca de la biomasa	$x_{C-bio} = 48.27$ $x_{H-bio} = 6.36$ $x_{O-bio} = 45.2$ $x_{N-bio} = 0.14$
Porcentaje de cenizas en la biomasa	$ash = 0.8$
Fracción másica de material volátil	$x_{mv} = 0.81$

#### 4.1.5 Resultados de la validación

Al ingresar los datos de entrada de forma secuencial o en su defecto escribirlos de forma predefinida como se muestra en el Apéndice B, el modelo matemático en código MATLAB realizará la secuencia explicada en el Capítulo 3, con la finalidad de resolver las ecuaciones diferenciales ordinarias de transformación para el cálculo de los flujos molares de las especies analizadas ( $i = CO, CO_2, H_2, H_2O, CH_4, O_2, N_2, char$ ) con respecto a la altura del reactor.

Los primeros resultados de la simulación numérica en régimen estacionario a evaluar fueron satisfactorios. El tiempo de simulación fue de aproximadamente 51 s, obteniendo un tiempo de respuesta relativamente rápido en comparación a los modelos CFD, así mismo, el número de pisos o diferenciales de altura del reactor obtenidos fue de 9463 para cada especie gaseosa analizada, dicha cantidad obtenida es función del comando ODE113, pues utiliza incrementos de altura variables. De esta forma, se calculó los valores del flujo molar total a la entrada y salida del reactor, obteniendo  $0.0234 \text{ mol/s}$  y  $0.0214 \text{ mol/s}$  respectivamente, además, la diferencia o variación de flujos es igual a  $2 \times 10^{-03} \text{ mol/s}$ , por lo tanto, el flujo molar se reduce. Así mismo, se estimó el flujo másico a la entrada y salida del reactor (ver Apéndice K), verificando la conservación de masa del sistema.

Además, se obtuvo resultados gráficos para comparar la evolución de las fracciones molares de las tres principales especies gaseosas que componen al *syngas* ( $CO, H_2, CH_4$ ), presentadas en la investigación de Radmanesh, Chaouki & Guy (2006) frente al modelo matemático desarrollado en esta investigación. Cabe señalar que las gráficas presentan un apoyo visual, pues se ha señalado con una recta vertical discontinua la ubicación de la altura del sistema de alimentación donde inicia el proceso de devolatilización (ver apartado 2.3) y, de igual forma para la altura del lecho expandido.

La evolución de la fracción molar de monóxido de carbono ( $CO$ ) en fase burbuja se presenta en la Figura 53, con una curva de color azul, obteniendo un comportamiento de predicción similar al modelo de Radmanesh, Chaouki & Guy (2006) descrito por una curva discontinua roja. Sin embargo, ambos modelos presentan una diferencia notable. Esta investigación sobreestima el rendimiento del  $CO$  mientras que el segundo modelo lo subestima. A pesar de lo mencionado anteriormente, la tendencia se asemeja a los valores experimentales, debido a que estos incrementan su valor conforme aumenta la altura del reactor.

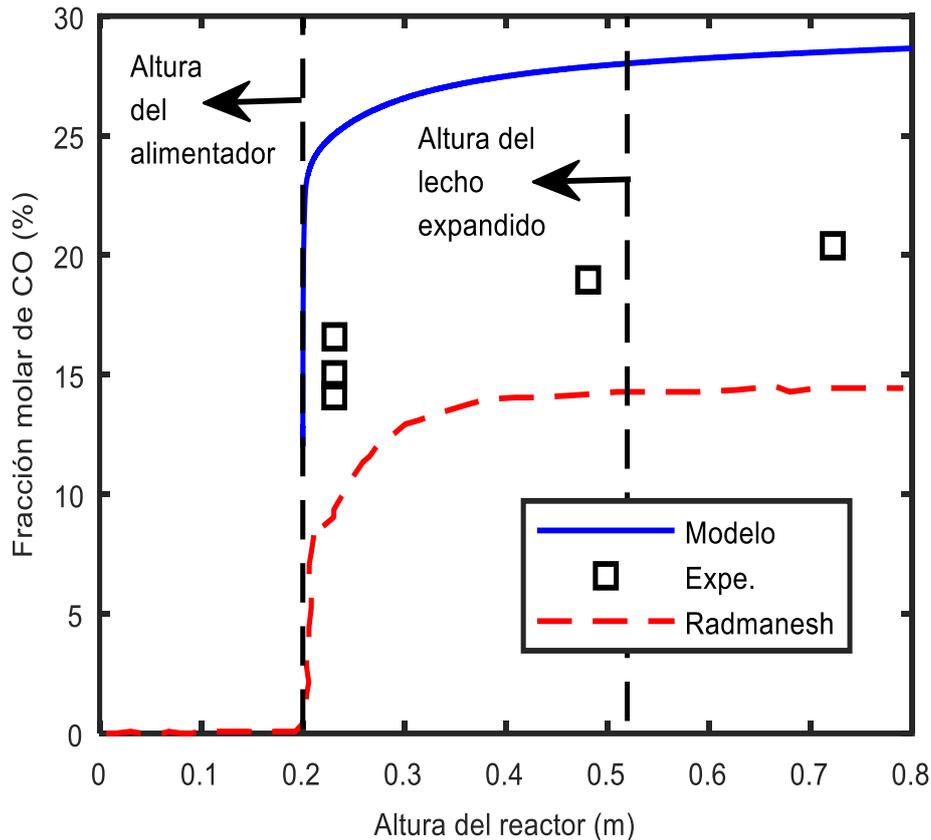


Figura 53. Evolución de la fracción molar del monóxido de carbono

La respuesta de la fracción molar de hidrógeno ( $H_2$ ) frente a la altura del reactor se observa en la Figura 54, donde el modelo desarrollado en esta investigación logra predecir valores numéricos cercanos a los datos experimentales y presenta un mejor comportamiento frente al modelo matemático comparado (curva discontinua roja).

Por último, se compara la evolución de la fracción molar del metano ( $CH_4$ ), obteniendo una tendencia y comportamiento diferenciado. La curva del color azul desarrollada en esta investigación presenta una disminución del rendimiento o consumo del metano al incrementar la altura del reactor, por otro lado, el modelo de Radmanesh, Chaouki & Guy (2006), desde ahora llamado modelo de referencia, predice una tendencia similar con los datos experimentales, donde el gas incrementa su valor porcentual (ver Figura 55). A pesar de ello, es importante destacar que en ambos casos la variación entre el valor real y predicho no es significativa, esto se analizará en el siguiente párrafo.

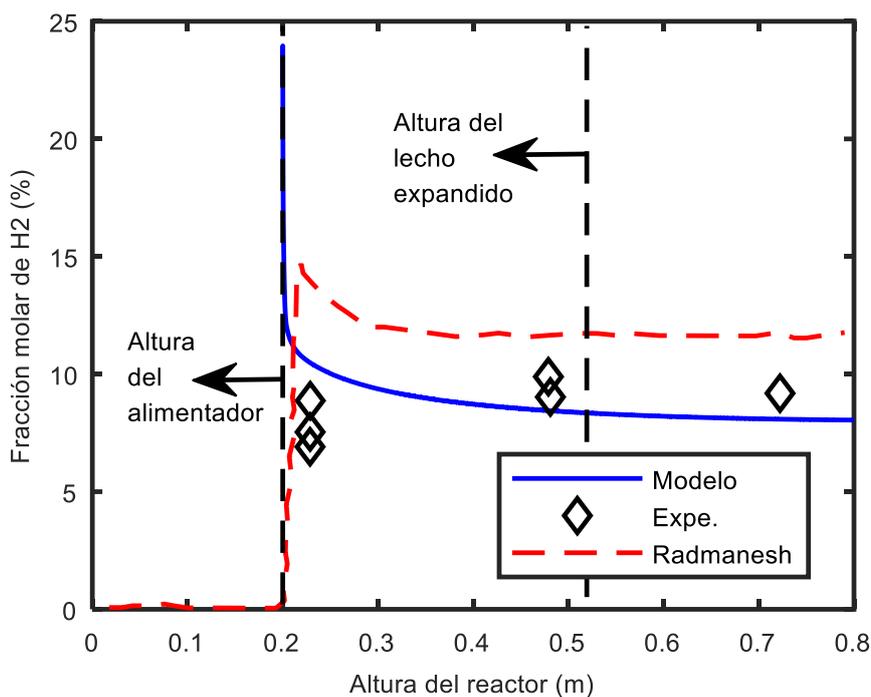


Figura 54. Evolución de la fracción molar del hidrógeno

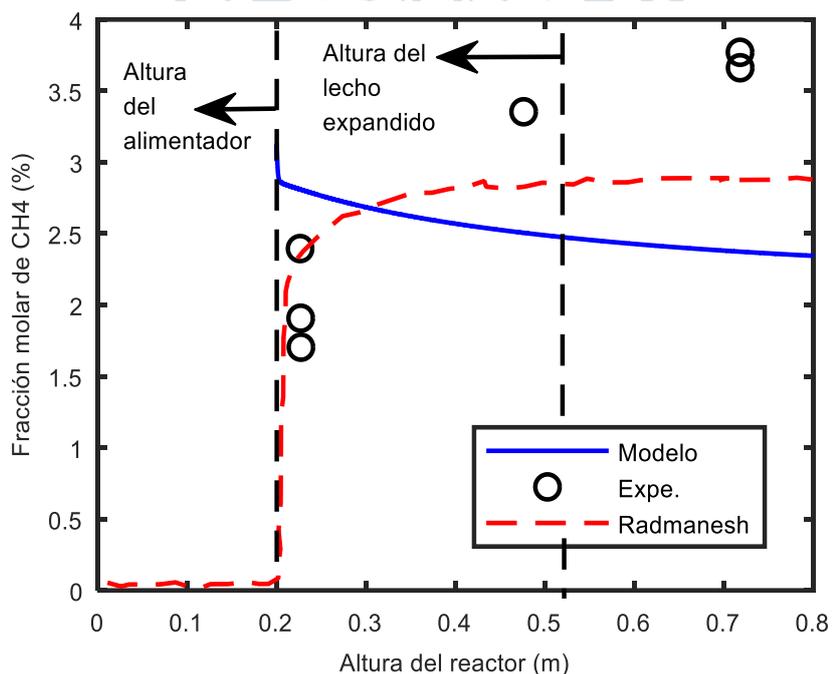


Figura 55. Evolución de la fracción molar del metano

A continuación, en la Tabla 30 se presentan los datos resumidos del error relativo obtenido del modelo desarrollado en esta investigación con respecto a los datos experimentales medidos a la salida del reactor de las tres especies gaseosas, así mismo, se estima el error de la investigación de referencia.

Tabla 30. Cuadro comparativo del error relativo en ambos modelos

	Fracciones molares a la salida del reactor (%)			Error (%)		
	$CO$	$H_2$	$CH_4$	$E_{CO}$	$E_{H_2}$	$E_{CH_4}$
Experimento 1	20.39	9.18	3.66	--	--	--
Modelo	28.52	8.08	2.37	39.87	11.98	35.25
Radmanesh, Chaouki & Guy (2006)	14.44	11.78	2.88	29.18	28.32	21.31

Como se observa en la Tabla 33, se comprobó que ambos modelos matemáticos presentan los valores más altos de error relativo para predecir la fracción molar del monóxido de carbono. Por otra parte, al analizar las fracciones molares del hidrógeno a la salida del reactor, el modelo de referencia presenta un error de más del doble respecto al modelo en código MATLAB, mientras que el error al estimar la fracción molar del metano en el modelo de referencia es menor.

#### 4.2 Análisis del gasificador UDEP

La planta piloto del gasificador de lecho fluidizado burbujeante se construyó en el año 2017 en el campus de la Universidad de Piura (ver Figura 56), desde entonces se ha realizado mejoras en la geometría y estructura del gasificador, así como el análisis de cierto tipo de biomasa residual producida en la ciudad de Piura (ver apartado 1.4.2.1).

Este apartado contiene el análisis a nivel numérico matemático del gasificador UDEP frente al uso de bagazo de caña de azúcar como materia prima combustible, además, se analizan dos variables de control para estimar el mayor rendimiento calorífico del *syngas*.



Figura 56. Planta piloto para gasificación de biomasa en la Universidad de Piura

#### 4.2.1 Ubicación del gasificador UDEP

Un gasificador es un equipo que posee un reactor de geometría variable que opera a temperaturas elevadas, así mismo, tiene sistemas de alimentación, filtrado, etc. Por ello, es necesario tener un espacio adecuado para su instalación.

La construcción de la planta experimental donde funciona el gasificador de forma segura está ubicada entre el policlínico y el radar de la Universidad de Piura, con dirección Av. Ramón Mugica 131, Urb. San Eduardo (ver Figura 57). Las dimensiones del terreno tienen un área aproximada de  $5 \times 4 \text{ m}^2$ .



Figura 57. Ubicación en el plano de la planta piloto  
Fuente: Obtenido de Google Earth

#### 4.2.2 Datos de entrada para la simulación numérica

Como se mencionó anteriormente, para iniciar el modelo matemático en código MATLAB es necesario conocer los datos de entrada (ver apartado 3.3.1). Estos datos se agruparon en la Tabla 34, y los valores corresponden a los parámetros térmicos, fluidodinámicos y geométricos del gasificador UDEP, determinados en las investigaciones de García Valladolid (2017) y Estremadoyro (2015). Además, se analizó el bagazo de caña de azúcar como materia prima para esta simulación, por ser un residuo muy abundante en la ciudad de Piura. Para ello, es necesario conocer la composición básica mediante un análisis último y próximo. Se tomó como base la investigación de Ahmed & Gupta (2011) para conocer la composición en base seca de la biomasa elegida, debido a que los autores utilizaron valores estándar vistos en diversas literaturas durante un proceso de gasificación.

La geometría preliminar del reactor en base a un modelo de caja negra utilizando el software CEAgui se observa en la Figura 58a (Estremadoyro, 2015), donde se puede conocer

la altura del alimentador y el diámetro interno del reactor. En base al estudio preliminar anterior, el diseño final del reactor de lecho fluidizado burbujeante se observa en la Figura 58b (García Valladolid, 2017), con ciertas variaciones y mejoras geométricas necesarias para la construcción física.

Mediante los diseños mencionados en el párrafo anterior, se pudo extraer cierta información relevante para la simulación numérica del modelo matemático desarrollado en esta investigación (ver Tabla 31). Es necesario señalar que los parámetros fluidodinámicos como la razón de equivalencia y el estado de fluidización han sido estimados bajo cálculos numéricos manuales con la información determinada en las dos investigaciones ya mencionadas.

Tabla 31. Datos de entrada del experimento UDEP

Experimento UDEP	
Biomasa	Bagazo de caña de azúcar
Temperatura de operación	$T = 1073 \text{ K}$
Presión de operación	$P = 1 \text{ atm}$
Estado de fluidización	$EF = 5$
Diámetro de partícula del material inerte	$d_p = 0.0005 \text{ m}$
Densidad del material inerte (bauxita)	$\rho_p = 1760 \text{ kg/m}^3$
Altura del reactor	$H_R = 1.35 \text{ m}$
Diámetro interno del reactor	$D_i = 0.23 \text{ m}$
Número de orificios en distribuidor	$n_d = 49$
Razón de equivalencia	$ER = 0.15$
Composición másica en base seca de la biomasa	$x_{C-bio} = 44.8$ $x_{H-bio} = 5.35$ $x_{O-bio} = 39.55$ , $x_{N-bio} = 0.38$
Porcentaje de cenizas en la biomasa	$ash = 0.113$
Fracción másica de material volátil	$x_{mv} = 0.738$
Porcentaje de carbono fijo	$C_{fixed} = 14.95$

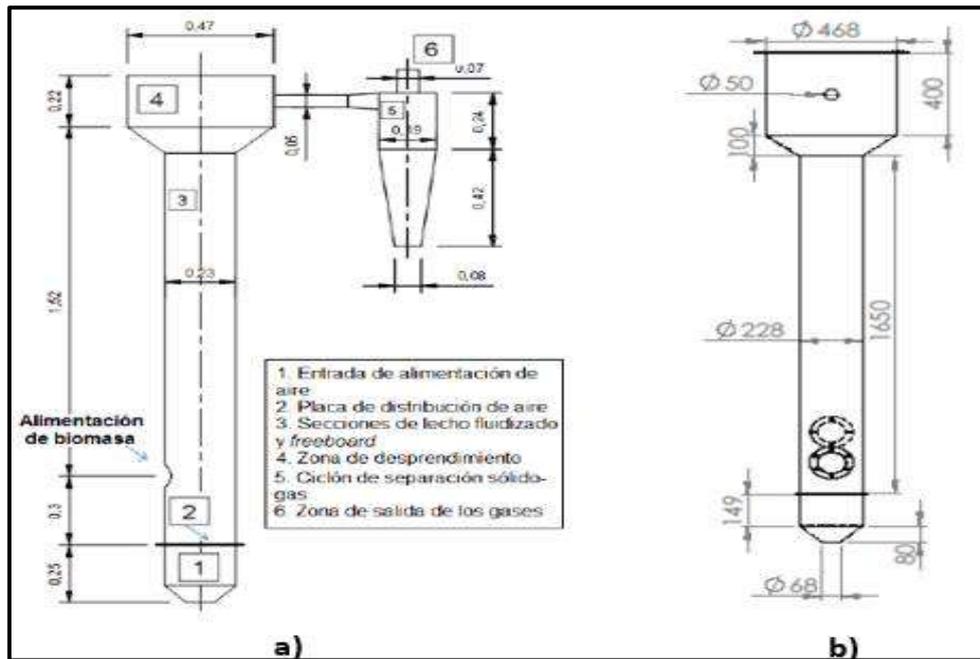


Figura 58. Esquema geométrico del reactor preliminar (a) y con dimensiones finales (b)

Fuente: Obtenido de Estremadoyro (2015) y García Valladolid (2017)

#### 4.2.3 Resultados y discusiones del gasificador UDEP

Con los datos de entrada ingresados al modelo matemático, se realiza el cálculo de la evolución de las fracciones molares en la fase burbuja de las principales especies gaseosas que componen al syngas, a lo largo de la altura del reactor, con la finalidad de predecir el potencial calorífico bajo las condiciones del experimento UDEP (ver Tabla 34). Los resultados se observan en la Figura 59 y Figura 60.

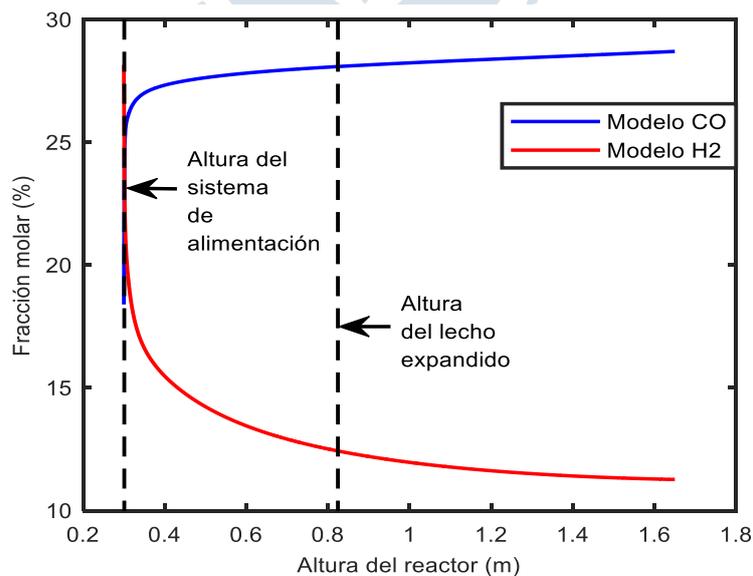


Figura 59. Evolución del CO y H<sub>2</sub> producidos en el gasificador UDEP con bagazo de caña de azúcar

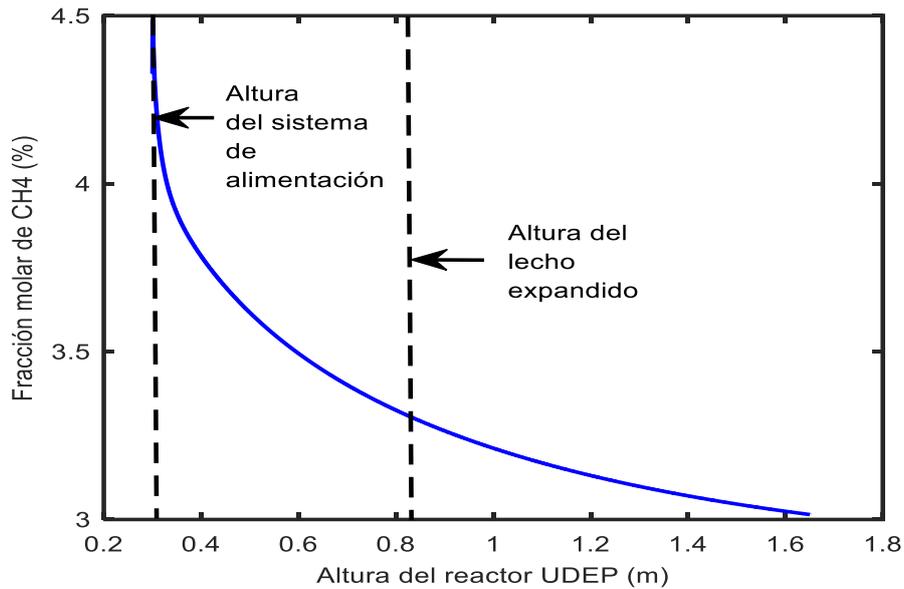


Figura 60. Evolución del CH<sub>4</sub> producido en el gasificador UDEP con bagazo de caña de azúcar

Las evidencias anteriores muestran que la evolución de la fracción molar de monóxido de carbono (CO) presenta una sobreestimación, debido a las contribuciones de las reacciones químicas endotérmicas y a las ecuaciones consideradas para estimar la velocidad de reacción de dicho gas. Esto representa un consumo de metano (R5), vapor de agua (R6) y de dióxido de carbono (R7) para la generación de CO, además, existe una contribución minoritaria debido a la generación de material carbonoso. Con respecto a la tendencia del hidrógeno y el metano vistas en la Figura 59 y Figura 60 respectivamente, estos gases presentan un comportamiento descendente, pues se consumen conforme incrementa la altura del reactor, esto tiene una consecuencia en el rendimiento calorífico del *syngas* como se verá más adelante. En tal sentido, la Tabla 32 presenta una comparativa de los valores estimados en esta investigación con respecto a la investigación de Figueroa (2015). Cabe mencionar que en ambos casos los escenarios son diferentes, coincidiendo solo en la temperatura de operación, el tipo de biomasa y en el tipo de gasificador utilizado.

Tabla 32. Datos obtenidos a la salida del reactor para gasificación de bagazo de caña de azúcar

	Gasificador	Modelo	$T$ [°C]	$ER$	$y_{CO}$	$y_{H_2}$	$y_{CH_4}$
Experimento UDEP	BFB	Teoría de las dos fases	800	0.15	28.7%	11.27%	3.01%
Figueroa (2015)	BFB	CFD	800	0.3	12.95%	5.5%	3.6%

Así mismo, se estimó la diferencia de la cantidad de flujo molar a la entrada del reactor y a la salida, obtenido una reducción del orden de  $10^{-02} \text{ mol/s}$ , demostrando nuevamente que el flujo molar ha disminuido a la salida del reactor. A continuación, se presentan los resultados obtenidos.

$$\dot{f}_{molar-inicial} = 0.5483 \text{ mol/s}$$

$$\dot{f}_{molar-final} = 0.5125 \text{ mol/s}$$

$$\Delta \dot{f} = 0.0358 \text{ mol/s}$$

El valor del poder calorífico inferior (PCI) del syngas se estimó mediante la Ecuación 156, que representa la contribución porcentual de los valores del PCI de las tres principales especies gaseosas, presentadas en la investigación de Waldheim & Nilsson (2001) sobre gasificación. Además, se verificó que el valor del PCI obtenido mediante el modelo matemático para el experimento UDEP está dentro del rango de valores teóricos que se pueden obtener en un reactor de lecho fluidizado burbujeante a presión atmosférica, así como los valores de las fracciones molares estimadas en esta investigación (ver Tabla 33).

$$PCI = \frac{(PCI_{CO}y_{CO}) + (PCI_{H_2}y_{H_2}) + (PCI_{CH_4}y_{CH_4})}{100} \text{ [MJ/Nm}^3\text{]} \quad (156)$$

$$PCI = \frac{(12.63y_{CO} + 10.8y_{H_2} + 35.9y_{CH_4})}{100}$$

$$PCI_{Exp.UDEP} \approx 5.93 \frac{\text{MJ}}{\text{Nm}^3}$$

Tabla 33. Características típicas del gas producido en gasificadores a presión atmosférica

Propiedades	Downdraft	Updraft	BFB	CFB
PCI (MJ/Nm <sup>3</sup> )	4-5.6	3.7-5.1	3.7-8.4	3.6-5.9
H <sub>2</sub> (%vol)	15-21	10-14	5-16.3	15-22
CO (%vol)	10-22	15-20	9.9-22.4	13-15
CO <sub>2</sub> (%vol)	11-13	8-10	9-19.4	13-15
CH <sub>4</sub> (%vol)	1-5	2-3	2.2-6.2	2-4

Fuente: Obtenido de Couto *et al* (2013)

**4.2.3.1 Influencia de la temperatura de operación.** Uno de los parámetros de control más importantes es la temperatura de operación, pues genera variaciones significativas en la composición del syngas como se verá más adelante. En consecuencia, el análisis de este parámetro con el modelo matemático desarrollado en código MATLAB es fundamental para entender de forma teórica el comportamiento del gasificador UDEP frente a variaciones de temperatura en el reactor.

Después de ingresar los datos de entrada del gasificador UDEP y estimar de forma aproximada los valores de los flujos molares en un reactor isotérmico, se plantea entonces variar este parámetro hasta cierto rango de temperatura, pues como se observa en los datos estimados en la Tabla 34, los valores del hidrógeno ( $H_2$ ) y del metano ( $CH_4$ ) empiezan a disminuir o a consumirse hasta alcanzar valores muy pequeños (entre  $951^\circ\text{C}$  y  $953^\circ\text{C}$ ), cuya magnitud no es lo suficiente como para lograr generar las reacciones químicas propuestas en este modelo matemático. Además, se observa que en el rango de valores entre  $725^\circ\text{C}$  y  $750^\circ\text{C}$  los saltos son muy grandes para el  $H_2$  y el  $CH_4$ , sin embargo, al tomar un incremento menor, los valores resultan con la misma tendencia, por ello se ha optado por mantener el incremento de  $25^\circ\text{C}$  para el análisis. Así mismo, en la Tabla 37 se observa que a medida que incrementa la temperatura en pasos de  $1^\circ\text{C}$  a partir de los  $950^\circ\text{C}$ , la diferencia de flujos a la entrada y salida se incrementa, por lo tanto, el sistema ya no converge.

Un aumento de la temperatura de operación significa que las velocidades de reacción durante el proceso de gasificación serán mayores, aumentando ciertos compuestos gaseosos y disminuyendo otros (Figuerola, 2015). Por otro lado, la conversión de biomasa aumenta a medida que la temperatura aumenta, con ello los sólidos disminuyen y aumentan los compuestos gaseosos. En consecuencia, las variaciones de las tres especies gaseosas analizadas frente al incremento de temperatura en el reactor UDEP se presentan a continuación (ver Figura 61 y Figura 62).

Tabla 34. Data teórica obtenida del modelo matemático para diferentes temperaturas del reactor UDEP

Temperatura [ $^\circ\text{C}$ ]	$y_{CO}$	$y_{H_2}$	$y_{CH_4}$	$PCI$	$f_o$	$f_f$	$\Delta f$
700	27.15	4.55	6.75	6.34	0.6320	0.5503	0.0820
725	27.3	5.00	6.66	6.38	0.6088	0.5330	0.0758
750	28.18	13.35	3.08	6.11	0.5872	0.5516	0.0360
775	28.3	12.51	3.07	6.03	0.5671	0.5325	0.0346
800	28.7	11.27	3.01	5.92	0.5483	0.5125	0.0360
825	29.61	10.00	2.86	5.85	0.5307	0.4932	0.0376
850	30.42	8.75	2.65	5.74	0.5143	0.4754	0.0389
875	31.21	7.72	2.37	5.63	0.4989	0.4592	0.0390
900	32.16	6.82	2.13	5.56	0.4845	0.4443	0.0402
925	33.21	5.74	1.91	5.50	0.4709	0.4293	0.0416
950	34.72	1.59	1.78	5.20	0.4582	0.4037	0.0546
951	34.7	1.26	1.74	5.14	0.4577	0.3989	0.0588
952	34.3	1.02	1.72	5.06	0.4572	0.3912	0.0661
953	34	0.87	1.70	5.00	0.4567	0.3684	0.0883
955	El sistema ya no converge.						

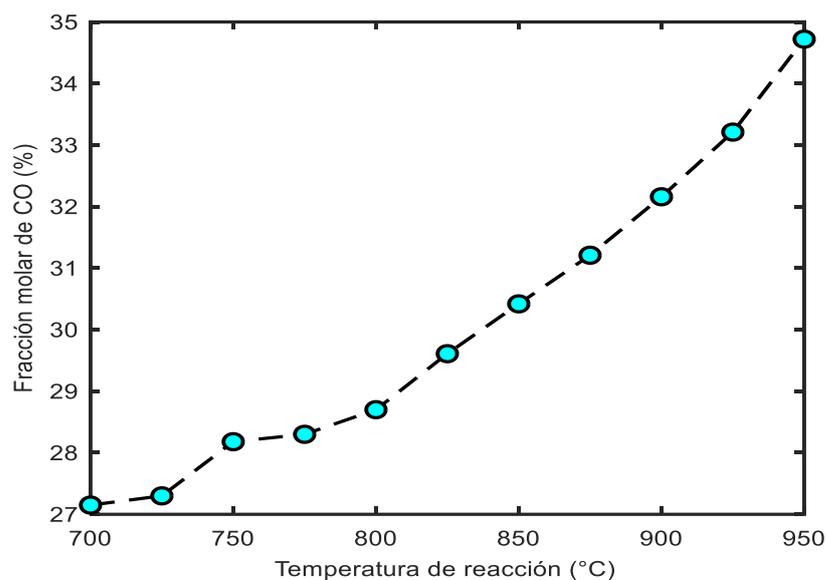


Figura 61. Evolución de la fracción molar de **CO** frente a la temperatura de operación del gasificador UDEP

Con respecto a la tendencia de las principales especies gaseosas del *syngas* analizadas en el gasificador UDEP, se puede afirmar que el contenido de monóxido de carbono aumenta conforme aumenta la temperatura del proceso, esto difiere de algunas literaturas. Por el contrario, la tendencia de la fracción molar del hidrógeno presenta un comportamiento definido, y tiene un valor pico a 750°C, luego disminuye conforme aumenta la temperatura del proceso, una tendencia similar ocurre con el contenido de metano, estos dos comportamientos se presentan en diversas investigaciones, tales como Rodríguez *et al* (2010), Tosina Fernández (2013) y Radmanesh, Chaouki & Guy (2006).

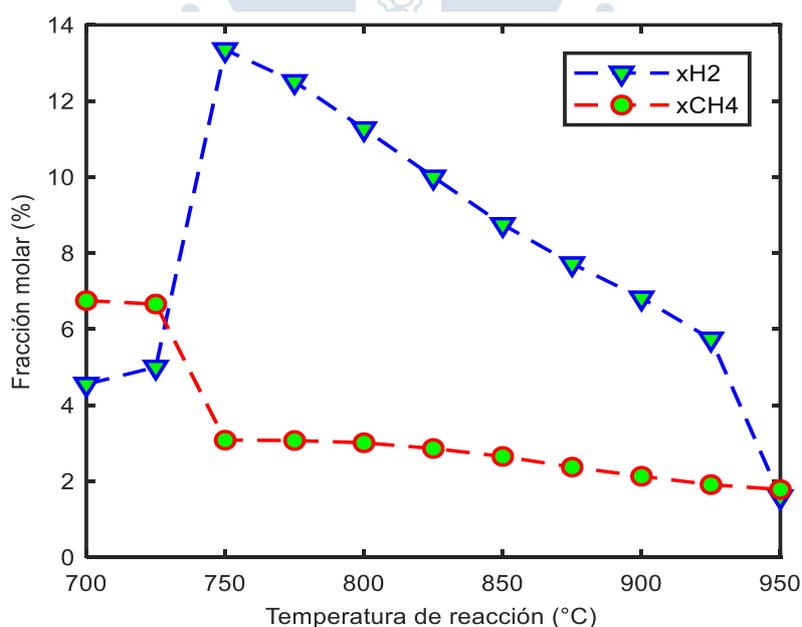


Figura 62. Evolución de la fracción molar del CH4 y el H2 frente a la temperatura de operación del gasificador UDEP

En base a los resultados anteriores, se puede afirmar lo que diversos autores postulan, que el aumento del rendimiento energético del *syngas* o la disminución del poder calorífico inferior está relacionado con la temperatura, inclusive cuando se trabaja con diferentes tipos de biomasa, sin embargo, esto puede ser referencial, porque depende además de ciertos factores, por ejemplo, del tipo de agente gasificante, de la geometría del reactor, etc.

Así mismo, el comportamiento del PCI se observa en la Figura 63, y presenta el comportamiento esperado según diversas literaturas, es decir, que empeora la calidad el gas a la salida del reactor conforme se aumenta la temperatura del proceso. Además, se puede observar que el gasificador UDEP presenta un mejor desempeño energético a 735°C con un valor de PCI igual  $6.4 \text{ MJ}/\text{Nm}^3$ , debido a la variación de las tres especies gaseosas analizadas.

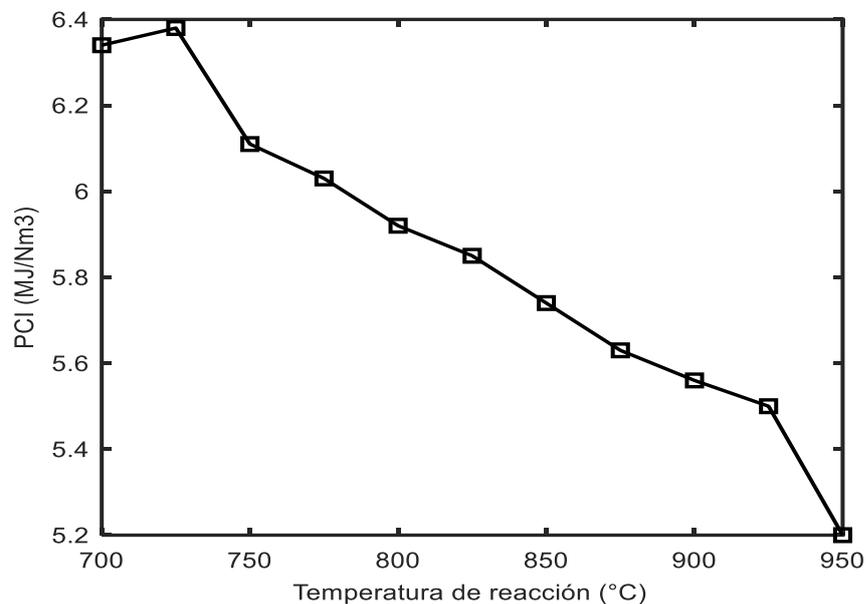


Figura 63. Evolución del poder calorífico inferior frente a la temperatura de operación del gasificador UDEP

**4.2.3.2 Influencia de la razón de equivalencia (ER).** El capítulo 2 explica diversas variables que intervienen durante el proceso de gasificación, y una de ellas es la razón de equivalencia, un factor adimensional utilizado en el proceso de conversión térmica, y se define como la relación entre el flujo másico real de aire-biomasa y el flujo de aire-biomasa estequiométrico necesario para generar una combustión completa. Además, se analizó los rangos que podría tener este parámetro.

Este apartado contiene la relación existente entre la *ER* y la evolución de las fracciones molares de las tres especies gaseosas analizadas, respecto al experimento UDEP. Por tal razón, en la Tabla 35 se muestra la data obtenida mediante la simulación numérica. Y de forma gráfica se puede concluir que los valores del monóxido de carbono en la Figura 64 muestran una tendencia a incrementar su contenido porcentual, al aumentar la *ER*, sin embargo, la variación de los valores no es muy significativa. Esta tendencia ascendente se observa en investigaciones como Tosina Fernández (2013) y Arteaga-Pérez (2012), por el

contrario, la investigación de Manikandan & Jeya (2020) analiza la gasificación de biomasa en un lecho fluidizado burbujeante con bagazo de caña de azúcar, que utilizó un rango de la  $ER$  entre 0.1 y 0.35, obtuvo una tendencia descendente de la composición en base seca del monóxido de carbono. Estas diferencias tienen una explicación, pues los experimentos no son iguales y generan ciertas condiciones para la obtención de resultados particulares, por tal razón, los valores de un modelo deben ser verificados experimentalmente.

Después de la simulación, se pudo determinar el gasto másico de biomasa seca al utilizar un determinado valor de la  $ER$  para el experimento UDEP. Los valores obtenidos en definitiva presentan una tendencia a disminuir el consumo de biomasa (bagazo de caña de azúcar) al incrementar la  $ER$ , esto es comprensible al analizar la fórmula de la  $ER$ , repercutiendo en el valor del PCI, sin embargo, la variación no es muy grande, pues representa una disminución de  $0.6 \text{ MJ}/\text{Nm}^3$ .

Tabla 35. Data teórica obtenida del modelo matemático para diferentes valores de la  $ER$

$ER$	$y_{CO}$	$y_{H_2}$	$y_{CH_4}$	$PCI$	$g_{bio} [\text{kg}/\text{h}]$	$f_0$	$f_f$	$\Delta f$
0.19	28.11	10.54	2.73	5.67	35.28	0.4719	0.4405	0.0315
0.20	28.20	10.3	2.67	5.63	34.56	0.4576	0.4267	0.0309
0.21	28.20	10.0	2.61	5.58	33.84	0.4447	0.4141	0.0306
0.22	28.20	9.8	2.55	5.54	33.12	0.4329	0.4026	0.0303
0.23	28.20	9.55	2.50	5.49	32.40	0.4597	0.4270	0.0327
0.24	28.20	9.27	2.46	5.45	32.00	0.4490	0.4163	0.0326
0.25	28.20	8.98	2.40	5.39	31.32	0.4391	0.4064	0.0326
0.26	28.36	8.64	2.38	5.37	30.60	0.3949	0.3647	0.0302
0.27	28.44	8.33	2.33	5.33	30.20	0.3871	0.3568	0.0303
0.28	28.52	8.02	2.28	5.29	29.70	0.3799	0.3495	0.0305
0.29	28.57	7.69	2.26	5.25	29.50	0.3733	0.3426	0.0306
0.30	28.57	7.35	2.21	5.20	29.10	0.3670	0.3362	0.0308
0.31	28.49	7.02	2.17	5.14	28.80	0.3612	0.3302	0.0309
0.32	28.44	6.69	2.10	5.07	28.10	0.3557	0.3246	0.0311

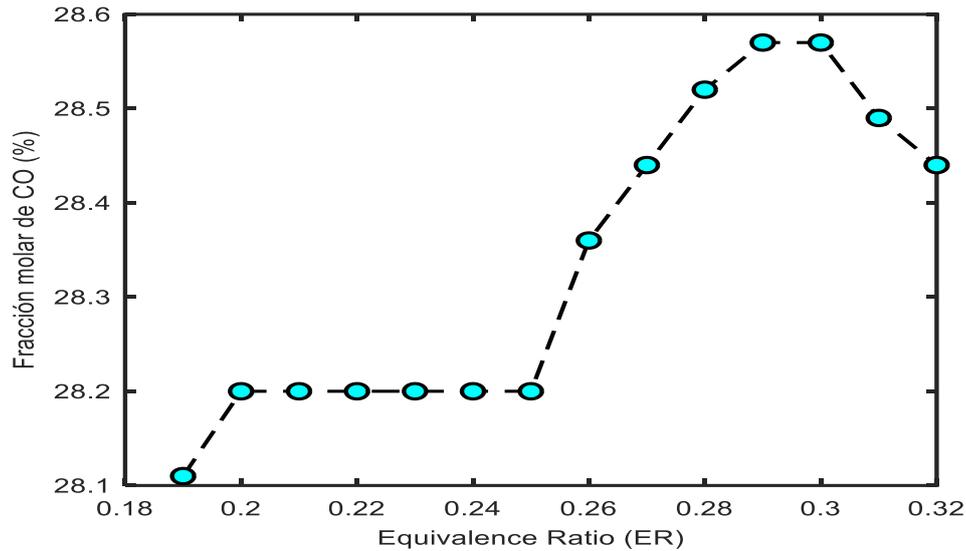


Figura 64. Evolución de la fracción molar del  $CO$  frente a la variación de la  $ER$  para el experimento UDEP

De forma similar a la variación de temperatura, las fracciones molares de hidrógeno y metano a la salida del reactor disminuyen conforme aumenta la razón de equivalencia (ver Figura 65), esto disminuye la calidad del syngas. Se observa que la variación de hidrógeno es más significativa en comparación a la variación de metano, este último compuesto gaseoso es afectado por la reacción de metanización, que se inhibe al aumentar el valor de  $ER$ . Resultados similares a la tendencia obtenida en esta investigación pueden ser observados en Tosina Fernández (2013), Radmanesh, Chaouki & Guy (2006), Manikandan & Jeya (2020) y Arteaga-Pérez (2012). Finalmente, la Figura 66 muestra la influencia de las variaciones de las tres especies analizadas con respecto al valor del poder calorífico inferior, pues su tendencia es a disminuir a medida que incrementa la  $ER$ , como se mencionó en el párrafo anterior. Es importante resaltar que los valores obtenidos del PCI son menores en comparación a los estimados en la Figura 63 debido a que la  $ER$  tiene un valor constante de 0.15.

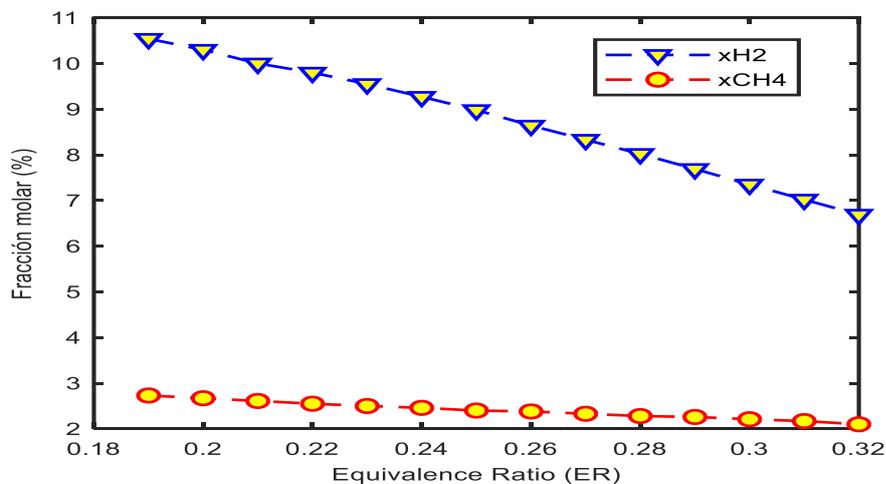


Figura 65. Evolución de la fracción molar del  $CH_4$  y el  $H_2$  frente a la variación de la  $ER$  para el experimento UDEP

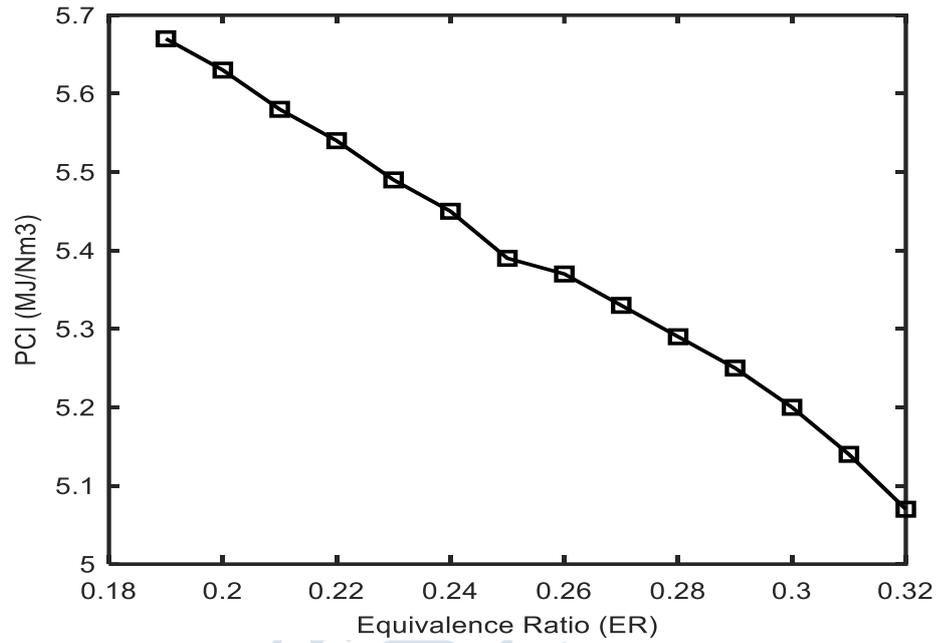


Figura 66. Evolución del poder calorífico inferior frente a la variación de la ER para el experimento UDEP

Es necesario destacar que los resultados de las variaciones de los dos parámetros analizados, y orientados al gasificador UDEP, han sido presentados en un paper al 16<sup>th</sup> Conference on Sustainable Development of Energy, Water and Environment Systems (SDEWES) DUBROVNIK 2021, realizado en Croacia Octubre 10-15, 2021. El estado de este informe se encuentra aprobado y fue presentado virtualmente (ver Anexo 2).



## Conclusiones

El proceso termoquímico de gasificación en régimen burbujeante presenta una modelación compleja, debido a la interacción de diversos parámetros fluidodinámicos y de reacciones químicas de manera simultánea, en un reactor sin zonas diferenciadas. Por los resultados obtenidos, la Teoría de las Dos Fases es un modelo matemático válido para predecir el comportamiento del proceso de gasificación con un error aceptable, en comparación a otros métodos o teorías que requieren sistemas de solución complejos o variables que no se pueden determinar de manera rápida.

En la presente tesis se ha desarrollado un modelo matemático de un gasificador de lecho fluidizado burbujeante, basado en la Teoría de las Dos Fases. En este sentido, se consideró necesario establecer que al interior del reactor existe un lecho infinito, donde se pueden aplicar las ecuaciones de transformación de flujo molar en las fases burbuja y emulsión, así como el balance másico mediante una ecuación química general. Teóricamente, estas ecuaciones son válidas solo hasta la altura del lecho expandido, esto responde al por qué se trazó una recta discontinua indicando dicha altura en las gráficas obtenidas, sin embargo, en las Figuras 53 a 54, de la validación del modelo, se observa que los valores de los flujos molares interceptados por la recta mencionada respecto a los valores obtenidos a la salida del reactor presentan una variación promedio de  $\pm 0.69$ , de forma similar, para el experimento UDEP obtuvo una variación promedio de  $\pm 1.2$ . Por consiguiente, la aplicación de esta hipótesis es válida al tener resultados con variaciones no significativas.

La metodología de solución del modelo matemático es secuencial y de fácil comprensión, con adaptabilidad para futuras investigaciones. Además, incorpora ecuaciones empíricas simplificadas del proceso de devolatilización específicamente para el estudio de la biomasa de primera y segunda generación. Se observa que los resultados del modelo matemático en base a la metodología propuesta han permitido una buena aproximación de las fracciones molares de los tres principales compuestos del syngas, con una precisión promedio de 71% respecto a los datos experimentales, en comparación al modelo de Radmanesh, Chaouki & Guy (2006) que obtuvo una precisión promedio de 73.7%, en general ambos resultados presentan cierta cercanía. El error obtenido en esta investigación es manejable debido a la gran incertidumbre durante el proceso de gasificación con lechos fluidizados, no solo por los diferentes mecanismos químicos y cinéticos, además, es necesario contemplar el tratamiento previo (uniformidad del secado y tamaño de partícula) de la materia prima, debido

a que genera variaciones en su composición real, pues el modelo se basa en resultados teóricos.

Esta investigación tuvo como objetivo la estimación de la calidad del syngas a la salida del reactor UDEP bajo los parámetros de diseño actuales, todo ello mediante el análisis de la evolución de las fracciones molares de las especies gaseosas CO, H<sub>2</sub> y CH<sub>4</sub> obteniendo un valor de 5.93 MJ/Nm<sup>3</sup> al gasificar bagazo de caña de azúcar con una variación de reducción de flujos molares igual a  $\Delta f = 0.0358$  mol/s. Además, se asume un buen cumplimiento de la Ley de conservación de masa, al ser verificado en el Modelo de Validación (ver Apéndice K), al igual que en los experimentos donde se varió la temperatura de operación y la razón de equivalencia (ER).

En efecto, se observa que el modelo matemático unidimensional aplicado al experimento UDEP presenta una sobrestimación de la fracción molar de monóxido de carbono, obteniendo un +21.8% al aumentar la temperatura de operación hasta 950°C, y un ligero aumento de +1.16% al aumentar la ER hasta 0.32. Esto es comprensible, pues el modelo desarrollado contempla ecuaciones de velocidades de reacción conservadoras durante el proceso de gasificación. Por el contrario, las dos especies restantes (H<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>) presentan un comportamiento decreciente respecto a los parámetros de influencia como la temperatura de operación y la razón de equivalencia, obteniendo una caída para el hidrógeno de -65.1% y -36.5% respectivamente, y para el metano -73.63% y -23.1% respectivamente. Estos resultados repercuten en el empobrecimiento del poder calorífico del syngas a la salida del reactor.

La data obtenida mediante simulación numérica sugiere gasificar bagazo de caña de azúcar con la planta piloto del gasificador UDEP a una temperatura de operación entre 750°C y 775°C, y con un valor de 0.2 para la ER, con dichos valores se puede optimizar la calidad del syngas. Sin embargo, es recomendable tener datos experimentales a modo de comparación, debido a que al gasificar a dichas temperaturas se suele obtener una conversión moderada de material carbonoso, así mismo, el gas de salida contiene dichas partículas, por lo que será necesario utilizar un adecuado sistema de ciclones y de filtración.

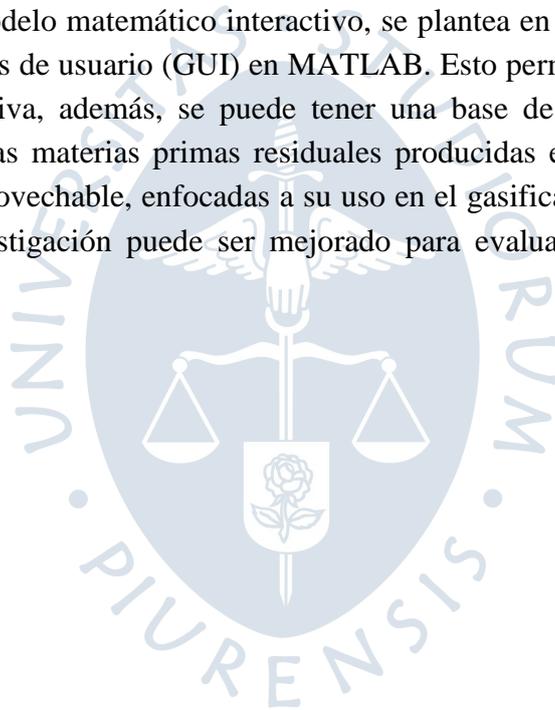
Según los resultados obtenidos en el experimento UDEP, el modelo matemático presenta una limitante, que es la temperatura de operación al interior del reactor. En la realidad se podría operar el reactor UDEP a una temperatura mayor que 950°C y se obtendrá un gas con cierto poder calorífico, sin embargo, para el modelo unidimensional de esta investigación no es aplicable, esto se justifica debido a selección de las velocidades de reacción y a las ecuaciones empíricas del proceso de devolatilización, que no permiten la iteración del código MATLAB al obtener una baja concentración de las especies gaseosas analizadas.

Finalmente, se resalta la importancia de esta investigación para la mejora en eficiencia energética utilizando residuos sólidos renovables. Además, hace un llamado a la mejora del diseño del gasificador UDEP y deja una base para los futuros modelos matemáticos sobre el proceso de gasificación, dando un aporte valioso a la sociedad y a la comunidad científica.

## Recomendaciones

La precisión del modelo matemático puede ser mejorada al implementar nuevas velocidades de reacción, por ello, se recomienda plantear un nuevo modelo para la cinética química de gasificación en base a diversos tipos de biomasa, así como el análisis de un reactor no isotérmico y del *freeboard*, con la finalidad de tener condiciones cercanas a la realidad.

Para tener un modelo matemático interactivo, se plantea en futuras investigaciones, el uso de interfaces gráficas de usuario (GUI) en MATLAB. Esto permitirá ingresar los datos de entrada de forma intuitiva, además, se puede tener una base de datos de la composición elemental de las diversas materias primas residuales producidas en la ciudad de Piura con potencial energético aprovechable, enfocadas a su uso en el gasificador UDEP. Por otro lado, el modelo de esta investigación puede ser mejorado para evaluar diversas geometrías del reactor.





## Referencias bibliográficas

- Abdollahi, M., Guy, C., & Chaouki, J. (2010). Biomass Gasification in Rotating Fluidized bed. *The 13th International Conference on Fluidization - New Paradigm in Fluidization Engineering*, (pág. 9). Montréal.
- Acevedo, J., Zapata, Z., Arenas, E., & Posso, F. (2019). La importancia de los catalizadores en la gasificación de biomasa: Una revisión de la literatura. *ResearchGate*, 27.
- Afanasjeva, N., Castillo, L., & Sinisterra, J. (2017). Biomasa Lignocelulósica. Parte I: Transformación de biomasa. *Journal of Science with Technological Applications*, 17. doi:<https://doi.org/10.34294/j.jsta.17.3.22>
- Aguilar, N. (2015). *Ficha Técnica del cultivo de Caña de Azúcar*. Recuperado el 02 de febrero de 2021, de [http://nutriciondebovinos.com.ar/MD\\_upload/nutriciondebovinos\\_com\\_ar/Archivos/File/CA%C3%91A\\_DE\\_AZ%C3%91ACAR,\\_FICHA\\_T%C3%89CNICA.pdf](http://nutriciondebovinos.com.ar/MD_upload/nutriciondebovinos_com_ar/Archivos/File/CA%C3%91A_DE_AZ%C3%91ACAR,_FICHA_T%C3%89CNICA.pdf)
- Ahmed, I., & Gupta, A. (20 de April de 2011). Sugarcane bagasse gasification: Global reaction mechanism of syngas evolution. *Applied Energy*, 7. doi:doi:10.1016/j.apenergy.2011.07.001
- Alvarez , H., Mori, M., & Martignoni, W. (2015). Effect of Different Gas-Solid Drag Models in a High-Flux Circulating Fluidized Bed Rise. *Chemical Engineering Transactions*, 7. doi:10.3303/CET1543272
- Alves Moya, L. (2017). *Modelo Matemático para Projeto de Reatores Autotérmicos de Leito Fluidizado Borbulhante para Pirólise Rápida Oxidativa de Biomassas*. Universidade Estadual De Campinas, Faculdade de Engenharia Mecânica, Campinas.
- Arteaga-Pérez, L., Casas-Ledón, Y., Pérez-Bermúdez, R., Rodríguez-Machín, L., Peralta-Suárez, L., Prieto-García, J., & Dewulf, J. (2012). Determinación de la calidad energética y la composición del gas de síntesis producido con biocombustibles. Parte II: Combustibles Sólidos, Bagazo de caña de azúcar. *Afinidad LXVIII*, 7.
- Badillo Hernández, U. (2009). *Modelado orientado al control de gasificadores*. Tesis de Maestría, Universidad Nacional Autónoma de México, Departamento de Control , México. Recuperado el 22 de marzo de 2021, de <http://www.ptolomeo.unam.mx:8080/xmlui/bitstream/handle/132.248.52.100/3964/badillohernandez.pdf?sequence=1>

- Barrientos, P. (2014). *Los biocombustibles y su efecto en la agricultura peruana*. Lima.
- Basu, P. (2010). *Biomass Gasification and Pyrolysis*. Halifax: Academic Press.
- Basu, P. (2013). *Biomass Gasification, Pyrolysis and Torrefaction* (Second ed.). Academic Press. doi:<https://doi.org/10.1016/C2011-0-07564-6>
- Bates, R., Ghoniem, A., Jablonski, W., Carpenter, D., Altantzis, C., Garg, A., . . . Field, R. (2017). *Steam-Air Blown Bubbling Fluidized Bed Biomass Gasification (BFBBG): Multi-Scale Models and Experimental Validation*. AIChE. doi:<https://doi.org/10.1002/aic.15666>
- Caña Brava. (s.f.). *El ciclo de energía renovable del carbono*. Recuperado el 10 de junio de 2020, de <http://www.canabrava.com.pe/procesos>
- Chaillou, L. (2008). *Cálculo Numérico: Curso práctico con aplicaciones a la Ingeniería en Alimentos*. Universidad Nacional de Santiago del Estero, Físico-Matemático.
- Chao, C., Yu, C., Zhou, J., Xiang, Y., & Luo, Z. (2014). Optimization of the Three-stage Biomass Gasification Characteristics in High-Temperature Entrained-flow Bed. *BioResources*, 13.
- Chapra, S., & Canale, R. (2011). *Métodos numéricos para ingenieros*. Mc Graw Hill.
- Cluet, B. (2014). *Évaluation de la ségrégation de la biomasse dans un lit fluidisé et modélisation globale du procédé de gazéification*. Université de Lorraine.
- Cocco, R., Reddy Karri, S., & Knowlton, T. (2014). *Introduction to Fluidization*. AIChE.
- Conesa, J. (2010). Reactores de lecho fluidizado. *Diseño de reactores heterogéneos*. Recuperado el 27 de marzo de 2021, de [https://rua.ua.es/dspace/bitstream/10045/15296/6/Tema6\\_rlf\\_RUA.pdf](https://rua.ua.es/dspace/bitstream/10045/15296/6/Tema6_rlf_RUA.pdf)
- CONICET Bahía Blanca. (2007). *Centro Científico Tecnológico (CCT)*. Recuperado el 12 de febrero de 2021, de Centro Científico Tecnológico (CCT) Web Site: <http://www.criba.edu.ar/cinetica/solidos/Capitulo2.pdf>
- Couto, N., Rouboa, A., Silva, V., Monteiro, E., & Bouziane, K. (2013). Influence of the biomass gasification processes on the final composition of syngas. *Energy Procedia*, 11. doi:[doi: 10.1016/j.egypro.2013.07.068](https://doi.org/10.1016/j.egypro.2013.07.068)
- Davidson, J. (1995). Fluidized Particles. En E. Guazzelli, & L. Oger, *Mobile Particulate Systems* (pág. 390). Springer Netherlands. doi:[https://doi.org/10.1007/978-94-015-8518-7\\_12](https://doi.org/10.1007/978-94-015-8518-7_12)
- De Lucas Herguedas, A. I., Del Peso Taranco, C., Rodríguez García, E., Prieto Paniagua, P., Sanz González, E., & Sánchez Martín, M. (2012). *Biomasa, Biocombustibles y Sostenibilidad*. Palencia: Centro Tecnológico Agrario y Agroalimentario ITAGRA.CT.

- De Souza-Santos, M. (1989). *Comprehensive modelling and simulation of fluidized bed boilers and gasifiers*. Instituto de Pesquisas Tecnológicas do Estado de São Paulo, São Paulo.
- Delebarre, A. (2004). Revisiting the Wen and Yu equations for Minimum Fluidization Velocity prediction. *Chemical Engineering Research and Design*, 4. doi:<https://doi.org/10.1205/026387604323142621>
- Dryer, F., & Glassman, I. (1973). High-Temperature oxidation of CO and CH<sub>4</sub>. *Symposium (International) on Combustion*, 987-1003. doi:[https://doi.org/10.1016/S0082-0784\(73\)80090-6](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(73)80090-6)
- Estremadoyro, J. (2015). *Análisis de factibilidad para producción de energía utilizando un gasificador de hojas de caña de azúcar*. Piura: Universidad de Piura.
- Ezquerro, J. (2012). *Iniciación a los métodos numéricos*. Universidad de la Rioja . Recuperado el 25 de febrero de 2021, de file:///C:/Users/IVAN/Downloads/Dialnet-IniciacionALosMetodosNumericos-489813.pdf
- Fatehi, H. (2014). *Numerical Simulation of Combustion and Gasification of Biomass Particles*. Doctoral Dissertation, Lund University, Department of Energy Sciences, Lund.
- Fernandez, R. (2020). *Metodologías de control clásicas y avanzadas aplicadas con un modelo de reactor de digestión anaerobia*. Universidad de Piura, Piura.
- Ferreira, S., Monteiro, E., Brito, P., & Vilarinho, C. (2019). A Holistic Review on Biomass Gasification Modified Equilibrium Models. *Energies*, 31.
- Figueroa, J. E. (2015). *Processos Termoquímicos para processamento de bagaço de cana de açúcar: Pirólise em leito fixo e gaseificação em leito fluidizado*. Tese de Doutor, Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química, Campinas.
- Fonseca, N. (2003). *Estado del Arte del Uso del Gas de Gasificación Termoquímica de Biomasa(GG), en Motores de Combustión Interna Alternativos*. Universidad Politécnica de Madrid, Madrid.
- Fotovat, F., & Chaouki, J. (2013). Distribution of Large Biomass Particles in a Sand-Biomass Fluidized Bed: Experiments and Modeling. *Engineering Conferences International*, 9. Obtenido de [https://dc.engconfintl.org/fluidization\\_xiv/52/](https://dc.engconfintl.org/fluidization_xiv/52/)
- García Valladolid, R. (2017). *Desarrollo de metodología para la validación experimental de un gasificador de lecho fluidizado burbujeante*. Tesis, Universidad de Piura, Departamento de Ingeniería Mecánico-Eléctrica, Piura.
- Google Earth. Ubicación de planta piloto en Universidad de Piura.
- Gómez Barea, A., & Leckner, B. (2010). *Progress in Energy and Combustion Science* . Elsevier.

- Gómez Hernández, J. (2010). *Modelo no isotérmico de gasificadores de lecho fluidizado*. Universidad Carlos III de Madrid, Departamento de Ingeniería Térmica y de Fluidos, Madrid.
- Gómez, A., Klose, W., Rincón, S., & Wiest, W. (2004). Transformación termoquímica de la biomasa residual del proceso de extracción del aceite de palma: tecnologías y perspectivas. *PALMAS*, 25.
- Gopalakrishnan, P. (2013). *Modelling of Biomass Steam Gasification in a Bubbling Fluidized Bed Gasifier*. University of Canterbury.
- Grace, J. (1986). *Modelling and Simulation of Two-Phase fluidized bed reactors*. doi:[https://doi.org/10.1007/978-94-009-4400-8\\_7](https://doi.org/10.1007/978-94-009-4400-8_7)
- Groppi, G., Tronconi, E., Forzatti, P., & Berg, M. (2000). *Mathematical modelling of catalytic combustors fuelled by gasified biomasses*. ELSEVIER.
- Gungor, A. (2011). Modeling the effects of the operational parameters on H<sub>2</sub> composition in a biomass fluidized bed gasifier. *International Journal of HYDROGEN ENERGY*, 6592-6600.
- Haslam, R. (1923). The Simultaneous Combustion of Hydrogen and Carbon Monoxide. *Industrial & Engineering Chemistry*. doi:<https://doi.org/10.1021/ie50163a008>
- Hernández-Jiménez, F., Gómez-García, A., Santana, D., & Acosta-Iborra, A. (2012). Gas interchange between bubble and emulsion phases in a 2D fluidized bed as revealed by two-fluid model simulations. *Chemical Engineering Journal*, 479-490. doi:<http://dx.doi.org/10.1016/j.cej.2012.10.056>
- Jiang, H., & Morey, R. (1992). A numerical model of a fluidized bed biomass gasifier. *Biomass and Bioenergy*, 431-447.
- Jiang, H., & Morey, R. (1992). *Pyrolysis of corncobs at fluidization*. University of Minnesota. doi:[https://doi.org/10.1016/0961-9534\(92\)90044-Q](https://doi.org/10.1016/0961-9534(92)90044-Q)
- Johari, A., Nyakuma, B., Ahmad, A., Tuan Adbullah, T., Kamaruddin, M., Mat, R., & Ali, A. (2014). *Design of a Bubbling Fluidized Bed Gasifier for the thermochemical conversion of Oil Palm Empty Fruit Brunch Briquette*. Trans Tech Publications.
- Kaushal, P., Abedi, J., & Mahinpey, N. (2010). *A comprehensive mathematical model for biomass gasification fluidized bed reactor*. University of Calgary. Elsevier. doi:[10.1016/j.fuel.2010.07.036](https://doi.org/10.1016/j.fuel.2010.07.036)
- Khezri, R., Azlina, W., Ab, W., Ghani, K., Soltani, S., Awang Biak, D., . . . Motlagh, S. R. (2019). *Computational Fluid Dynamics of Gas-Solid Hydrodynamics in a Bubbling Fluidized-bed Reactor: Effects of Air Distributor, Viscous and Drag Models*.
- Khonde, K., Hedao, S., & Deshmukh, S. (2019). Prediction of product gas composition from biomass gasification by the method of Gibbs free energy minimization. *Energy*

- Sources, Part A: Recovery, Utilization, and Environmental Effects*, 11. doi:<https://doi.org/10.1080/15567036.2019.1624890>
- Klug, M. (2012). Pirólisis, un proceso para derretir la biomasa. *Revista de química PUCP*, 26, 4.
- Kunii, D., & Levenspiel, O. (1991). *Fluidization Engineering* (Segunda ed.). Butterworth-Heinemann.
- Li, S. (2016). Chapter 8 - Fluidized Bed Reactor. En S. Li, *Reaction Engineering* (págs. 369-403). Elsevier Inc. doi:<https://doi.org/10.1016/B978-0-12-410416-7.00008-2>
- Loha, C., Gu, S., De Wilde, J., Mahanta, P., & Chatterjee, P. (30 de Julio de 2014). Advances in mathematical modeling of fluidized bed gasification. *ELSEVIER*, 28.
- Mahmood AL-Farraji, A. A. (2017). *Chemical Engineering and Reactor Design of a Fluidised Bed Gasifier*. Cardiff University.
- Manikandan, P., & Jeya, C. (2020). Prediction of Gas Composition of a Fluidized Bed Gasifier in a Sugarcane Bagasse- Modeling. *IWCASME 2020*, (pág. 8). doi:10.1088/1757-899X/983/1/012013
- Mañas, J., & Pinta, M. (2018). *Métodos numéricos para el análisis matemático con MATLAB*. UTMACH.
- Medina, M., Ospino, Y., & Tejada, L. (2014). *Esterificación y Transesterificación de aceites residuales para obtener biodiesel*. Universidad de Caldas. doi:10.17151/luaz.2015.40.3
- Merino, M. (2019). *Diseño e implementación de reactor anaerobio semicontinuo para aprovechamiento de cáscaras de cacao*. Tesis, Universidad de Piura, Piura.
- Ministerio de Agricultura y Riego. (2019). *Observatorio de commodities: azúcar*. Dirección de Estudios Económicos e Información Agraria, Lima.
- Montoya, M., Quintero, J., Sánchez, Ó., & Cardona, C. (2005). *Evaluación económica del proceso de obtención de alcohol carburante a partir de caña de azúcar y maíz*. Universidad Eafit, Medellín.
- Moratorio, D., Rocco, I., & Castelli, M. (2012). *Conversión de Residuos Sólidos Urbanos en Energía*. Universidad de Montevideo.
- Moreno, F. (2010). *Simulación de gasificación de biomasa en lecho fluidizado burbujeante*. Universidad Carlos III de Madrid, Madrid.
- Mori, S., & Wen, C. (1975). Estimation of bubble diameter in gaseous fluidized beds. *AIChE Journal*, 109-115. doi: <https://doi.org/10.1002/aic.690210114>
- Mouronte, S. (2014). *Estudio experimental sobre el comportamiento de las burbujas en lechos fluidizados bidimensionales*. Universidad Carlos III de Madrid, Departamento de Ingeniería Térmica y de Fluidos.

- Nanou, P. (2013). *Biomass Gasification for the production of methane*. University of Twente.
- Narváez, M. (2014). *Predictor y Corrector Generalizado del Método Adams Bashforth Moulton para el cálculo de la reactividad y la potencia nuclear*. Pontificia Universidad Javeriana Cali, Departamento de Ciencias Naturales y Matemáticas, Cali. Recuperado el 01 de marzo de 2021, de [http://vitela.javerianacali.edu.co/bitstream/handle/11522/3131/Predictor\\_corrector\\_generalizado.pdf?sequence=1&isAllowed=y](http://vitela.javerianacali.edu.co/bitstream/handle/11522/3131/Predictor_corrector_generalizado.pdf?sequence=1&isAllowed=y)
- Neri Segura, F. (2002). *Caracterización y Cinética de la Pirólisis del Bagazo de caña de azúcar*. Tesis de Maestría, Centro de Investigación en Materiales Avanzados, Chihuahua. Recuperado el 06 de enero de 2021, de <https://cimav.repositorioinstitucional.mx/jspui/bitstream/1004/2303/1/Tesis%20M.%20Francisco%20Neri.pdf>
- Pauls, J. (2015). *Simulation of Air-Steam Gasification of Woody Biomass in Aspen Plus: A Comprehensive Model Including Pyrolysis, Hydrodynamics, and Tar Production*. Thesis, University of Calgary, Calgary.
- Pecate, M. (2017). *Gazéification de la biomasse en lit fluidisé dense et circulant entre 750 et 850°C: Etude hydrodynamique et réactive*. Université de Toulouse.
- Perales Lorente, J. (2002). *Desulfuración de gas de síntesis a alta temperatura y presión por absorción en óxidos regenerables*. Tesis doctoral, Universitat Politècnica de Catalunya, Departament d'Enginyeria Química, Barcelona. Recuperado el 25 de marzo de 2021, de <http://hdl.handle.net/2117/93735>
- Prinsen, P. (2010). *Composición química de diversos materiales lignocelulósicos de interés industrial y análisis estructural de sus ligninas*. Instituto de Recursos Naturales y Agrobiología de Sevilla, Departamento de Química Orgánica, Sevilla.
- Radmanesh, R., Chaouki, J., & Guy, C. (2006). *Biomass Gasification in a Bubbling Fluidized Bed Reactor: Experiments and Modeling*. École Polytechnique, Montreal, Department of Chemical Engineering, Montreal. doi:10.1002/aic.11020
- Radmanesh, R., Mabrouk, R., Chaouki, J., & Guy, C. (2005). Effect of Temperature on Solids Mixing in a Bubbling Fluidized Bed Reactor. *International Journal of Chemical Reactor Engineering*, 16.
- Reina, J., Velo, E., & Puigjaner, L. (2000). Predicting the minimum fluidization velocity of polydisperse mixtures of scrap-wood particles. *Powder Technology*, 7. doi:10.1016/S0032-5910(00)00226-6
- Rodríguez, A., Zalaeta, A., Olivares, A., & Torres, F. (2010). Análisis y Diseño de un Sistema de Gasificación de Biomasa. *XVI CONGRESO INTERNACIONAL ANUAL DE LA SOMIM*, (pág. 10). Monterrey.

- Romero, A. (2010). *Aprovechamiento de la biomasa como fuente de energía alternativa a los combustibles fósiles*. Universidad Complutense de Madrid, Departamento de Ingeniería Química .
- Ruiz Bermejo, J. A. (2013). *Análisis de la problemática e investigación de aspectos avanzados de la generación eléctrica con biomasa*. Universidad de la Rioja .
- Sánchez, I., Gallardo, A., & Edo, N. (2014). Análisis de las tecnologías de valorización de residuos basadas en la gasificación. *Congreso Nacional del Medio Ambiente*, 24.
- Sit, S., & Grace, J. (1981). Effect of bubble interaction on interphase mass transfer in gas fluidized beds. *Chemical Engineering Science*, 36, 327-335. doi:[https://doi.org/10.1016/0009-2509\(81\)85012-9](https://doi.org/10.1016/0009-2509(81)85012-9)
- The Math Works. (2001). *MATLAB The Language of Technical Computing*. Recuperado el 02 de marzo de 2021, de [https://web.stanford.edu/class/ee254/software/using\\_ml.pdf](https://web.stanford.edu/class/ee254/software/using_ml.pdf)
- Torres Moyano, R. (2012). *Análisis de la estrategia de modelado de gasificadores de biomasa en lecho fluidizado*. Universidad Carlos III de Madrid, Departamento de Ingeniería Térmica y de Fluidos, Madrid.
- Tosina Fernández, S. (2013). *Simulación en código Matlab de un reactor para la gasificación de biomasa en lecho fluidizado burbujeante*. Madrid: Universidad Carlos III de Madrid.
- Uyazán, A., Gil, I., Aguilar, J., Rodríguez, G., & Caicedo, L. (2004). *Deshidratación del etanol*. Universidad Nacional de Colombia, Bogotá.
- Vakalis, S., Patuzzi, F., Prando, D., & Baratieri, M. (2014). Thermodynamic Modelling of Biomass Downdraft Gasifiers: Introduction to the "multi-box" concept. *ResearchGate*, 5.
- Valladares, F. (2017). *Modelamiento del proceso de digestión anaeróbica de estiércol vacuno y cáscara de cacao*. Universidad de Piura.
- Waldheim, L., & Nilsson, T. (2001). *Heating value of gases from biomass gasification*. TPS Termiska Processer AB. IEA Bioenergy Agreement.
- Wen, C., & Yu, Y. (1966). *A Generalized Method for Predicting the Minimum Fluidization Velocity*. West Virginia University, Morgantown. doi:<https://doi.org/10.1002/aic.690120343>
- Wikipedia. (23 de Septiembre de 2019). Recuperado el 03 de Agosto de 2020, de [https://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Especial:Citar&page=Ley\\_de\\_Sutherland&id=119626749&wpFormIdentifier=titleform](https://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Especial:Citar&page=Ley_de_Sutherland&id=119626749&wpFormIdentifier=titleform)
- Wojnicka, B., Ściężko, M., & Schmid, J. (2019). Modelling of biomass gasification with steam. *Biomass Conversion and Biorefinery*. doi:<https://doi.org/10.1007/s13399-019-00575-2>

Yan, H.-m., Heidenreich, C., & Zhang, D.-k. (1997). *Mathematical modelling of a bubbling fluidised-bed coal gasifier and the significance of net flow.*



## Apéndices





## Apéndice A. Datos de entrada para iniciar el modelo matemático

```
%[Datos_de_Entrada]
%Se declaran como globales las variables de entrada para utilizarlas en
%otras funciones
global T EF ER
global Hr Di Nd
global Hfb
global C H O N S
global ash xmv xm_char
global dp Dlecho
global fi ww pregunta

%Se ingresan los datos de entrada para el proceso de gasificación

%Características del proceso
%-----
%Temperatura del proceso
disp('-----');
disp('Ingrese las condiciones del proceso en base a un régimen
burbujeante');
disp('-----');
T=input('Ingrese la temperatura del proceso en Kelvin=');%[K]
EF=input('Ingrese el estado de fluidización=');%[adimensional]
ER=input('Ingrese el Equivalence Ratio=');%[adimensional]
%-----

%Geometría del reactor
%-----
disp('-----');
disp('Características del reactor');
disp('-----');
Hr=input('Ingrese la altura del reactor en metros=');%[m]
Di=input('Ingrese el diámetro interno del reactor en metros=');%[m]
Nd=input('Ingrese el número de agujeros del plato
distribuidor=');%[adimensional]
```

```
%Para efectos de cálculos, el Di del reactor será igual al diámetro de la
%rejilla que contiene al lecho
```

```
%-----
```

```
%Características del lecho
```

```
%Lecho=biomasa+material inerte
```

```
%-----
```

```
disp('-----');
```

```
disp('Características del lecho');
```

```
disp('-----');
```

```
Hfb=input('Ingrese la altura del alimentador con respecto a la base del
lecho en metros=');
```

```
disp('¿El análisis último o elemental es en Base seca libre de cenizas y
humedad, SÍ=1 NO=0');
```

```
pregunta=input('Ingrese el valor de la respuesta (SÍ o NO)');
```

```
if pregunta==0
```

```
ww=input('Ingrese el contenido porcentual de humedad de la biomasa');
```

```
ash=input('Ingrese el contenido porcentual de cenizas=');
```

```
else
```

```
    %Los valores de ceniza y humedad toman valores de cero
```

```
    ww=0;
```

```
    ash=0;
```

```
end
```

```
disp('Según el Análisis último obtenido de la biomasa');
```

```
%Composición básica de la biomasa C-H-O-N-S
```

```
C=input('Ingrese el contenido porcentual de Carbono=');
```

```
H=input('Ingrese el contenido porcentual de Hidrógeno=');
```

```
O=input('Ingrese el contenido porcentual de Oxígeno=');
```

```
N=input('Ingrese el contenido porcentual de Nitrógeno=');
```

```
S=input('Ingrese el contenido porcentual de Azufre=');
```

```
disp('-----');
```

```
disp('Según el Análisis próximo obtenido de la biomasa');
```

```
xmv=input('Ingrese el contenido porcentual de materia volátil=');
```

```
xm_char=input('Ingrese el contenido porcentual de carbón fijo o char=');

disp('-----');
disp('Ingrese las características del material inerte');
dp=input('Ingrese el diámetro promedio de partícula en metros=');
Dlecho=input('Ingrese la densidad en kg/m3=');

disp('-----');
disp('¿Conoce la esfericidad? Si--> v=1 No--> v=0');
v=input('Ingrese el valor de v=');
if v==1
    fi=input('Ingrese la esfericidad=');%[adimensional]
else
    fi=1;%Se asume una partícula perfectamente esférica
end
%-----
```



## Apéndice B. Datos de entrada para la validación

```

%[Datos_de_Entrada_datos]
%Se declaran como globales las variables de entrada para utilizarlas en
%otras funciones
global T EF ER
global Hr Di Nd
global Hfb
global C H O N S
global ash xmv xm_char
global dp Dlecho
global fi ww
% Data según Ramin Radmanesh, Jamal Chaouki & Christophe Guy, (2006)
% Data según Ramin Radmanesh, Jamal Chaouki, Rachid Mabrouk & Christophe
Guy, (2005)
%Se ingresan los datos de entrada para el proceso de gasificación

%Características del proceso
%-----
%Temperatura del proceso
T=1073;%[K]
EF=7;%[adimensional]
ER=0.32;%[adimensional]
%-----

%Se considera que esta altura es igual a la altura del alimentador
Hfb=0.2;%[m]

%Geometría del reactor
%-----
Hr=0.8-Hfb; %[m]
Di=0.078;%[m]
Nd=30;%[adimensional]
%Para efectos de cálculos, el Di del reactor será igual al diámetro de la
%rejilla que contiene al lecho
%-----

```

```
%Características del lecho
%Lecho=biomasa+material inerte
%-----
%Composición básica de la biomasa (beech wood) C-H-O-N-S
C=48.27;
H=6.36;
O=45.2;
N=0.14;
S=0;
ww=0.064; %[humedad adimensional]

%Valores del análisis próximo
ash=0.8;
xmv=81;
xm_char=18;

%Características del lecho
dp=0.00025;
Dlecho=2650;
fi=1; %Se asume una partícula perfectamente esférica
```



## Apéndice C. Pesos moleculares de los compuestos gaseosos

```

function [PM] = Pesos_Moleculares

%Los pesos moleculares se hacen variables globales
global PM_CO PM_CO2 PM_O2 PM_H2 PM_H2O PM_CH4 PM_N2 PM_char
global PM_C PM_H PM_O PM_N

%PM de los elementos básicos que componen la biomasa
%-----
PM_C = 12.01*1E-3; % Peso atómico del carbono [kg/mol]
PM_H = 0.001;      % Peso atómico del hidrogeno [kg/mol]
PM_O = 16*1E-3;   % Peso atómico del oxígeno [kg/mol]
PM_N = 14*1E-3;   % Peso atómico del hidrogeno [kg/mol]
%-----

%Cálculo de los pesos moleculares de las especies volátiles [kg/mol]
%Especies volátiles=[CO CO2 O2 H2 H2O CH4 N2 char]
%-----
PM_CO = PM_C + PM_O; % Peso molecular del monóxido de carbono
[kg/mol]
PM_char = PM_C; % Peso molecular del del compuesto carbonoso
[kg/mol]
PM_H2 = 2*PM_H; % Peso molecular del hidrogeno molecular
[kg/mol]
PM_CO2 = 2*PM_O + PM_C; % Peso molecular del dióxido de carbono
[kg/mol]
PM_O2 = 2*PM_O; % Peso molecular del oxígeno molecular [kg/mol]
PM_CH4 = 4*PM_H + PM_C; % Peso molecular del metano [kg/mol]
PM_H2O = 2*PM_H + PM_O; % Peso molecular del agua [kg/mol]
PM_N2 = 2*PM_N; % Peso molecular del nitrógeno molecular
[kg/mol]
%-----

%Se forma una matriz de [8x1] con los pesos moleculares de las especies
PM = [PM_CO PM_CO2 PM_O2 PM_H2 PM_H2O PM_CH4 PM_N2 PM_char]';

```

## Apéndice D. Cálculo de las propiedades del agente gasificante

```

function [Prop_air] = Propiedades_del_agente_gasificante
global PM_N2 PM_O2 T PM_aire P R
global mu_aire Dair DG

%Propiedades del agente gasificante
%Se calcula la viscosidad dinámica del agente gasificante (aire a 1 atm)
%Según la Ley de Sutherland
%-----
mu_aire=1.729E-05*((273.15+120)/(T+120))*(T/273.15)^1.5; %[kg/m.s]
%-----

%Cálculo de la densidad del aire a la temperatura del proceso
%Se considera que la composición del aire tiene una proporción de 79% N2 y
21% O2
%-----
PM_aire=(0.79*PM_N2+0.21*PM_O2); %Peso molecular del aire [kg/mol]
P=101325; %Presión de trabajo igual a 1 atm
Pa]
R=8.314; %Constante Universal de los Gases
Ideales [J/mol.K]
Rg=R/PM_aire; %Constante particular del aire
[J/kg.K]
Dair=P/(Rg*T); %Densidad del aire [kg/m3]
%-----

%Según Tosina (2013)
%-----
DG=8.677E-05*(T^1.75)/P; %Difusividad másica del aire-
volátiles [m2/s]
%-----

%Se crea una matriz [1x3] con las propiedades del aire
Prop_air=[mu_aire Dair DG];
end

```

## Apéndice E. Hidrodinámica del lecho fluidizado burbujeante

```

function [Hmf, Hexp, Fbe] = Hidrodinamica_del_lecho_fluidizado
global Di Nd Dlecho Dair
global EF umf Area dp ww
global w u0 uvis db0 dbm Hfb as epsb

%Fracción de Humedad relativa de la biomasa
w=ww;

%Área transversal del reactor
%-----
Area=pi*(Di^2)/4;%[m2]
%-----

%Cálculo de la velocidad superficial del agente gasificante
%Se considera como un parámetro constante a lo largo del eje "z"
%-----
u0=EF*umf;%[m/s]
%-----

%Cálculo de la velocidad visible
%Según el modelo original de Harrison y Davidson
%Se considera trabajar con partículas Gedalrt del grupo B, por lo tanto
"Y=0.7"
%-----
uvis=0.7*(u0-umf);%[m/s]
%-----

%Diámetro de burbuja inicial
%Según Kunii & Levenspiel (1991)
%-----
db0=(1.3/(9.81^0.2))*(Area*(u0-umf)/Nd)^0.4;%[m]
%-----

%Diámetro máximo de burbuja inicial formado por coalescencia

```

```

%Según Mori & Wen (1975)
%-----
dbm=0.652*((Area*(u0-umf))^0.4);%[m]
%-----

%Otros parámetros como el diámetro de burbuja teórico (dbm), velocidad de
%la burbuja libre en un lecho infinito (ubr) y la velocidad de la burbuja
%(ub) serán calculados en la función transferencia del modelo, entre otros,
%debido a que dependen de la altura del reactor (z).

%Cálculo de la altura de mínima fluidización (Hmf)
%Según una fórmula convencional
%-----
Hmf=1.4*Hfb;%[m]
%-----

%Cálculo de la altura del lecho expandido
%Consideración
Dt=Di;%Diámetro de la rejilla que contiene al lecho [m]

%Factor de expansión del lecho (Fbe)
%Según Gómez y Leckner (2010)
%-----
if Dt >0.0635
    Fbe=1 + ((14.31*((u0-
umf)^0.738)*(dp^1.006)*(Dlecho^0.376))/((Dair^0.126)*(umf^0.537)));%[adimen
sional]
else
    Fbe=1+((1.032*((u0-
umf)^0.57)*(Dair^0.083))/((Dlecho^0.166)*(umf^0.063)*(Dt^0.445)));
end
%-----

%Altura del lecho expandido
%Según Grace (1986)
%-----

```

```
Hexp=Fbe*Hmf;% [m]
```

```
%-----
```

```
%Área específica de las partículas
```

```
as=6/dp;% [1/m]
```

```
epsb = 1 - (1/Fbe);
```

```
end
```



## Apéndice F. Desarrollo del proceso de devolatilización

```

function [devo_biomass] = Devolatilizacion

global xmv xm_char

global xmv_CO xmv_CO2 xmv_H2 xmv_H2O xmv_CH4 xmv_char
global H O T

%=====
%Cálculo de las fracciones másicas por especie
%=====

%Según Calgary (2015)
xmv_CH4=(3.75E-07*(T-273)^2)-(0.0004*(T-273))+0.1414;
xmv_CO=(2.55E-06*(T-273)^2)-(0.0025*(T-273))+0.8247;

%Según Wojnicka et al (2019)
xmv_H2O=0.0065*(O/H)*(1/(xmv/100));
xmv_CO2=(44/32)*(O/100-(0.1*(1-(xmv/100))))-
(((16*xmv_CO)/28)+((16*xmv_H2O)/18))*(xmv/100))*(1/(xmv/100));
xmv_H2=(H/xmv)-(xmv_CH4/4)-(xmv_H2O/9);
xmv_char=xm_char/100;

%Se crea una matriz de [1x6] para observar los resultados
devo_biomass=[xmv_CO xmv_CO2 xmv_H2 xmv_H2O xmv_CH4 xmv_char];
end

```

## Apéndice G. Cálculo de parámetros de la reacción inicial

```

function [f_vol_b, f_vol_e, cb0, ce0, gm_inicial, datos,m_biomasa,m_aire] =
Parametros_Reaccion_Inicial

global u0 Area Dair PM_aire ER

global C H O N

global PM_C PM_H PM_O PM_N

global w ash

global xmv_CO xmv_CO2 xmv_H2 xmv_H2O xmv_CH4 xmv_char

global PM_CO PM_CO2 PM_H2 PM_H2O PM_CH4 PM_char PM_O2 PM_N2

global umf db0 g Di uvis

%Cálculos iniciales del aire
%-----
Qaire=u0*Area;           %Caudal de aire real [m3/S]
m_aire=Qaire*Dair;      %Flujo masico del agente gasificante(aire real)
[kg/s]
f_aire=m_aire/PM_aire; %Flujo molar del aire real [mol/s]
f_O2=f_aire*0.21;      %Flujo molar inicial de oxígeno [mol/s]
f_N2=f_aire*0.79;     %Flujo molar inicial de nitrógeno [mol/s]
%-----

%Cálculo de las fracciones molares iniciales
%No se toma en cuenta el contenido de azufre (S)
% -----
xC=(C/PM_C)/(C/PM_C + H/PM_H + O/PM_O + N/PM_N); %Fracción molar del
carbono
xH=(H/PM_H)/(C/PM_C + H/PM_H + O/PM_O + N/PM_N); %Fracción molar del
carbono
xO=(O/PM_O)/(C/PM_C + H/PM_H + O/PM_O + N/PM_N); %Fracción molar del
carbono
xN=(N/PM_N)/(C/PM_C + H/PM_H + O/PM_O + N/PM_N); %Fracción molar del
carbono
% -----

%Cálculo del flujo másico inicial de biomasa
%-----

```

```

m_biomasa=m_aire/(ER*((xC+(xH/4)-
(xO/2))*((2*PM_O)+(7.52*PM_N))/((xC*PM_C)+(xH*PM_H)+(xO*PM_O)+(xN*PM_N))));
%Flujo másico de biomasa alimentada [kg/s]

```

```

%Se calcula la biomasa libre de cenizas y humedad

```

```

m_biomasa_seca=m_biomasa*(1-w)*(1-(ash/100)); [kg/s]
%Flujo másico de biomasa seca

```

```

%-----

```

```

%Cálculo de los flujos másicos iniciales de las especies volátiles
liberadas

```

```

%-----

```

```

m_CO=m_biomasa_seca*xmv_CO; %Flujo másico inicial del monóxido de
carbono [kg/s]

```

```

m_CO2=m_biomasa_seca*xmv_CO2; %Flujo másico inicial del dióxido
carbono [kg/s]

```

```

m_H2=m_biomasa_seca*xmv_H2; %Flujo másico inicial del hidrógeno
[kg/s]

```

```

m_H2O=m_biomasa_seca*xmv_H2O; %Flujo másico inicial del vapor agua
[kg/s]

```

```

m_CH4=m_biomasa_seca*xmv_CH4; %Flujo másico inicial del metano
[kg/s]

```

```

m_char_ini=m_biomasa_seca*xmv_char; %Flujo másico inicial de compuesto
carbonoso [kg/s]

```

```

%-----

```

```

%Cálculo de los flujos molares iniciales de las especies volátiles
liberadas

```

```

%-----

```

```

f_CO=m_CO/PM_CO; %Flujo molar del monóxido de carbono
en los volátiles [mol/s]

```

```

f_CO2=m_CO2/PM_CO2; %Flujo molar del dióxido de carbono
en los volátiles [mol/s]

```

```

f_H2=m_H2/PM_H2; %Flujo molar del hidrogeno en los
volátiles [mol/s]

```

```

f_CH4=m_CH4/PM_CH4; %Flujo molar del metano en los
volátiles [mol/s]

```

```

f_H2O=m_H2O/PM_H2O; %Flujo molar del vapor de agua en los
volátiles [mol/s]

```

```

f_char_ini=m_char_ini/PM_char;          %Flujo molar de compuesto carbonoso
en los volátiles          [mol/s]

%-----

%Los flujos molares iniciales de los reactivos (biomasa y agente
gasificante)

%Se almacenan en 2 matrices de [8x1] [CO CO2 O2 H2 H2O CH4 N2 char] (Burbuja
y Emulsión)

%Se considera una repartición equilibrada en ambas fases, por lo tanto, los
flujos se dividen entre dos.

%-----

f_vol_b=[f_CO/2 f_CO2/2 f_O2/2 f_H2/2 f_H2O/2 f_CH4/2 f_N2/2 0];
f_vol_e=[f_CO/2 f_CO2/2 f_O2/2 f_H2/2 f_H2O/2 f_CH4/2 f_N2/2 f_char_ini];

%-----

%Se calcula la velocidad inicial de una burbuja
%Según Davidson & Harrison

%-----

ub_ini=(0.711*((g*db0)^0.5)*1.2*exp((-1.49*db0)/Di))+uvis;          %Velocidad
inicial de las burbujas (en z=0)          [m/s]

%-----

%Se calcula las concentraciones molares iniciales de las especies químicas
[CO CO2 O2 H2 H2O CH4 N2 char]

%-----

cb0=f_vol_b/(Area*ub_ini);          %Array de
Concentraciones iniciales Fase Burbuja          [mol/m3]

ce0=f_vol_e/(Area*umf);          %Array de
Concentraciones iniciales Fase Emulsión          [mol/m3]

%-----

%Gasto másico inicial de biomasa para calcular el error en el balance de
masa (En Fase Emulsión y Burbuja)

%-----

gm_inicial=f_CO*PM_CO + f_H2*PM_H2 + f_CO2*PM_CO2 + f_CH4*PM_CH4 +
f_H2O*PM_H2O + f_O2*PM_O2 + f_N2*PM_N2 + f_char_ini*PM_char;%[kg/s]

%-----

```

```
datos= [Qaire m_aire f_aire f_O2 f_N2 f_CO f_CO2 f_H2 f_CH4 f_H2O  
f_char_ini];  
end
```



## Apéndice H. Función transferencia

```

function [df_dz] = Funcion_transferencia(z,f)
%Función transferencia para resolver las ecuaciones diferenciales
%ordinarias de transformación para cada especie volátil.
global Area dbm db0 Di umf DG u0 g uvis Emf P T R
global mu_aire Dair dp epsb as

%=====
%CÁLCULOS DE LA HIDRODINÁMICA DEL LECHO EN FUNCIÓN DE "z"
%=====

%Díámetro de burbuja efectivo, según Mori & Wen (1975)
dbz=dbm- ((dbm-db0)*exp(-0.3*z/Di));%[m]
%-----
%Velocidad de una burbuja en un lecho infinito, según Wallis (1969)
ubr=0.711*((g*dbz)^0.5)*1.2*exp((-1.49*dbz)/Di);%[m/s]
%-----
%Velocidad de ascenso de una burbuja, según Davidson & Harrison
ub=uvis+ubr;%[m/s]
%-----
%Fracción de volumen ocupado por las burbujas, según Tosina (2013)
%Se calcula como un valor constante
Eb=epsb;
%-----
%Área interfacial entre las fases burbuja y emulsión por unidad de volumen
de lecho
%Según Davidson (1995)
a_b=(6*Eb)/dbz;%[1/m]
%-----

%=====
%CÁLCULO DEL PERFIL COMPOSICIÓN DE LAS ESPECIES
%=====

```

```

%Coeficiente de transferencia de masa entre fases (de fase burbuja a
emulsión)

%Según Sit & Grace (1981)
kBE=(umf/3)+(((4*DG*Emf*ub)/(pi*dbz))^0.5);

%-----

%Se definen los vectores de [1x8] para almacenar variables de las 8
especies

%Especies i=[CO CO2 O2 H2 H2O CH4 N2 char]

cb=zeros(8,1);%Definición del vector concentración en fase burbuja
ce=zeros(8,1);%Definición del vector concentración en fase emulsión
xb=zeros(8,1);%Definición del vector fracción másica en fase burbuja
xe=zeros(8,1);%Definición del vector fracción másica en fase emulsión
pb=zeros(8,1);%Definición del vector presión parcial en fase burbuja
pe=zeros(8,1);%Definición del vector presión parcial en fase emulsión

%-----

%Cálculo de las concentraciones molares
for i=1:1:8

    cb(i,1)=f(i,1)/(ub*Area);%Concentración molar en la fase
burbuja[mol/m3]

    ce(i,1)=f(i+8,1)/(umf*Area);%Concentración molar en la fase
emulsión[mol/m3]

    if cb(i,1)>0
        cb(i,1)=cb(i,1);%Siempre positivos
    else
        cb(i,1)=0;
    end

    if ce(i,1)>0
        ce(i,1)=ce(i,1);%Siempre positivos
    else
        ce(i,1)=0;
    end

end
end

```

```

%-----
%Cálculo de las fracciones molares y presiones parciales en ambas fases
for i=1:1:8

    if sum(cb)>0
        xb(i,1)=cb(i,1)/sum(cb);%Fracción molar en la fase burbuja
    else
        xb(i,1)=0;
    end

    if sum(ce)>0
        xe(i,1)=ce(i,1)/sum(ce);%Fracción molar en la fase emulsión
    else
        xe(i,1)=0;
    end

    %Cálculo de las presiones parciales
    pb(i,1)=xb(i,1)*P*(1-Eb)/101325;%Presión parcial en la fase
    burbuja[atm]
    pe(i,1)=xe(i,1)*P*(1-Eb)/101325;%Presión parcial en la fase emulsión
    [atm]
%-----

end

% =====
% RUTINA PARA LAS REACCIONES HOMOGÉNEAS Y HETEROGÉNEAS
% =====

%Para este modelo matemático se consideran las siguientes reacciones:
%Reacciones Homogéneas (En ambas Fases) || Reacciones Heterogéneas (Solo
Fase Emulsión)

%R1--> CH4+2O2-->CO+2H2O          || R6--> C+CO2-->2CO (Boudouard)
%R2--> CO+0.5O2-->CO2            || R7--> C+H2O-->CO+H2
%R3--> H2+0.5O2-->H2O            || R8--> C+2H2-->CH4 (Metanización)

```

```

%R4--> CO+H2O<-->H2+CO2 (Water Gas-shif)|| R9--> C+0.8O2-->2(1-
0.8)CO2+((2*0.8)-1)CO
%R5--> CH4+H2O-->CO+3H2          || R9 es la combustión del char

%-----

%Cálculo de los coeficientes estequiométricos (ce) de las reacciones
%Por ejemplo, en la reacción: aX+bY-->cP+dM, sus "ce" serán a,b,c y d
%Los "ce" de los Productos (P,M) son + y los Reactantes (X,Y) son -
%Los "ce" se ordenan de la forma: [CO CO2 O2 H2 H2O CH4 N2 char]

%FASE BURBUJA (Reacciones del tipo GAS-GAS)
alphaR1=[1; 0; -2; 0; 2; -1; 0; 0];
alphaR2=[-1; 1; -0.5; 0; 0; 0; 0; 0];
alphaR3=[0; 0; -0.5; -1; 1; 0; 0; 0];
alphaR4=[-1; 1; 0; 1; -1; 0; 0; 0];
alphaR5=[1; 0; 0; 3; -1; -1; 0; 0];

%FASE EMULSIÓN (Reacciones del tipo GAS-SÓLIDO)
alphaR6=[2; -1; 0; 0; 0; 0; 0; -1];
alphaR7=[1; 0; 0; 1; -1; 0; 0; -1];
alphaR8=[0; 0; 0; -2; 0; 1; 0; -1];
alphaR9=[0.3; 0.7; -0.85; 0; 0; 0; 0; -1];

%-----

%Cálculo de la Energía Libre de Gibbs
%Los coeficientes son: Ag, Bg, Cg, Dg, Eg, Fg, Gg (cada uno representa una
matriz de [1x6])

%Se almacenan los coeficientes termoquímicos de cada especie CO, CO2, H2O,
H2, CH4 y char

%Datos extraídos del documento de la NASA
%Según Ruta Khonde, Shubham Hedao & Samir Deshmukh (2019)
%%Para temperaturas entre 1000K hasta 5000K
if T>1000
    Ag=[3.05E+00 4.64E+00 2.68E+00 2.93E+00 1.64E+00 2.61E+00];
    Bg=[1.35E-003 2.74E-003 2.97E-003 8.27E-004 1.01E-002 -1.96E-004];
    Cg=[-4.86E-007 -9.96E-007 -7.74E-007 -1.46E-007 -3.37E-006 1.07E-07];

```

```

Dg=[7.89E-011 1.60E-010 9.44E-011 1.54E-011 5.35E-010 -1.64E-011];
Eg=[-4.70E-015 -9.16E-015 -4.27E-015 -6.89E-016 -3.16E-014 8.19E-016];
Fg=[-1.43E+004 -4.90E+004 -2.99E+004 -8.13E+002 -1.00E+004 8.54E+004];
Gg=[6.017E+00 1.94E+00 6.88E+00 -1.02E+00 9.99E+00 4.19E+00];

else
  %Para T entre 300 a 1000 K
  Ag=[3.58E+00 2.36E+00 4.20E+00 2.34E+00 5.15E+00 2.55E+00];
  Bg=[-6.10E-004 8.98E-003 -2.04E-003 7.98E-003 -1.37E-002 -3.22E-004];
  Cg=[1.02E-006 -7.12E-006 6.52E-006 -1.95E-005 4.92E-005 7.34E-007];
  Dg=[9.07E-010 2.46E-009 -5.49E-009 2.02E-008 -4.85E-008 -7.32E-010];
  Eg=[-9.04E-013 -1.44E-013 1.77E-012 -7.38E-012 1.67E-011 2.67E-013];
  Fg=[-1.43E+004 -4.84E+004 -3.03E+004 -9.18E+002 -1.02E+004 8.54E+004];
  Gg=[3.51E+00 9.90E+00 -8.49E-001 6.83E-001 -4.64E+00 4.53E+00];

end

n=6;%Variable para ingresar las 6 especies químicas: CO, CO2, H2, H2O, CH4
y char
g0_RuT=zeros(1,n);%Matriz para almacenar la Energía Libre de Gibbs

for ii=1:n
  %Energía libre de Gibbs [J/mol]
  g0_RuT(1,ii)=(Ag(1,ii)*(1-log(T)))-(Bg(1,ii)*(T/2))-(Cg(1,ii)*(T^2)/6)-
  (Dg(1,ii)*(T^3)/12)-(Eg(1,ii)*(T^4)/20)+(Fg(1,ii)/T)+Gg(1,ii);
end

%-----

% =====
% CINÉTICA DE LAS REACCIONES HOMOGÉNEAS (velocidades de reacción "r")
% =====

%Especies i=[CO CO2 O2 H2 H2O CH4 N2 char]

%R1--> CH4+2O2-->CO+2H2O
%Según Yan, Heidenreich & Zhang (1997)
%La concentración del CO2 se cambió por la del O2, cb2 por el cb3
k_CO=(2.4602E-12)*(exp((-21137/T)+24.74414))*(T^3);%Constante de equilibrio
%Según Gómez Barea

```

```

r1_B=(1.58*(10^10))*exp(-203000/(R*T))*cb(3,1)*cb(6,1);
r1_E=(1.58*(10^10))*exp(-203000/(R*T))*ce(3,1)*ce(6,1);

%R2--> CO+0.5O2-->CO2
%Según Yan, Heidenreich & Zhang (1997), citado por Tosina (2013)
r2_B=k_CO*(cb(1,1)^2)*cb(2,1);%Velocidad de reacción R2 en Fase Burbuja
[mol/m3 s]
r2_E=k_CO*(ce(1,1)^2)*ce(2,1);%Velocidad de reacción R2 en Fase Emulsión
[mol/m3 s]

%R3--> H2+0.5O2-->H2O
%Según Haslam (1923) para T entre 900 y 1500°C
k_H2=2.86*k_CO;%Constante de equilibrio
%Según Yan, Heidenreich & Zhang (1997), citado por Tosina (2013)
%La concentración del CO2 se cambió por la del O2
r3_B=k_H2*(cb(4,1)^2)*cb(3,1);%Velocidad de reacción R3 en Fase Burbuja
[mol/m3 s]
r3_E=k_H2*(ce(4,1)^2)*ce(3,1);%Velocidad de reacción R3 en Fase Emulsión
[mol/m3 s]

%R4--> CO+H2O<-->H2+CO2 (Water Gas-shif)
%Según Karim & Mohindra, citados por Gómez-Hernández (2010)
k5forward=(2.78E+03)*exp(-12600/(R*T));
Keq_R5=0.0265*exp(-65800/(R*T));
k5reverse_B=k5forward/Keq_R5;
r4_B=((k5forward*cb(5,1)*cb(1,1))-(k5reverse_B*cb(2,1)*cb(4,1)))/1000;%Velocidad de reacción R4 en Fase
Burbuja [mol/m3 s]
r4_E=((k5forward*ce(5,1)*ce(1,1))-(k5reverse_B*ce(2,1)*cb(4,1)))/1000;%Velocidad de reacción R4 en Fase
Emulsión [mol/m3 s]

%R5--> CH4+H2O-->CO+3H2
%Según Tosina (2013)
Keq4=exp((-1)*(g0_RuT(1,1)+(3*g0_RuT(1,4))-g0_RuT(1,3)-g0_RuT(1,5)));
k4=7.301E-02*exp(-36150/(R*T));
r5_B=0;

```

```

r5_E=k4*((pe(5,1)*pe(6,1))-(((pe(4,1)^3)*pe(1,1))/Keq4));%Velocidad de
reacción R5 en Fase Emulsión [mol/m3 s]

%-----

% =====
% CINÉTICA DE LAS REACCIONES HETEROGÉNEAS (velocidades de reacción "r")
% =====

%Especies i=[CO CO2 O2 H2 H2O CH4 N2 char]
Crf =(4.0012*10*z)-3.0012;%Factor de Reactividad del Char

%R6--> C+CO2-->2CO (Boudouard)
%Según Tosina (2013)
Keq6=exp((-1)*((2*g0_RuT(1,1))-g0_RuT(1,2)-g0_RuT(1,6)));
k6=3.616E+01*exp(-77390/(R*T));
r6_B=0;%Velocidad de reacción R6 en Fase Burbuja [mol/m3 s]
r6_E=Crf*k6*(pe(2,1)-((pe(1,1)^2)/Keq6));%Velocidad de reacción R6 en Fase
Emulsión [mol/m3 s]

%R7--> C+H2O-->CO+H2
%Según Tosina (2013)
Keq7=exp((-1)*(g0_RuT(1,1)+g0_RuT(1,4)-g0_RuT(1,3)-g0_RuT(1,6)));
k7=1.517E+04*exp(-121620/(R*T));
r7_B=0;%Velocidad de reacción R7 en Fase Burbuja [mol/m3 s]
r7_E=Crf*k7*(pe(5,1)-((pe(1,1)*pe(4,1))/Keq7));%Velocidad de reacción R7 en
Fase Emulsión [mol/m3 s]

%R8--> C+2H2-->CH4 (Metanización)
%Según Tosina (2013)
Keq8=exp((-1)*(g0_RuT(1,5)-(2*g0_RuT(1,4))-g0_RuT(1,6)));
k8=4.189E-03*exp(-19210/(R*T));
r8_B=0;%Velocidad de reacción R8 en Fase Burbuja [mol/m3 s]
r8_E=Crf*k8*((pe(4,1)^2)-(pe(6,1)/Keq8));%Velocidad de reacción R8 en Fase
Emulsión [mol/m3 s]

%R9--> C+0.8O2-->2(1-0.8)CO2+(2*0.8-1)CO

```

```

Sc_O2=mu_aire/(Dair*DG);%Numero de Schmidt del O2
Re_p=(dp*Dair*u0)/mu_aire;%Número de Reynolds de partícula
%Según Tosina (2013)
k9=DG/(dp*((2*Emf)+(0.69*((Sc_O2)^(1/3))*((Re_p/Eb)^(1/2))));
r9_B=0;%Velocidad de reacción R9 en Fase Burbuja [mol/m3 s]
r9_E=as*k9*ce(3,1);%Velocidad de reacción R9 en Fase Emulsión [mol/m3 s]
%-----

% =====
% APOORTE DEL FLUJO NETO (Solo Fase Emulsión)
% =====

%Aporte de flujo neto en ambas fases
Ft_E=Emf*((alphaR1*r1_E)+(alphaR2*r2_E)+(alphaR3*r3_E)+(alphaR4*r4_E)+(alphaR5*r5_E)+(alphaR6*r6_E)+(alphaR7*r7_E)+(alphaR8*r8_E)+(alphaR9*r9_E));
Ft_g=(1-Emf)*((alphaR1*r1_E)+(alphaR2*r2_E)+(alphaR3*r3_E));
Ft_c=(1-Emf)*((alphaR6*r6_E)+(alphaR7*r7_E)+(alphaR8*r8_E)+(alphaR9*r9_E));

dFe=sum((1-Eb)*(Ft_E+Ft_c+Ft_g));
%Variación de flujo neto por especie
DFe_i=(ce/sum(ce))*dFe;%Este es un vector de 1 fila por 8 columnas
%-----

% =====
% ECUACIONES DE TRANSFORMACIÓN (Estimación de flujos molares)
% =====

Ft_b=Emf*((alphaR1*r1_B)+(alphaR2*r2_B)+(alphaR3*r3_B)+(alphaR4*r4_B)+(alphaR5*r5_B)+(alphaR6*r6_B)+(alphaR7*r7_B)+(alphaR8*r8_B)+(alphaR9*r9_B));
Ft_e=(1-Emf)*((alphaR1*r1_E)+(alphaR2*r2_E)+(alphaR3*r3_E)+(alphaR4*r4_E)+(alphaR5*r5_E)+(alphaR6*r6_E)+(alphaR7*r7_E)+(alphaR8*r8_E)+(alphaR9*r9_E));

dfe=Area*((a_b*kBE*(cb-ce))-DFe_i+((1-Eb)*(Ft_b+Ft_e)));
dfb=Area*((a_b*kBE*(ce-cb))+DFe_i+(Eb*Ft_b));

```

```
df_dz=[dfb; dfe];
```

```
%-----
```

```
end
```



## Apéndice I. Prueba del modelo matemático para la validación

```

clc
clear all

%Se llama a la Rutina Datos de entrada para la Validación
%-----

Datos_de_Entrada_datos_validacion
%-----

%Se inician las rutinas, según el siguiente orden:
%-----

[PM] = Pesos_Moleculares;
[Prop_air] = Propiedades_del_agente_gasificante;
[min_fluidi] = Minima_fluidizacion;
[Hmf, Hexp] = Hidrodinamica_del_lecho_fluidizado;
[devo_biomass] = Devolatilizacion;
[f_vol_b, f_vol_e, cb0, ce0, gm_inicial, datos, , m_biomasa, m_aire] =
Parametros_Reaccion_Inicial;
%-----

%Condiciones iniciales del proceso
z0=0;%Altura inicial [m]
zf=Hr;%Altura final del reactor [m]
%NOTA: Se considera que en el reactor existe un lecho infinito, por lo
%tanto mi zf será igual a la altura del reactor y no igual a la altura de
% mínima fluidización.

f0=[f_vol_b'; f_vol_e'];%Flujos iniciales [mol/s]

%Se resuelven las EDO
%-----

[z,f] = ode113('Funcion_transferencia', [z0 zf], f0); %ODE 113 resuelve la
función transferencia

%Donde:
%z: Coordenada axial de la altura del reactor, con incrementos definidos

```

```

%por ODE113

%f: Flujos molares en fases Emulsión y Burbuja para cada especie [mol/s]
%-----

figure(1)
fb = f(:,1:8);
plot(z,fb(:,1),'b', z,fb(:,4),'k', z,fb(:,5),'b--', z,fb(:,6),'r--',
z,fb(:,7),'g--', z,fb(:,8),'k.-');
legend('CO', 'CO2', 'O2', 'H2', 'H2O', 'CH4', 'N2', 'Char');
title('Evolución de los flujos molares en Fase Burbuja');
xlabel('z [m]');
ylabel('fb [mol/s]');

figure(2)
fe = f(:,9:16);
plot(z,fe(:,1),'b', z,fe(:,4),'k', z,fe(:,5),'b--', z,fe(:,6),'r--',
z,fe(:,7),'g--', z,fe(:,8),'k.-');
legend('CO', 'CO2', 'O2', 'H2', 'H2O', 'CH4', 'N2', 'Char');
title('Evolución de los flujos molares en Fase Emulsión');
xlabel('z [m]');
ylabel('fe [mol/s]');

%DATOS EXPERIMENTALES SEGÚN RADMANESH (obtenidos mediante el software
XYExtrac)
%=====

%Para el CH4
zCH4=[0.226989;0.226723;0.226084;0.475920;0.717874;0.717732];%[m]
xCH4=[1.70418;1.90744;2.39525;3.35393;3.66230;3.77070];%[porcentual]
%-----

%Para el CO
zCO=[0.230996;0.231072;0.231211;0.480873;0.721698];
xCO=[14.1270;15.0000;16.5873;18.9683;20.3968];
%-----

%Para el CO2
zCO2=[0.233622;0.483905;0.727910];
xCO2=[13.4754;12.2505;12.7128];

```

```

%-----
%Para el H2
zH2=[0.228666;0.228736;0.228883;0.481113;0.478996;0.722281];
xH2=[6.90936;7.53678;8.87007;9.02623;9.88964;9.18587];
%=====

%DATA DE LOS RESULTADOS DEL MODELO 1 (CINÉTICO) PROPUESTO POR RADMANESH
(obtenidos mediante el software XYExtrac)
%=====

%Altural
zzCH4=[0.0108462;0.0260076;0.0346963;0.0563888;0.0694042;0.0867699;0.099762
0;...

0.114935;0.125805;0.134482;0.145328;0.167032;0.180036;0.190882;0.201763;...

0.201845;0.204108;0.202056;0.204389;0.204494;0.204623;0.204763;0.204927;...

0.207201;0.207306;0.207435;0.207564;0.209862;0.210014;0.212241;0.221047;...

0.229782;0.245049;0.258123;0.273378;0.292925;0.312495;0.332053;0.351611;...

0.373304;0.392850;0.412385;0.431944;0.434078;0.457928;0.477463;0.497009;...

0.531706;0.546925;0.568594;0.592456;0.605483;0.625018;0.653218;0.668403;...

0.705280;0.694423;0.722623;0.739977;0.755161;0.781204;0.798546];

%Fracción másica del CH4 obtenida del Modelo 1
xxCH4=[0.0541435;0.0275980;0.0413093;0.0418940;0.0422448;0.0561900;0.029586
0;...

0.0165179;0.0437650;0.0439989;0.0442913;0.0583534;0.0452268;0.0455191;...

0.0862437;0.180586;0.288463;0.423179;0.611921;0.733218;0.881469;1.04320;...

1.23188;1.35324;1.47453;1.62278;1.77104;1.91935;2.09455;2.16200;2.31048;...

2.37810;2.47286;2.54059;2.62187;2.64935;2.70378;2.74474;2.78570;2.78629;...

2.81377;2.82777;2.86873;2.82835;2.81552;2.82952;2.85701;2.84446;2.88530;...

```

2.85893;2.85958;2.87341;2.88741;2.88817;2.88858;2.88957;2.87580;2.87656;...  
2.87703;2.87744;2.89162;2.87861];

### %Altura2

zzCO=[0.00656455;0.0153173;0.0306415;0.0394012;0.0503421;0.0634712;0.067840  
6;...

0.0809628;0.0897155;0.0984752;0.111604;0.124733;0.137863;0.146615;0.157563;  
...

0.172873;0.181626;0.192567;0.201355;0.203591;0.203640;0.205877;0.203744;...

0.203793;0.206023;0.206078;0.208336;0.208398;0.206273;0.206308;0.208544;...

0.210788;0.210837;0.219576;0.230551;0.230579;0.237185;0.243791;0.250398;...

0.259199;0.265784;0.272384;0.285548;0.300914;0.314056;0.329395;0.360064;...

0.379778;0.408232;0.427925;0.460755;0.489208;0.508909;0.537355;0.565802;...

0.589872;0.627078;0.664291;0.679587;0.705860;0.736494;0.751811;0.771505;0.7  
91199];

### %Fracción másica del CO obtenida del Modelo 1

xxCO=[0.000000;0.000000;0.0793651;0.0158730;0.0158730;0.0158730;0.0793651;0  
.000000;...

0.000000;0.0793651;0.0793651;0.0793651;0.0793651;0.0793651;0.0158730;0.0793  
651;...

0.0793651;0.0793651;0.476190;1.03175;1.58730;2.14286;2.77778;3.33333;3.8095  
2;...

4.44444;5.23810;5.95238;6.66667;7.06349;7.61905;8.25397;8.80952;8.65079;9.0  
4762;...

9.36508;9.84127;10.3175;10.7937;11.3492;11.5873;11.9841;12.3810;12.9365;13.  
0952;...

13.3333;13.7302;13.9683;14.0476;14.0476;14.1270;14.2063;14.2857;14.2857;14.  
2857;...

14.2857;14.3651;14.5238;14.2857;14.4444;14.4444;14.4444;14.4444;14.4444];

### %Altura3

zzCO2=[0.00234192;0.00470165;0.00922520;0.0115315;0.0138734;0.0183970;0.0207567;0.0252625;...

0.0276044;0.0299463;0.0322170;0.0411929;0.0435348;0.0481474;0.0505783;0.0573192;...

0.0574260;0.0664019;0.0709789;0.0733386;0.0779156;0.0802931;0.0848879;0.0893759;...

0.0961345;0.100658;0.107470;0.114229;0.123240;0.138868;0.129963;0.143427;0.152421;...

0.163596;0.179224;0.190399;0.203792;0.205795;0.205670;0.209980;0.209873;0.209731;...

0.207371;0.209428;0.211503;0.211361;0.211236;0.213275;0.220087;0.220158;0.242242;...

0.251057;0.262126;0.270924;0.284192;0.295260;0.310763;0.335117;0.350638;0.368376;...

0.394947;0.421555;0.457031;0.494760;0.514733;0.536887;0.561277;0.592354;0.614491;...

0.643316;0.661072;0.672158;0.696548;0.707652;0.727607;0.736476;0.743128;0.760848;0.774169;0.789708];

### %Fracción másica del CO2 obtenida del Modelo 1

xxCO2=[0.401599;1.04398;1.44522;1.84664;2.40870;2.80995;3.45233;3.77325;4.33531;4.89737;...

5.13815;5.61936;6.18142;6.98426;7.94793;8.34899;8.83091;9.31212;9.95432;10.5967;...

11.2389;11.9616;12.6841;12.9247;13.4061;13.8074;14.5297;15.0111;15.6529;16.1336;...

15.9737;16.6955;17.2570;17.6577;18.1384;18.5391;18.9396;17.9756;17.4134;16.8508;...

16.3689;15.7263;15.0839;14.3609;13.7181;13.0756;12.5133;11.7100;12.4323;12.7536;...

12.3502;12.1085;12.0273;11.7053;11.5436;11.4624;11.3808;11.2182;11.2170;11.2156;...

11.0528;11.0507;11.0478;11.2054;11.2841;11.2020;11.2001;11.3582;11.1958;11.1935;...

11.2724;11.2715;11.2695;11.3490;11.3474;11.3466;11.3461;11.2644;11.3436;11.4227];

#### %Altura4

zzH2=[0.0177371;0.0310400;0.0421606;0.0598977;0.0754526;0.0865034;0.0997713;0.113074;...

0.128594;0.155200;0.168503;0.179588;0.192891;0.201899;0.199962;0.202318;0.204815;...

0.202807;0.203017;0.205513;0.203715;0.208533;0.208743;0.206840;0.211623;0.207468;...

0.212147;0.210174;0.212671;0.210733;0.210977;0.211257;0.213718;0.214067;0.214347;...

0.214626;0.219340;0.221382;0.230076;0.243135;0.258445;0.267209;0.289101;0.306838;...

0.322323;0.353293;0.382046;0.410904;0.426459;0.457429;0.481853;0.510710;0.530665;...

0.550584;0.568356;0.594927;0.610447;0.630401;0.650355;0.672527;0.696915;0.721374;...

0.736789;0.750092;0.774550;0.790105];

#### %Fracción másica del H2 obtenida del Modelo 1

xxH2=[0.0762906;0.0741956;0.151185;0.148391;0.224682;0.144201;0.0633718;0.0612769;...

0.0588328;0.0546429;0.0525480;0.0508022;0.0487073;0.362249;0.992476;1.30707;...

1.93659;2.40935;2.88176;3.51129;4.45645;5.32183;5.79424;6.50320;7.28985;7.92043;...

8.47087;9.02236;9.65189;10.2821;10.8333;11.4631;12.0139;12.8013;13.4312;14.0610;...

14.6902;14.2962;13.9011;13.3479;12.8730;12.6354;12.0021;11.9993;11.9181;11.7557;...

11.5937;11.6679;11.7442;11.5819;11.6567;11.7309;11.7278;11.6459;11.7219;11.6389;...

11.6365;11.6334;11.6302;11.6267;11.6229;11.7765;11.5379;11.5358;11.6894;11.7657];

%-----

**%Composición en fracción de base seca % de especies en la Fase Burbuja**

**xbCO=(100.\*f(:,1))./(f(:,1)+f(:,2)+f(:,3)+f(:,4)+f(:,5)+f(:,6)+f(:,7)+f(:,8))**);

**xbCO2=(100.\*f(:,2))./(f(:,1)+f(:,2)+f(:,3)+f(:,4)+f(:,5)+f(:,6)+f(:,7)+f(:,8))**);

**xbH2=(100.\*f(:,4))./(f(:,1)+f(:,2)+f(:,3)+f(:,4)+f(:,5)+f(:,6)+f(:,7)+f(:,8))**);

**xbO2=(100.\*f(:,3))./(f(:,1)+f(:,2)+f(:,3)+f(:,4)+f(:,5)+f(:,6)+f(:,7)+f(:,8))**);

**xbH2O=(100.\*f(:,5))./(f(:,1)+f(:,2)+f(:,3)+f(:,4)+f(:,5)+f(:,6)+f(:,7)+f(:,8))**);

**xbCH4=(100.\*f(:,6))./(f(:,1)+f(:,2)+f(:,3)+f(:,4)+f(:,5)+f(:,6)+f(:,7)+f(:,8))**);

**xbN2=(100.\*f(:,7))./(f(:,1)+f(:,2)+f(:,3)+f(:,4)+f(:,5)+f(:,6)+f(:,7)+f(:,8))**);

**xbChar=(100.\*f(:,8))./(f(:,1)+f(:,2)+f(:,3)+f(:,4)+f(:,5)+f(:,6)+f(:,7)+f(:,8))**);

**%Delimitamos la zona donde ocurren las reacciones**

**%Límite en la altura del alimentador**

**a=[Hfb Hfb]**);

**b=[Hfb max(xbCO)+1.3]**);

**bb=[Hfb max(xbH2)+0.85]**);

```
bbb=[Hfb max(xbCH4)+0.8];
```

```
%Límite de la altura de expansión del lecho
```

```
q=[Hexp+0.2 Hexp+0.2];
```

```
v=[Hexp+0.2 max(xbCO)+1.33];
```

```
vv=[Hexp+0.2 max(xbH2)+0.85];
```

```
vvv=[Hexp+0.2 max(xbCH4)+0.8];
```

```
%Hacemos constante el último valor
```

```
t=[z(end)+0.2 xbCO(end)];
```

```
tt=[Hr xbCO(end)];
```

```
figure(3)
```

```
p1=plot(z+0.2,xbCO,'b',zCO,xCO,'sk',zzCO,xxCO,'--r',a,b,'--k',q,v,'--k');
```

```
legend('Model','Expe.','Radmanesh');
```

```
ylabel('Molar fraction of CO (%)');
```

```
xlabel('Reactor height (m)');
```

```
p1(1).LineWidth = 1.5;
```

```
p1(2).LineWidth = 1.5;
```

```
figure(5)
```

```
p2=plot(z+0.2,xbH2,'b',zH2,xH2,'dk',zzH2,xxH2,'--r',a,bb,'--k',q,vv,'--k');
```

```
legend('Model','Expe.','Radmanesh');
```

```
ylabel('Molar fraction of H2 (%)');
```

```
xlabel('Reactor height (m)');
```

```
p2(1).LineWidth = 1.5;
```

```
p2(2).LineWidth = 1.5;
```

```
figure(6)
```

```
p3=plot(z+0.2,xbCH4,'b',zCH4,xCH4,'ok',zzCH4,xxCH4,'--r',a,bbb,'--k',q,vvv,'--k');
```

```
legend('Model','Expe.','Radmanesh');
```

```
ylabel('Molar fraction of CH4 (%)');
```

```
xlabel('Reactor height (m)');
```

```
p3(1).LineWidth = 1.5;
```

```
p3(2).LineWidth = 1.5;
```

```
% Se Verifica la conservación de la masa en los instantes inicial y final
% Se analiza la variación de flujo molar en los instantes inicial y final
% -----
```

```
f_inicial = sum(f0)
```

```
f_final = sum(fb(length(fb),:)+fe(length(fb),:))
```

```
%Balance másico entrada [g/min]
```

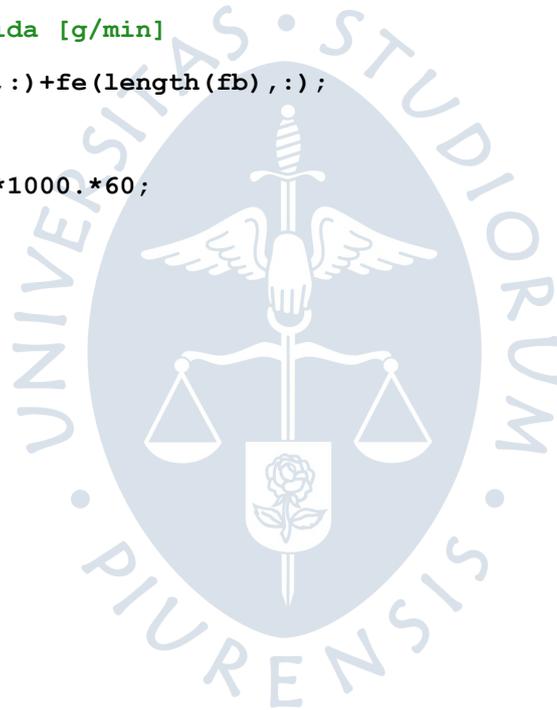
```
inMF=(m_biomasa*1000)+m_aire)*60;
```

```
%Balance másico salida [g/min]
```

```
outMF=fb(length(fb),:)+fe(length(fb),:);
```

```
nPM=PM';
```

```
outMi=(outMF.*nPM).*1000.*60;
```



## Apéndice J. Modelo matemático

```

clc
clear all

%Se llama a la Rutina Datos de entrada
%-----

Datos_de_Entrada
%-----

%Se inician las rutinas, según el siguiente orden:
%-----

[PM] = Pesos_Moleculares;
[Prop_air] = Propiedades_del_agente_gasificante;
[min_fluidi] = Minima_fluidizacion;
[Hmf, Hexp] = Hidrodinamica_del_lecho_fluidizado;
[devo_biomass] = Devolatilizacion;
[f_vol_b, f_vol_e, cb0, ce0, gm_inicial] = Parametros_Reaccion_Inicial;
%-----

%Condiciones iniciales del proceso
z0=0;%Altura inicial [m]
zf=Hr;%Altura final del reactor [m]

%NOTA: Se considera que en el reactor existe un lecho infinito, por lo
%tanto el zf será igual a la altura del reactor y no igual a la altura de
% mínima fluidización.

f0=[f_vol_b'; f_vol_e'];%Flujos iniciales [mol/s]

%Se resuelven las EDO
%-----

[z,f] = ode113('Funcion_transferencia', [z0 zf], f0); %ODE 113 resuelve la
función transferencia

%Donde:

%z: Coordenada axial de la altura del reactor, con incrementos definidos
%por ODE113

%f: Flujos molares en fases Emulsión y Burbuja para cada especie [mol/s]

```

```

%-----

figure(1)
fb = f(:,1:8);
plot(z,fb(:,1),'b','g', z,fb(:,4),'k', z,fb(:,5),'b--', z,fb(:,6),'r--',
z,fb(:,7),'g--', z,fb(:,8),'k.-');
legend('CO', 'CO2', 'O2', 'H2', 'H2O', 'CH4', 'N2','Char');
title('Evolución de los flujos molares en Fase Burbuja');
xlabel('z [m]');
ylabel('fb [mol/s]');

figure(2)
fe = f(:,9:16);
plot(z,fe(:,1),'b', z,fe(:,4),'k', z,fe(:,5),'b--', z,fe(:,6),'r--',
z,fe(:,7),'g--', z,fe(:,8),'k.-');
legend('CO', 'CO2', 'O2', 'H2', 'H2O', 'CH4', 'N2','Char');
title('Evolución de los flujos molares en Fase Emulsión');
xlabel('z [m]');
ylabel('fe [mol/s]');

%Composición en base seca de las fracciones molares de especies en la Fase
Burbuja
xbCO=(100.*f(:,1))./(f(:,1)+f(:,2)+f(:,3)+f(:,4)+f(:,5)+f(:,6)+f(:,7)+f(:,8)
));
xbCO2=(100.*f(:,2))./(f(:,1)+f(:,2)+f(:,3)+f(:,4)+f(:,5)+f(:,6)+f(:,7)+f(:,8)
));
xbH2=(100.*f(:,4))./(f(:,1)+f(:,2)+f(:,3)+f(:,4)+f(:,5)+f(:,6)+f(:,7)+f(:,8)
));
xbO2=(100.*f(:,3))./(f(:,1)+f(:,2)+f(:,3)+f(:,4)+f(:,5)+f(:,6)+f(:,7)+f(:,8)
));
xbH2O=(100.*f(:,5))./(f(:,1)+f(:,2)+f(:,3)+f(:,4)+f(:,5)+f(:,6)+f(:,7)+f(:,8)
));
xbCH4=(100.*f(:,6))./(f(:,1)+f(:,2)+f(:,3)+f(:,4)+f(:,5)+f(:,6)+f(:,7)+f(:,8)
));
xbN2=(100.*f(:,7))./(f(:,1)+f(:,2)+f(:,3)+f(:,4)+f(:,5)+f(:,6)+f(:,7)+f(:,8)
));
xbChar=(100.*f(:,8))./(f(:,1)+f(:,2)+f(:,3)+f(:,4)+f(:,5)+f(:,6)+f(:,7)+f(:,8)
));

```

```
figure(3)
plot(z,xbCO,'-b')
ylabel('Fracción molar (%)');
xlabel('Altura del reactor (m)');
title('Composición en base seca del CO en Fase Burbuja');

figure(4)
plot(z,xbH2,'-b')
ylabel('Fracción molar (%)');
xlabel('Altura del reactor (m)');
title('Composición en base seca del H2 en Fase Burbuja');

figure(5)
plot(z,xbCH4,'-b')
ylabel('Fracción molar (%)');
xlabel('Altura del reactor (m)');
title('Composición en base seca del CH4 en Fase Burbuja');

%Se verifica la variación de flujo molar en los instantes inicial y final
%-----
f_inicial = sum(f0)
f_final = sum(fb(length(fb),:)+fe(length(fb),:))
variacion_flujos=f_inicial-f_final
%-----
```

### Apéndice K. Resultados del balance de masa en el gasificador (Código validación)

A continuación, se presentan los resultados (ver Tabla A2.1) correspondientes al balance de flujo másico en el reactor. Las variables de ingreso al reactor son el flujo másico de biomasa y flujo másico de agente gasificante (aire), ambas variables se calcularon al inicio del código de validación y serán expresadas en las unidades de  $g/min$  debido a que la literatura de referencia para la validación usó un pequeño reactor a escala de laboratorio. Además, las variables de salida son las 8 especies ( $i = CO, CO_2, H_2, H_2O, CH_4, O_2, N_2, char$ ) calculadas en unidades de  $g/min$  al final del código.

Tabla A2.1. Resultados numéricos del balance de flujo másico para el código de validación

Componente	Entrada [ $g/min$ ]	Salida [ $g/min$ ]
<i>Beech Wood</i> (biomasa)	10.613	-
Agente gasificante (aire)	19.752	-
$CO$	-	10.33
$CO_2$	-	0.001
$O_2$	-	0.127
$H_2$	-	0.206
Vapor de agua ( $H_2O$ )	-	4.022
$CH_4$	-	0.48
$N_2$	-	15.01
<i>char</i>	-	0.19
<b>Total</b>	<b>30.365</b>	<b>30.366</b>

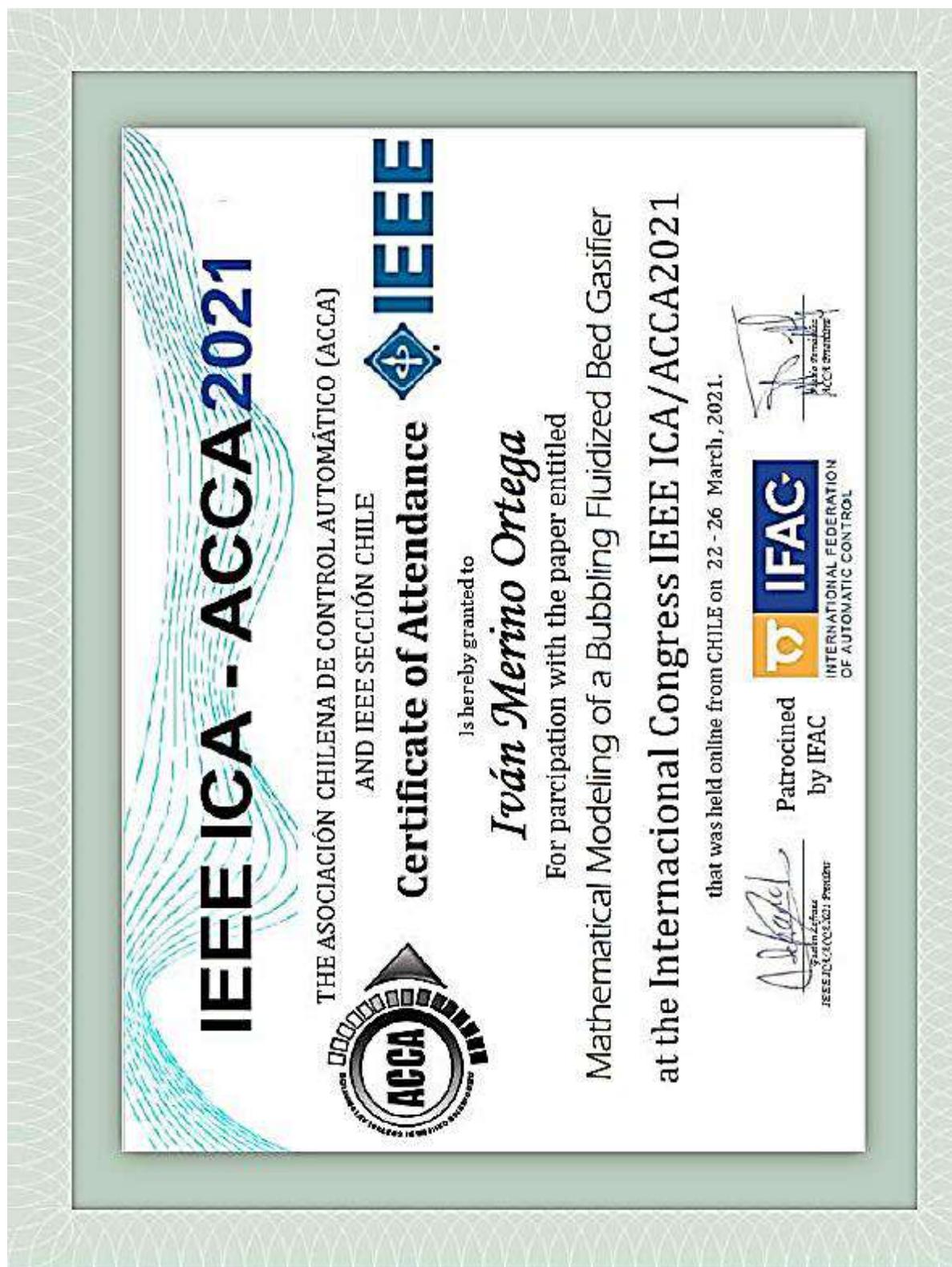


**Anexos**





Anexo 1. Certificado de participación IEEE como ponente del paper #37



Fuente: Barbosa, K.(comunicación personal, 04 de abril de 2021)

## Anexo 2. Correo de registro del paper, status de aceptación y presentación virtual SDEWES 2021

From: SDEWES2021 <sdewes2021@sdewes.org>  
 Sent: jueves, 22 de abril de 2021 06:45 p. m.  
 To: Raul La Madrid Olivares <raul.lamadrid@udep.edu.pe>  
 Subject: [SDEWES2021] Manuscript submitted (SDEWES2021.0016 One-dimensional Numerical Prediction of Syngas Components in a Bubbling Fluidized Bed Gasifier)

Dear Prof. La Madrid,

Thank you for submitting the manuscript

SDEWES2021.0016 One-dimensional Numerical Prediction of Syngas Components in a Bubbling Fluidized Bed Gasifier

-

Ivan Merino Ortega, Universidad de Piura, Peru  
 Raul La Madrid\*, Universidad de Piura, Peru  
 Daniel Marcelo-Aldana, Universidad de Piura, Peru  
 Elder M. Mendoza Orbegoso, Universidad Nacional de Trujillo, Peru

For DUB2021 conference.

It was received by the system and the editors have been notified.  
 If any errors have occurred during the submissions, you will be notified as soon as possible.

Thank you very much and best regards,

sdewes2021 COMET SYSTEM

PROCESS FINISHED / ABSTRACT - ACCEPT, MANUSCRIPT - ACCEPT AS ARCHIVAL					
PAPER ID	TYPE	TITLE	AUTHORS	STATUS	ACTIONS
SDEWES2021.0016 <a href="#">RES6_OL</a>	Archival oral	<a href="#">One-dimensional Numerical Prediction of Syngas Components in a Bubbling Fluidi..</a>	I. Merino Ortega, R. La Madrid*, D. Marcelo-Aldana, E.M. Mendoza Orbegoso	Ended. Status: abstract - accept, manuscript - accept as archival	none

The screenshot shows the Virtual Conference Platform interface. At the top, it says 'VIRTUAL CONFERENCE PLATFORM'. Below that, the session is identified as 'Session: Renewable energy resources 6'. The main title of the session is 'One-dimensional Numerical Prediction of Syngas Components in a Bubbling Fluidized Bed Gasifier'. A video player is embedded, showing a presentation slide with the title 'ONE-DIMENSIONAL NUMERICAL PREDICTION OF SYNGAS COMPONENTS IN A BUBBLING FLUIDIZED BED GASIFIER' and the authors: Raul La Madrid, Ivan Merino, Elder Mendoza, and Daniel Marcelo. The slide also mentions the '16th Sdewes Conference DUBROVNIK 2021'. To the right of the video player, there is a list of other presentations in the session, including 'Waste gas utilization by combining operation with syngas conversion to biomethane technology' and 'Analysis of greenhouse gas emissions reduction from...'. The interface includes a search bar, navigation icons, and a footer with logos of sponsors like CONCYTEC, PISA CIENCIA, and the University of Piura.

Fuente: La Madrid, O. (comunicación personal, 22 de abril de 2021)