UNIVERSIDAD DE COSTA RICA FACULTAD DE INGENIERÍA ESCUELA DE INGENIERÍA DE BIOSISTEMAS

"Análisis de un gasificador de flujo concurrente para el aprovechamiento energético de residuos biomásicos aplicando dinámica de fluidos computacional"

Trabajo Final de Graduación presentado ante la Escuela de Ingeniería de Biosistemas como requisito para optar por el grado de

Licenciatura en Ingeniería Agrícola y de Biosistemas

Randal Salazar Esquivel

Ciudad Universitaria Rodrigo Facio San José, Costa Rica 2017 Esta tesis fue aceptada por la Comisión de Trabajos Finales de Graduación de la Escuela de Ingeniería de Biosistemas de la Universidad de Costa Rica, como requisito para optar al grado y título de Licenciatura en Ingeniería Agrícola y de Biosistemas.

Dr. Pedro Casanova Treto Director de tesis

Kattia &0:

Dra. Kattia Solís Ramírez Miembro, Equipo Asesor

Dr. Henry Alfaro Chavarría Miembro, Equipo Asesor

Mon lero arta

Dra. Marta Montero Calderón Presidente, Tribunal Examinador

Mauricio Bustamante

Dr. Mauricio Bustamante Román Miembro, Tribunal Examinador

Rsalazar

Randal Salazar Esquivel Estudiante

A Dios...

Por la perseverancia, fuerza de voluntad y oportunidades que han surgido en estos años.

AGRADECIMIENTOS

A Pedro, por confiar en mí y darme la oportunidad de desarrollar este proyecto. Por cada consejo, regaño, aprendizaje y lección de vida. Pero más importante, por su amistad incondicional.

A Kattia, por todo el apoyo, consejos y observaciones que me permitieron generar un trabajo de calidad. Gracias por creer en mí como asistente y preocuparse por mi bienestar personal.

> A Henry, por aceptar ser parte de este proceso, por todas las sugerencias, aportes y consejos brindados.

A Marta Montero, por el apoyo brindado y poner a mi disposición las herramientas necesarias para desarrollar este trabajo.

> A Silene, por ser mí pilar y siempre creer en mí, gracias por apoyarme en los momentos difíciles.

A mis compañeros de trasnochadas, gracias por todo el apoyo, las vivencias y buenos momentos que compartimos.

A la Escuela de Ingeniería de Biosistemas, a su personal administrativo por toda la ayuda de estos años.

> A don Geovanni, por inculcar el amor y pasión por esta disciplina.

A la Universidad de Costa Rica y a su sistema de becas, sin los cuales hubiese sido imposible culminar este proceso.

A todos los familiares que me brindaron su apoyo.

ÍNDICE GENERAL

ÍNDI	CE DE CUADROSvii
ÍNDI	CE DE FIGURASviii
RESU	JMENx
INTR	ODUCCIÓN1
CAPÍ	TULO 1. ESTADO DEL ARTE4
1.1.	Tecnologías de conversión termo-química de biomasa4
1.2.	Química de la gasificación de biomasa5
1.3.	Etapas de la gasificación7
1.	.3.1. Secado
1.	.3.2. Pirólisis
1.	.3.3. Oxidación o gasificación10
1.	.3.4.Reducción
1.4.	Modelación de la gasificación11
1.5.	Modelación matemática13
1.	.5.1. Modelo de balance de masa
1.	.5.2. Modelo de conservación de momento
1.	.5.3. Modelo de turbulencia
1.	.5.4. Modelo Euleriano granular
1.	.5.5. Modelo de reacciones químicas
1.	.5.6. Conservación de energía20
CAPÍ	TULO 2. METODOLOGÍA22
2.1.	Reactor de gasificación modelado23
2.2.	Dominio de la modelación26
2.	2.1 Dominio de trabajo26
2.	2.2 Discretización del dominio
2.	2.3. Modelos físicos

- 1	Modelo de turbulencia	31		
- Modelo multifásico				
- 1	- Modelo de especies			
2.2.4. Caracterización de materiales				
2.	.2.5. Condiciones de frontera	34		
2.1	.2.6. Parámetros de solución	36		
2.3.	Comparación estadística del modelo numérico	37		
CAP	ÍTULO 3. RESULTADOS	40		
3.1.	Discretización del dominio	40		
3.2.	Comportamiento dinámico y térmico en el reactor de gasificación en función de la posición de ingreso del agente gasificante	42		
3.3.	Comportamiento dinámico y térmico del gasificador en función del cau de agente gasificante ingresado	dal 50		
3.4.	Efecto del caudal de aire y su posición de ingreso en la concentración de especies químicas en el gas de síntesis	e 57		
3.5.	Comparación estadística del modelo número establecido para el proces gasificación	o de 67		
CON	CLUSIONES	70		
REC	OMENDACIONES	72		
REFI	ERENCIAS	74		
ANE	XO A. VARIACIÓN EN LAS VELOCIDADES Y PATRONES DEL FLUJO DE VOLÁTILES	; 81		
ANE	XO B. DISTRIBUCIÓN DE TEMPERATURA EN EL ESTRA DEL REACTOR	.TO 85		
ANE	XO C. FORMACIÓN DE ESPECIES QUÍMICAS DURANTE LA DINÁMICA DE GASIFICACIÓN	89		
ANE	XO D. VARIACIÓN DE LAS ESPECIES QUÍMICAS QUE CONFORMAN EL SYNGAS PARA CADA CASO DE ESTUDIO	97		

ÍNDICE DE CUADROS

Cuadro 1.1. Reacciones químicas presentes en el proceso de gasificación y sus	
respectivas entalpías	6
Cuadro 2.1. Análisis de mallas empleadas en el estudio	31
Cuadro 2.2. Reacciones químicas establecidas en el modelo de transporte de especies	33
Cuadro 2.3. Propiedades físicas y térmicas de los pellets elaborados a partir de residuos	,
de aserradero	34
Cuadro 2.4. Casos de estudio planteados para la modelación numérica del reactor	
de gasificación	35
Cuadro 2.5. Métodos de solución empleados en el método numérico	37
Cuadro 3.1. Variación en la fracción másica de metano al modificar el número de	
elementos del mallado	40
Cuadro 3.2. Fracciones másicas obtenidas en la conformación del syngas para cada case	0
planteado en la modelación numérica	67
Cuadro 3.3. Composición del gas de síntesis obtenido en diversas modelaciones	
numéricas realizadas en el área de gasificación	68
Cuadro 3.4. Validación estadística de los resultados obtenidos en la conformación del	
syngas reportado en cada modelación numérica	69

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1.1. Etapas de la gasificación en un reactor de lecho fijo de flujo concurrente.	8
Figura 1.2. Esquema de la descomposición termoquímica de biomasa	9
Figura 1.3. Etapas de la gasificación.	11
Figura 2.1. Reactor de gasificación de flujo concurrente.	22
Figura 2.2. Vista en corte de reactor de gasificación	23
Figura 2.3. Tobera de alimentación de aire ambiente al reactor	24
Figura 2.4. Modelo geométrico del gasificador de flujo concurrente	25
Figura 2.5. Dimensiones características del gasificador de flujo concurrente	25
Figura 2.6. Diagrama de flujo del proceso de modelación numérica del reactor de	
gasificación	27
Figura 2.7. Modelo geométrico empleado en la modelación fluido computacional	28
Figura 2.8. Variaciones en la posición del ingreso de aire establecidas	29
Figura 2.9. Diagrama de implementación del modelo multifase en el proceso de	
simulación	32
Figura 3.1. Convergencia de la fracción másica de metano al aumentarse el número o	de
elementos en los mallados	41
Figura 3.2. Distribución de velocidad y patrones de líneas de flujo de la fase de volá	tiles
en el lecho poroso de pellets para el caso II	43
Figura 3.3. Distribución de temperaturas en el lecho poroso del gasificador para	
el caso II	44
Figura 3.4. Distribución de velocidad y patrones de líneas de flujo de la fase de volá	tiles
en el lecho poroso de pellets para el caso V.	46
Figura 3.5. Distribución de temperaturas en el lecho poroso del gasificador para	
el caso V.	47
Figura 3.6. Distribución de velocidad y patrones de líneas de flujo de la fase de volá	tiles
en el lecho poroso de pellets para el caso VIII.	48
Figura 3.7. Distribución de temperaturas en el lecho poroso del gasificador para el caso VIII	49
Figura 3.8. Distribución de velocidad y patrones de líneas de fluio de la fase de volá	tiles
en el lecho poroso de pellets para el caso I	51
Figura 3.9. Distribución de temperaturas en el lecho poroso del gasificador para	
el caso I	52
Figura 3.10. Distribución de velocidad y patrones de líneas de fluio de la fase de en	el
lecho poroso de pellets volátiles para el caso III	
r r r	

Figura 3.11.	Distribución de temperaturas en el lecho poroso del gasificador para	
	el caso III	55
Figura 3.12.	Variación en la fracción másica de a) CO y b) CO2 para el caso VII	58
Figura 3.13.	Variación en la fracción másica de a) CH ₄ y b) H ₂ para el caso VII	59
Figura 3.14.	Variación en la fracción másica de a) CO y b) CO2 para el caso V	60
Figura 3.15.	Variación en la fracción másica de a) CH ₄ y b) H ₂ para el caso V	61
Figura 3.16.	Variación de la fracción másica de CO presente en el gas de síntesis en	
	función del caudal de aire y su posición de ingreso	63
Figura 3.17.	Variación de la fracción másica de CO ₂ presente en el gas de síntesis en	
	función del caudal de aire y su posición de ingreso	64
Figura 3.18.	Variación de la fracción másica de CH4 presente en el gas de síntesis en	
	función del caudal de aire y su posición de ingreso	65
Figura 3.19.	Variación de la fracción másica de H ₂ presente en el gas de síntesis en	
	función del caudal de aire y su posición de ingreso	66

Se realizó una modelación numérica que simula el comportamiento térmico, fluido-dinámico y de generación de especies químicas característico del proceso de gasificación de biomasa en un reactor de lecho concurrente utilizando dinámica de fluidos computacional (CFD).

Un modelo tridimensional fue establecido para representar el interior del reactor de gasificación, ANSYS Workbench © 18.0 fue utilizado para generar el mallado del reactor y establecer los distintos modelos físico-químicos que representaran adecuadamente el proceso de gasificación.

Se asumió el proceso de simulación como un estado estacionario. Los modelos de energía, turbulencia, transporte de especies y multifásicos fueron establecidos para representar adecuadamente las ecuaciones que rigen la transferencia de masa, momento y energía en el proceso de degradación termo-química de biomasa, resueltos a partir del método de volúmenes finitos implementado por Fluent[®].

Las variaciones en el caudal de aire ingresado al reactor, así como la posición en la que se ingresa el mismo, fueron establecidas a fin de determinar el punto de operación óptimo del reactor.

Los resultados del modelo numérico desarrollado permitieron identificar una mayor interacción entre la fase de compuestos volátiles y la fase sólida de pellets en la zona superior del reactor, producto del aumento de temperatura que se genera en esta zona, debido a la alta

Х

turbulencia presentada; este comportamiento se cumple para los distintos escenarios planteados en la investigación.

Además, se determinó que empleando un caudal de 400 l/min de aire e ingresándolo por encima de la garganta del reactor se obtienen los mejores resultados en términos de calidad de syngas producido, estableciendo esta condición como punto de operación óptimo del reactor.

El consumo global de energía ha aumentado constantemente durante gran parte del siglo XX, particularmente desde 1950 [1]. La Agencia Internacional de Energía ha pronosticado que la demanda mundial de energía aumentará un 1,6 % al año en promedio entre 2006 y 2030 [2]. Este panorama pone en evidencia la necesidad de invertir en la investigación y desarrollo de nuevas fuentes de energía a partir de fuentes no convencionales.

El estudio y caracterización de diversas biomasas como recurso energético ha sido una línea de investigación a la cual se le ha prestado mayor atención en los últimos años, principalmente debido a su potencial energético y volúmenes de producción mundial. La disminución de emisión de gases de invernadero, reducción del costo de la energía, mejora del aseguramiento del abastecimiento energético, mejor manejo/reducción de residuos y oportunidades de desarrollo económico asociado a la implementación de proyectos en bioenergía son algunas de las ventajas de emplear biomasa como materia prima para la generación de energía [3]. La gasificación de biomasa es una tecnología útil y eficiente en producción de energía, que puede contribuir de manera significativa a la generación de energía renovable [4].

Costa Rica presenta un gran potencial para el uso de residuos biomásicos para producción energética. La producción de residuos biomásicos lignocelulósicos, energéticamente aprovechables de las principales actividades agrícolas a nivel nacional (piña, café, banano, palma y arroz, en orden de mayor a menor producción) alcanzó para el 2010 las

6.500.000,00 ton/año aproximadamente, esto recalca la importancia de implementar tecnologías útiles en el aprovechamiento energético de este tipo de biomasas [5].

Las técnicas de modelación en dinámica de fluidos computacional (CFD por sus siglas en inglés) se han convertido en una útil herramienta en el área de la conversión termoquímica de biomasa. Diversos investigadores han empleado la modelación en CFD para analizar el comportamiento de los equipos de conversión termoquímica. Los modelos CFD se han establecido como un complemento eficaz para el desarrollo de nuevas ideas y tecnologías, ahorrando en costos, tiempo en pruebas y seguridad ocupacional [6].

Este proyecto busca evaluar la gasificación como una alternativa al uso de residuos biomásicos, estudiando mediante la modelación de dinámica de fluidos computacional el comportamiento de la producción de gas de síntesis al variarse distintas condiciones físicoquímicas, las cuales permitan validar la implementación de este tipo de tecnología como una herramienta eficiente de conversión de biomasa en un combustible renovable.

Por lo tanto, esta investigación analiza el comportamiento fluido-dinámico de un gasificador de flujo concurrente, presentando variaciones en la velocidad y posición de ingreso del agente gasificante, a fin de identificar su punto de operación óptimo. Para esto se plantearon los siguientes objetivos específicos:

- Establecer el conjunto de modelos numéricos adecuados, que describan el comportamiento termoquímico de la gasificación, para simular la dinámica de gasificación.
- 2. Definir un mallado adecuado en la geometría del gasificador, para obtener soluciones precisas optimizando el tiempo de convergencia y consumo de recursos computacionales.
- 3. Identificar la magnitud de velocidad y la configuración del ingreso del agente gasificante que propicie la operación más eficiente del reactor.
- 4. Evaluar las condiciones de temperatura, velocidad, presión y producción de especies al presentarse variaciones en el ingreso del agente gasificante.

1.1. Tecnologías de conversión termo-química de biomasa

La biomasa es un material biológico derivado de organismos vivos o recientemente vivos, a menudo se refiere a plantas o materiales vegetales que sean específicamente llamados lignocelulósicos [3]. A través del proceso de fotosíntesis, la clorofila de las plantas captura la radiación solar, convierte el dióxido de carbono del aire y el agua del suelo en carbohidratos, para formar materia orgánica, al combustionar los carbohidratos regresan a su forma de dióxido de carbono y agua, liberando la energía que contienen [7].

Existe una gran variedad de productos de interés energético que pueden ser empleados en la generación de energía, tales como: cultivos energéticos, residuos agrícolas, forestales, industriales y urbanos [8]. Con una gama tan amplia de material identificado como biomasa, los métodos para aprovechar todo su potencial energético deben ser igual de amplios.

Son múltiples las opciones tecnológicas disponibles para utilizar una amplia variedad de tipos de biomasa como fuente de energía renovable. Las tecnologías de conversión pueden liberar la energía directamente, en forma de calor o electricidad, o pueden convertirlo a otras formas, como biocombustible líquido y/o gaseoso [9]. La conversión de la biomasa en energía se puede realizar utilizando dos procesos tecnológicos principalmente: procesos termoquímicos y bioquímicos. La extracción mecánica con esterificación es una tercera tecnología para producir energía a partir de biomasa [10].

Dentro de los procesos de conversión termoquímica destacan cuatro opciones: combustión, pirólisis, gasificación y licuefacción. La conversión bioquímica abarca dos opciones de proceso: digestión (producción de biogás, una mezcla principalmente de metano y dióxido de carbono) y fermentación [11].

Debido a las reacciones que se dan en el proceso de conversión termoquímica, se generan una serie de productos característicos del proceso de la descomposición de la biomasa, un residuo sólido llamado char, un producto gaseoso denominado syngas o gas de síntesis y un líquido alquitranado de composición compleja, conocido como alquitrán [12].

Las características de los productos gaseosos, líquidos y sólidos dependen en gran medida de las características químicas y físicas de la materia prima, la velocidad de calentamiento, la temperatura del proceso, la presión y el tipo de reactor [12].

1.2. Química de la gasificación de biomasa

En el proceso de gasificación se da la conversión termoquímica de un material orgánico en una mezcla de gas combustible por medio de reacciones químicas de oxidación parcial, propiciadas por la adición de calor y la exposición a agentes de reacción como el aire, oxígeno puro, vapor de agua, dióxido de carbono o hidrógeno [13], comúnmente se trabaja con el 25 a 30 % del aire necesario para que se dé una oxidación completa [14].

La celulosa, la cual es el componente principal presente en la biomasa, realiza su conversión gracias a la gasificación a hidrocarburos más ligeros. Este gas, se denomina gas de síntesis,

gas pobre o syngas, presentando el poder calorífico inferior de una sexta parte respecto a la energía obtenida por gas natural [15].

El gas de síntesis obtenido al utilizar principalmente aire como agente gasificante se conforma de fracciones de monóxido de carbono (CO), dióxido de carbono (CO₂), hidrógeno (H₂), metano (CH₄), pequeñas cantidades de otros hidrocarburos más pesados, agua (H₂O) y diversos contaminantes, como pequeñas partículas carbonosas (char), cenizas y alquitranes [16]. La complejidad del proceso de gasificación es debida al número de reacciones que toman lugar en el proceso y al considerable número de componentes presentes en la biomasa. Las principales reacciones en el proceso de gasificación se enlistan en el cuadro 1.1.

Reacción	ΔH_{298} , kJ mol ⁻¹
Materia volátil→CH ₄ +C	Levemente exotérmico
C+0,5O2→CO	-111
$CO+0,5O_2 \rightarrow CO_2$	-254
$H_2+0,5O_2\rightarrow H_2O$	-242
$C+H_2O\rightarrow CO+H_2$	+131
$C+CO_2 \rightarrow 2CO$	+172
$C+2H_2 \rightarrow CH_4$	-75
$CO+3H_2 \rightarrow CH_4+H_2O$	-206
$CO+H_2O\rightarrow CO_2+H_2$	-41
$\rm CO_2 + 4H_2 \rightarrow CH_4 + H_2O$	-165

Cuadro 1.1. Reacciones químicas presentes en el proceso de gasificación y sus respectivas entalpías [17].

Para un combustible que contenga carbón, hidrógeno y oxígeno, a una presión fija, la temperatura del sistema de combustión es determinada por la relación de equivalencia (RE), esta representa la cantidad de aire añadido en relación con la cantidad de aire requerida para la combustión estequiométrica [18]. Dependiendo de la relación de equivalencia, un proceso de conversión termoquímica puede ser clasificado como pirólisis (RE = 0), gasificación (RE = 0,20-0,50) o combustión (RE \geq 1) [19].

Generalmente, el proceso térmico depende de las características físicas y químicas del combustible sólido, así como de las condiciones del entorno del combustible, tales como temperatura, presión y composición atmosférica [12]. Adicionalmente, la tasa a la cual se da el calentamiento de las partículas sólidas juega un papel importante en las características de la descomposición térmica de la biomasa [20].

1.3. Etapas de la gasificación

Existen múltiples configuraciones geométricas de reactores de gasificación, la utilización específica de estos diseños se basa en el tipo de biomasa, tipo y caudal de agente gasificante y la calidad del gas de síntesis que se desee obtener. Los procesos de degradación y conversión de la biomasa en compuestos volátiles se ven afectados por la geometría del reactor. En un reactor de flujo concurrente los procesos de secado, pirólisis, oxidación y reducción son los que rigen la cinética de gasificación de la biomasa [21]. En la figura 1.1 se muestra un diagrama de las etapas de gasificación en un gasificador de flujo concurrente.



Figura 1.1. Etapas de la gasificación en un reactor de lecho fijo de flujo concurrente [21].

1.3.1. Secado

El secado es el primer proceso que tiene lugar cuando se da el calentamiento de un combustible sólido. A presiones atmosféricas, este ocurre en un rango de temperatura ambiental aproximado a 107 °C [22]. A pesar de su aparente simplicidad, el secado de una partícula sólida es una combinación compleja de eventos que involucran tres fases: agua líquida, vapor y una fase sólida porosa a través de la cual el líquido y el vapor migran [23].

1.3.2. Pirólisis

La pirólisis es la degradación térmica de la biomasa en una fracción solida (carbón vegetal), una fracción líquida (alquitranes) y una fracción gaseosa compuesta de moléculas simples (CO, H₂, CO₂, CH₄ y C_nH_m). Este es un proceso endotérmico, por lo cual se debe suministrar energía para que se lleve a cabo y el tiempo de duración del proceso está asociado con el suministro de energía térmica [7]. En la figura 1.2, se muestra un esquema de la descomposición de la biomasa durante la pirólisis, en el cual se aprecian de forma esquemática las reacciones presentes durante el proceso y los productos obtenidos.



Figura 1.2. Esquema de la descomposición termoquímica de biomasa [24].

Este es un proceso complejo que involucra múltiples reacciones, incluyendo aspectos de transferencia de calor y masa, resultando en la liberación de partículas de mezclas orgánicas e inorgánicas de gases y líquidos hacia el ambiente [25]. La liberación provocada es debido al incremento de la temperatura de la partícula. Usualmente, la pirólisis inicia cuando la partícula de carbono alcanza temperaturas justo por encima a las de proceso de secado,

aproximadamente 117 °C [26]. Las temperaturas empleadas para pirólisis de carbón o biomasa pueden alcanzar 700 °C [26].

1.3.3. Oxidación o gasificación

La oxidación es el proceso siguiente a la pirólisis en los reactores de gasificación de flujo concurrente. La reacción producida es una combustión controlada del producto carbonoso o char proveniente de la pirólisis. Este proceso es exotérmico, por lo cual sustenta las reacciones endotérmicas de la gasificación que se producen en la región de pirólisis y de reducción [27], por tanto, la temperatura en esta zona aumenta considerablemente hasta unos 1000 a 1200 °C [15]. La oxidación se controla mediante la aportación exacta de aire u oxígeno en el gasificador a fin de generar una combustión incompleta.

Los productos que se obtienen en esta región son el H_2O y CO_2 a partir de la combustión del combustible y los elementos creados en la pirólisis como los hidrocarburos pesados, el H_2 o alquitranes [27].

1.3.4. Reducción

En la reducción se producen todas aquellas reacciones que generan el gas de síntesis en su composición final, esta etapa se produce simultáneamente y después de la oxidación. La reducción es la más compleja de todas las etapas, envuelve reacciones químicas entre HC, H_2O , CO_2 , O_2 y H_2 , así como entre los gases desprendidos [27].

Este proceso permite el enfriamiento de los gases, lo que elimina la mayoría del carbón y mejora la calidad del gas. Este carbón se degrada por la acción de los gases hasta convertirse en un polvo fino o cenizas. Por lo general en la zona de reducción se manejan rangos de temperatura entre 600 a 900 °C [15].

En la figura 1.3 se presenta un resumen de los procesos que ocurren en la gasificación, así como sus respectivas reacciones.



Figura1.3. Etapas de la gasificación [14].

1.4. Modelación de la gasificación

Los métodos numéricos aplicados en la dinámica de fluidos computacional se pueden utilizar para describir estos procesos de degradación de biomasas en componentes más simples. Estos

se han convertido en una importante herramienta de análisis y diseño para lograr describir los patrones de flujo y temperatura, la concentración de los productos y los rendimientos de la gasificación [28].

La comprensión de la interacción entre los mecanismos químicos y físicos durante la gasificación es de fundamental importancia para el diseño óptimo de un gasificador de biomasa [29]. En vista del gran interés en las ventajas del proceso de gasificación, es necesario modelar y predecir el rendimiento del gasificador para mejorar los diseños y resolver problemas operativos.

Los modelos CFD de sistemas de gasificación constituidos por fases gas-sólido pueden ser clasificados en dos enfoques, según se trate la fase de partículas: el método de elementos discretos basado en el método Euleriano-Lagrangiano y el método continuo basado en el método Euleriano-Euleriano o modelo de dos fluidos. Ambos métodos consideran la fase gaseosa como una fase continua, la diferencia fundamental entre estos dos modelos radica en la forma en que se tratan las partículas [30].

El enfoque Euleriano-Lagrangiano describe la fase sólida a nivel de partículas (representación de masas puntuales). En esta representación la partícula es mucho más pequeña que el espaciamiento del mallado sobre el cual la velocidad del gas es calculada, sin presentar influencia en el dominio del gas o su discretización. Las técnicas de masas puntuales se utilizan para modelar un gran número de partículas sin tomar en cuenta aspectos hidrodinámicos específicos de la interfase gas-sólido [30].

12

El enfoque Euleriano-Euleriano por su parte trata las partículas como un medio continuo, formando ambas fases un continuo interpenetrante. Debido a la representación continua de las partículas este enfoque requiere leyes de cierre adicionales para describir la reología de la fase de partículas [30].

La teoría cinética de flujos granulares se utiliza comúnmente en el enfoque Euleriano-Euleriano para obtener relaciones constitutivas para la fase sólida. Esta teoría se basa en el concepto de temperatura granular, lo cual es la medida de las oscilaciones aleatorias de las partículas [31].

El enfoque Euleriano-Euleriano presenta varias ventajas sobre el enfoque Euleriano-Lagrangiano, siendo la principal el consumo de recursos computacionales, el cual es menor en el enfoque Euleriano-Euleriano; adicionalmente, el mallado, consumo de memoria y requisitos computacionales son optimizados empleando este enfoque en una modelación numérica [30].

1.5. Modelación matemática

1.5.1. Modelo de balance de masa

_

Las ecuaciones de continuidad para la fase gaseosa y sólida están dadas por [32]:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_g \rho_g) + \nabla (\alpha_g \rho_g \nu_g) = S_{gs} \tag{1}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s \rho_s) + \nabla(\alpha_s \rho_s \nu_s) = S_{sg}$$
⁽²⁾

 $\begin{array}{l} \alpha_g: \mbox{ fracción volumétrica de la fase gaseosa (cm³)} \\ \alpha_s: \mbox{ fracción volumétrica de la fase sólida (cm³)} \\ \rho_g: \mbox{ densidad de la fase gaseosa (g/cm³)} \\ \rho_s: \mbox{ densidad de la fase sólida (g/cm³)} \\ \nu_g: \mbox{ velocidad instantánea de la fase gaseosa (m/s)} \\ \nu_s: \mbox{ velocidad instantánea de la fase sólida (m/s)} \\ S_{gs, sg}: \mbox{ fuente de masa debido a las reacciones heterogéneas (g), se expresa como [32]:} \\ \end{array}$

$$S_{sg} = -S_{gs} = M_C \sum \gamma_C R_C \tag{3}$$

donde:

 M_C : peso molecular de especies químicas (mol) γ_C : coeficiente estequiométrico (adimensional) R_C : tasa de reacción (mol/L·s)

La densidad de la fase gaseosa se determina a partir del comportamiento de un gas ideal,

descrito por [32]:

$$\frac{1}{\rho_g} = \frac{RT}{p} \sum_{i=1}^n \frac{Y_i}{M_i} \tag{4}$$

donde:

R: constante universal de los gases (8,3145 [J/mol·K]) p: presión del gas (Pa) ρ_g : densidad de la fase gaseosa (g/cm³) T: temperatura promedio de la mezcla de gases (K) Y_i : fracción másica de la especie i (mol) M_i : peso molecular de la especie i (mol)

1.5.2. Modelo de conservación de momento

La ecuación de momentum de la fase gaseosa está dada por [32]:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g\rho_g\nu_g) + \nabla(\alpha_g\rho_g\nu_g\nu_g) = -\alpha_g\nabla p_g + \alpha_g\rho_g g + \beta(\nu_g - \nu_s) + \nabla\alpha_g\tau_g + S_{gs}U_s$$
(5)

U_s: velocidad promedio del sólido (m/s) β: coeficiente de arrastre de la interfase gas-sólido (adimensional) τg: esfuerzo tensor de fase gaseosa (N)

La ecuación de momentum de la fase sólida se expresa como [32]:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s\rho_s\nu_s) + \nabla(\alpha_s\rho_s\nu_s\nu_s) = -\alpha_s\nabla p_s + \alpha_s\rho_sg + \beta(\nu_g - \nu_s) + \nabla\alpha_s\tau_s + S_{sg}U_s$$
(6)

donde:

 p_s : presión de las partículas debido a las colisiones (Pa) τ_s : esfuerzo tensor de la partícula (N)

1.5.3. Modelo de turbulencia

En un flujo turbulento, existe una cascada de energía correspondiente a un amplio rango de escalas de longitud de los remolinos más grandes a los remolinos más pequeños [33]. Por lo tanto, la simulación numérica 100% precisa de un flujo turbulento con un alto número de Reynolds en un moderno horno, caldera o gasificador es prácticamente imposible, incluso con la capacidad actual de las computadoras [34].

Launder y Spalding [35], desarrollaron el modelo κ - ϵ estándar derivado de las ecuaciones de Reynolds promedio de Navier-Stokes. Mediante análisis dimensional, la viscosidad turbulenta μ_t puede ser asumida como [36]:

$$\mu_t = C_\rho V L$$

 C_{ρ} : constante adimensional V: velocidad turbulenta (m/s) L: longitud turbulenta (m)

De acuerdo al análisis dimensional, la escala de velocidad turbulenta (V) y la escala de longitud (L), pueden ser definidas como [34]:

(7)

$$V = \kappa^{\frac{1}{2}} \qquad y \qquad L = \frac{\kappa^{\frac{2}{3}}}{\varepsilon} \tag{8}$$

donde:

κ: energía cinética turbulenta (m²/s²) ε: tasa de disipación de energía cinética turbulenta (m²/s³)

De esta manera la viscosidad turbulenta puede ser evaluada mediante κ y ϵ como [37]:

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{\kappa^2}{\varepsilon} \tag{9}$$

donde:

 C_{μ} : constante adimensional.

En el modelo κ - ε estándar los valores de κ y ε pueden obtenerse empleando las siguientes ecuaciones de transporte [32]:

$$\frac{\partial(\rho\kappa)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i \kappa)}{\partial X_i} = \frac{\partial}{\partial X_i} \left[\left[\mu + \frac{\mu_t}{\delta_k} \right] + \frac{\partial\kappa}{\partial x_i} \right] - G_k + G_b - \rho\varepsilon$$
(10)

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i\varepsilon)}{\partial X_i} = \frac{\partial}{\partial X_i} \left[\left[\mu + \frac{\mu_t}{\delta_\varepsilon} \right] + \frac{\partial\varepsilon}{\partial x_i} \right] - C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{\kappa} (G_\kappa + (1 - C_{3\varepsilon})G_b) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{\kappa}$$
(11)

 G_{κ} : generación de κ debido a la tensión turbulenta (adimensional) tal que [32]:

$$G_{\kappa} = \left(-\rho u_{i} u_{j}\right) \frac{\partial u_{j}}{\partial X_{i}} = \tau_{ij} \frac{\partial u_{j}}{\partial x_{i}}$$
(12)

Este modelo es ampliamente utilizado en problemas ingenieriles de flujo turbulento, principalmente por ser un modelo robusto, económico y razonablemente preciso [38]. La selección de este modelo de turbulencia es apropiada cuando la transferencia de turbulencia entre fases desempeña un papel predominante, como en el caso de la gasificación en lechos fijos.

1.5.4. Modelo Euleriano granular

En el modelo Euleriano granular, los esfuerzos en la fase sólida granular se obtienen por la analogía entre el movimiento aleatorio de las partículas y el movimiento térmico de las moléculas dentro de un gas, lo que explica la inelasticidad de las partículas sólidas [39]. Esta aproximación del comportamiento entre las fases es la razón para el amplio uso de la teoría cinética de flujos granulares para modelar el movimiento de las partículas [40].

En un gas, la intensidad de la fluctuación de la velocidad determina los esfuerzos, la viscosidad y la presión de la fase granular, la energía cinética asociada con las fluctuaciones de velocidad se describen por una temperatura pseudo-térmica o por una temperatura

granular que es proporcional a las fluctuaciones de velocidad de las partículas, es decir, la temperatura de un medio granular es función de la cantidad de movimiento de sus componentes [40].

La ecuación de conservación para la temperatura granular, obtenida a partir de la teoría cinética de los gases, está dada por [32]:

$$\frac{3}{2} \left[\left(\frac{\partial(\rho_s \alpha_s \theta_s)}{\partial(t)} + \nabla(\rho_s \alpha_s \overrightarrow{v_s} \theta_s) \right) \right] = (-p_s \overline{I} + \overline{\tau_s}) : \nabla(\overrightarrow{v_s}) + \nabla \left(k_{\theta_a} \nabla(\theta_s) \right) - \gamma_{\theta_a} + \phi_{ls} \quad (13)$$

donde:

 $\begin{array}{l} \left(-p_{s}\bar{I}+\overline{\tau_{s}}\right):\nabla(\overline{\nu_{s}}): \text{ generación de energía por los esfuerzos en el sólido (J)} \\ k_{\theta_{a}}\nabla(\theta_{s}): \text{ energía de difusión (J)} \\ k_{\theta_{a}}: \text{ coeficiente de difusión (cm^{2}/s)} \\ \gamma_{\theta_{a}}: \text{ disipación por colisiones de la energía (J)} \\ \emptyset_{ls}: \text{ intercambio de energía entre la fase gaseosa y la fase sólida (J)} \end{array}$

1.5.5. Modelo de reacciones químicas

El transporte de especies es una herramienta útil para predecir los tiempos de reacción o reacciones químicas. Para la especie "i", la ecuación de conservación para la fracción de masa de esa especie, está dado de la siguiente forma [41]:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho m_{i'}) + \frac{\partial p}{\partial X_i}(\rho U_i m_i) = \frac{\partial}{\partial X_i} J_{j',i} + R_{i'} + S_{i'}$$
(14)

donde:

 $J_{j',j}$: componente "i" del flujo de difusión de la especie j´ en la mezcla

 $R_{i'}$ velocidad a la que las especies se consumen o se producen en una o más reacciones (mol/L \cdot s) [36]

 $J_{j',i}$ está relacionado con el coeficiente de difusión y el gradiente de concentración de la especie [42]. Cuando dos o más especies están presentes, la suma de las fracciones de masa en cada célula debe de ser 1. Por esta razón, si "n" especies están involucradas en la simulación, solo n-1 ecuaciones de especies son necesarias para resolverlas. La fracción de masa de "n" especies se puede calcular a partir de la siguiente condición [37]:

$$\sum_{i}^{n} m_{i'} = 1 \tag{15}$$

Las reacciones volumétricas en el transporte de especies se pueden modelar mediante herramientas CFD, empleando el modelo de disipación de remolinos, el cual supone que las tasas de reacción se controlan por la turbulencia del sistema [43].

El modelo de disipación de remolinos se basa en el concepto de que la reacción química es rápida con respecto al transporte en el flujo [17]. Cuando los reactivos se mezclan a nivel molecular forman instantáneamente producto, el modelo supone que la tasa de reacción puede estar relacionada directamente al tiempo requerido para mezclar los reactivos a nivel molecular [44].

Este modelo considera una relación entre la tasa de reacción, la tasa de disipación de reactantes y productos contienen remolinos, sugiriendo que la velocidad de reacción puede ser la menor de las dos siguientes expresiones [44] :

$$R_{i',\kappa} = v_{i',k} M_{i'} A \rho \frac{\varepsilon}{\kappa} \frac{m_R}{V_{R',k} M_p}$$
(16)

$$R_{i',\kappa} = v_{i',k} M_{i'} A B \rho \frac{\varepsilon}{\kappa} \frac{M_p}{V_{R',k} M_p}$$
(17)

 M_p :fracción de masa de las especies P producidas (mol) m_R : fracción de masa de las especies R reactantes (mol) A, B: constantes empíricas iguales a 4,0 y 0,5 respectivamente (adimensional) ϵ/K : escala de tiempo de los remolinos turbulentos (1/s)

Aunque el modelo de disipación de remolinos es computacionalmente demandante, es un modelo robusto y menos demandante en los datos de entrada necesarios para su implementación [17].

1.5.6. Conservación de energía

Para describir la conservación de energía se debe resolver la siguiente ecuación de entalpía para cada fase [32]:

$$\frac{\partial(\alpha_q \rho_q h_q)}{\partial(t)} + \nabla \left(\alpha_q \rho_q \overrightarrow{u_q} h_q\right)$$
$$= -\alpha_q \frac{\partial(p_q)}{\partial(t)} + \overline{\tau_q} : \nabla(\overrightarrow{u_q}) - \nabla \overrightarrow{q_q} + S_q + \sum_{p=1}^n \left(\overrightarrow{Q_{pq}} + \dot{m}h_{pq} - \dot{m}h_{qp}\right) \quad (18)$$

donde:

 $\begin{array}{l} h_q : \mbox{entalpía especifica de la fase q^{th} (kJ/mol)} \\ \overrightarrow{q_q} : \mbox{flujo de calor (W/m^2)} \\ S_q : \mbox{término producto de las reacciones químicas (mol)} \end{array}$

 Q_{pq} : transferencia de calor entre las fases pth y qth (W) h_{pq} : entalpía de la interfase (kJ/kg)

La tasa de transferencia de energía es asumida como función de la diferencia de temperaturas entre las fases [32]:

$$Q_{pq} = h_{pq} \left(T_p - T_q \right) \tag{19}$$

donde:

 h_{pq} : coeficiente de transferencia de calor entre la fase gaseosa p^{th} y la fase sólida $q^{th}\,(W\!\cdot\!m^{-2}\!\cdot\!K^{-1})$

Siempre que la convección sea el principal mecanismo de transferencia de calor dentro del reactor, el coeficiente de transferencia de calor estará relacionado con el número de Nusselt en la fase qth por [32]:

$$h_{pq} = \frac{6k_p \alpha_q \alpha_p N u_q}{d_p^2} \tag{20}$$

donde:

 $k_p: \ \text{conductividad térmica de la fase } p^{\text{th}} (W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}) \\ \alpha_p: \ \text{difusividad térmica de la fase gaseosa } (m^2/s) \\ \alpha_q: \ \text{difusividad térmica de la fase sólida } (m^2/s) \\ Nu_q: \ \text{número de Nusselt (adimensional)} \\ d_p: \ \text{longitud característica } (m)$

El gasificador utilizado para la investigación fue el reactor de lecho fijo de flujo concurrente mostrado en la figura 2.1, diseñado y construido por la Unidad de Recursos Forestales del Instituto de Investigaciones en Ingeniería (INII).



Figura 2.1. Reactor de gasificación de flujo concurrente.

Se realizaron tres variaciones en el flujo másico de aire ingresado al gasificador, así como tres variaciones en la posición de inyección del mismo, según se describe en la sección 2.2.1 y 2.2.5. Las nueve configuraciones propuestas, fueron utilizadas para su respectiva

modelación numérica, donde, patrones de flujo, temperatura y generación de especies químicas fueron analizados, con el objetivo de validar la configuración más eficiente en cuanto a la operación y comportamiento del reactor.

2.1. Reactor de gasificación modelado

En la figura 2.2 se muestra una vista en corte del esquema general del reactor de gasificación. El diseño del reactor se basó en la capacidad de mantener una producción energética constante de 15 kW. El cuerpo principal del reactor lo componen tres etapas. En la etapa superior se da el ingreso de biomasa al reactor así como la inyección de aire al sistema. El gasificador cuenta con un sistema de alimentación automatizado mediante un sistema de tornillo sin fin, el cual ingresa la biomasa al reactor desde una tolva de alimentación.

Figura 2.2. Vista en corte de reactor de gasificación.

Aún en la etapa superior, el ingreso de aire al gasificador se da por medio de una configuración de tres toberas radiales (figura 2.3). Estas inyectan aire ambiente propulsado por un ventilador externo.

Figura 2.3. Tobera de alimentación de aire ambiente al reactor.

En la zona media del reactor se da la reducción del área transversal por medio de una garganta interna, necesaria para los procesos de pirólisis y gasificación, además, en esta zona se ubica la salida del gas de síntesis producido. En la etapa inferior se da la extracción de sólidos, tales como biomasa gasificada y ceniza.

La geometría establecida para el desarrollo de la modelación numérica se detalla en la figura 2.4, donde se definió el interior del gasificador como un cuerpo sólido, con el propósito de indicar las condiciones de porosidad propias de la biomasa. Las entradas de aire en la tobera y la garganta ubicadas en el interior del medio poroso se establecieron como cuerpos vacíos, a fin de que el software de modelación reconozca estos cuerpos como límites físicos en la geometría. Las dimensiones del reactor de gasificación se muestran en la figura 2.5.

Figura 2.4. Modelo geométrico del gasificador de flujo concurrente.

Figura 2.5. Dimensiones características del gasificador de flujo concurrente.
2.2. Dominio de la modelación

La generación de mallados y modelación fluido-dinámica del reactor de gasificación de flujo concurrente se realizó utilizando el software computacional de dinámica de fluidos Fluent[®] de ANSYS Workbench © 18.0. En el proceso de gasificación se da la liberación de compuestos volátiles a determinados rangos de temperatura, una vez estabilizado el reactor, empleando tasas de ingreso de aire y biomasa constantes, la producción de estos compuestos químicos tiende a ser estable en el tiempo, estas condiciones permiten trabajar la modelación del reactor en estado estacionario.

Todas las simulaciones se realizaron en un computador Dell® de 64 GB de memoria RAM y un procesador Intel® Xeon® de diez núcleos, propiedad de la Escuela de Ingeniería de Biosistemas de la Universidad de Costa Rica.

La figura 2.6 presenta el esquema de trabajo seguido para establecer el modelo numérico que describe el comportamiento físico-químico del reactor de gasificación.

2.2.1 Dominio de trabajo

La determinación del dominio de trabajo se basó en establecer los límites físicos que interactúan en el modelo geométrico destacado en la figura 2.7. Dichos límites físicos determinan la entrada y salida de diversos flujos al dominio del reactor de gasificación. En cuanto a las entradas, se definió la superficie superior del reactor como la entrada de biomasa en forma de pellets, el ingreso de aire al reactor se da por las tres superficies radiales ubicadas



Figura 2.6. Diagrama de flujo del proceso de modelación numérica del reactor de gasificación.

en la tobera. En el dominio de trabajo se presenta una única salida, por la cual se da la migración de los compuestos volátiles generados durante la gasificación, salida que se definió en la superficie indicada en la figura 2.5 como salida de gas de síntesis.



Figura 2.7. Modelo geométrico empleado en la modelación fluido computacional.

La posición en la cual se inyecta el agente gasificante en el interior del gasificador es de los aspectos más importantes que determinan la eficiencia de un reactor. Esta característica es responsable de la generación o inhibición de los procesos químicos ocurridos en la gasificación, primordialmente, el lugar en el que se ingrese el aire afecta directamente los patrones de temperatura dentro del reactor, promoviendo en mayor o menor medida la

liberación de especies químicas que componen el gas de síntesis, por ende la capacidad energética del mismo.

La premisa anterior es la principal razón por la cual la posición en la que se ingresa el aire es una de las variables de estudio de esta investigación.

Tres distintas configuraciones de ubicación de toberas fueron evaluadas, variándose la posición en la cual se introduce el aire, esto se ejemplifica en la figura 2.8, la configuración a) corresponde a la posición original con la cual se diseñó y construyó el reactor, la posición b) propone ingresar el aire en la zona de transición entre las etapas de pirólisis y oxidación, la configuración c) se estableció con el objetivo de inyectar el aire directamente a la zona de oxidación.



Figura 2.6. Variaciones en la posición del ingreso de aire establecidas.

2.2.2 Discretización del dominio

La discretización del dominio se basó en el método de volúmenes finitos, mediante la descomposición del dominio en pequeños volúmenes de control generándose una malla tridimensional de nodos. El método de volúmenes finitos considera los principios de conservación de masa, momento y energía, los cuales son la base de la modelación matemática fluido-dinámica.

La precisión de la solución obtenida está directamente ligada a la cantidad de elementos que componen el mallado, razón por la cual es necesario realizar un estudio de mallas. Este estudio se basa en determinar el número de elementos necesarios para obtener una solución real del fenómeno estudiado, un mallado con más elementos implicaría aumentar el tiempo de resolución y el consumo de recursos computacionales para obtener un mismo resultado.

La convergencia de la prueba de mallas fue analizada tomando como parámetro la fracción másica de metano presente en el gas de síntesis a la salida del reactor, esta especie química fue seleccionada debido a que la calidad y poder energético del gas de síntesis se basan en gran medida en la concentración y niveles de producción de metano. Fueron analizadas seis configuraciones de mallas en total para la investigación, realizando incrementos del 20% en el número de elementos en una malla respecto a la anterior.

En cuadro 2.1 se presenta el número de nodos y elementos respectivos a cada malla generada para el estudio. La eficiencia del mallado se basó en dos parámetros de calidad, la oblicuidad y la ortogonalidad, parámetros que rigen la calidad de los resultados obtenidos de la modelación numérica. La oblicuidad indica que tan cercano está un elemento de acercarse a una cara ideal, valores cercanos a 0 indican una oblicuidad excelente, por otra parte, la ortogonalidad indica que tan congruentes están las transiciones entre un elemento y otro, un valor de ortogonalidad cercano a 1 precisa una alta calidad. Ambos valores se obtienen del software al momento que se genera el mallado.

Malla	Nodos	Elementos
Malla 1	20910	112828
Malla 2	26038	141808
Malla 3	32648	178160
Malla 4	39160	210792
Malla 5	47849	255167
Malla 6	57194	304728

Cuadro 2.1. Análisis de mallas empleadas en el estudio.

2.2.3. Modelos físicos

- Modelo de turbulencia

La elección del modelo de turbulencia depende de consideraciones como el modelo físico estudiado, el nivel de precisión requerido, los recursos computacionales disponibles y la cantidad de tiempo disponible para la simulación [31]. Se implementó el modelo de turbulencia κ - ϵ en todos escenarios establecidos para modelación, este modelo es estable, preciso y numéricamente robusto.

Funciones mejoradas en la pared propias del modelo de turbulencia se establecieron para resolver las ecuaciones en las celdas cercanas a estos límites físicos, donde estas se vuelven más finas.

- Modelo multifásico

El enfoque Euleriano-granular se utilizó para representar la fase de compuestos volátiles y la fase porosa del lecho de biomasa. En condiciones de estado estacionario, este modelo describe adecuadamente el comportamiento de los flujos en una mezcla sólido-fluido, en adición, este modelo requiere menos tiempo computacional en comparación al método Lagrangiano [45]. La adaptación del modelo multifásico a las condiciones físico-químicas del proceso de gasificación que se están analizando se resumen en la figura 2.9.



Figura 2.7. Diagrama de implementación del modelo multifase en el proceso de simulación.

- Modelo de especies

El modelo de transporte de especies se incluyó en la modelación numérica para representar la generación y consumo de las distintos compuestos químicas que interactúan en la dinámica de gasificación. La interacción entre los procesos químicos y el grado de turbulencia en el interior del reactor se manejó con el modelo de disipación de remolinos. Donde se suponen que las velocidades de reacción de las distintas especies se controlan por la turbulencia del flujo [31], este método requiere una capacidad computacional menor que otros métodos, como por ejemplo la cinética química de Arrhenius.

El cuadro 2.2 presenta las reacciones homogéneas integradas al modelo de transporte de especies [44], reacciones que representan la liberación y consumo de compuestos químicos, dependiendo de la fase de gasificación en la cual se encuentren las partículas.

Reacción 1	Volátiles de pellets→0,6CO+0,254CO ₂ +0,146CH ₄ +1,238H ₂
Reacción 2	$CO+H_2O+0,5O_2\rightarrow CO_2+H_2O$
Reacción 3	$CH_4+1,50_2 \rightarrow CO+2H_2O$
Reacción 4	H_2 +0,50 $_2$ → H_2 O
Reacción 5	$H_2O+CO\rightarrow H_2+CO_2$

Cuadro 2.2. Reacciones químicas establecidas en el modelo de transporte de especies.

2.2.4. Caracterización de materiales

Como parte de la mezcla de pellets de aserrín y aire correspondiente a la fase granular, fue necesario establecer parámetros físicos que identificaran a los pellets de aserrín como la

materia prima para llevar a cabo el conjunto de reacciones químicas que dan paso a la generación del gas de síntesis.

Para la caracterización de este material, se tomó como referencia los datos generados por Carrillo [46], en su estudio de propiedades físico-químicas de pellets elaborados a partir de residuos de aserradero. El cuadro 2.3 presenta propiedades físicas y térmicas que se emplearon para caracterizar el material durante la modelación numérica.

Cuadro 2.3. Propiedades físicas y térmicas de los pellets elaborados a partir de residuos de aserradero [46].

Caracterización de pellets de aserrín			
Densidad real (kg/m ³)	1105,04		
Densidad aparente (kg/m ³)	552,3		
Calor específico (kJ/kg·K)	2,183		
Conductividad térmica (W/m·K)	0,279		
Porosidad (%)	50,02		

2.2.5. Condiciones de frontera

Las condiciones de frontera se encargan de especificar las variables de flujo, químicas y térmicas en los límites del modelo físico. Las características del modelo físico con el cual se está trabajando requieren establecer diversas entradas y salidas de los distintos flujos másicos que interactúan en el reactor.

La condición de flujo másico se empleó para definir el flujo de entrada en cada punto de ingreso de la tobera, así como en el puerto de ingreso de biomasa al reactor, especificando el caudal másico y temperatura de ingreso de los flujos al reactor. Se emplearon tres distintos flujos másicos de aire en las modelaciones realizadas, la cantidad de aire a ingresar al reactor

se basó en los estudios experimentales realizados por Guangul et al [47] en un gasificador de flujo concurrente, de condiciones similares a las están tratando en el presente estudio.

Se estableció un caudal de 400 l/min como el flujo base para que se presenten las condiciones necesarias para el proceso de gasificación, Guangul et al [47] indican que ingresando esta cantidad de aire al reactor se mantuvieron condiciones estables para la producción de syngas. De manera complementaria, estos autores trabajaron con caudales de 300 y 500 l/min. Guangul et al [47] concluyeron estos caudales como los rangos límites para que se llevasen a cabo los procesos termoquímicos en el reactor de gasificación.

Planteados los caudales de aire y las respectivas posiciones de ingreso de agente gasificante que compararan durante el estudio CFD, se obtienen un total de 9 diferentes casos de estudio; a fin de simplificar la comprensión de los resultados se utilizará la notación descrita en la tabla 2.4.

Caso	Posición de tobera (cm)	Caudal (l/min)
Ι		300
II	3	400
III		500
IV		300
V	10	400
VI		500
VII		300
VIII	20	400
IX		500

Cuadro 2.4. Casos de estudio planteados para la modelación numérica del reactor de gasificación.

El flujo másico de alimentación de pellets se estableció con base a la teoría expuesta por Sheth & Babu [48], dichos autores indican que es necesario ingresar 1 kg de residuos madereros por cada 5,22 m³ de aire inyectado al reactor, esto con el fin de mantener la relación de equivalencia óptima para una adecuada gasificación. Esta relación estequiométrica se empleó para definir el flujo másico de pellets al presentarse las tres variaciones en el caudal del agente gasificante, en las distintas modelaciones numéricas desarrolladas.

Como se indicó anteriormente, el reactor de gasificación presenta una única salida por la cual el escape de los distintos compuestos volátiles que conforman el gas de síntesis. Se estableció la condición de salida de presión como condición de frontera en este límite, está condición permite fijar un valor de presión a la salida del reactor, facilitando la convergencia de los modelos al evitarse los flujos reversos en el reactor.

2.2.6. Parámetros de solución

El resultado del proceso de discretización es un conjunto finito de ecuaciones algebraicas que necesitan ser resueltas de manera simultánea en cada celda en el dominio de solución, un procedimiento de solución iterativa es necesario debido a la no linealidad de las ecuaciones que rigen el flujo de fluidos y los procesos relacionados [49]. Dos métodos de solución son comúnmente usados, el método acoplado y el segregado. Un enfoque de solución segregado es aquel en el que se resuelve una variable a la vez en todo el dominio, un enfoque de solución acoplado, por otro lado, es donde todas las variables se resuelven de manera simultánea en

una sola celda antes de que el solucionador se mueva a la siguiente celda, donde se repite el proceso [42].

A partir del esquema de solución acoplado se obtiene una solución más robusta y eficiente para los flujos en estado estacionario [31], particularmente para flujos multifásicos, premisa por la cual se seleccionó este método como algoritmo de resolución de las modelaciones planteadas. El cuadro 2.4 indica el método de solución seleccionado para cada variable en la discretización espacial del modelo.

Variable	Método	
Gradiente	Celda basada en mínimos cuadrados	
Momento	Primer orden-Upwind	
Fracción volumétrica	Primer orden-Upwind	
Energía cinética turbulenta	Segundo orden- Upwind	
Tasa de disipación turbulenta	Segundo orden- Upwind	
Especies en fase 1	Segundo orden- Upwind	
Especies en fase 2	Segundo orden- Upwind	

Cuadro 2.5. Métodos de solución empleados en el método numérico.

2.3. Comparación estadística del modelo numérico

La comparación estadística del modelo se realizó respecto a las fracciones másicas de las especies químicas que componen el gas de síntesis obtenido, y comparándolas con la composición del gas de síntesis reportado en diversas investigaciones de reactores de gasificación de lecho concurrente [17, 39, 52, 53, 54, 55, 56]. Estos estudios presentan similitudes en las condiciones en las cuales se desarrolló la presente modelación numérica.

Los estudios se seleccionaron en función de que todos realizan modelaciones numéricas en reactores de gasificación de flujo concurrente en estado estacionario [17, 39, 52, 53, 54, 55, 56]. Babu & Sheth [17], Couto [39], Couto, Silva, Monteiro & Rouboa [52] y Gerun, Bellettre & Tazerout [56] realizaron simulaciones numéricas empleando modelos matemáticos utilizados en la presente investigación, incluyendo, conservación de masa, momento y energía, modelo de turbulencia κ - ϵ , modelo multifásico Euleriano-granular y el modelo de transporte de especies.

Gagliano, Nocera, Patania, Bruno & Castaldo [53] y Gerun, Bellettre & Tazerout [56], realizaron las modelaciones en el reactor de gasificación empleando como biomasa pellets de residuos de aserradero, biomasa empleada en esta investigación.

Por otra parte, Meenaroch, Kerdsuwan & Laohalidanond [54] realizaron variaciones en la modelación numérica empleando distintos caudales de aire ingresado al reactor, empleando un rango de 300 a 450 l/min, caudales similares a los empleado en este estudio.

La fiabilidad del modelo numérico generado se examinó empleando la raíz del error medio cuadrático, recomendado para estudiar la precisión en modelos de dinámica de fluidos computacional [50], la ecuación de dicho error se muestran en la ecuación 21.

Errores menores a un 10% son considerados aceptables para el caso de modelos numéricos que simulen condiciones de combustión y/o gasificación [51].

$$REMC = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (y_{mod,i} - \bar{y}_{dato})^2}$$

donde:

n: cantidad de datos

 \overline{y}_{dato} : promedio de los datos medidos en distintas investigaciones realizadas $y_{mod,i}$: valor obtenido de la simulación

(21)

3.1. Discretización del dominio

Un total de 6 mallados con distintos números de elementos fueron analizados durante el estudio realizado, con el objetivo de optimizar los resultados de modelación a un menor consumo de recursos computacionales y un menor tiempo de convergencia de los parámetros analizados. La optimización del número de elementos del mallado se determinó a partir de los resultados de la fracción másica de metano presente en el gas de síntesis, dichos resultados se muestran en el cuadro 3.1.

	del mallac	lo.		
Malla	Elementos	Fracción másica de CH4	Oblicuidad	Ortogonalidad
1	112828	$0,04960\pm0,00020$	$0,22800\pm0,12600$	$0,86000 \pm 0,08800$
2	141808	$0,04900 \pm 0,00018$	$0,23000\pm0,12400$	$0,85900 \pm 0,08700$
3	178160	$0,04840 \pm 0,00021$	$0,22900\pm0,12300$	$0,85900 \pm 0,08600$
4	210792	$0,04840\pm0,00020$	$0,22700\pm0,12200$	$0,85900 \pm 0,08500$
5	255167	0,04830±0,00019	$0,22300\pm0,12000$	$0,86100\pm0,08400$
6	304728	$0,04830\pm0,00022$	$0,22100\pm0,12000$	$0,86200 \pm 0,08400$

Cuadro 3.1. Variación en la fracción másica de metano al modificar el número de elementos del mallado.

En el cuadro 3.1 se detallan los resultados obtenidos en el estudio de mallas planteado, estudio que se realizó analizando el comportamiento en la variación de la fracción másica de metano al aumentarse el número de elementos que conformaban el mallado del modelo geométrico. Se observa que a partir de los 210792 elementos el metano no varía de manera significativa su fracción másica en el gas de síntesis, garantizándose la convergencia de las soluciones, comportamiento que se ejemplifica de manera más clara en la figura 3.1.



Figura 3.1. Convergencia de la fracción másica de metano al aumentarse el número de elementos en los mallados.

De este estudio se concluye que a partir de esta cantidad de elementos las soluciones de las ecuaciones matemáticas que modelan el comportamiento termoquímico del reactor son lo suficientemente exactas para describir el proceso de gasificación a simular.

Para el mallado seleccionado en el estudio fluido-dinámico se obtuvo un valor promedio de oblicuidad de 0,227±0,122, valor considerado como bueno, según el manual de usuario de Fluent[®] [31]. Por otra parte, se obtuvo un valor promedio de 0,859±0,085 en la ortogonalidad del mallado, considerado como un valor muy bueno [31]. Con base a estos dos parámetros se garantiza que el mallado generado cuenta con la calidad óptima para representar eficientemente el comportamiento interno del reactor de gasificación.

3.2. Comportamiento dinámico y térmico en el reactor de gasificación en función de la posición de ingreso del agente gasificante

Este apartado analiza el comportamiento obtenido con las líneas de flujo de especies volátiles en el gasificador de flujo concurrente. Para analizar el efecto de la posición se discuten los casos II, V y VII (3, 10 y 20 cm respectivamente, a un caudal constante de 400 l/min). La distribución del flujo de compuestos volátiles en el interior del reactor rige la dinámica de gasificación, dictando entre otros parámetros la distribución de temperaturas y la generación de especies químicas que componen el gas de síntesis.

En la figura 3.2 se presenta la distribución espacial de velocidades del flujo de especies volátiles generales para el caso II. De este caso se observa la rápida disipación de la velocidad del flujo de aire ingresado al reactor, producto del lecho poroso de pellets que se encuentra en el interior del reactor, a la vez, el flujo se direcciona del manera frontal hacia las paredes del reactor, reduciendo de manera significativa la velocidad del flujo al colisionar con la misma.

La colisión del flujo de aire de manera directa con las paredes del reactor provoca la recirculación del flujo en esta zona, generando el aumento de la turbulencia en la zona superior del gasificador, turbulencia representada de manera gráfica por la generación de remolinos en los estratos superiores del reactor.

El flujo de volátiles tiende a estabilizarse por la interacción con las partículas sólidas de biomasa, disminuyendo paulatinamente su velocidad e implicando que el flujo descienda por la garganta del reactor producto de la caída de presión que se da en la zona de salida de gas de síntesis. Durante este trayecto acontecen una serie de reacciones heterogéneas y homogéneas que dan lugar a la formación del gas de síntesis. A medida que el gas de síntesis se aproxima a la salida del reactor, se presenta un aumento gradual (0 a 16 m/s) en la velocidad del flujo, producto del cambio de presión en esta zona.



Figura 3.2. Distribución de velocidad y patrones de líneas de flujo de la fase de volátiles en el lecho poroso de pellets para el caso II.

El efecto de la turbulencia y una mayor interacción del aire en la zona superior del reactor provoca una mayor reacción entre la fase gaseosa y el lecho sólido de pellets, implicando un aumento directo de la temperatura en esta zona, donde se alcanza una temperatura máxima de 1050 °C, este efecto que se ilustra en la figura 3.3, donde se muestra la distribución de temperaturas en el lecho poroso. La razón de que se alcance este punto de alta temperatura se debe principalmente a la cantidad de oxígeno presente en esta zona del reactor y la reacción del CO, reacción exotérmica cuya liberación de energía se traduce en el aumento de la temperatura en el gasificador.



Figura 3.3. Distribución de temperaturas en el lecho poroso del gasificador para el caso II.

Al presentarse este foco de alta temperatura en la zona superior del reactor se provoca el desplazamiento de la zona de combustión u oxidación, situación que afecta de manera directa la liberación y consumo de especies químicas, por ende, el rendimiento del gasificador.

En la figura 3.3 se aprecia el descenso gradual de la temperatura a medida que el flujo de syngas desciende por el reactor, esto es producto de la degradación de los pellets y la liberación de especies químicas. Los cambios abruptos de temperaturas en el gasificador se deben principalmente a la baja conductividad térmica de los pellets de aserrín, provocando la acumulación de elevadas temperaturas en zonas específicas del reactor y descensos abruptos de hasta 400 °C en cuestión de pocos centímetros.

De la modelación numérica resultante se destaca que los intervalos de velocidades de flujo y rangos de temperaturas corresponden a valores congruentes a los reportados en distintos estudios en el campo de la simulación de procesos de gasificación [35, 48], análogos según la fase del proceso de gasificación que se desarrolla en el reactor de flujo concurrente.

Sheth & Babu [48], al realizar estudios experimentales de producción de gas de síntesis a partir de residuos madereros en un gasificador de flujo concurrente, determinaron que la temperatura promedio del reactor en la zona que se ingresa el aire es de 1000 °C, y la temperatura promedio de la zona de pirólisis ronda los 500 °C. Sharma [35] al modelar la dinámica de transporte en el medio poroso de un gasificador de lecho concurrente, estableció que los rangos de temperatura en el cuerpo del reactor variaban desde los 950 °C a los 200 °C.

Los estudios de Sheth & Babu [48] y Sharma [35] confirman que los rangos de temperatura presentados en este estudio se comportan acorde a la literatura reportada. El comportamiento de la temperatura en el reactor concuerda con los rangos de temperatura reportados por distintos investigadores [17, 26, 35, 44, 48].

La figura 3.4 muestra el comportamiento de la distribución del flujo de compuestos volátiles para el caso V. Se observa que los rangos de velocidad se mantienen en una magnitud similar al caso II a lo largo de todo el reactor; de igual forma, se presenta una mayor recirculación de flujo en el estrato superior del gasificador.



Figura 3.4. Distribución de velocidad y patrones de líneas de flujo de la fase de volátiles en el lecho poroso de pellets para el caso V.

La distribución de temperaturas para el caso V se muestra en la figura 3.5. Equivalente al caso anterior (caso II), se presentan puntos de alta temperatura en la zona superior del reactor, producto de la alta turbulencia y reacciones químicas que interactúan en esta zona. Para el caso V se presentan rangos de mayor temperatura en comparación al caso previo, donde la temperatura en el interior de la garganta promedia los 800 °C, identificando que al cambiar el ingreso del agente gasificante de la posición de 3 a 10 cm se genera una mayor interacción entre las fases y una mayor estabilización de las temperaturas de las fases del proceso de gasificación, facilitando la liberación de compuestos volátiles.



Figura 3.5. Distribución de temperaturas en el lecho poroso del gasificador para el caso V.

La figura 3.6 presenta el comportamiento de las líneas de flujo de la fase gaseosa al descender la posición de la tobera de ingreso de aire para el caso VIII. El flujo de volátiles presenta rangos de velocidad similares a los dos casos anteriores, fomentando que se presente un patrón de alta turbulencia similar en la zona superior.



Figura 3.6. Distribución de velocidad y patrones de líneas de flujo de la fase de volátiles en el lecho poroso de pellets para el caso VIII.

La distribución de temperaturas para el caso VIII se presenta en la figura 3.5. Análogo a los casos anteriores, se observan focos de alta temperatura en la zona superior del reactor, donde la temperatura máxima alcanzada ronda los 1030 °C. Se presenta un comportamiento similar

en las temperaturas al observado en las simulaciones anteriores, donde se da la reducción gradual en la temperatura del lecho de pellets.



Figura 3.7. Distribución de temperaturas en el lecho poroso del gasificador para el caso VIII.

Balcha [44] en su investigación de la modelación numérica de un gasificador a pequeña escala, reporta los patrones de velocidad que se generan en el reactor, presentando múltiples similitudes de comportamiento a las modelaciones obtenidas en este estudio. En el estudio de Balcha [44] se observan patrones de alta velocidad en las toberas de ingreso de aire, presentado valores de hasta 50 m/s, así como la rápida disminución de esta a medida que el

flujo se acerca a las paredes del reactor, siendo la velocidad del flujo de 0 m/s en múltiples regiones del reactor.

Este patrón es consistente con el reportado en esta investigación, donde se presentan zonas de alta velocidad y turbulencia, marcado de descensos en la velocidad al punto de llegar a ser nulos en diversas zonas del gasificador.

Este comportamiento es consistente en distintas investigaciones en gasificación [26, 29, 53] y se reitera en reactores tanto de flujo concurrente como de contraflujo.

3.3. Comportamiento dinámico y térmico del gasificador en función del caudal de agente gasificante ingresado

Esta sección analiza el comportamiento térmico y fluido-dinámico en el gasificador al presentarse variaciones en el caudal ingresado, variaciones realizadas respecto al caudal teórico recomendado de 400 l/min [47]. Se discuten los casos I, II y III (300, 400 y 500 l/min respectivamente, a una posición constante de 3 cm). La figura 3.8 y la figura 3.9 presentan la dinámica de las líneas de flujo de volátiles y la distribución de temperaturas en el gasificador respectivamente, esto para el caso I.

En la figura 3.8 se observa que al reducir el caudal ingresado consecuentemente se presenta la disminución de las velocidades de los flujos transportados por el reactor. El patrón de recirculación de aire en la zona superior del reactor presenta un comportamiento análogo al del caso II analizado en la sección 3.2, este comportamiento provoca las zonas de alta



Figura 3.8. Distribución de velocidad y patrones de líneas de flujo de la fase de volátiles en el lecho poroso de pellets para el caso I.

temperatura en estos estratos superiores, comportamiento indicado en la figura 3.9, no obstante, se aprecia una marcada disminución en la temperatura en todo el lecho del reactor, aspecto provocado por la reducción del oxígeno ingresado, limitando los procesos combustión y liberación de gases volátiles propios de la gasificación.

Al presentarse temperaturas bajas en el gasificador se presenta la inhibición de las reacciones endotérmicas que ocurren en el proceso de gasificación, limitando la liberación de compuestos químicos, ya que, el lecho de pellets no alcanza la temperatura suficiente para



Figura 3.9. Distribución de temperaturas en el lecho poroso del gasificador para el caso I.

promover reacciones completas, provocando que el lecho poroso no se consuma en su totalidad, aspecto que reduce la calidad y cantidad del gas de síntesis producido, así como, una mayor formación de cenizas en el reactor, aspecto contraproducente para la operatividad del mismo. Consecuentemente esta condición promueve la generación de alquitranes, reduciendo la eficiencia del reactor y limitando la vida útil de los filtros empleados.

La figura 3.10 y 3.11 presentan la dinámica de las líneas de flujo de volátiles y la distribución de temperaturas en el gasificador respectivamente, esto para el caso III, cuando el caudal de aire ingresado al reactor es de 500 l/min. Se presenta el aumento de la velocidad del flujo de

gases para esta condición, manteniendo tal y como es el caso de los escenarios anteriores altos patrones de turbulencia en la parte superior del gasificador.

Para las condiciones presentadas se observa el aumento de las temperaturas en todos los estratos del reactor, respecto al caso I y II, aspecto provocado por el aumento del oxígeno ingresado, condición contraproducente para las reacciones químicas, ya que, se afecta la relación estequiometría óptima para que se lleve a cabo el proceso de gasificación, promoviendo que el proceso se convierta en una combustión completa, donde gases inertes y de poco contenido energético como CO y CO_2 son producidos en mayor cantidad, afectando la eficiencia energética del gas de síntesis generado.

Los anexos A y B muestran el comportamiento de las líneas de flujo de volátiles y la distribución de temperaturas respectivamente, esto para los casos IV, VI, VII y IX, es decir, para las condiciones en que la tobera para el ingreso de aire se encuentra a 10 y 20 cm, realizándose variaciones en el caudal aire introducido.

Para los casos IV y VII (Anexos A1, A3, B1 y B3), donde se empleó un caudal de 300 l/min, se presentan las condiciones propias de reducir el caudal de aire, es decir, se observó la disminución de la velocidad de las líneas de flujo y un marcado descenso en la temperatura del gasificador. Por tanto, presentándose condiciones no óptimas para desarrollar de manera adecuada el proceso de gasificación.

Por otra parte, para los casos VI y IX (Anexos A2, A4, B2 y B4), donde se aumentó el caudal de ingreso de aire a 500 l/min, se presentó el aumento de la velocidad en el flujo de volátiles,

acompañado del aumento en las temperaturas presentadas en el lecho de biomasa, en comparación a los otros caudales empleados, dichas condiciones afectan como ya se mencionó previamente la formación de especies químicas de interés energético, tales como CH₄ y H₂.



Figura 3.10. Distribución de velocidad y patrones de líneas de flujo de la fase de volátiles en el lecho poroso de pellets para el caso III.

Los incrementos de temperatura en el reactor al aumentar el caudal de aire a 500 l/min, y de manera inversa, la disminución en los estratos de temperatura al ingresarse 300 l/min, es un



Figura 3.11. Distribución de temperaturas en el lecho poroso del gasificador para el caso III.

comportamiento reportado en distintas investigaciones en el campo de la modelación numérica de la gasificación; por ejemplo, Meenaroch et al [54], realizaron modelaciones numéricas en un gasificador de flujo concurrente empleando caudales de aire de 300, 400 y 450 l/min, reportando temperaturas máximas de 800 °C para el menor caudal y de 1200 °C para el mayor caudal de aire empleado en las simulaciones, temperaturas correspondientes a la zona en la que se ingresa el agente gasificante. Los resultados expuestos por Meenaroch et al [54] son congruentes con el comportamiento que se está obteniendo en las temperaturas reportadas en el estudio desarrollado, comprobando que el aumento gradual del caudal de aire ingresado tendrá un efecto directo en la dinámica de gasificación, reflejándose en el aumento de la temperatura del reactor.

Los resultados obtenidos a partir de las modelaciones numéricas y presentados en las secciones 3.2 y 3.3 permiten establecer que posicionar el ingreso de aire en distintas zonas del gasificador no presenta un efecto verdaderamente significativo en el comportamiento del movimiento de las líneas de flujo, implicando que en las distintas modelaciones generadas se presenten patrones de temperaturas similares, cuya variación depende principalmente la cantidad de aire ingresado.

El comportamiento mostrado por el parámetro de la temperatura en los nueve escenarios modelados presenta diversas variaciones al comportamiento teórico que se espera de un gasificador de lecho concurrente; no se observa una clara transición en los cambios de temperaturas, los cuales permitan indicar la etapa de gasificación que se está dando en una determinada posición de reactor, efecto propio del movimiento recirculatorio del flujo de aire en el gasificador. Aunque no se presentan estos estratos de temperatura característicos en dichos reactores, los rangos de temperaturas obtenidos rondan valores análogos a los que la teoría indica.

El análisis realizado en las secciones 3.2 y 3.3 no toma en consideración la composición del gas de síntesis obtenido en cada simulación, parámetro del cual depende en gran medida la eficiencia del proceso de gasificación llevado a cabo, esto no permite establecer a ciencia cierta si las variaciones en las temperaturas y el comportamiento en el flujo de volátiles son

56

beneficiosas o contraproducentes para el proceso. La sección 3.4 indica detalladamente el efecto que presenta variar el caudal de aire y su posición de ingreso en la composición química del gas de síntesis.

3.4. Efecto del caudal de aire y su posición de ingreso en la concentración de especies químicas en el gas de síntesis

Esta sección analiza la formación de especies químicas que conforman el gas de síntesis obtenido en el proceso de gasificación para cada uno de los casos planteados, enfocándose en la producción de CO, CO₂, CH₄ y H₂ como compuestos de mayor relevancia en la composición del syngas (cuya composición varía entre 0 y 1), la restante composición del gas de síntesis es conformada por nitrógeno y otras especies menores que no representan un aporte energético significativo. De igual manera, se estudia el fenómeno de la formación de cada especie química en distintas zonas del gasificador.

La figura 3.12 muestra el efecto en las fracciones másicas de monóxido de carbono y dióxido de carbono para el caso VII. Se observa que las mayores concentraciones de ambas especies se dan en la zona superior del reactor, producto de que en esta zona la concentración de oxígeno es alta, dando paso a una combustión exotérmica, ocasionando que en esta zona del gasificador se presenten las mayores temperaturas registradas, implicando la liberación espontánea de estos compuestos. A medida que la temperatura en el reactor se reduce en los estratos inferiores se presenta la estabilización en las fracciones másicas de estos compuestos, equilibrando a rangos característicos del gas de síntesis.



Figura 3.12. Variación en la fracción másica de a) CO y b) CO₂ para el caso VII.

Un efecto similar se observa en la figura 3.13, donde se presentan las fracciones másicas de metano e hidrógeno para la misma configuración de tobera y caudal, se presenta una mayor concentración de estas especies en la zona superior de gasificador producto de la temperatura concentrada en este estrato, las fracciones másicas de estas especies equilibran a valores propios del gas de síntesis a medida que las fases se estabilizan con la temperatura del reactor.

El efecto de la liberación, consumo y formación final de las especies químicas que participan en el proceso de gasificación varían su composición debido las temperaturas, cantidad de oxígeno y reacciones químicas (exotérmica y endotérmicas) que se dan en las diferentes etapas de la gasificación.



Figura 3.13. Variación en la fracción másica de a) CH₄ y b) H₂ para el caso VII.

Al presentarse variaciones en la posición y cantidad del aire ingresado se obtiene un efecto directo en las fracciones másicas de las especies químicas en estudio, efecto ejemplificado en las figuras 3.14 y 3.15, donde muestra la formación de CO, CO₂, CH₄ y H₂ en el reactor para el caso V, se muestra la misma tendencia que el caso anterior, es decir, la liberación abrupta de especies en la zona superior producto de la temperatura de esta zona, y la posterior estabilización en las fracciones másicas conforme se equilibran las fases.

Este patrón de comportamiento es constante para cada uno de los nueve casos planteados en la investigación, la formación de especies químicas para las configuraciones restantes se muestran del Anexo C1 al C14.



Figura 3.14. Variación en la fracción másica de a) CO y b) CO₂ para el caso V.

Balcha [44] en su investigación determinó que las composiciones de los compuestos que conforman el syngas permanecieron en niveles altos en la zona de ingreso del aire al reactor, donde, las fracciones másicas de CO, CO₂, H₂ y CH₄ alcanzaron su nivel máximo. A medida que el flujo de volátiles se estabilizaba en el reactor, se produjo una disminución pronunciada en todas las especies volátiles. El comportamiento expuesto por Balcha [44] coincide con la distribución de las fracciones másicas presentadas en las simulaciones realizadas.

Un aspecto a destacar de la distribución de las fracciones másicas especies químicas en el reactor radica en que, en la zona de pirólisis la fracciones másicas tienden a reducirse a



Figura 3.15. Variación en la fracción másica de a) CH₄ y b) H₂ para el caso V.

valores cercanos a 0, este aspecto lo rescata Felisart [26] en su estudio fluido-dinámico de un gasificador de flujo descendente; al igual que en este caso, la formación de especies químicas se ve reducida en la zona de pirólisis. El consumo de estas especies es producto de las reacciones que toman parte del proceso de gasificación, en especial del proceso de pirólisis, donde se da la formación de especies menores que componen el gas de síntesis.

El CO y CO₂ son compuestos químicos que no representan ningún potencial energético significativo en la composición del syngas, por lo cual, la generación de estas especies en la menor medida posible es beneficioso para el aumento de la calidad del gas de síntesis, ya que, se promueve la liberación de especies que sí poseen un alto valor energético en el syngas,
como el CH_4 y el H_2 . Las proporciones de CO y CO_2 aumentan cuando las condiciones de gasificación no son adecuadas, es decir, exceso o faltante de oxígeno en el proceso termoquímico.

El efecto que representa variar la posición de ingreso de aire y el caudal del mismo para la cantidad de monóxido de carbono presente en el gas de síntesis se observa en la figura 3.16. Al emplearse un caudal de 400 l/min se observa una marcada disminución en la concentración de esta especie, aumentar o disminuir este caudal se traduce en un aumento significativo en la fracción másica de CO. Al disminuir la posición de la tobera se da el aumento gradual de la fracción de CO, por lo cual, ubicar el ingreso de aire en una zona inferior a los 10 cm no es recomendable si se desea limitar la producción de esta especie química.

La figura 3.17 presenta el comportamiento en la fracción másica de CO₂ presente en el gas de síntesis al realizarse las variaciones en la posición de la tobera de ingreso del agente gasificante y el caudal de este. Al igual que el caso del monóxido de carbono al emplearse un caudal de 400 l/min la producción de CO₂ se mantiene estable, sin presentar grandes fluctuaciones, a diferencia de los otros dos caudales, donde se observa que a medida que la tobera va disminuyendo su posición por el reactor se da un aumento considerable en la concentración de esta especie química. Para limitar la producción de esta especie química se sugiere la misma recomendación del caso anterior de no disminuir la posición por debajo de los 10 cm.



Figura 3.16. Variación de la fracción másica de CO presente en el gas de síntesis en función del caudal de aire y su posición de ingreso.

La concentración de metano presente en el syngas producto de la variación en la posición de ingreso del aire y su cantidad se expone en la figura 3.18. Al emplearse el caudal de 400 l/min se obtienen las mayores fracciones másicas de las modelaciones realizadas, esto indica que utilizar este caudal tendrá por resultado un gas de síntesis energéticamente de más calidad. Al desviar el caudal ingresado del valor de 400 l/min se presenta una drástica reducción en la concentración de esta especie química, afectando directamente la calidad del syngas. El efecto de variar la posición de la tobera no parece tener un efecto significativo en la producción de metano, ya que, para cada determinado caudal que se esté empleando la producción de esta especie se mantiene en niveles relativamente constantes.



Figura 3.17. Variación de la fracción másica de CO₂ presente en el gas de síntesis en función del caudal de aire y su posición de ingreso.

La fracción másica de hidrógeno presente en el gas de síntesis producto de la variación en la posición de ingreso del aire y su caudal se presenta en la figura 3.19. La producción de hidrógeno contenido en el syngas presenta un comportamiento similar al mostrado por el metano el caso anterior, los mayores niveles de hidrógeno obtenido se alcanzan al emplear un caudal de 400 l/min, caudales inferiores y mayores a este caudal ocasionan una marcada disminución en la concentración de hidrógeno, por lo tanto, energéticamente, el syngas producido a partir del caudal de 400 l/min es de mayor calidad. Al variarse la posición de la tobera la producción de H₂ mantiene niveles de producción prácticamente constantes, aunque

se denota una marcada tendencia en la reducción de los niveles de H_2 a medida que se baja la posición de la tobera en el reactor.



Figura 3.18. Variación de la fracción másica de CH₄ presente en el gas de síntesis en función del caudal de aire y su posición de ingreso.

A partir de los resultados obtenidos en la formación de especies químicas realizando ajustes en la posición del ingreso del aire y el caudal que se ingresa, se determinó que la cantidad del aire que se introduce en el reactor presenta un efecto directo en la composición del gas de síntesis que se produce en el proceso de gasificación, obteniéndose un syngas de mayor calidad al utilizar un caudal de 400 l/min, validando la recomendación Guangul et al [47], estableciendo 400 l/min como el caudal óptimo para este tipo de gasificadores.



Figura 3.19. Variación de la fracción másica de H₂ presente en el gas de síntesis en función del caudal de aire y su posición de ingreso.

Esta cantidad de aire ingresado reduce la formación de CO y CO₂, aumentando la formación CH₄ y H₂, condiciones deseables para un syngas de calidad óptima. En cuanto a la variación en la posición en la que se ingresa el aire, se determinó que bajar la tobera por debajo de la posición de 10 cm, produce el aumento de CO y CO₂, afectando el proceso de gasificación; para el CH₄ y H₂, la producción de estas especies tiende a ser constante sin importar la posición en la que se ingrese el agente gasificante. Del Anexo D1 a D4 se presenta de forma gráfica las fracciones másicas de las especies químicas en estudio, para cada configuración planteada.

3.5. Comparación estadística del modelo numérico establecido para el proceso de gasificación

Esta sección compara estadísticamente la composición del gas de síntesis obtenido en las distintas modelaciones numéricas realizadas respecto a la composición del syngas reportado en distintas investigaciones científicas, los resultados obtenidos para los nueves distintos casos planteados en la investigación se muestran en el cuadro 3.2.

Posición	Caudal	СО	CO ₂	CH4	H_2
(cm)	(l/min)	(%)	(%)	(%)	(%)
	300	20,55	14,36	3,58	13,08
3	400	16,39	16,22	5,05	14,12
	500	17,54	13,36	2,57	11,08
	300	22,55	20,37	2,08	9,08
10	400	16,53	16,35	5,07	13,07
	500	20,40	18,23	4,05	10,01
	300	21,59	20,39	3,08	10,09
20	400	19,02	17,64	6,12	13,05
	500	20,55	20,36	4,08	11,08

Cuadro 3.2. Fracciones másicas obtenidas en la conformación del syngas para cada caso planteado en la modelación numérica.

El cuadro 3.2 permite cuantificar de una mejor manera los resultados expuestos en la sección 3.5, donde para el caudal de 400 l/min se obtienen los menores niveles CO y CO₂, a la vez que presenta los mayores nivel de CH₄ y H₂, los otros dos caudales empleados presentan deficiencias en la formación de estas especies químicas en función de obtener un gas de síntesis de composición adecuada. El cuadro 3.3 presenta la conformación del syngas obtenido en diversos estudios CFD en el área de gasificación.

		Composición del gas de			
T	Autores -	síntesis			
Investigación		CO ₂	CO	CH ₄	H_2
		(%)	(%)	(%)	(%)
Modeling and simulation of reduction zone of downdraft biomass gasifier [17]	B.V. Babu P.N. Sheth	11,00	22,00	2,00	13,00
Using an Eulerian-granular 2-D multiphase CFD model to simulate oxygen air enriched gasification of agroindustrial residues [52]	N. Couto V. Silva E. Monteiro P.Brito	18,00	14,00	2,00	10,00
A robust numerical model for characterizing the syngas composition in a downdraft gasification process [53]	A. Gagliano F. Nocera F. Patania M. Bruno D. Castaldo	12,00	17,00	2,00	17,00
Development of kinetics models in each zone of a 10 kg/hr downdraft using computational fluid dynamics [54]	P. Meenaroch S. Kerdsuwan K. Laohalidanond	18,00	11,00	4,00	9,00
Experimental and numerical analysis of biomass gasification [55]	E. Monteiro A. Rouboa V. Silva P. Brito	18,00	13,00	2,00	14,00
Investigation of the oxidation zone in a biomass two-stage downdraft gasifier [56]	L. Gerun J. Bellettre M. Tazerout	14,10	17,90	6,50	11,40
Energetic and exergetic analysis of biomass gasification [39]	N. Couto	18,00	15,00	2,00	13,00

Cuadro 3.3. Composición del gas de síntesis obtenido en diversas modelaciones numéricas realizadas en el área de gasificación.

Estableciendo una comparación entre los resultados obtenidos para las fracciones másicas de las especies químicas en los 9 casos simulados respecto a los resultados mostrados en el cuadro 3.3, se determina que los porcentajes de fracciones másicas para las cuatro distintas especies en estudio presentan valores cercanos los reportados en la literatura, destacando la fiabilidad del modelo numérico establecido en esta investigación, en el aspecto de consumo, formación y transporte de especies. El cuadro 3.4 muestra los errores medios cuadráticos reportados para cada especie química en cada caso de estudio.

Posición	Caudal	REMC CO	REMC CO2	REMC CH4	REMC H ₂
(cm)	(l/min)	(%)	(%)	(%)	(%)
	300	5,89	3,16	1,74	2,53
3	400	3,44	2,99	2,67	2,95
	500	3,83	3,66	1,65	2,84
	300	7,62	5,62	1,82	4,22
10	400	3,47	3,02	2,68	2,53
	500	5,77	3,95	1,96	3,5
	300	6,77	5,63	1,62	3,45
20	400	4,72	3,58	3,58	2,52
	500	5,89	5,61	1,98	2,84

Cuadro 3.4. Validación estadística de los resultados obtenidos en la conformación del syngas reportado en cada modelación numérica.

REMC: Raíz del error medio cuadrático.

El cuadro 3.4 denota la validación de los resultados obtenidos para cada especie química que conforma el gas de síntesis en cada configuración simulada. Los errores medios cuadráticos para cada especie reportada no superan el 10% de error, esto implica que los resultados determinados mediante el modelo numérico establecido se apegan de manera fehaciente a los resultados reportados por diversos autores, por lo que puede considerarse que el modelo establecido representa con precisión aceptable la composición química del gas de síntesis producido.

Con base en los resultados obtenidos a partir del modelo numérico establecido para el reactor de gasificación, se logró evaluar la respuesta fluido-dinámica, térmica y química en el gasificador al variar los parámetros establecidos.

La prueba de mallas permitió establecer el número de elementos óptimos para obtener una resolución precisa de las simulaciones planteadas para el reactor en estudio, a partir de 210792 elementos en el mallado se garantiza la adecuada convergencia de los parámetros en estudio, permitiendo realizar un balance entre la precisión de los resultados y su consumo computacional.

Para los distintos escenarios simulados en la investigación los rangos de velocidades y temperaturas obtenidos presentan valores similares a los reportados en diversas fuentes teóricas y estudios realizados en el campo de gasificación mediante CFD.

Se presenta una mayor turbulencia en los estratos superiores del reactor de gasificación para todos los escenarios simulados, implicando un aumento directo de la temperatura en esta zona, influenciando la manera en la que se da la liberación y consumo de especies químicas en el reactor.

Posicionar el ingreso del agente gasificante en distintas zonas del gasificador no representa una variación significativa en el comportamiento fluido-dinámico de los compuestos volátiles.

70

El caudal de agente gasificante ingresado al reactor de gasificación presenta un efecto directo en la distribución de temperaturas en los distintos estratos del reactor, generando un efecto directo en las reacciones químicas que acontecen en el proceso.

Al presentarse variaciones en la posición y cantidad del aire ingresado, la liberación, consumo y formación final de las especies químicas varían su composición debido a la dinámica termo-química que se da en el interior del reactor de gasificación.

Las fracciones másicas de CO y CO_2 presentaron sus valores más bajos al emplearse un caudal de 400 l/min; para limitar la producción de estas especies químicas no se debe ubicar la tobera en una posición inferior a los 10 cm.

Los mayores niveles de producción de metano e hidrógeno se alcanzan al emplear un caudal de 400 l/min.

Se determinó que empleando un caudal de 400 l/min de aire e ingresando el mismo entre los 3 a 10 cm, se obtienen los mejores resultados en términos de calidad de syngas producido, estableciendo esta condición como punto de operación óptimo del reactor.

Los errores medios cuadráticos reportados para cada especie no superan en 10%, implicando que estadísticamente el modelo numérico establecido representa de forma eficiente la concentración de fracciones másicas de especies químicas presentes en el gas de síntesis. Es indispensable corroborar los resultados obtenidos en la modelación numérica mediante la validación experimental. La validación experimental es necesaria en todo estudio de métodos numéricos, a fin de comprobar que los parámetros físicos simulados presenten un comportamiento similar al medido experimentalmente.

Con base al comportamiento fluido-dinámico obtenido en las simulaciones, es recomendable disminuir el tamaño del reactor, eliminar toda la zona del reactor por encima de la tobera permitiría una mayor homogenización de las temperaturas internas, afectando de manera directa la generación de especies químicas.

Con la finalidad de variar el parámetro de turbulencia mostrado en los estratos superiores del reactor, se recomienda variar el ángulo de los inyectores de aire en el plano horizontal, respecto a su posición original (figura 2.3), dicha variación obligaría al oxígeno a interaccionar en mayor medida con la biomasa presente en los estratos inferiores, promoviendo una mejor distribución de la temperatura en el reactor y afectando directamente la liberación de compuestos volátiles.

Variar el modelo numérico establecido probando con distintos submodelos de turbulencia, multifásicos y de transporte de especies funcionarían como variantes que aumentarían la precisión de los resultados logrados.

72

Realizar simulaciones en estado transitorio se vuelve necesario a fin de comparar el comportamiento del reactor con los cambios que se produzcan durante las validaciones experimentales.

- Babu SP, Whaley TP. IEA Biomass thermal gasification project. Biomass and Bioenergy. 1992;2:299–306.
- Knudsen J, Weigang L, Frandsen F. Experimental investigation of sulfur release during thermal conversion of wheat straw and its application to full-scale grate firing. En: Sixth international conference on technologies and combustion for a clean environment; 2001 Julio 9-12; Oporto, Portugal; 2001. p. 1303–9.
- International Renewable Energy Agency. Renewable power generation costs in 2012: an overview. Bonn: IRENA Copyright ©; 2013. 12 p.
- 4. Intelligent Energy Europe. Final guideline for safe and eco-friendly biomass gasification. Bruselas: European Commission; 2009. 10 p.
- Roldán VC. Informe de capacidad de energías limpias en Costa Rica 2010. Cartago, Tecnológico de Costa Rica, Escuela de Química, 2010.
- Wang Y, Yan L. CFD Studies on Biomass Thermochemical Conversion. Int J Mol Sci. 2008;9:1108-30.
- Fernández LE. Obtención de gas combustible a partir de la gasificación de biomasa en un reactor de lecho fijo [tesis de maestría]. Bogotá, D.C.: Universidad Nacional de Colombia; 2011.
- Moragues JA, Rapallini AT. Energía de la biomasa. Revista Proyecto Energético. 2003;65:24-8.

- Habibi A, Merci B, Heynderickx GJ. Impact of radiation models in CFD simutions of steam cracking furnaces. Comput Chem Eng. 2007;31(11):1389–406.
- Aznar MP, Corella J, Delgado J, Lahoz J. Improved steam gasification of lignocellulosic residues in a fluidized bed with commercial steam reforming catalysts. Ind Eng Chem Res. 1993;32(1):1–10.
- Zhou H, Jensen PA, Flemming JF. Dynamic mechanistic model of superheater deposit growth and shedding in a biomass fired grate boiler. Fuel. 2007;86(10-11):1519–33.
- Hallgren A. Theoretical and engineering aspects of the gasification of biomass [tesis de maestría]. Lund: Lund University; 1996.
- Liliedahl T, Sjöström K. Modelling of char-gas reaction kinetics. Fuel. 1997;76(1):29-37.
- Huaraz CY. Diseño de un gasificador de 25 kW para aplicaciones domésticas usando como combustible cascarilla de arroz [tesis de licenciatura]. Lima: Pontificia Universidad Católica del Perú; 2013.
- Pérez DM. Diseño de un gasificador de pequeña potencia eléctrica [tesis de mestría].
 Barcelona: Universidad Politécnica de Cataluña; 2014.
- Arroyo C, Guillermo C. Piloto de gasificador downdraft operado con biomasa [tesis de licenciatura]. Barcelona: Universidad Politécnica de Cataluña; 2011.
- Babu BV, Sheth PN. Modeling and simulation of reduction zone of downdraft biomass gasifier: Effect of char reactivity factor. Energy Convers Manag. 2005;47(15-16):2602–11.

- Brown DP, Biswas P, Rubin SG. Transport and deposition of particles in gas turbines: Effects of convection, diffusion, thermophoresis, inertial impaction and coagulation.
 1st ed. New York: American Society of Mechanical Engineers; 1994.
- Svendsgaard OB. Gas engine for a biomass powered small scale heat and power plant [tesis de maestría]. Trondheim: Norwegian University of Science and Technology; 2000.
- 20. Antal MJ. Biomass pyrolysis: A review of the literature part 1-Carbohydrate pyrolysis. En: Advances in solar energy. New York: Springer; 1985. p. 61–111.
- 21. Azcona S. Proyecto piloto de generación de energía eléctrica mediante gasificación en comunidades amazónicas aisladas [tesis de licenciatura]. Pamplona: Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales y de Telecomunicación; 2011.
- 22. Williams RH, Larson ED. Biomass gasifier gas turbine power generating technology. Biomass and Bioenergy. 1996;10(2-3):149–66.
- 23. Chughtai MY, Kubiak H. Hydrogen from biomass. En: 10th European conference and technology exhibition. Wurzburg, Alemania; 1998 Junio 8-11. p. 284–6.
- Bridgwater AV, Maniatis K. Progress in biomass gasification: an overview. En: Progress in thermochemical biomass conversion. Tyrol: Blackwell Science; 2008. p. 1-31.
- 25. Olivares A, Aznar MP, Caballero MA, Gil J, Francés E, Corella J. Biomass gasification: produced gas upgrading by in-bed use of dolomite. Ind Eng Chem Res. 1997;36(12):5220–6.

- 26. Felisart B. Simulación fluido-térmica de un reactor de gasificación de lecho fijo descendente [tesis de licenciatura]. Lima: Pontificia Universidad Católica del Perú; 2014.
- 27. Cresson É. Biomass conversion technologies, achievements and prospects for heat and power generation. 1st ed. Bruselas: Office for official publications of the european communities; 1998.
- 28. Herguido J, Corella J, González-Saiz J. Steam gasification of lignocellulosic residues in a fluidized bed at a small pilot scale. Effect of the type of feedstock. Ind Eng Chem Res. 1992;31(5):1274–82.
- 29. Kebede B. CFD modeling and simulation on hydrodynamics of CFB biomass gasifier using FLUENT [tesis de maestría]. Addis Ababa: Addis Ababa University; 2011.
- 30. Chapman S, Cowling TG. The mathematical theory of non-uniform gases. 3rd ed. Cambridge: Cambridge University Press; 1970.
- 31. ANSYS ®. ANSYS FLUENT theory guide [Internet]. Canonsburg; 2013. Disponible desde: https://uiuc-cse.github.io/me498cm-fa15/lessons/fluent/refs/ANSYS Fluent Theory Guide.pdf
- 32. Magnussen BF, Hjertager BH. On mathematical Modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion. En: 16th symposium (international) on combustion. Pittsburgh, Estados Unidos; 1976 Agosto 15-20. p. 719–29.

- 33. Kaer SK. Extending the modeling capacity of CFD codes applied to biomass-fired boilers. En: ECOS2003. Copenhagen, Dinamarca; 2003 Junio 28-30. p. 251–64.
- 34. Willcox DC. Turbulence modeling for CFD. 3rd ed. California: DCW Industries; 1998.
- 35. Sharma AK. Modeling fluid and heat transport in the reactive, porous bed of downdraft (biomass) gasifier. Int J Heat Fluid Flow. 2007;28(6):1518–30.
- 36. Babu BV, Chaurasia AS. Pyrolysis of biomass: improved models for simultaneous kinetics and transport of heat, mass and momentum. Energy Convers Manag. 2004;45(9-10):1297–327.
- 37. Xia B, Sun DW. Applications of computational fluid dynamics (CFD) in the food industry: a review. Comput Electron Agric. 2002;34(1-3):5–24.
- 38. Nemoda SD, Mladenovic MR, Paprika MJ, Eric AM, Grubor BD. Three phase eulerian-granular model applied on numerical simulation of non-conventional liquid fuels combustion in a bubbling fluidized bed. Therm Sci. 2016;20(00):133–49.
- Couto ND. Energetic and exergetic analysis of biomass gasification [tesis de maestría]. Vila Real: University of Trás-os-Montes e Alto Douro; 2015.
- 40. Pallares J, Arauzo I, Williams A. Integration of CFD codes and advanced combustion models for quantitative burnout determination. Fuel. 2007;86(15):2283–90.
- 41. Schlichting H, Gersten K. Boundary layer theory. 9th ed. Berlin: Springer; 2017.
- 42. Kallio GA, Reeks MW. A numerical simulation of particle deposition in turbulent boundary layers. Int J Multiph. 1989;15(3):433–46.

- Mathieu P, Dubuisson R. Performance analysis of a biomass gasifier. Energy Convers Manag. 2002;43(10):1291–9.
- 44. Balcha DA. Numerical modeling of small-scale biomass straw gasifier [tesis de maestría]. Winnipeg: University of Manitoba; 2009.
- 45. Zhang Z, Chen Q. Comparison of the Eulerian and Lagrangian methods for predicting particle transport in enclosed spaces. Atmos Environ. 2007;41(25):5236–48.
- 46. Carrillo TP. Caracterización de pellets con fines energéticos elaborados a partir de residuos forestales [tesis de licenciatura]. San José: Universidad de Costa Rica; 2015.
- 47. Guangul FM, Sulaiman SA, Ramli A. Study of the effects of operating factors on the resulting producer gas of oil palm fronds gasification with a single throat downdraft gasifier. Renew Energy. 2014;72:271–83.
- 48. Sheth PN, Babu B V. Experimental studies on producer gas generation from wood waste in a downdraft biomass gasifier. Bioresour Technol. 2009;100(12):3127–33.
- 49. Moilanen A, Saviharju K. Gasification reactivities of biomass fuels in pressurised conditions and product gas Mmixtures. En: Developments in thermochemical biomass conversion. 1st ed. Espoo: Springer; 1997. p. 828–37.
- 50. Kobayashi K, Salam MU. Comparing simulated and measured values using mean squared deviation and its components. Agron J. 2000;92:345–52.
- 51. Darki EE. Modeling and economic assessment of integrated gasification with sorbent CO₂ capture [tesis de doctorado]. Calgary: University of Carlgary; 2014.

- 52. Couto N, Silva V, Monteiro E, Brito P, Rouboa A. Using an Eulerian-granular 2-D multiphase CFD model to simulate oxygen air enriched gasification of agroindustrial residues. Renew Energy. 2015;77:174–81.
- 53. Gagliano A, Nocera F, Patania F, Bruno M, Castaldo D. A robust numerical model for characterizing the syngas composition in a downdraft gasification process. Comptes Rendus Chim. 2016;1–9.
- 54. Meenaroch P, Kerdsuwan S, Laohalidanond K. Development of kinetics models in each zone of a 10 kg/hr downdraft gasifier using computational fluid dynamics. Energy Procedia. 2015;79:278–83.
- 55. Silva V, Monteiro E, Brito P, Rouboa A. Experimental and numerical analysis of biomass gasification. Energy Procedia. 2013;36:591–5.
- 56. Gerun L, Bellettre J, Tazerout M. Investigation of the oxidation zone in a biomass two-stage downdraft gasifier. En: 18th International Conference on Efficiency, Cost, Optimization, Simulation and Envieronmental Impact of Energy Systems (ECOS 2005). Trondheim, Noruega; 2005 Junio 20-22.

ANEXO A. VARIACIÓN EN LAS VELOCIDADES Y PATRONES DEL FLUJO DE VOLÁTILES



Figura A1. Distribución de velocidad y patrones de líneas de flujo de la fase de volátiles en el lecho poroso de pellets para el caso IV.



Figura A2. Distribución de velocidad y patrones de líneas de flujo de la fase de volátiles en el lecho poroso de pellets para el caso VI.



Figura A3. Distribución de velocidad y patrones de líneas de flujo de la fase de volátiles en el lecho poroso de pellets para el caso VII.



Figura A4. Distribución de velocidad y patrones de líneas de flujo de la fase de volátiles en el lecho poroso de pellets para el caso IX.

ANEXO B. DISTRIBUCIÓN DE TEMPERATURA EN EL ESTRATO DEL REACTOR



Anexo B1. Distribución de temperaturas en el lecho poroso del gasificador para el caso IV.



Anexo B2. Distribución de temperaturas en el lecho poroso del gasificador para el caso VI.



Anexo B3. Distribución de temperaturas en el lecho poroso del gasificador para el caso VII.



Anexo B4. Distribución de temperaturas en el lecho poroso del gasificador para el caso IX.

ANEXO C. FORMACIÓN DE ESPECIES QUÍMICAS DURANTE LA DINÁMICA DE GASIFICACIÓN



Figura C1. Variación en la fracción másica de a) CO y b) CO₂ para el caso I.



Figura C2. Variación en la fracción másica de a) CH₄ y b) H₂ para el caso I.



Figura C3. Variación en la fracción másica de a) CO y b) CO₂ para el caso II.



Figura C4. Variación en la fracción másica de a) CH₄ y b) H₂ para el caso II.



Figura C5. Variación en la fracción másica de a) CO y b) CO₂ para el caso III.



Figura C6. Variación en la fracción másica de a) CH₄ y b) H₂ para el caso III.



Figura C7. Variación en la fracción másica de a) CO y b) CO₂ para el caso IV.



Figura C8. Variación en la fracción másica de a) CH₄ y b) H₂ para el caso IV.



Figura C9. Variación en la fracción másica de a) CO y b) CO₂ para el caso VI.



Figura C10. Variación en la fracción másica de a) CH₄ y b) H₂ para el caso VI.



Figura C11. Variación en la fracción másica de a) CO y b) CO2 para el caso VIII.



Figura C12. Variación en la fracción másica de a) CH₄ y b) H₂ para el caso VIII.



Figura C13. Variación en la fracción másica de a) CO y b) CO₂ para el caso IX.



Figura C14. Variación en la fracción másica de a) CH₄ y b) H₂ para el caso IX.

ANEXO D. VARIACIÓN DE LAS ESPECIES QUÍMICAS QUE CONFORMAN EL SYNGAS PARA CADA CASO DE ESTUDIO



Figura D1. Variación de la fracción másica de CO presente en el gas de síntesis para cada caso de estudio.



Figura D2. Variación de la fracción másica de CO₂ presente en el gas de síntesis para cada caso de estudio.


Figura D3. Variación de la fracción másica de CH₄ presente en el gas de síntesis para cada caso de estudio.



Figura D4. Variación de la fracción másica de H₂ presente en el gas de síntesis para cada caso de estudio.