

ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD PARA LA EVALUACIÓN NUMÉRICA DE LA
GASIFICACIÓN DE BIOMASA MEDIANTE GASIFICACIÓN DE BIOMASA.

JHONATAN JOSÉ ZUÑIGA AGUDELO

JOSÉ GABRIEL GUERRERO LAMBERTINEZ

UNIVERSIDAD PONTIFICIA BOLIVARIANA
ESCUELA DE INGENIERÍAS Y ARQUITECTURA
PROGRAMA DE INGENIERÍA MECÁNICA
MONTERÍA – CÓRDOBA
2023

ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD PARA LA EVALUACIÓN NUMÉRICA DE LA
GASIFICACIÓN DE BIOMASA MEDIANTE GASIFICACIÓN DE BIOMASA.

JHONATAN JOSÉ ZUÑIGA AGUDELO

JOSÉ GABRIEL GUERRERO LAMBERTINEZ

Trabajo de grado para optar al título de ingeniero mecánico

Asesor

RAFAEL DAVID GÓMEZ VÁSQUEZ
Ingeniero Mecánico

UNIVERSIDAD PONTIFICIA BOLIVARIANA
ESCUELA DE INGENIERÍAS Y ARQUITECTURA
PROGRAMA DE INGENIERÍA MECÁNICA
MONTERÍA – CÓRDOBA
2023

AGRADECIMIENTOS

Expresamos nuestra más grande gratitud a nuestro director de tesis I.M. Rafael David Gómez Vásquez. PhD por acompañarnos constantemente en este proceso, con su guía y por enseñarnos tanto sobre estos temas académicos. Además, por no solo ser nuestro docente y asesor, sino también por la relación de tantos años, se ha convertido en una gran amistad.

Me encuentro muy agradecido con mi familia. Mi padre José Gabriel Guerrero Estrada, Mi madre Yamiles Lambertinez Humanez, Mis hermanas Esther P Guerrero y Belly L. Guerrero; le agradezco mucho a mis tías que han sido como otras madres en mi vida: María del Carmen Lambertinez (QEPD), Matiz H Lambertinez y su Esposo Alfonso M. Nieto G., Nuvia Lambertinez H. Agradezco a mis primos, que se criaron conmigo los hermanos Nieto: Andrés A. Nieto, Carlos E. Nieto y Eduardo A. Nieto. También agradezco a mis amigos, a esos que son como mis hermanos: Ruber Ledezma Jr, Juan F. Uribe y Luis A. Contreras. Finalmente, un agradecimiento a Nuris E. Correa y Julio C. Buitrago. A todos ellos va dedicado este trabajo, gracias por apoyarme durante todo mi proceso de formación académica, a pesar de todos los problemas y el tiempo que me tomo siempre estuvieron ahí para mí.

Este trabajo de grado quiero dedicárselo a mi madre Diana Shirley Agudelo Ríos, ella es el pilar de mi vida, es la persona que siempre ha estado ahí en los tiempos buenos y en los tiempos difíciles, cuando sentía que estaba a punto de desfallecer ella siempre estaba ahí para darme ánimos, consejos y nunca dejar que me rindiera. Estoy seguro que si ella no hubiera estado a mi lado no estaría en el lugar que me encuentro ahora mismo ya que me hubiese rendido hace mucho tiempo. También quiero agradecerle a mi pareja Eva Sandri Mendoza Martínez que también estuvo ahí todo el tiempo de mi carrera universitaria apoyándome en todo lo que podía. Aparte, quiero agradecerle a mi padre José G. Zúñiga y mi hermano Juan C. Zúñiga que de algún modo u otro también me apoyaron en toda mi carrera universitaria. Finalmente agradezco a mis profesores y a mis compañeros de clases en especial a mi compañero de tesis que siempre estuvo ahí no solo en el trabajo de grado sino todo el tiempo de formación académica.

CONTENIDO

RESUMEN.....	1
INTRODUCCIÓN	2
1. Estado del arte.....	3
2. Objetivo General.....	7
2.1 Objetivos específicos	7
3. Metodología.....	8
3.1 Modelo Matemático	8
3.1.1 Ecuaciones de conservación.....	8
3.1.2 Ecuaciones de la gasificación de biomasa	9
3.2 Simulación del proceso de gasificación	11
3.2.1 Construcción del CAD con las dimensiones	11
3.3 Propiedades de transporte y cinética de pirolisis	12
3.4 Método de solución	14
4. Resultados y discusión.....	16
4.1 Análisis del modelo	16
4.1.1 Temperatura.....	16
4.1.2 Composiciones	17
4.2 Análisis de Sensibilidad.....	19
4.2.1 Análisis de sensibilidad basado en regresiones codificadas	22
4.2.2 Tasa de reacción a diferentes temperaturas	25
CONCLUSIONES.....	27
REFERENCIAS	28

TABLA DE ILUSTRACIONES

Ilustración 1	Esquema del reactor de estudio.....	11
Ilustración 2	Contorno y perfil de temperatura a lo largo del reactor.....	16
Ilustración 3	Composiciones de gas de síntesis. Experimental & Simulación CFD.....	17
Ilustración 4	Fracción molar de gases distribuidos al interior del reactor	18
Ilustración 5	Perfiles de Fracción Volumen de las especies gaseosas combustibles.....	19
Ilustración 6	Contorno de especies gaseosas combustibles y temperatura	20
Ilustración 7	Efecto de la fracción de vapor en el reactor	21
Ilustración 8	Grafica de Perturbación del Monóxido de carbono.....	23
Ilustración 9	Grafica de Perturbación para el Hidrogeno	23
Ilustración 10	Contorno de TAR.....	24
Ilustración 11	Perfil de concentraciones	24
Ilustración 12	Perfil de temperatura del Monóxido de carbono.....	25
Ilustración 13	Perfil de temperatura del Metano.....	25
Ilustración 14	Perfil de temperatura del Hidrogeno	26

CONTENIDO DE TABLAS

Tabla 1	Resultados de ensayos de análisis elementales de la biomasa	12
Tabla 2	Estudio del proceso de pirolisis en residuos vegetales.....	13
Tabla 3	Diámetros de distribución de biomasa cruda.....	14
Tabla 4	Reacciones en fase gaseosa	15
Tabla 5	Set de reacciones del Char	15
Tabla 6	composiciones de especies en el reactor valores numéricos vs valores experimentales 17	
Tabla 7	Análisis de sensibilidad basado en regresiones codificadas.....	22

RESUMEN

En el presente trabajo se desarrollará un modelo de reactor de gasificación de biomasa por medio de herramientas computacionales, teniendo en cuenta los parámetros cinéticos, las características del lecho, los perfiles térmicos y la composición de los gases. La biomasa se simulará como partículas sólidas, agregada a una velocidad baja con el fin de variar los periodos de retención de este, esto comparándolo directamente con un reactor de gasificación real, junto con una fase de gas de medio continuo. Para la pirolisis se utilizará un modelo cinético de primer orden, empleando una especie intermedia Vol (g), en donde la composición de los gases producto se fijará a partir de los balances de masa y las correlaciones para llegar a una igualdad de proporción entre los gases producto. Además, se utilizarán como datos bases para la simulación los datos experimentales de un reactor de lecho fijo con un flujo de biomasa de 50kg/h trabajando con una relación ER de 0.3 obteniendo un gas de síntesis con: CO = 15.6%, H₂ = 11% y CH₄ = 1.46%. Usando los parámetros anteriormente descritos, también se tuvieron en cuenta la variación de la temperatura del aire y la variación de la cantidad de masa de aire a la entrada del reactor al momento de ejecutar las simulaciones; esto arrojo como resultados que a bajas temperaturas y bajas relaciones de aire no se genera una condición autotérmica en el receptor.

Abstract

In this work, a biomass gasification reactor model will be developed using computational tools, considering kinetic parameters, bed characteristics, thermal profiles and gas composition. The biomass will be simulated as solid particles, aggregated at a low velocity in order to vary the retention periods of this, this comparing it directly with a real gasification reactor, together with a continuous medium gas phase. For the pyrolysis, a first order kinetic model will be used, using an intermediate specie Vol (g), where the composition of the product gases will be fixed from mass balances and correlations to reach an equal proportion between the product gases. In addition, experimental data from a fixed bed reactor with a biomass flow of 50kg/h working with an ER ratio of 0.3 will be used as base data for the simulation obtaining a syngas with: CO = 15.6%, H₂ = 11% and CH₄ = 1.46%. Using the parameters described above, the variation of the air temperature and the variation of the amount of mass of air at the reactor inlet were also considered when running the simulations; This showed as results that at low temperatures and low air relations an autothermic condition is not generated in the receiver.

Palabras Clave: Biomasa, pirolisis, gasificación.

Key Words: biomass, pyrolysis, gasification.

INTRODUCCIÓN

La Gasificación de biomasa es un proceso termoquímico de transformación de diversas materias primas a base de carbón carbono, hacia tres subproductos, Biochar, Bio-aceite y syngas a través de una oxidación parcial del carbono. Este último, (Syngas), puede ser empleado ya sea para la generación de energía eléctrica, energía térmica y/o la síntesis de otros compuestos químicos, ya que, bajo las condiciones de operación de la gasificación, el syngas está compuesto por una mezcla de gases con una importante contribución del hidrogeno H_2 , el monóxido de carbono C_O y metano por lo cual la gasificación de biomasa puede ser empleada en ciclos IGCC para la producción de energía electricidad a partir de motores de combustión interna diseñados para la utilización del syngas producto de la gasificación. Esta tecnología constituye un mecanismo para la generación de energía a partir de fuentes renovables y es clasificada dentro de las fuentes no convencionales de energía. La disponibilidad de biomasa residuales en centros urbanos y zonas rurales ha incrementado el interés sobre el desarrollo e implementación de este proceso en distintas escalas desde el uso ordinario en viviendas para suplir las necesidades básicas, hasta el uso industrial para la cogeneración de energía eléctrica y térmica. Sin embargo, la adecuación de sistemas de gasificación Biomasa depende fuertemente de la composición química de la biomasa (Análisis próximo y ultimo), la disponibilidad (Ciclos agrícolas) y seguridad alimentaria en el lugar a ser implementada. Siendo necesario la evaluación técnica y económica particular a cada zona bajo las condiciones anteriormente mencionadas. Desde el punto de vista operativo es necesario considerar distintos factores de operación como la temperatura de reacción, el agente gasificante, el tipo de biomasa, el tamaño de partícula de la biomasa, la tasa de transferencia de calor, la presión operativa, la relación de equivalencia, la adición de catalizadores y el tipo de reactor (Mohammed et al., 2011). Para la evaluación técnica de este proceso se requiere contar con herramientas capaces de considerar el efecto de los factores químicos (Composición, cinética, efectos catalíticos), fenomenológicos (Mecanismos de transferencia y transporte, balances de energía, efecto escala) y técnicos sobre los campos de distribución y la composición de productos de la gasificación de la biomasa.

Se han usado tallos de maíz (Resalta las pruebas experimentales y simulaciones más relevantes con tuza resultados generales que nos permitan mostrar los puntos a mejorar en el trabajo) para evaluar la influencia de parámetros de la gasificación, en donde se determinó que un aumento de ER promueve las reacciones de combustión, lo cual permite que se libere más calor incrementando la temperatura de gasificación (Guo et al., 2014). Lahijani, Zainal & Mohammadi en su investigación observaron los efectos del ER en el gas producto de la gasificación mediante análisis de varianza en un gasificador de lecho fluidizado, obteniendo que, a mayores valores de ER, la producción del gas se veía afectado en una mayor generación de hidrógeno hasta llegar a un ER aproximado de 0.23 y partir de ahí este empezaba a disminuir, se observó una disminución en el metano y el monóxido de carbono. Así mismo se observa que a mayores ER el poder calorífico disminuye, pero lo contrario ocurre con la Cold Gas Efficiency aumentando a medida que ER lo hace, lo cual implicaría un aumento en la tasa de producción de gas debido a que hay más aire en la mezcla. (Lahijani et al., 2013)

Este trabajo de investigación propone realizar una simulación de un reactor de gasificación de biomasa en lecho fijo de corriente descendente (Downdraft) a pequeña escala, que permita obtener y analizar los resultados al momento de realizar una gasificación de biomasa en un reactor comercial, mediante el análisis de sensibilidad en superficies de respuesta y regresiones codificadas. De esta manera se tendrá una base de referencia para futuras simulaciones o proyectos experimentales en los que se requiera saber las condiciones autotérmicas de un reactor de gasificación en lecho fijo de corriente descendente.

1. Estado del arte

Las herramientas CFD en el estudio del proceso de gasificación de biomasa, son usadas para la predicción de parámetros como la distribución de temperaturas y concentraciones del gas producto. Estas se realizan mediante las soluciones de ecuaciones de masa, momentum, energía y especies a través de una región discreta. Si las condiciones hidrodinámicas del reactor son bien conocidas en la realidad, los modelos CFD suelen dar entonces respuestas precisas. Para representar un buen modelo CFD en la gasificación de biomasa es preciso entonces encontrar una dinámica de flujo de fluidos representativa y una química muy específica con referencia al set de reacciones y cinéticas (Pepiot et al., 2010).

Yan-Pin Chyou (Chyou et al., 2010) desarrollaron la simulación numérica de gasificación de carbón pulverizado en un gasificador de flujo volante de dos etapas (entrained flow gasifier) empleando el software de volúmenes finitos FLUENT. El propósito de esta investigación es la de entender mejor el proceso de gasificación tanto en el gas como el del equipo, los tiempos de las reacciones químicas se asumieron mucho más rápidas que la escala de tiempo turbulenta de los eddies. Las ecuaciones de Navier-Stokes y transporte de especies fueron resueltas empleando el modelo de reacción eddy-breakup. Se estudió la influencia de la concentración de lodos en el carbón y la relación de O_2 /carbón durante el proceso de gasificación. En una condición de conversión casi completa del carbono de alimentación, se prefiere una baja concentración de lodo si se desea producir más H_2 junto con una temperatura de gas de síntesis más baja. En cambio, una mayor concentración de lodo genera una mayor producción de CO con una temperatura de gas de síntesis más alta. En el caso de una mayor relación de O_2 /carbón promueven la combustión mientras el poder calorífico del gas decrece a altas temperaturas. Por otro lado, una baja relación de O_2 /carbón generan un gas con mayor poder calorífico y una reducción de las temperaturas del gas producto.

La conversión termoquímica de biomasa es muy prometedora para la producción de biocombustibles y jugará un papel determinante en el desplazamiento del consumo de combustibles derivados del petróleo hacia fuentes renovables. Los enfoques empíricos han mostrado serias limitaciones en su capacidad para comprender y controlar los procesos de conversión. Sin embargo, sin la capacidad de predecir y optimizar con precisión el rendimiento de la conversión termoquímica, la comercialización a gran escala de estos sistemas se ve seriamente comprometida. En este contexto, la Dinámica de Fluidos Computacional (CFD) aparece como una herramienta esencial para comprender mejor los complejos procesos físicos y químicos involucrados, allanando el camino hacia estrategias eficientes de control y diseño. Después de una breve descripción de los modelos numéricos necesarios para simular la gasificación y pirólisis de biomasa, se detallan las contribuciones de CFD al diseño y optimización de procesos. Finalmente, se revisa el estado de la técnica en términos de modelos numéricos para los flujos de partículas densas y reactivas que se encuentran típicamente en los procesos de conversión. Se examinan las deficiencias de las simulaciones CFD existentes, especialmente en términos de validación y previsibilidad; y se sugieren direcciones para futuras investigaciones basadas en el progreso de CFD en otros campos.

Gao J y compañía (Gao et al., 2012) emplearon el software Fluent para modelar un gasificador tipo ciclón empleando aserrín como materia prima, las etapas de pirólisis, combustión de volátiles y char fueron ingresadas de modelos generales mediante cinética específica para cada una de las reacciones. Como resultados se obtuvieron porcentajes de conversión de carbón entre el 77 y 94.2%, eficiencias de gas en frío entre 53.6 y 63% variando en equivalente ratio ER entre 0.23 y 0.35, se obtuvieron como resultados poderes caloríficos hasta de 5.7MJ/Nm³. Los experimentos mostraron las mismas tendencias que los resultados CFD concluyendo que serán una herramienta adecuada para el desarrollo de gasificadores. Además de estudio el efecto de la relación aire/combustible, sobre las características de gasificación; lo que arrojó como resultado, que la relación aire/combustible varía de 0,23 a 0,35. Este modelo proporciona la información adecuada sobre la temperatura en el gasificador y la composición del gas de salida.

En el trabajo de Jakobs (Jakobs et al., 2012) se desarrolló un modelo CFD de gasificación a alta presión en un gasificador de flujo volante (entrained flow gasifier) en el cual se empleó un combustible líquido lodoso como materia prima, las ecuaciones de conservación y especies fueron resueltas en un software de volúmenes finitos. Para este trabajo se estudió el efecto de la calidad de atomización del combustible en función de la velocidad del gas y la presión del reactor. Se encontró que el diámetro medio de partícula (Sauter Mean Diameter SMD) está influenciado por la presión y velocidad del gas. Al incrementar la presión del reactor aumenta el diámetro de aerosol mientras que si se aumenta la velocidad disminuye el SMD. También se observó una influencia del SMD en el proceso a partir de las mediciones de concentración de metano y carbono orgánico, así como los perfiles de temperatura radial a lo largo de la línea central del reactor. Teniendo en cuenta que los tamaños mayores impregnan las paredes y pasaban a través del reactor sin reaccionar completamente.

Se analizó la calidad de atomización de las boquillas de fluido gemelas en función del gas y la presión del reactor, estos atomizadores desarrollados y caracterizados con un gasificador de flujo atmosférico para que se pudiera detectar la influencia de la calidad de la pulverización en dicho proceso. (influencia del aumento de la presión del reactor en la atomización)

Janajreh y sus colegas (Janajreh & al Shrah, 2013) investigaron la eficiencia de conversión en un gasificador Downdraft a baja escala empleando madera como materia prima. Con astillas de madera de 0.5 cm de grosor, 1 a 2 cm de ancho y 2 a 2.5 cm de longitud constituyente la materia del gasificador. Los perfiles de temperatura resultados de experimentaciones fueron comparados con la solución numérica empleando CFD en un modelo de evolución de partículas lagrangiana. La simulación numérica se realizó con una alta resolución de malla, se empleó fase gaseosa, solida, modelo de turbulencia k-e y modelos de reacciones químicas CFD. Volúmenes finitos con modéelos de transferencia de calor en las paredes metálicas fueron empleados. La distribución de temperaturas y evolución de especies se compararon con resultados experimentales y con un modelo de equilibrio adimensional. La temperatura media en CFD fue mucho más alta en comparación con las medidas experimentales, el poder calorífico del gas se determinó 19 puntos por debajo del calculado en el caso ideal. Debido a la complejidad de la naturaleza del flujo al interior de gasificador de lecho fijo, el modelo CFD no pudo adoptar la física y la química en comparación a otros estudios realizando en gasificadores de flujo volante (entrained flow) los cuales por su naturaleza son de altas temperaturas. Para tener en cuenta el tamaño de la partícula, se emplearon datos cinéticos de tamaños de 1cm en cual compensa diámetros de partícula de 0.1 mm usando el método de fase discreta.

B. Pandey y sus socios (Pandey et al., 2020), desarrollaron un modelo CFD axisimetrico en 2D de gasificador de tiro descendente Imbert, el cual fue validado con datos experimentales. Dicho modelo puede predecir los elementos CO, Hidrogeno, CO_2 con una gran precisión. Las composiciones del gas productor y la temperatura del gasificador se estudiaron con diferentes relaciones de equivalencia (ER), es decir, de 0.25 a 0.60. Esto arroja que a partir del aumento de la relación de equivalencia tiende a disminuir la cantidad de CO, hidrogeno y metano en el gas pobre mientras, que el nitrógeno y el CO_2 aumentan excesivamente. También se notó que con el aumento de la relación de equivalencia tiende a aumentar la temperatura en el interior del gasificador.

Los Autores T. Chen y compañía (T. Chen et al., 2021), tuvieron en cuenta que la generación de hollín era un problema importante en la gasificación de biomasa a alta temperatura, lo que daba como resultado la contaminación del aire y de equipos de gasificación. La naturaleza compleja de los materiales de biomasa y el proceso de formación de alquitrán hacen que sea difícil comprender completamente y describir los mecanismos de evolución y la generación de este a la escala del reactor. Esto, los entusiasmó a desarrollar un algoritmo integral de formación de alquitrán con dinámica de fluidos computacional (CFD) para la gasificación de biomasa, donde el precursor del alquitrán se modela utilizando un marco de pirolisis basado en componentes para distinguir la celulosa, la hemicelulosa y la lignina. Este modelo se valida primero con experimentos de pirolisis de

diferentes grupos de investigación, después del cual se estudia la generación de alquitrán durante la gasificación con vapor de biomasa en un horno de tubo de caída bajo diferentes temperaturas de funcionamiento (900-1200 °C).

En el estudio realizado por: N. Ngamsidiphogsa y sus compañeros (Ngamsidiphogsa et al., 2021), los residuos de palma aceitera, como los racimos de fruta vacíos (PEFB) de aceite de palma, normalmente se abandonan debido a la alta humedad y volumen que generan. La peletización y la gasificación de tiro descendente constituyen una solución prometedora para la producción de energía y calor a pequeña escala. En dicho estudio, se desarrolla un modelo dinámico (CFD) de un gasificador de tiro descendente Imbert modificado que consume PEFB peletizados. El mecanismo cinético detallado de la desvolatilización de la biomasa junto con el transporte a gran escala de partículas se incorpora a ecuaciones para que permitan una predicción precisa de la zona de pirólisis del gasificador. El lecho empacado de partículas de biomasa peletizadas se simula mediante el uso de un modelo CFD de medio poroso de transporte volumétrico que se valida comparando la predicción de las fracciones de volumen de especies en la salida de gas con datos experimentales publicados. Los perfiles de velocidad y temperatura de la corriente del gasificador se revelan, junto con la trayectoria de la evolución del alquitrán. La relación de equivalencia óptima se encuentra en 0.30 con base en la concentración de alquitrán de 5 mg y una eficiencia del gas frío de 62%.

Los Autores D. Yepes Maya y sus colegas (Yepes Maya et al., 2021), proponen y emplean un enfoque de modelado de complejidad mixta para crear un modelo de dinámica de fluidos computacional (CFD) en 3d para predecir la producción de gas de síntesis a partir de briquetas de *Miscanthus* en un gasificador de tiro descendente de dos etapas que opera con diferentes flujos de gasificación. El objetivo de este enfoque es reducir el costo computacional y al mismo tiempo proporcionar predicciones precisas; en comparación con la gasificación experimental con aire, el modelo predice correctamente el perfil de temperatura dentro del reactor, la composición de gas de síntesis (CO , H_2 , y CH_4) y, por tanto, el poder calorífico interior (LHV).

En el estudio realizado por S. Hwang, J Ho y U. Lee (Hwang et al., 2021), fue investigado numéricamente la gasificación de biomasa por soplado de aire en un gasificador de lecho fluidizado burbujeante (BFB), por medio de un modelo de elementos discretos acoplado con dinámica de fluidos computacional (CFD-DEM) en el que se empleó gas como continuo y partícula como fase discreta. En un estudio paramétrico, se realizaron cálculos para varios FN (Fluidization Number) y el valor de ER se fijó en 0.27, pero arrojaba un resultado con formación de CO_2 dentro del lecho fluidizado en la región de valores de FN superiores a 3.6. A medida que se aumenta el FN se observaron ligeras disminuciones en las concentraciones de CO y H_2 así como de CCE, por lo que no se recomendó aumentar el FN más allá de cierto valor. Finalmente, el CGE aumento para los valores de FN y ER entre 2.45 y 0.21 y 3.56 y 0.3, mientras que disminuyó para los valores de FN y ER superiores a 3.56 y 0.3; por lo tanto, los valores óptimos de de FN y ER se consideraron como 3.56 y 0.3.

R. Dong y sus socios (Dong et al., 2022), basaron su enfoque en que la combustión química en bucle se ha convertido en una tecnología de combustión prometedora para la captura de carbono. En su trabajo, el flujo reactivo gas-sólido en la gasificación de biomasa del reactor de combustible del sistema de combustión en bucle químico lo estudian numéricamente mediante un enfoque multifásico de partículas en celda bajo el marco Euleriano-Langragiano. En cuanto a la validación del modelo, los productos gaseosos que se obtuvieron numéricamente concordaron cuantitativamente con los datos experimentales de la literatura. Lo cual llevó a la discusión del comportamiento del flujo reactivo gas-sólido junto con el efecto de los parámetros operativos. Los resultados mostraron que la distribución no uniforme de la fase sólida a lo largo de la dirección axial resulta de la segregación inducida por tamaño/densidad, lo que da lugar a la acumulación de partículas transportadoras de oxígeno en fondo y la elutriación de las partículas de biomasa. El menor contenido de carbono existe en la región cercana al puerto de alimentación. Por encima de la posición de alimentación, se puede observar el aumento del contenido de carbono, pero la disminución de la masa de la biomasa;

aparece un pequeño contenido de CO y H_2 mientras existe una amplia gama de CO_2 en la región densa del reactor.

M. Yanga y sus compañeros (Yang et al., 2022), emplean un modelo de partícula en celda multifásica reactiva tridimensional (MP-PIC) para investigar la combustión y gasificación de biomasa en hornos de lecho fluidizado. Con este modelo basado en un método de grano grueso (CGM) se agrupan partículas de combustible y arena en parcelas, este se considera un modelo computacionalmente eficiente, sin embargo, puede causar inestabilidad numérica si los paquetes agrupados no están pasando celdas computacionales pequeñas, lo trae consigo una sobrecarga de partículas sólidas en las celdas. Para solucionar esto, en el estudio se propone implementar un método de núcleo de distribución (DKM) en un código abierto. Luego, el modelo se utilizó para estudiar la combustión/gasificación en el proceso de un reactor de lecho fluidizado burbujeante bajo temperaturas ambiente variables, proporciones de aire equivalentes y proporciones de vapor a biomasa. Con esto se demostró que el rendimiento de DKM mejora la precisión y solidez del modelo.

De qué manera se pueden establecer las condiciones de operación en un proceso de gasificación de lecho fijo tal que se alcance estabilidad autotérmica en un reactor de lecho fijo de corriente descendente.

2. Objetivo General

Desarrollar un modelo CFD de la gasificación de biomasa en lecho fijo de corriente descendente que permita evaluar los perfiles térmicos, hidrodinámica de lecho y composición de gases en función de las condiciones operativas del reactor.

2.1 Objetivos específicos

- Determinación de parámetros cinéticos y características de la conversión termoquímica para la biomasa de estudio.
- Simular y validar la gasificación autotérmica de biomasa en un reactor de lecho fijo empleando CFD.
- Estudiar las condiciones autotérmicas de la gasificación en función de las condiciones operativas empleando el método de superficie de respuesta.

3. Metodología

3.1 Modelo Matemático

3.1.1 Ecuaciones de conservación

La modelación del flujo de fluido a través del reactor se realizó empleando las ecuaciones de transporte en lecho poroso para acercarse al comportamiento de las presiones a lo largo del reactor y caracterizar la velocidad superficial de los gases en el lecho.

Ecuación de conservación de la masa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v) = \text{Ecuación (1)}$$

Ecuación de conservación de momentum

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v \otimes v) = \nabla \cdot \sigma + f_b \text{ Ecuación (2)}$$

Donde f_b es una fuerza resultante del cuerpo por unidad de volumen, σ es el tensor de esfuerzos, este puede describirse en términos de esfuerzos normales y cortantes como:

$$\sigma = -pI + T \text{ Ecuación (3)}$$

Donde p es la presión y T es el tensor de esfuerzo viscoso.

Ecuación de conservación de la energía

$$\frac{\partial}{\partial t} \int ((\chi(\rho E)_f + (1 - \chi)(\rho C_p)_s T) dV) dV + \oint \rho H v_s \cdot da = \text{Ecuación (4)}$$
$$- \oint \dot{q}^n \cdot da + \oint T \cdot v_s da + \int f_b \cdot v_s dV + \int S_u dV$$

El flujo de calor es definido como:

$$\dot{q}^n = -k_{eff} \nabla T \text{ Ecuación (5)}$$

k_{eff} Es la conductividad térmica efectiva del lecho definida como:

$$k_{eff} = \chi k_f (1 - \chi) k_s \text{ Ecuación (6)}$$

Para el presente trabajo se toma la conductividad de la madera aportando así una cercanía con la distribución de temperaturas desde el cuello de reacción hasta la zona superior de la pirolisis.

La transferencia de calor a través del lecho se determina mediante la expresión:

$$\dot{q}^n = (1 - \chi) \frac{\Delta T}{\left(\frac{1}{h_1} + R + \frac{1}{h_2}\right)} |a| + \chi(k\nabla T) \cdot a - \dot{m}H \quad \text{Ecuación (7)}$$

χ Es la porosidad definida como la relación entre el área de los espacios intersticiales y la superficie sólida, ΔT Es la diferencia de temperatura entre el espesor del lecho poroso, h_1, h_2 Son los coeficientes de transferencia de calor convectivo a cada lado de la superficie del lecho, R Es la Resistencia térmica de contacto por unidad de área, \dot{m} Es el flujo másico, H es la entalpia del fluido.

Donde E es la energía total por unidad de masa, q representa el flujo de calor y S_E una fuente de energía por unidad de volumen.

La radiación para este estudio se define mediante el modelo de Rosseland. Donde el flujo de calor por radiación tiene a misma forma de la ley de conducción de Fourier.

$$q_r = -16\sigma T n^2 T^3 \nabla T \quad \text{Ecuación (8)}$$

Donde n es el índice de refracción del medio, $\sigma = 5.67 \times 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}$ es la constante Stefan Boltzmann.

3.1.2 Ecuaciones de la gasificación de biomasa

Se detallan los fenómenos en las distintas etapas del proceso de gasificación: secado, Pirolisis (Devolatilización), Oxidación del char y reducción

Secado: en esta etapa, el contenido de humedad de la biomasa es evaporado antes de que otros procesos de transferencia de masa inicien. La ecuación de evaporación de la humedad de la fase solida (Biomasa) es definida como:

$$\frac{da_{wp} m_p}{dt} = -r_{wp} \quad \text{Ecuación (9)}$$

a_{wp}, m_p Son el área superficial y la masa de la partícula solida respectivamente, r_{wp} determina la tasa de evaporación.

Devolatilización de la Biomasa: La Devolatilización o pirolisis es representada mediante la siguiente expresión

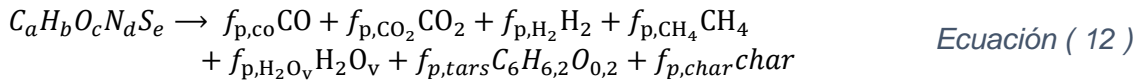


En esta etapa la biomasa solida es térmicamente convertida en una mezcla de gases $\text{Vol}(g)$ y Carbón en estado sólido $C(s)$. La velocidad de esta reacción para este estudio es determinada por un modelo cinético de primer orden en la forma de Arrhenius mediante la expresión:

$$k_{dev} = k_{dev} \exp\left(\frac{-E_{dev}}{R_U T}\right) \quad \text{Ecuación (11)}$$

Para determinar las especies que se generan en este proceso es necesario realizar un balance de masa partiendo de los resultados de un análisis elemental y emplear tres correlaciones empíricas.

$vol(g)$ es la mezcla de gases producto de pirolisis de la biomasa. Ecuación (11) representa la estequiometria del proceso de pirolisis.



$f_{p,CO}$, f_{p,CO_2} , f_{p,H_2} , f_{p,CH_4} , f_{p,H_2O_v} indican las concentraciones molares de la fase gaseosa producto que corresponden a $vol(g)$. $f_{p,tars}$ corresponde a la fracción de alquitranes y $f_{p,char}$ es el biochar restante luego de la devolatilización. En este caso se tienen siete incógnitas despreciando el azufre como especie. Tres ecuaciones se obtienen del balance de carbono, hidrogeno y oxigeno (ver Ecuación (12) Ecuación (14)).

$$a = f_{p,CO} + f_{p,CO_2} + f_{p,CH_4} + 6f_{p,tars} + f_{p,char} \quad \text{Ecuación (13)}$$

$$b = 2f_{p,H_2} + 4f_{p,CH_4} + 4f_{p,H_2O(g)} + 6.2f_{p,tars} \quad \text{Ecuación (14)}$$

$$c = f_{p,CO} + 2f_{p,CO_2} + f_{p,H_2O(g)} + 0.2f_{p,tars} \quad \text{Ecuación (15)}$$

El balance de carbono fijo (CF) se representa como:

$$f_{p,char} MM_{Char} = CF * MM_{Bio} \quad \text{Ecuación (16)}$$

MM_{Char} y MM_{Bio} son las masas moleculares del Char y la biomasa respectivamente. Las tres ecuaciones restantes corresponden a correlaciones empíricas en función de la temperatura de la pirolisis.

$$\frac{f_{p,CO}}{f_{p,CO_2}} = \alpha_1 \frac{MM_{CO_2}}{MM_{CO}} \quad \text{Ecuación (17)}$$

$$\frac{f_{p,CH_4}}{f_{p,CO_2}} = \alpha_2 \frac{MM_{CO_2}}{MM_{CH_4}} \quad \text{Ecuación (18)}$$

$$\frac{f_{p,H_2O(g)}}{f_{p,CO_2}} = \alpha_3 \frac{MM_{CO_2}}{MM_{H_2O(g)}} \quad \text{Ecuación (19)}$$

α_1 , α_2 y α_3 corresponden a las siguientes correlaciones empíricas en función de la temperatura de pirolisis: (Thunman et al., 2001)

$$\alpha_1 = 1.94 \cdot 10^{-6} T^{1.87} \quad \text{Ecuación (20)}$$

$$\alpha_2 = 1.305 \cdot 10^{-11} T^{3.39} \quad \text{Ecuación (21)}$$

$$\alpha_3 = 0.85 - 0.95 \quad \text{Ecuación (22)}$$

Para este trabajo se toma un valor de $\alpha_3 = 0.9$. El software Matlab es empleado como solver para obtener la composición de los gases devolatilizados en la pirolisis, La temperatura de evaluación inicial se asume 800 K, luego, este valor se realimenta con las iteraciones del campo de temperaturas durante la simulación del proceso en CDF mientras la simulación estabiliza.

Oxidación del Biochar (Carbón): La Combustión del carbón se da sobre la superficie de la partícula solida con un agente oxidante mediante las reacciones R10, R11 y R12 (ver Tabla 5). Mediante un balance de masa se obtiene la tasa de formación de Bio-Char a partir de la tasa de Devolatilización de la biomasa sólida, derivando en la siguiente expresión:

$$r_{hpn} = \frac{r_{vpn}(1 - YY_{pn})}{YY_{pn}} \quad \text{Ecuación (23)}$$

YY_{pn} es el coeficiente estequiométrico para la Devolatilización de la partícula (Biomasa), r_{hpn} la tasa de formación de Char y r_{vpn} es la tasa de devolatilización. El Biochar reacciona heterógamamente con el oxígeno gaseoso difuso en la superficie de la partícula sólida. Las cinéticas de la reacción se muestran en la Tabla 5 (Ver R9, R10 y R11). La tasa de reacción global de la reacción del Biochar r_{hpl} es determinada mediante la siguiente expresión:

$$r_{hpl} = \frac{A_p^2 M_{hp} M_g \phi_l k_{cpl} k_p \zeta_{pl} C_{olg} C_g}{M_g A_p C_g (\zeta_{pl} k_{pl} + k_{cpl}) + r_p} \quad \text{Ecuación (24)}$$

El coeficiente de transferencia de masa k_{cpl} es calculado a partir del número de Sherwood basado en la correlación de Ranz-Marshall. Se asume la porosidad de la partícula $\zeta_{pl}=1.0$, M_{hp} , M_g son los pesos moleculares del char y la mezcla de gas en contacto con este respectivamente, C_g es la concentración de gas, A_p es el área superficial de la partícula.

3.2 Simulación del proceso de gasificación

3.2.1 Construcción del CAD con las dimensiones

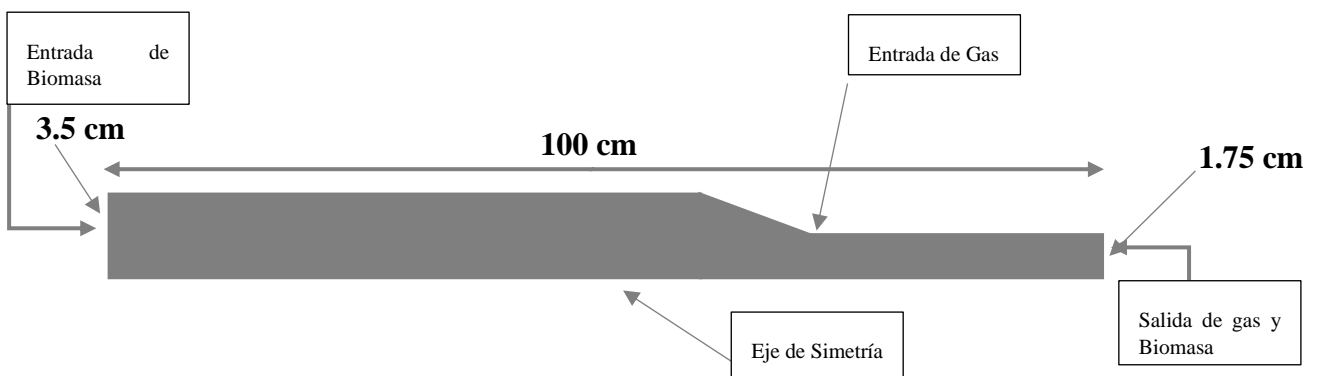


Ilustración 1 Esquema del reactor de estudio.

El que se diseñó para esta simulación no es de un reactor comercial, es un reactor de estudio a pequeña escala en el cual se observara el comportamiento de las reacciones que se dan en un reactor comercial, cuenta con una longitud de 100 cm de largo, un diámetro mayor el cual es la

entrada de biomasa de 3.5 cm de radio, la entrada de gas está ubicada a 70 cm de la entrada de la biomasa, cuenta con un diámetro menor que tiene 1.75 cm de radio el cual es la salida de gas y biomasa y por último la simulación cuenta con un eje de simetría a lo largo del reactor esto con el fin de dividir a la mitad el dominio computacional y tener mayor rapidez al momento de obtener los resultados, además, la condición de frontera que se está utilizando para esta modelación es la condición de temperatura fija en el flujo de aire en la entrada, la cual se modificó para observar el comportamiento de los diferentes compuestos a lo largo del reactor.

Para el desarrollo de la evaluación numérica se usó el software Ansys Fluent de Volúmenes finitos, un modelo euleriano para la fase gaseosa y lagrangiana para las partículas de biomasa con interacción entre ellas. Un standard k_ϵ es usado para resolver el régimen turbulento en la fase continua mientras que los mecanismos de reacción gas-gas y superficial solido-gas fueron modelados mediante Finite-Rate/Eddy Dissipation Model en el cual se usan de forma conjugada las cinéticas de Arrhenius y la tasa mezcla turbulencia de especies. Si bien no se modela un lecho fijo propiamente, en este estudio se adaptan externamente las fuerzas y condiciones sobre la inyección de partículas con el fin de representar los tiempos de retención de la biomasa en un gasificador de lecho fijo tipo Downdraft. Para esto se debe evitar que las partículas se muevan en dirección del fluido por lo que se adapta un modelo de fuerza de arrastre Stokes-Cunningham Drag.

$$F_D = \frac{18\mu}{d_p^2 \rho_p C_C} \quad \text{Ecuación (25)}$$

$$C_C = 1 + \frac{2\lambda}{d_p} (1.257 + 0.4e^{-(1.1d_p)/2\lambda}) \quad \text{Ecuación (26)}$$

Donde μ es la viscosidad del gas donde se mueve la partícula, d_p es el diámetro de la partícula (distribución de tamaño de la biomasa), ρ_p densidad aparente de la biomasa y C_C es el factor de corrección de Cunningham. Para este estudio se ajustó en un valor de 3×10^3 de tal forma que F_D fuera indicada para evitar que la partícula se desplace en dirección a las líneas de flujo (específicamente en casos de recirculación y flujo ascendente) lo cual no representaría de forma correcta la dinámica de la biomasa en lecho fijo.

3.3 Propiedades de transporte y cinética de pirolisis

Como materia prima para este estudio se emplean residuos de cosecha de maíz, específicamente la tusa la cual es caracterizada mediante análisis próximos y elementales para la realización de balances de masa en la Ecuación (11)

Análisis próximo		Análisis elemental %	
Humedad (%)	10.52	C (%)	39.95
Cenizas (%)	7.71	H (%)	4.97
Material Volátil (%)	65.23	O (%)	54.3
Carbono Fijo (%)	16.54	N (%)	0.6
		S (%)	0.18

Tabla 1 Resultados de ensayos de análisis elementales de la biomasa

En un estudio realizado en la universidad de ciencia y tecnología de Beijing se analizaron y diferenciaron los resultados de la caracterización térmica y fisicoquímica de la mazorca de maíz vacía o tusa (CC), el biochar derivado del aserrín (SD) y el tallo de maíz (CS). (Liu et al., 2014)

El proceso de pirólisis podría dividirse en tres etapas. La primera etapa (etapa de secado) con una ligera pérdida de masa de alrededor del 10% se llevó a cabo de 50 a 150 °C, que se conformó con

la extracción de humedad en las muestras de biomasa. La segunda etapa (etapa de descomposición pirolítica) se alineó con la parte principal de pérdida de masa. Los rangos de pérdida de masa de las muestras estudiadas estuvieron dentro del rango de temperatura 200-500 °C. Dentro de este rango, tuvo lugar una descomposición térmica pirolítica de celulosa y hemicelulosa en el reactor. Los volátiles primarios producidos a partir del craqueo térmico de enlaces químicos comprendían compuestos en fase gaseosa no condensables (p. ej., CO_2 , CO y CH_4) y gases condensables en condiciones ambientales. La tercera etapa (etapa de carbonización) se debió al proceso de condensación y una mayor descomposición térmica de residuos sólidos como carbonos y materia inorgánica.

Los resultados obtenidos del estudio del proceso de pirólisis en CC, SD y CS se muestran en la siguiente tabla (Tabla 2).

Residuos vegetales	Rango templado °C	Pérdida de masa (%)	Modelo de mecanismo	E ($\frac{KJ}{mol}$)	E_0 ($\frac{KJ}{mol}$)	r2
CC	203-325	57.8	F2	158.16	122.42	0.9977
	325-457	33.2	A4	60.19		0.9712
CS	210-461	52.6	F2	183.75	155.13	0.9935
	318-461	30.7	F1	106.10		0.9876
Dakota del Sur	225-375	77.9	F2	161.87	161.87	0.9741

Tabla 2 Estudio del proceso de pirólisis en residuos vegetales

Los resultados muestran que la energía de activación de CC fue menor que los de CS y SD. E_0 representa la energía mínima requerida para iniciar una reacción. Este estudio sugiere que el proceso de pirólisis de CC requiere menos energía que los otros dos residuos vegetales y funciona mejor para el tratamiento térmico. Los resultados revelaron que CC contiene más grasas, proteínas y azúcares que CS y SD.

La tasa de devolatilización se determina mediante una cinética simple (ver Ecuación (10)) donde: $E_{dev} = 158.16 \text{ kJ mol}^{-1}$ y $k_{dev} = 6.873 \times 10^5$ son la energía de activación y factor de frecuencia de la reacción de devolatilización (J. Chen et al., 2017) ,(Liu et al., 2014)

Para la densidad de la biomasa, se tuvo en cuenta mazorcas vacías crudas (tusa de maíz), se secaron naturalmente y se cortaron en una longitud de 5 cm antes de colocarlas en el sistema de gasificación. Para preparar las mazorcas vacías torrefactas, las mazorcas vacías crudas se secaron al horno y se cocieron en el horno a una temperatura de cocción de 300 ° C durante 30 minutos Después de eso, las mazorcas vacías cocidas se cortaron en una longitud de 5 cm antes de usarse como materia prima, estos trozos de mazorca cuentan con una densidad aparente de la biomasa $\rho_p = 249.34 \text{ kg /m}^{-3}$ (Laohalidanond et al., 2017)

La capacidad calorífica para el presente estudio fue de $C_p = 0.56 \times 10^3 \text{ j kg}^{-1} \text{K}^{-1}$ determinada mediante la medición con el instrumento de conductividad térmica HILTON del laboratorio de termodinámica de la universidad Abubakar Tafawa Balewa de Bauchi en Nigeria. Este aparato permite la medición precisa de la temperatura y el suministro de energía en sondas de temperatura de respuesta rápida, A la muestra se le realizaron diferentes procesos para eliminar rastros de suciedad (arena y grasa) y otras impurezas, luego se molieron las muestras a tamaño de partícula de 0.075 mm y se combinó con un 5% de aglutinante (almidón/agua) para asegurar una compactación adecuada, se agregó la mezcla al molde y se dejó secar al sol de 2 a 5 días

dependiendo de las condiciones atmosféricas. En total se realizaron 9 muestras para sacar un promedio total. (Kyauta et al., 2014)

La conductividad térmica se obtuvo de una investigación realizada en la Universidad de Trás-os-Montes e Alto Douro, (UTAD), Portugal. El experimento se llevó a cabo con sensores de flujo de calor y sensores de temperatura superficial los cuales fueron instalados sobre tableros de mazorca de maíz vacía (tusa) granulada, en base a los resultados obtenido de este experimento se estimó la conductividad térmica de la tusa de maíz en $K_p = (0.058)_w m^{-1}K^{-1}$. (Pinto et al., 2016)

Para definir el tamaño de partículas se hacen mediciones experimentales y una aproximación volumétrica a su forma esférica. Los diámetros equivalentes mostrados en la Tabla 3 se ajustan a un modelo de distribución de Rosin–Rammler y 10 tamaños de partículas.

Diámetro Mínimo	0.0286 m
Diámetro Medio	0.0380 m
Diámetro Máximo	0.0410 m

Tabla 3 *Diámetros de distribución de biomasa cruda*

3.4 Método de solución

En cuanto a la solución en CFD se empleó el método de solución segregadas para las ecuaciones de continuidad, momentum, energía y transporte de especies de forma secuencial. Se emplea el esquema de segundo orden de discretización para las ecuaciones de momentum, energía cinética turbulenta, la disipación turbulenta, energía y las especies. SIMPLE algoritmo es usado en este estudio como algoritmo de acoplamiento presión-velocidad. Los datos experimentales de esta investigación fueron recopilados en la planta de gasificación de lecho fijo de la Universidad Pontificia Bolivariana realizada por el grupo OPUREB (Optimización de procesos y uso racional de la energía y biomasa)

N	Reacción	E [J/kmol]	k_0
R1	Pirolisis $Vol \rightarrow CO + CH_4 + H_2 + N_2 + H_2O + O_2 + Tar$	2.027×10^7	2.119×10^{11}
R2	Oxidación de CO: $CO + 0.5O_2 \rightarrow CO_2$	1.7×10^8	2.23×10^{12}
R3	WGS: $CO + H_2O \rightarrow CO_2 + H_2$	2.88×10^8	2.35×10^{11}
R4	RWGS: $CO_2 + H_2 \rightarrow CO + H_2O$	3.26×10^8	1.785×10^{12}
R5	Oxidación de H_2 : $H_2 + 0.5O_2 \rightarrow H_2O$	3.1×10^7	9.87×10^8
R6	Oxidación de H_2 rev: $H_2O \rightarrow H_2 + 0.5O_2$	2.728×10^8	2.06×10^{11}
R7	Oxidación de CH_4 : $CH_4 + 1.5O_2 \rightarrow CO_2 + H_2O$	2×10^8	5.012×10^{11}
R8	Reformado de CH_4 : $CH_4 + H_2O \rightarrow CO + 3H_2$	2.09×10^8	5.922×10^8
R9	Oxidación de Tar: $Tar + O_2 \rightarrow CO$	1.0×10^8	1.0×10^{15}

Tabla 4 Reacciones en fase gaseosa

N	Reacción	E [J/kmol]	k_0
R10	Combustión de Char $C(s) + O_2 \rightarrow CO$	1.3×10^8	300
R11	Gasificación Boudouard $C(s) + CO_2 \rightarrow CO$	2.2×10^8	2224
R12	Gasificación H_2O $C(s) + H_2O \rightarrow CO + H_2$	1.42×10^8	42.5
R13	Gasificación H_2 $C(s) + 2H_2 \rightarrow CH_4$	1.5×10^8	1.62
R14	Reformado de alquitrán con vapor $Tar + 6H_2O \rightarrow 9H_2 + 6CO$	1.68×10^8	1.98×10^7

Tabla 5 Set de reacciones del Char

4. Resultados y discusión

Para realizar la simulación se utilizaron las reacciones obtenidas en el reactor de lecho fijo de la Universidad Pontificia Bolivariana por el grupo OPUREB las cuales están descritas en las tablas anteriores, se optó por una simulación en 2D para tener un mejor resultado y tener más claridad al momento de analizar la información obtenida en la simulación.

4.1 Análisis del modelo

4.1.1 Temperatura

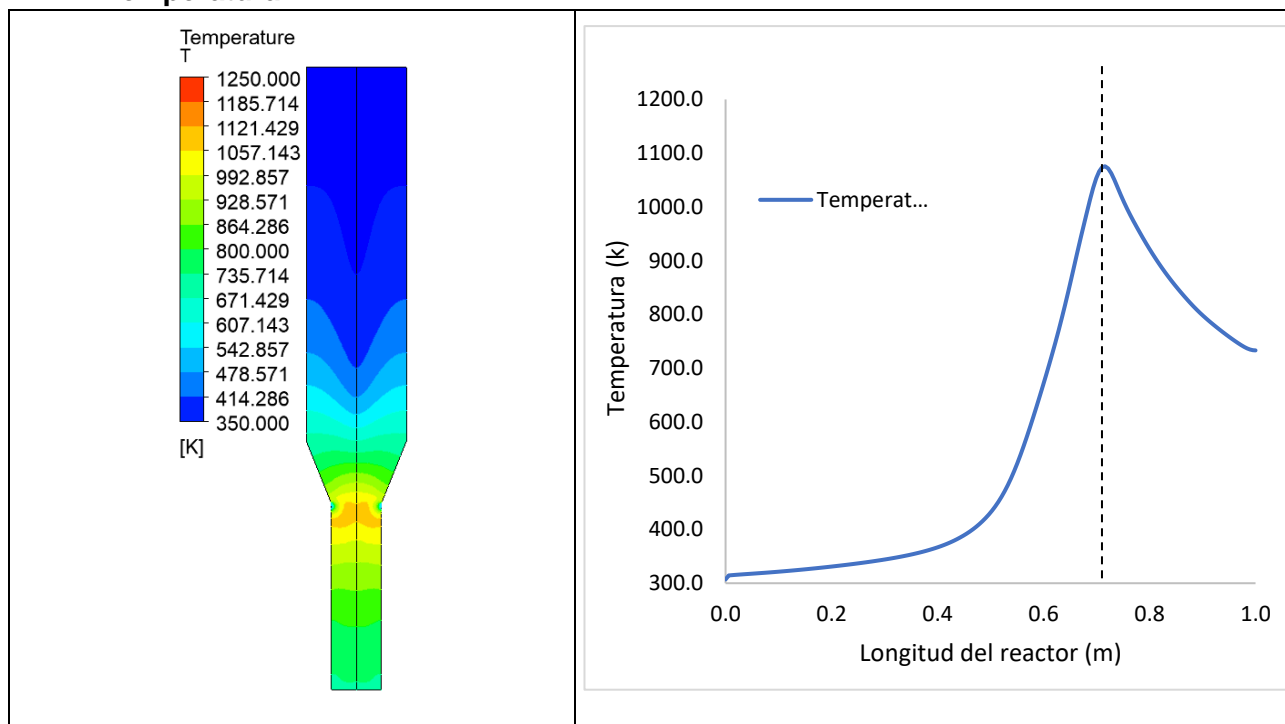


Ilustración 2 Contorno y perfil de temperatura a lo largo del reactor

La temperatura máxima registrada en el reactor fue de 1250 K como se observa en la Ilustración 2 y la posición de ascenso en el reactor se dio una distancia de 70 cm de la entrada de biomasa marcando una temperatura 1075,57 K, luego de esta posición la temperatura comienza a disminuir esto debido a que comienzan a parecer las reacciones endotérmicas las cuales necesitan de energía (en este caso temperatura) para poder reaccionar. Entre estas reacciones tenemos las reacciones de gasificación y reformado (ver Tabla 4).

4.1.2 Composiciones

A continuación, se muestra una comparación entre los datos obtenidos experimentalmente y los datos obtenidos con nuestro modelo numérico.

Especies Fracción Molar (%)	Modelo numérico a la salida del reactor (%)	Modelo experimental (%)
H ₂	13,89	11,37
CO	12,90	17,02
CO ₂	15,19	13,48
CH ₄	1,2	1,62
Poder calorífico gas producto (MJ/Nm ³)	4.07	3.95
Temperatura (K)	1054	1278

Tabla 6 composiciones de especies en el reactor valores numéricos vs valores experimentales

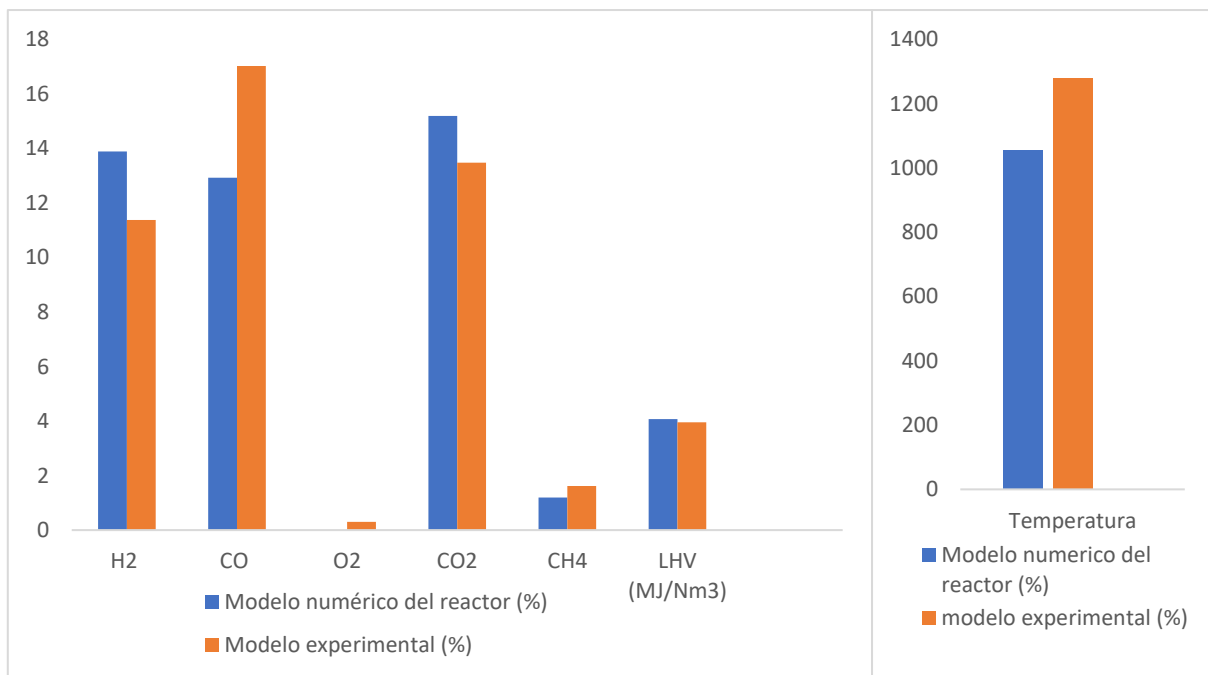


Ilustración 3 Composiciones de gas de síntesis. Experimental & Simulación CFD

Se puede observar que la temperatura más alta que se registra es justo en el cuello de reacción que está ubicado a 0.70 m de la entrada de biomasa y luego de este punto la temperatura comienza a descender debido a la aparición de las reacciones endotérmicas principalmente las de gasificación en presencia de biochar, es de resaltar que los datos del modelo numérico son muy semejantes a los resultados obtenidos experimentalmente en el laboratorio de gasificación de biomasa de la universidad pontificia bolivariana. Respecto al desarrollo de especies combustibles, en la Ilustración 5 se aprecia el incremento en la concentración de CO, H₂, y CH₄ antes de la zona de inyección del agente gasificante, coligado a las reacciones de pirolisis de la biomasa.

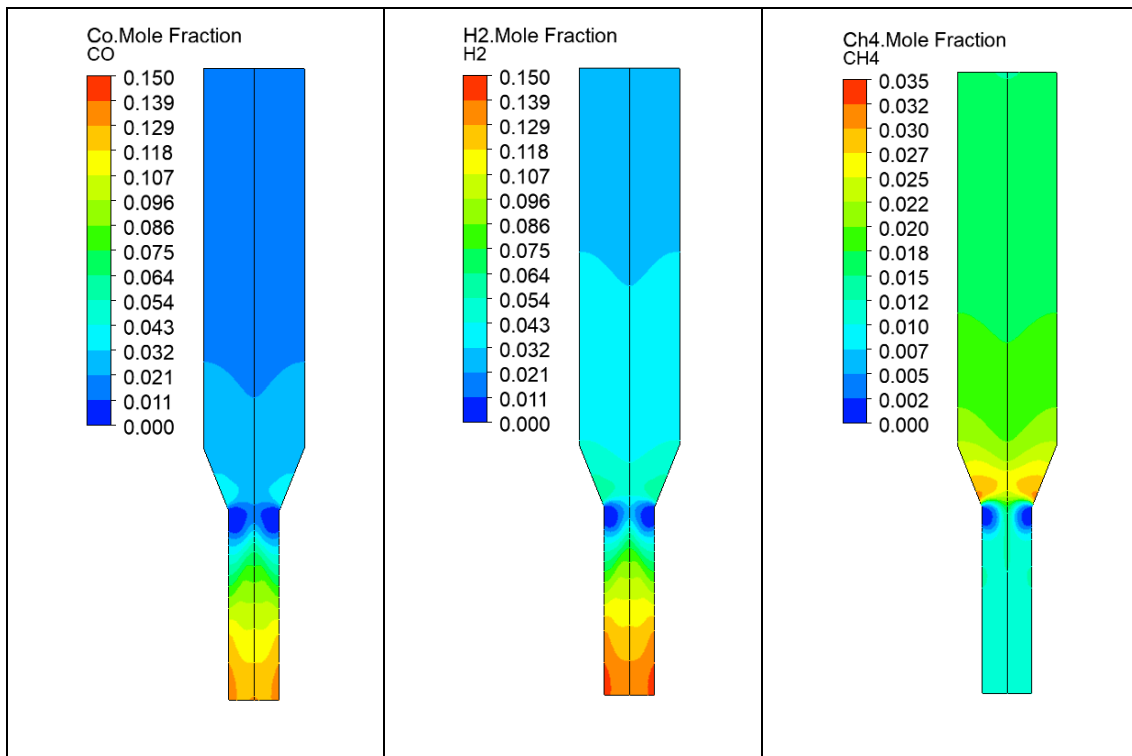


Ilustración 4 Fracción molar de gases distribuidos al interior del reactor

La Ilustración 4 muestra los contornos de distribución de especies al interior del reactor, donde se observa que la mayor concentración de especies combustibles como el CO y el H₂, se generan por debajo del cuello de reacción en la zona de reducción. Respecto a los gases no condensables como el CH₄, estos provienen mayormente de las reacciones generadas encima de la garganta del reactor. Las especies combustibles gaseosas y solidas salientes de la zona de pirolisis se oxidan al pasar por la garganta rica en oxígeno.

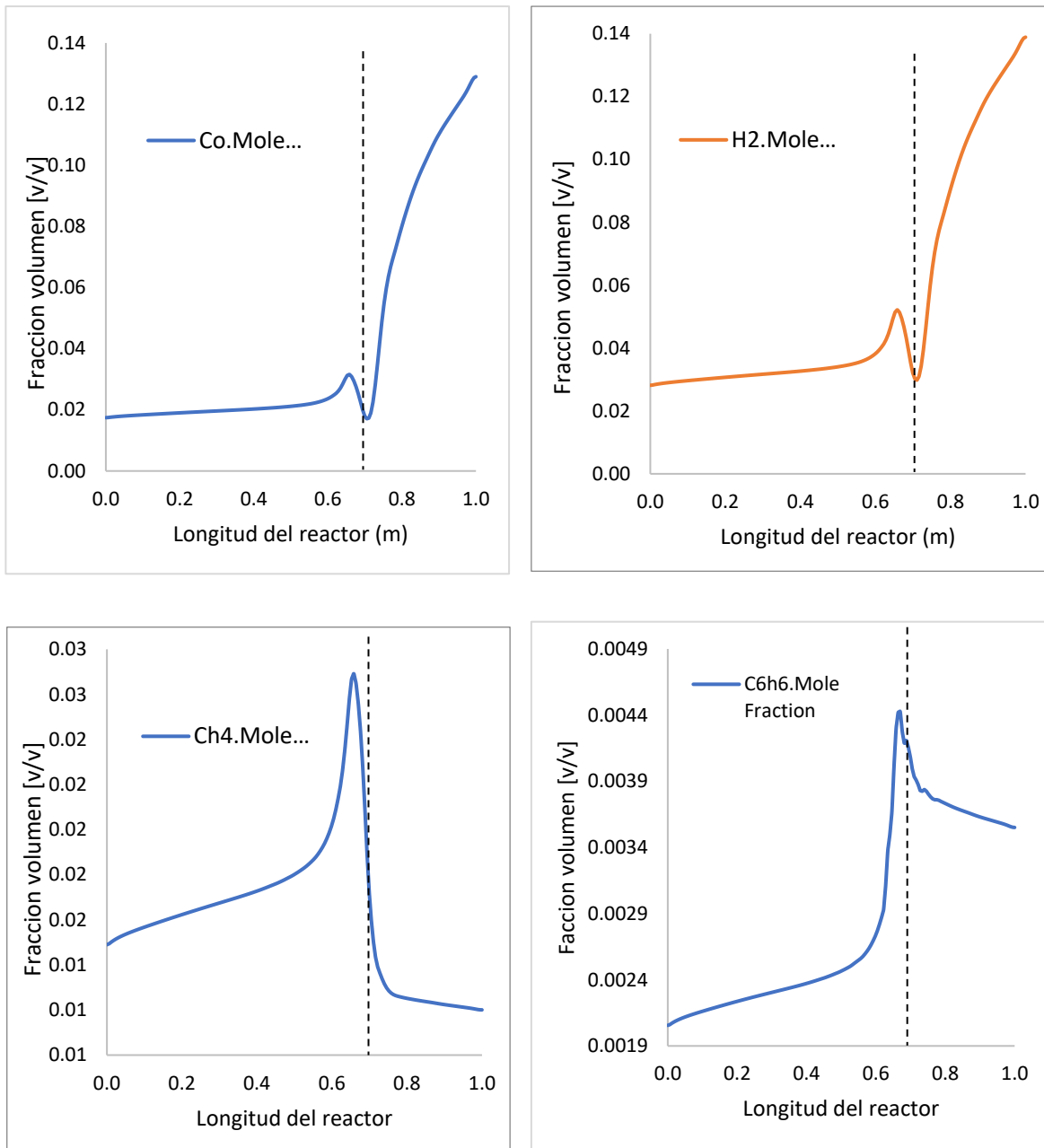


Ilustración 5 Perfiles de Fracción Volumen de las especies gaseosas combustibles

Se debe resaltar que todas las curvas de la Ilustración 5 están medidas en fracción volumétrica de gas [v/v], como se puede observar todas las curvas reaccionan justo por debajo del cuello de reacción, es decir, cada curva reacciona a 70 cm de la entrada de biomasa del reactor que es donde se encuentra la entrada de aire.

4.2 Análisis de Sensibilidad

Este análisis de sensibilidad se realizó con el fin de conocer el comportamiento de los gases dentro del reactor, para realizar este análisis se realizó una variación tanto del flujo másico de aire como de la temperatura de entrada de aire al reactor, a través de la temperatura de aire se mide el nivel mínimo de energía que necesita el proceso para mantenerse en una condición auto térmica mientras que la masa del aire indica la relación estequiométrica de ER para poder activar los mecanismos de reacción.

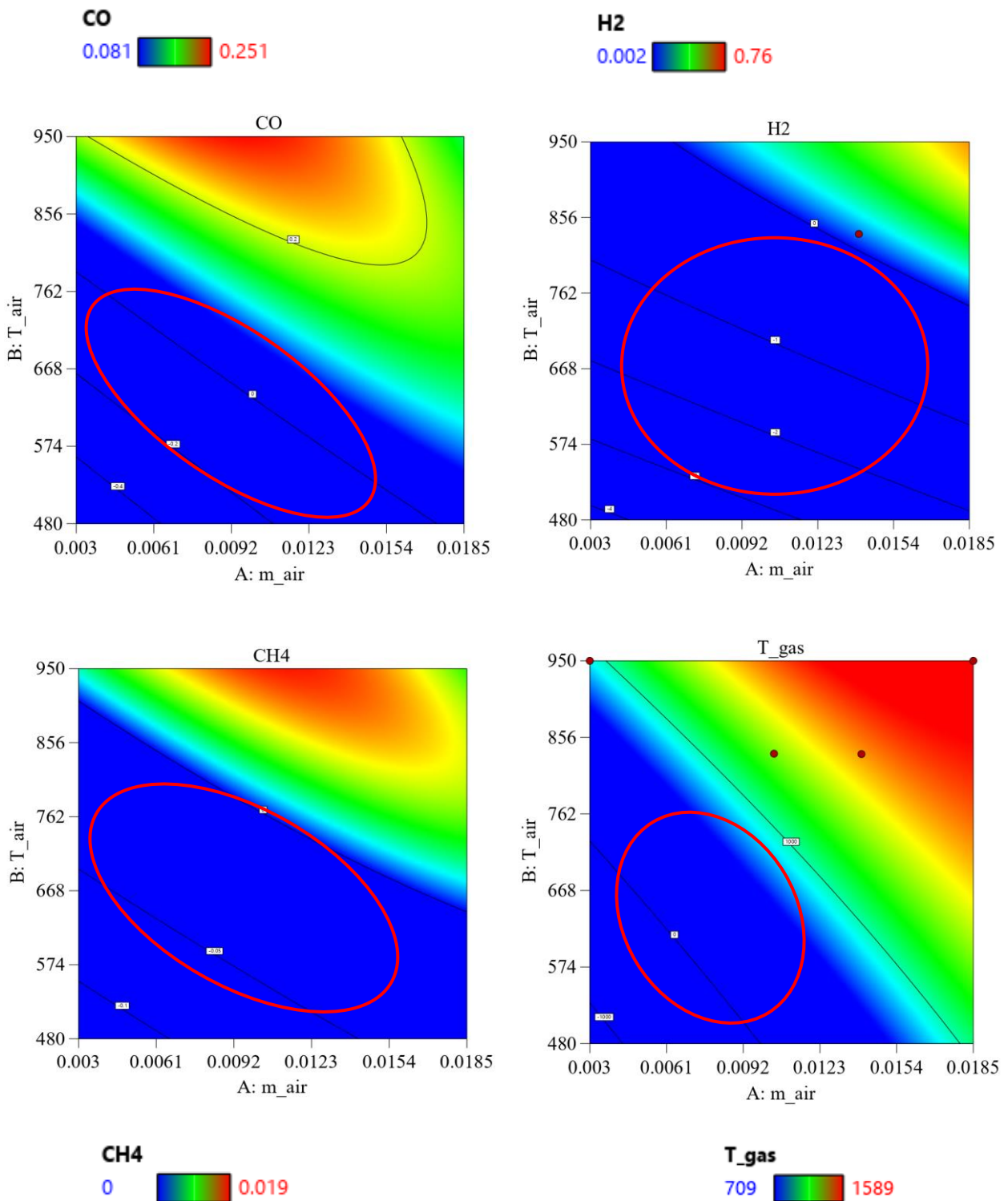


Ilustración 6 Contorno de especies gaseosas combustibles y temperatura

Como se observa en la **T_{gas}**

709 1589

CH4
0 0.019

Ilustración 6, las especies CH_4 , CO y H_2 incrementan a medida que la masa de aire y la temperatura del aire aumentan, siendo la temperatura del aire el factor con mayor efecto para la generación de

especies combustibles. Las zonas azules del contorno señalan las condiciones de operación en la cual las reacciones de pirolisis y gasificación no se activan debido a la baja demanda de energía térmica puesto que no se alcanzan estados autotérmicos.

En la gráfica de la temperatura a la salida del reactor se observan las condiciones en las cuales el reactor no supera la región autotérmica; lo que provoca que el reactor no encienda. Toda la zona azul hace referencia a las configuraciones en las cuales el reactor no encenderá, ya que para que se genere la gasificación debe estar de la zona autotérmica hacia arriba. Estas condiciones aquí simuladas también fueron comprobadas experimentalmente en un reactor de gasificación comercial a través de la manipulación del flujo de aire.

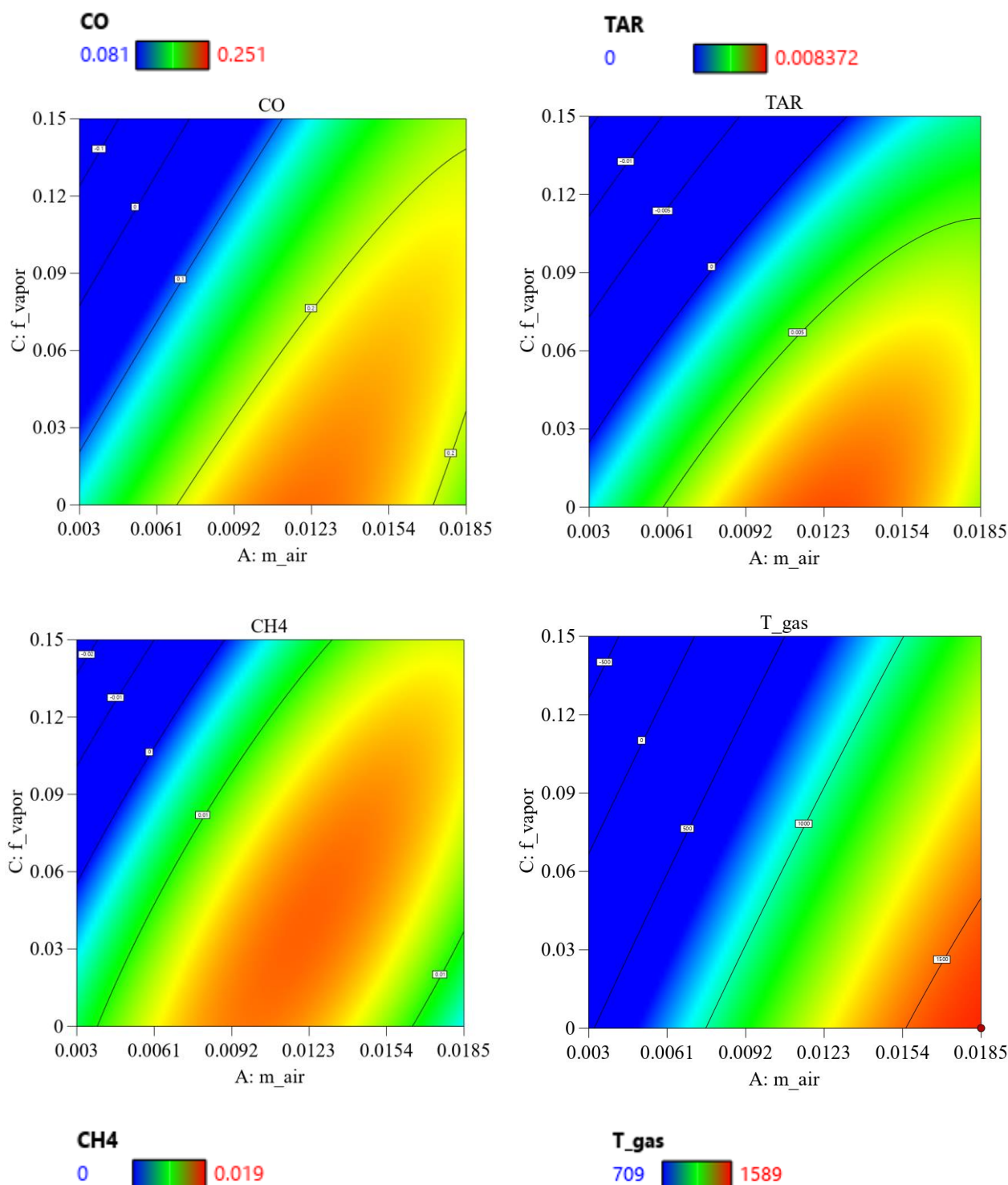


Ilustración 7 Efecto de la fracción de vapor en el reactor



Ilustración 7 se aprecia con claridad que, si se aumenta la fracción de vapor en el reactor, ocasionara que este se apague o que se deba suministrar más aire (oxígeno) para evitar que el reactor se apague. El hecho de que la humedad sea alta en el reactor provocará que la generación de CH_4 , CO y TAR y la temperatura a la salida del reactor disminuyan, la cantidad máxima de generación de los productos es cuando la humedad es casi nula en el interior del reactor.

En conclusión, si se desea generar altos valores de productos CH_4 , CO y H_2 , se debe aumentar la temperatura del aire, aumentar la masa del aire y reducir al mínimo la fracción de vapor.

4.2.1 Análisis de sensibilidad basado en regresiones codificadas

	CO	H_2	CH_4	TAR	T_{gas}
A	+0.184	0.3456	+0.0261	+0.0082	+758.42
B	+0.2825	+1.05	+0.0443	+0.0071	+699.93
C	-0.1229	-0.0638	-0.0142	-0.0044	-379.19
D	+0.0285	+0.5675	+0.0027	+0.0023	+111.43
AB	-0.1615	-0.3091	-0.0242	-0.0057	-403.34
AC	+0.077	-0.0105	+0.0103	+0.0038	+215.74
AD	-0.0308	-0.3935	-0.0026	-0.001	-53.78
BC	+0.1116	+0.0371	+0.0116	+0.0041	+369.57
BD	-0.0581	-0.6829	-0.0037	-0.0021	-109.14
CD	+0.0255	+0.0185	+0.003	+0.0032	+37.5
A^2	-0.0758	-0.0582	-0.0103	-0.0037	-244.86
B^2	-0.0866	-0.5605	-0.0181	-0.0011	-107.64
C^2	-0.0215	-0.0405	-0.0041	-0.0016	-58.9
D^2	-0.0216	-0.0154	-0.0033	-0.0014	-32.58

Tabla 7 Análisis de sensibilidad basado en regresiones codificadas

Donde,

A = Masa de Aire

B = Temperatura del Aire

C = Fracción de Vapor

D = Fracción Volátil (VM)

La Tabla 7 es muy importante, ya que en esta se pueden observar las condiciones que favorecen en la obtención de los productos que se desean. Si lo que se busca es una producción rica en H_2 se debe buscar la forma de que al momento de introducir el aire este tenga una temperatura elevada debido a que esta condición es la que mas favorece al momento de producir H_2 . Si lo que queremos

es reducir la formación de alquitranes (TAR) lo se debe hacer es tratar de ingresar la menor cantidad de masa de aire posible.

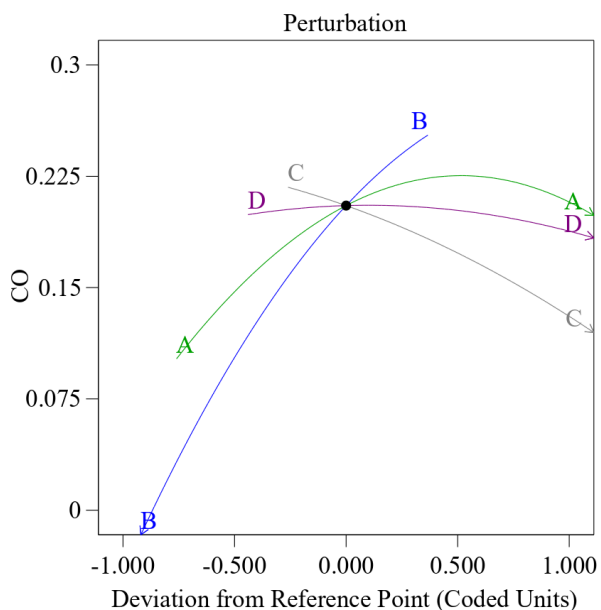


Ilustración 8 Grafica de Perturbación del Monóxido de carbono

- A= masa de aire
- B=Temperatura de aire
- C=Fracción de vapor
- D=Volátiles

En la Ilustración 8, se observa con mayor claridad que la temperatura del aire es el factor que más afecta en la gasificación junto con la masa de aire. Cuanto más se aumenten estos dos factores más CO se obtendrá; los volátiles no afectan en nada la gasificación, por el contrario, cuando aumentamos la fracción de vapor el CO disminuye.

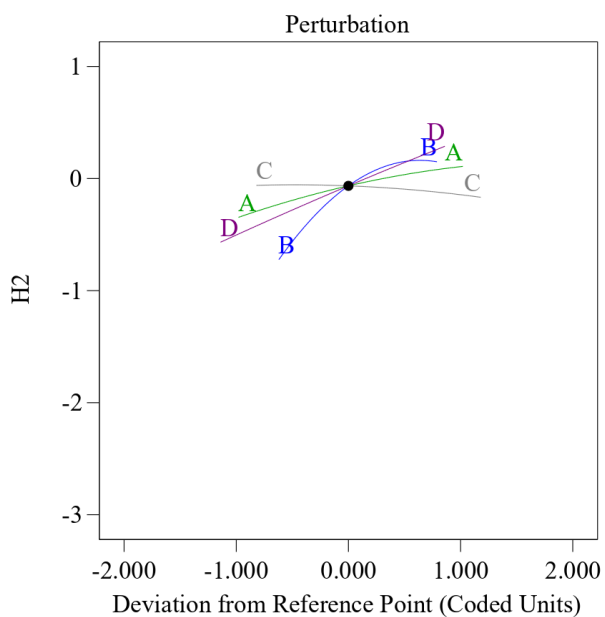


Ilustración 9 Grafica de Perturbación para el Hidrogeno

A= masa de aire
 B=Temperatura de aire
 C=Fracción de vapor
 D=Volátiles

Ahora, en la Ilustración 9 se puede determinar que aparte de la masa y la temperatura del aire, los volátiles también aumentan un poco la generación de H_2 .

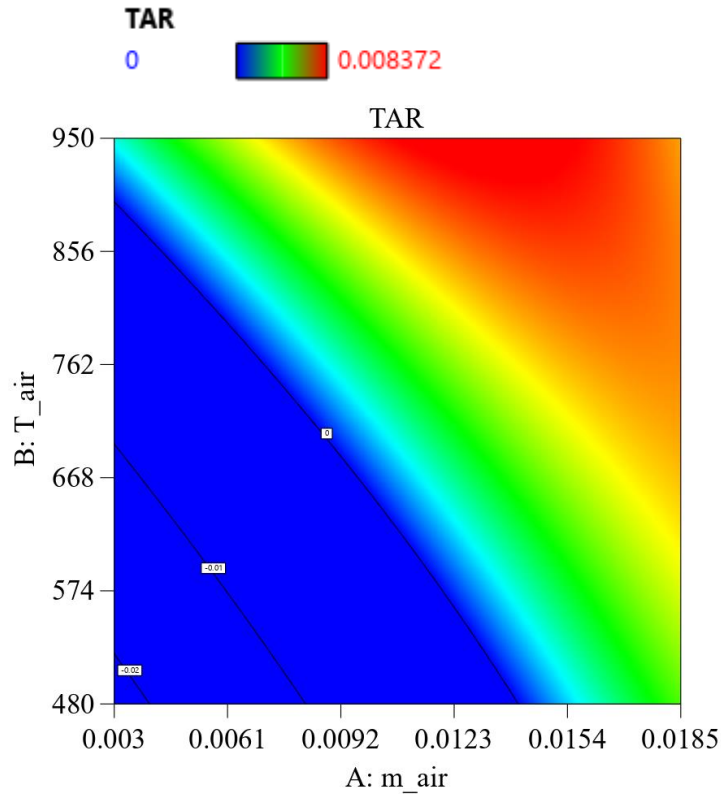


Ilustración 10 Contorno de TAR

Para el TAR (Ilustración 10) se observa, que a medida que se aumenta la temperatura y la masa del aire se generan más alquitranes, por lo que se debe buscar un equilibrio en el cual se puedan obtener altos niveles de CH_4 , CO , H_2 y bajos niveles de TAR.

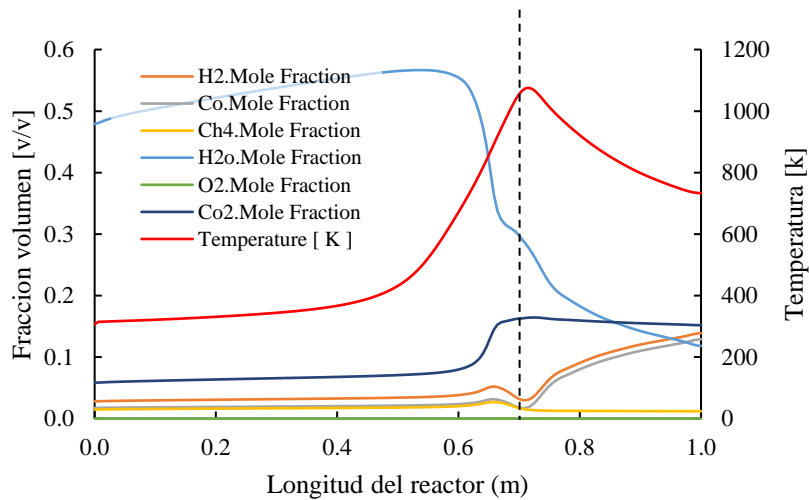


Ilustración 11 Perfil de concentraciones

La Ilustración 11 muestra el comportamiento del modelo CFD, es de observar que las especies no condensables como el H_2 y CO reaccionan después del cuello de reacción y aumentan a medida que la temperatura aumenta, también se puede destacar que el CO_2 disminuye a medida que la temperatura aumenta esto asociado al craqueo térmico de alquitranes.

4.2.2 Tasa de reacción a diferentes temperaturas

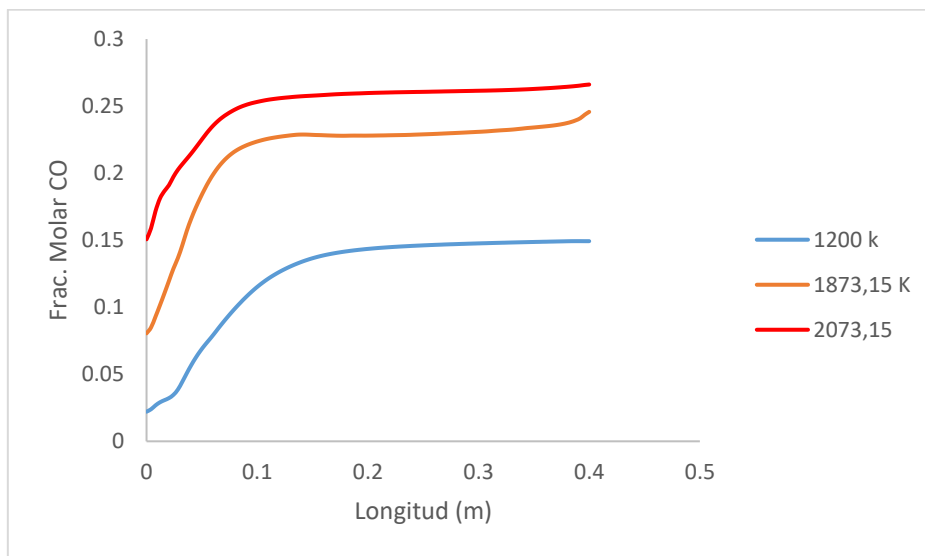


Ilustración 12 Perfil de temperatura del Monóxido de carbono

En este estudio del CO se observa que el comportamiento es muy similar a diferentes temperaturas, aunque a mayor temperatura se obtendrán más fracciones molares de CO .

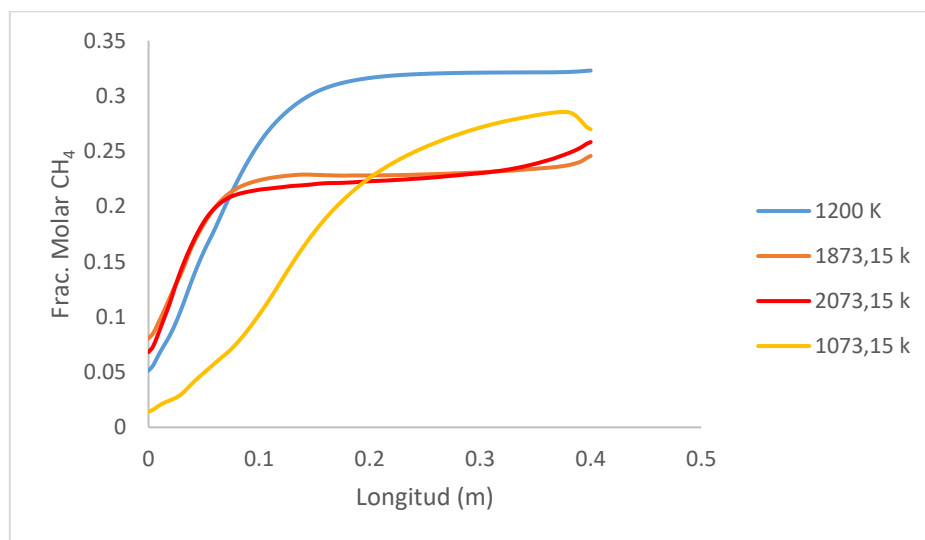


Ilustración 13 Perfil de temperatura del Metano

Para el caso del metano (CH_4) se puede observar que su comportamiento a altas temperaturas es muy similar y a bajas temperaturas tiene un comportamiento irregular, sin embargo, se obtendrá un mayor número de fracciones molares a una temperatura cercana a los 1200 K

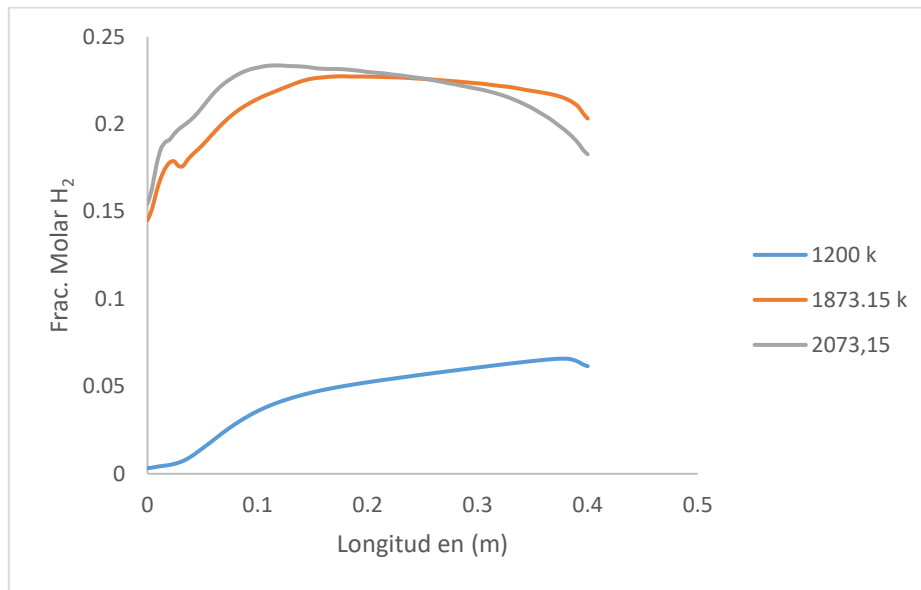


Ilustración 14 Perfil de temperatura del Hidrogeno

En el estudio del Hidrogeno (H_2), se observa que a temperaturas bajas no se obtiene un buen número de fracciones molares, sin embargo, a temperaturas altas su comportamiento es muy similar lo que arroja como resultado cantidades de fracciones molares parecidas.

Esta simulación ayudara a comprender de una mejor manera el comportamiento en un reactor de lecho fijo sin desperdiciar tiempo y recursos, buscando la mejor configuración que este debe tener para sacar sus mejores resultados.

CONCLUSIONES

- Se desarrolló un modelo computacional en 2D para el estudio de la gasificación de biomasa de lecho fijo, los mecanismos de pirolisis fueron definidos de tal manera que la transformación de los volátiles sea afectada por la temperatura del aire del reactor mediante tres estequiometrias y cinéticas divididas en rangos de temperaturas específicos.
- Los resultados experimentales que se obtuvieron en la planta de gasificación de la Universidad Pontificia Bolivariana sirvieron para realizar la validación de los datos obtenidos en la simulación CFD, la cual está orientada hacia el incremento de la calidad del gas de síntesis.
- Gracias al análisis de sensibilidad de superficies de respuesta se pueden determinar las condiciones de operaciones a la cual el reactor permanecerá en la región autotérmica y así se evitar el gasto de recursos y energía tratando de encontrar las condiciones experimentalmente en las cuales el reactor de gasificación no se apagará debido a bajas demanda de energía.
- Con respecto a los resultados obtenidos en la simulación se puede afirmar que la condición que más aumenta la producción de especies es la temperatura del aire, esta simulación ayudara en futuros proyectos a estimar la temperatura necesaria a la cual deben calentar el aire para obtener los productos deseados al final de la gasificación.
- Es muy importante tener en cuenta que la fracción de vapor es una condición que afecta de forma negativa al momento de la gasificación como lo muestra el análisis de sensibilidad basado en regresiones modificadas. Al tener una alta tasa de humedad dentro del reactor, provocara que este necesite más temperatura de aire o masa de aire para mantenerse en su zona autotérmica o en su defecto el reactor se apagara.
- Debido a que los resultados de la simulación de un reactor de lecho fijo de corriente descendente a escala presentan gran similitud con los resultados obtenidos de un reactor comercial, estos pueden servir como base para futuros trabajos en los que se requiera hacer estudios al momento de cambiar la biomasa del reactor o para estimar la cantidad de productos de gasificación que se obtienen en algunas condiciones operativas específicas, ya que al ser una simulación en CFD se pueden variar dichas condiciones operativas.

REFERENCIAS

- Chen, J., Wang, Y., Lang, X., Ren, X., & Fan, S. (2017). Evaluation of agricultural residues pyrolysis under non-isothermal conditions: Thermal behaviors, kinetics, and thermodynamics. *Bioresource Technology*, 241, 340–348. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2017.05.036>
- Chen, T., Li, T., Sjöblom, J., & Ström, H. (2021). A reactor-scale CFD model of soot formation during high-temperature pyrolysis and gasification of biomass. *Fuel*, 303(June). <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2021.121240>
- Chyou, Y. P., Huang, C. bin, Luan, Y. T., & Wang, T. (2010). *Numerical simulation of gasification process in a cross-type two-stage gasifier*. 27th Annual International Pittsburgh Coal Conference 2010, PCC 2010.
- Dong, R., Yang, S., Hu, J., Chen, F., Bao, G., & Wang, H. (2022). CFD investigation of the in-situ gasification process of biomass in the chemical looping combustion system. *Renewable Energy*, 185, 1245–1260. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2021.12.027>
- Gao, J., Zhao, Y., Sun, S., Che, H., Zhao, G., & Wu, J. (2012). Experiments and numerical simulation of sawdust gasification in an air cyclone gasifier. *Chemical Engineering Journal*, 213, 97–103. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2012.09.076>
- Guo, F., Dong, Y., Dong, L., & Guo, C. (2014). Effect of design and operating parameters on the gasification process of biomass in a downdraft fixed bed: An experimental study. *International Journal of Hydrogen Energy*, 39(11), 5625–5633. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2014.01.130>
- Hwang, I. S., Sohn, J., Lee, U. do, & Hwang, J. (2021). CFD-DEM simulation of air-blown gasification of biomass in a bubbling fluidized bed gasifier: Effects of equivalence ratio and fluidization number. *Energy*, 219. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2020.119533>
- Jakobs, T., Djordjevic, N., Fleck, S., Mancini, M., Weber, R., & Kolb, T. (2012). Gasification of high viscous slurry R&D on atomization and numerical simulation. *Applied Energy*, 93(July 2015), 449–456. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2011.12.026>
- Janajreh, I., & al Shrah, M. (2013). Numerical and experimental investigation of downdraft gasification of wood chips. *Energy Conversion and Management*, 65, 783–792. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2012.03.009>
- Kyauta, E. E., Dauda, D. M., & Justin, E. (2014). Investigation on Thermal Properties of Composite of Rice Husk , Corncob and Baggasse for Building Thermal Insulation. *American Journal of Engineering Research (AJER)*, 12, 34–40. <https://doi.org/10.13140/RG.2.2.34377.65128>
- Lahijani, P., Zainal, Z. A., & Mohammadi, M. (2013). Air gasification of oil palm waste over dolomite in a fluidized bed. *Turkish Journal of Engineering and Environmental Sciences*, 37(2), 123–136. <https://doi.org/10.3906/muh-1112-2>

- Laohalidanond, K., Kongkaew, N., & Kerdsuwan, S. (2017). Gasification Behavior Study of Torrefied Empty Corn Cobs. *Energy Procedia*, 138, 175–180. <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2017.10.146>
- Liu, X., Zhang, Y., Li, Z., Feng, R., & Zhang, Y. (2014). Characterization of corncob-derived biochar and pyrolysis kinetics in comparison with corn stalk and sawdust. *Bioresource Technology*, 170, 76–82. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2014.07.077>
- Mohammed, M. A. A., Salmiaton, A., Wan Azlina, W. A. K. G., Mohammad Amran, M. S., Fakhru'L-Razi, A., & Taufiq-Yap, Y. H. (2011). Hydrogen rich gas from oil palm biomass as a potential source of renewable energy in Malaysia. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 15(2), 1258–1270. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2010.10.003>
- Ngamsidhipongsa, N., Ghoniem, A. F., & Arpornwichanop, A. (2021). Detailed kinetic mechanism of devolatilization stage and CFD modeling of downdraft gasifiers using pelletized palm oil empty fruit bunches. *Renewable Energy*, 179, 2267–2276. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2021.08.010>
- Pandey, B., Prajapati, Y. K., & Sheth, P. N. (2020). CFD analysis of biomass gasification using downdraft gasifier. *Materials Today: Proceedings*, 44, 4107–4111. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.10.451>
- Pepiot, P., Dibble, C. J., & Foust, T. D. (2010). Computational fluid dynamics modeling of biomass gasification and pyrolysis. *ACS Symposium Series*, 1052, 273–298. <https://doi.org/10.1021/bk-2010-1052.ch012>
- Pinto, J., Sá, A. B., Pereira, S., Bentes, I., & Paiva, A. (2016). Possible Applications of Corncob as a Raw Insulation Material. In *Insulation Materials in Context of Sustainability*. InTech. <https://doi.org/10.5772/62339>
- Thunman Henrik, N. F. J. F. and L. B. (n.d.). *Composition of Volatile Gases and Thermochemical Properties of Wood for Modeling of Fixed or Fluidized Beds _ Energy & Fuels*. Retrieved November 10, 2022, from <https://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/ef010097q>
- Yang, M., Zhang, J., Zhong, S., Li, T., Løvås, T., Fatehi, H., & Bai, X. S. (2022). CFD modeling of biomass combustion and gasification in fluidized bed reactors using a distribution kernel method. *Combustion and Flame*, 236, 111744. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2021.111744>
- Yepes Maya, D. M., Silva Lora, E. E., Andrade, R. V., Ratner, A., & Martínez Angel, J. D. (2021). Biomass gasification using mixtures of air, saturated steam, and oxygen in a two-stage downdraft gasifier. Assessment using a CFD modeling approach. *Renewable Energy*, 177, 1014–1030. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2021.06.051>